© Д.С. Севостянов, 2008

УДК 533.583.2

Д.С. Севостянов

РАСЧЕТ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ АДСОРБЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ НА УГОЛЬНЫХ АДСОРБЕНТАХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МЕХАНИКИ

Построена модель структуры адсорбента для эффективного улавливания конкретного вещества на основе теоретических расчетов.

Семинар № 10

Моделирование эффективности угольных адсорбентов для улавливания экологически неблагоприятных веществ и парниковых газов расчетными методами имеет большое практическое значение. Метод молекулярной механики (атом-атом потенциалов) позволяет рассчитать энергетические и геометрические характеристики системы адсорбент-ад-сорбат с учетом их физико-химических особенностей. Ценность такого подхода заключается в том, что на основе теоретических расчетов можно моделировать структуру адсорбента для эффективного улавливания конкретного вещества. Это, в свою очередь, открывает путь к целенаправленной модификации адсорбента.

Согласно методу молекулярной механики энергия взаимодействия адсорбата с адсорбентом E (ккал/моль) при их фиксированной геометрии вычисляется по формуле [1, 2]:

$$E=\sum_{i>j}\sum_{j} f_{ij}\left(R_{ij}\right)$$

где f_{ij} – парные атом-атом потенциалы между валентно несвязанными атомами i и j, R_{ij} – расстояние между ними.

$$f_{C...C} = -476/R^6 + 3.77*10^4 \exp(-3.513R)$$

$$f_{C...H} = -121/R^6 + 3.28*10^4 \exp(-4.13R)$$

$$f_{H...H} = -40.1/R^6 + 2.86*10^4 \exp(-5.20R)$$

С целью моделирования сорбционных свойств угольных адсорбентов нами был выбран слой графита с разными числами конденсированных колец в двух направлениях плоскости (рис. 1). Число колец варьируется.

В работе рассматривали адсорбцию молекул CH_4 и C_6H_6 на поверхности адсорбента.

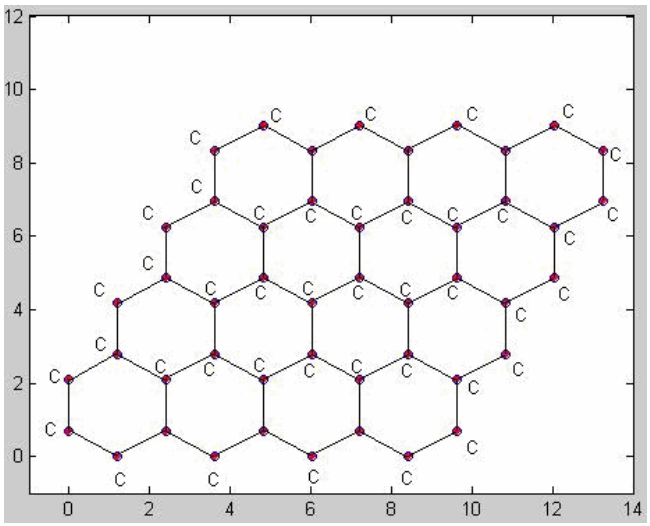

Рис. 1. Модель поверхности угольного адсорбента (R_{cc}=1.39 Å)

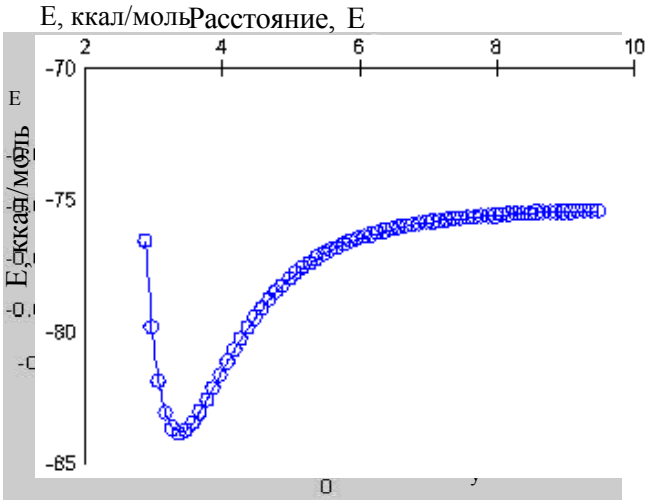

Рис. 2. Энергия взаимодействия CH_4 с отдельными атомами поверхности адсорбента E_i (ккал/моль)

Результаты расчета адсорбции CH_4 представлены на рис. 1-3. На рис. 1 представлена модель поверхности адсорбента, которая состоит из конденсированных ароматических колец. На рис. 2 приведены энергии взаимодействия атомов молекулы CH_4 с отдельными атомами поверхности при минимуме полной энергии. Видно, что диаметр взаимодействия с поверхностью составляет 17Å. На рис. 3 представлена полный потенциал взаимодействия молекулы CH_4 с поверхностью адсорбента, где E_{min} = -1.615 ккал/моль и R_{min} = 3.04 Å. На рис. 4 приведен потенциал взаимодействия молекулы CH_4 с поверхностью адсорбента при ее параллельном движении к поверхности на расстоянии R = 3.04 Å. Минимумы на потенциале

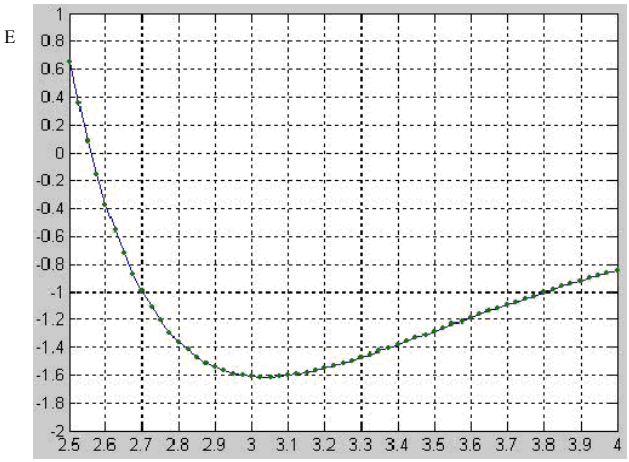

Рис. 3. Потенциал взаимодействие молекулы CH_4 с поверхностью адсорбента (E_{min} = -1.615 ккал/моль, R_{min} = 3.04 Å)

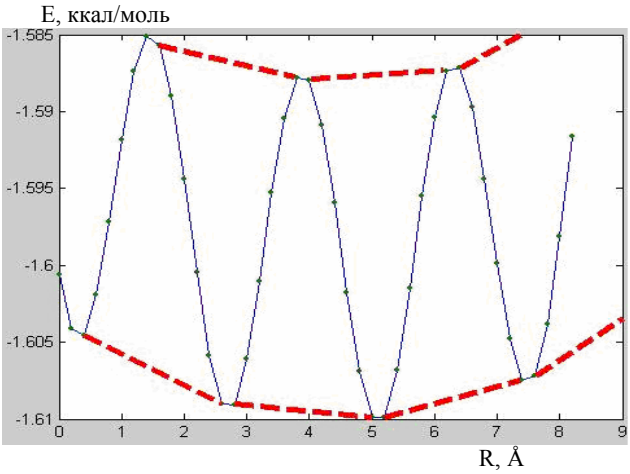

Рис. 4. Потенциал взаимодействия молекулы CH_4 с поверхностью адсорбента при ее параллельном движении к поверхности на расстоянии R = 3.04 Å

соответствуют положению когда молекула находится над центром кольца.

Аналогичные расчеты выполнены для молекулы C_6H_6. На рис. 5 приведен потенциал взаимодействия молекулы C_6H_6 с поверхностью адсорбента. Минимум энергии достигается при E=8.15 ккал/моль и R= 3.375 Å.

Рис. 5. Потенциал взаимодействия молекулы C_6H_6 с поверхностью адсорбента

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Молекулярные* структуры: Прецизионные методы исследования: Пер. с англ./Под ред. А. Доменикано, И. Харгиттаи. – М.: Мир,1997.- 671 с., ил.

2. *Дашевский В.Г.* Конформации органических молекул. М., «Химия», 1974 г. ГИАБ

Коротко об авторах

Севостянов Д.С. – аспирант, ФГУП Института горючих ископаемых – НТЦ по комплексной переработке твердых горючих ископаемых

Доклад рекомендован к опубликованию семинаром № 25 симпозиума «Неделя горняка-2007».
Рецензент д-р техн. наук, проф. *А.А. Абрамов.*