

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИМПУЛЬСНОГО НАГРЕВА НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДЕСОРБЦИИ В СИЛИКАЛИТЕ ПРИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов А.Н., Бормонтов Е.Н.

Воронежский государственный университет, Россия, 394018, г. Воронеж,
Университетская пл., 1, тел.(473)2208-481, E-mail: me144@phys.vsu.ru

Синтетические цеолиты перспективны в качестве материала адсорбента для создания газочувствительных сенсоров [1-2]. При разработке сенсора важно подобрать условия проведения регенерации сорбента. В работе [3] для повышения эффективности десорбции предложено использование импульсного нагрева. Цель настоящей работы – поиск оптимальных параметров импульсного нагрева.

Молекулярно-динамическое моделирование процесса десорбции проводилось в пакете LAMMPS для системы, содержащей решетку из 8 элементарных ячеек силикалита и 400 молекул метана. Использовались потенциалы взаимодействия, приведенные в работе [4]. Предварительно был проведен процесс адсорбции при постоянной температуре $T=323$ К. После достижения максимальной загрузки силикалита молекулами метана моделирование проводилось по двум сценариям: 1) десорбция при постоянной температуре 400 К до достижения равновесной заполненности цеолита метаном; 2) десорбция при импульсном нагреве со средней температурой 400 К и различными значениями амплитуды и длительности тепловых импульсов, а также различным соотношением длительности фронтов нагрева и охлаждения. Была показана существенная зависимость эффективности десорбции от продолжительности и формы тепловых импульсов. Был зафиксирован рост эффективности десорбции при уменьшении продолжительности тепловых импульсов и возрастании скорости нагрева. Таким образом, для практической реализации эффективной десорбции метана из цеолита наиболее предпочтительно использовать лазерные импульсы на зернах цеолита минимального размера.

Литература.

1. *Reib S., Hagen G., Moos R.* Zeolite-based Impedimetric Gas Sensor Device in Low-cost Technology for Hydrocarbon Gas Detection // *Sensors*, Vol. 8, 2008. P. 7904-7916.
2. *Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов А.Н.* Анализ состава сложной газовой смеси сенсором на основе цеолита // *Нано- и микросистемная техника*, том 18, № 9, 2016. Стр. 589-592.
3. *Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов А.Н.* Молекулярно-динамическое моделирование процессов десорбции в силикалите при импульсном нагреве // *ФАГРАН-2015: материалы VII Всероссийской конференции*, Воронеж, 10-13 нояб. 2015 г. Стр. 505-506.
4. *Куцова Д.С., Богатиков Е.В., Шебанов А.Н.* Моделирование сорбции метансодержащей воздушной смеси силикалитом. // *Конденсированные среды и межфазные границы*, Т. 17, № 2, 2015. Стр. 165-170.