

Информатика, вычислительная техника и управление

УДК 544.725

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССОПЕРЕНОСА В МИКРОПОРИСТЫХ СИСТЕМАХ С УЧЕТОМ ПРОЦЕССОВ ФИЗИЧЕСКОЙ АДсорбЦИИ МЕТОДОМ КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А.Н. Агафонов¹, А.В. Еремин¹, С.Б. Коньгин², В.И. Платонов¹

¹ Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва
Россия, 443086, г. Самара, Московское шоссе, 34

² Самарский государственный технический университет
Россия, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

Рассмотрены вопросы моделирования массопереноса в микропористых системах с учетом процессов физической адсорбции. Для проведения моделирования использован метод классической молекулярной динамики. В качестве модельной системы выбрана единичная бесконечная цилиндрическая пора с периодическим рельефом и потенциалом стенок Леннард-Джонса 5-10. В результате моделирования были получены пространственные распределения частиц пробы по объему поры в различные моменты времени и при различных граничных условиях. Также было показано влияние параметров потенциальной ямы стенки поры на кинетику протекающих в поре процессов адсорбции и массопереноса вдоль продольной оси. Кроме того, были получены распределения частиц по кинетическим энергиям без учета гетерогенности системы.

Ключевые слова: микропора, массоперенос, адсорбция, метод молекулярной динамики.

Современные технологии позволяют создавать устройства, работа которых определяется физико-химическими процессами, протекающими в микро- и мезоразмерных структурах [1]. К данным устройствам могут быть отнесены, например, современные сенсоры, микрофлюидные устройства, катализаторы и т. д. В этой связи актуальной является задача комплексного моделирования процессов переноса на микро- и мезоуровнях с учетом адсорбционных явлений.

Традиционные подходы для моделирования адсорбционных процессов (изотермы адсорбции) и процессов массопереноса (например, уравнение Навье-Стокса) имеют существенные ограничения при описании процессов в микро- и мезосистемах.

Следовательно, для решения указанной задачи необходимо использование других подходов, в первую очередь имитационных методов моделирования [2].

Андрей Николаевич Агафонов (к.т.н.), доцент кафедры «Наноинженерия».

Анатолий Викторович Еремин, студент.

Сергей Борисович Коньгин (д.т.н.), заведующий кафедрой «Машины и оборудование нефтегазовых и химических производств».

Владимир Игоревич Платонов (к.х.н.), ассистент кафедры «Химия».

Данная работа посвящена исследованию возможности использования метода классической молекулярной динамики [3] для комплексного описания процессов массопереноса в микро- и нанопористых системах с учетом влияния адсорбции. Основными достоинствами выбранного метода применительно к указанной задаче являются: прямое имитационное моделирование, возможность учета влияния геометрии систем, пор и формы потенциала «поверхность-частица», возможность задания различных начальных и граничных условий, возможность моделирования многокомпонентных сред. К недостаткам можно отнести сравнительно большой объем вычислений, ограниченность по пространственным и временным масштабам, ограничение максимальной скорости моделируемых частиц [4].

В качестве модельного процесса выбрана газофазная диффузия из ограниченного источника в условиях единичной адсорбирующей цилиндрической микropоры бесконечной длины (рис. 1).

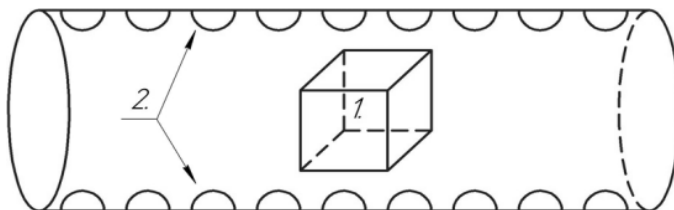


Рис. 1. Геометрия модели:

1 – исходный объем газа; 2 – условные элементы рельефа поверхности

При моделировании были приняты следующие допущения:

- периодический рельеф стенок;
- абсолютно упругие соударения частиц газовой фазы;
- отсутствие теплообмена со стенками;
- не рассматриваются процессы вращения и поляризации частиц.

Моделируемая система содержит 4096 частиц в газовой фазе со средней энергией, соответствующей температуре 300 К. Начальный объем пробы равен 512 nm^3 , причем частицы распределены в нем равномерно. Взаимодействие со стенками описывается потенциалом Леннарда-Джонса 5-10 [4, 5].

При определении концентрационных параметров системы продольная ось поры разбивалась на равные интервалы (5 нм) и вычислялось среднее значение количества частиц в каждом интервале. При обработке результатов моделирования использовался подсчет среднего по пяти экспериментам в каждом опыте.

В первом опыте исследовалась кинетика распространения пробы по объему поры. Профили пространственного распределения частиц в разные моменты времени представлены на рис. 2.

Полученные результаты на качественном уровне согласуются с известными из литературы результатами решения уравнения массопереноса в узком канале [6].

Во втором опыте исследовалось влияние потенциала стенки на пространственное распределение частиц пробы. Результаты моделирования представлены на рис. 3.

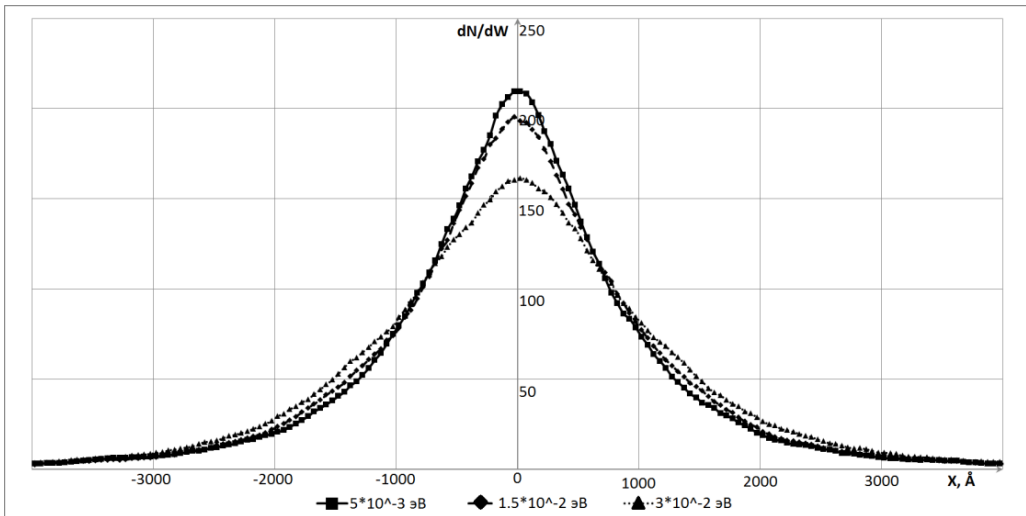


Рис. 2. Пространственное распределение частиц пробы по объему поры в различные моменты времени

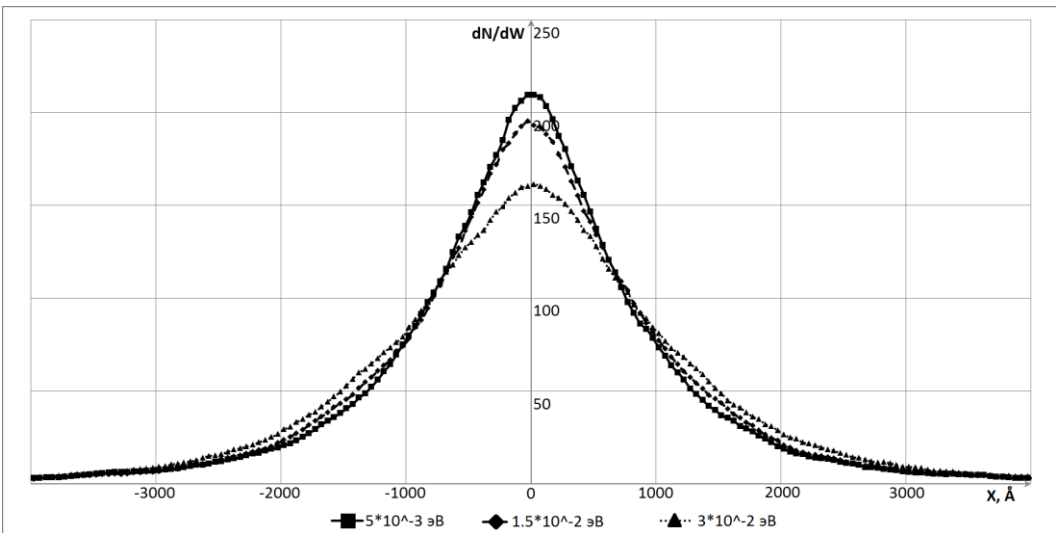


Рис. 3. Пространственное распределение частиц пробы в момент времени 1000 пс при различных глубинах потенциальной ямы у стенок поры (на рисунке показаны центральные части распределений)

Показанные на рис. 3 пики имеют одинаковую площадь, что связано с одинаковым общим количеством частиц в системе. Выявленные отличия в форме кривых, по мнению авторов, могут быть объяснены тем, что увеличение глубины потенциальной ямы приводит к более интенсивной адсорбции «холодных частиц», что исключает их из энергообмена в газовой фазе. Увеличение количества адсорбированных «холодных» частиц приводит к повышению средней кинетической энергии частиц газовой фазы и к ускоренному размытию концентрационного пика.

В третьем опыте исследовалось распределение частиц пробы по энергиям. Результаты моделирования приведены на рис. 4.

Полученные в результате моделирования распределения существенно отличаются от распределения Максвелла. Полученный вид зависимостей может быть объяснен тем, что обработка результатов моделирования велась без учета гетерогенности системы (адсорбированные частицы не исключались из обработки), а также тем, что моделируемая система открыта и далека от равновесного состояния.

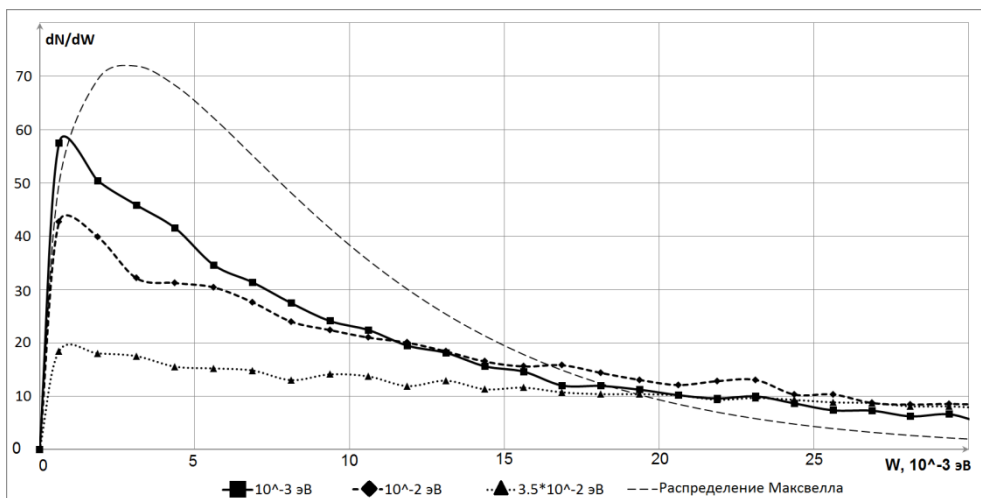


Рис. 4. Распределение частиц пробы по кинетической энергии в момент времени 1000 пс при различных глубинах потенциальной ямы у стенок поры

Для более точного учета вклада различных действующих факторов необходимо более подробное численное исследование представленной системы, что выходит за рамки данной работы.

Тем не менее полученные результаты моделирования позволяют предположить, что использованный в данной работе подход к моделированию процессов массопереноса в микро- и нанопористых системах может быть использован для моделирования комплексных процессов, демонстрирующих сложное поведение на макроуровне.

В дальнейшем авторы предполагают развивать предложенный подход в сторону увеличения количества частиц и времени моделирования, в частности за счет использования технологии параллельных вычислений, что позволит приблизиться к решению практически важных задач.

Основные результаты:

1. Показана возможность использования метода молекулярной динамики для моделирования физико-химических процессов в микропористых системах (до единиц мкм^3) на временах до 10^{-6} секунд с использованием персонального компьютера.

2. Показана возможность использования предложенного подхода для моделирования процессов массопереноса с учетом адсорбционных процессов в микропористых системах.

3. Предложенный подход к моделированию физико-химических процессов в

микропористых системах при выбранных допущениях демонстрирует согласие на качественном уровне с известными из литературы данными.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Ohira S., Toda K.* Micro gas analyzers for environmental and medical applications // *Analytical chemistry* – 2008. V. 612 – p. 143-156.
2. *Товбин Ю.К.* Молекулярная теория адсорбции в пористых телах. – М.: Физматлит, 2013. – 624 с.
3. Метод молекулярной динамики в физической химии / Под ред. Ю.К. Товбина. М.: Наука, 1996.
4. *Rapaport D.C.* The art of molecular dynamics simulation. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2004.
5. *Frenkel D., Smit B.* Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. San Diego, Academic Press, 2002.
6. *Долгонос А.М.* Неспецифическая селективность в проблеме моделирования высокоэффективной хроматографии. – М.: Либроком, 2013. – 256 с.

Статья поступила в редакцию 16 июня 2015 г.

MODELLING OF MASSTRANSPORT WITH PHYSICAL ADSORPTION IN MICROPORE SYSTEMS BY MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

A.N. Agafonov¹, A.V. Eryomin¹, S.B. Konygin², V.I. Platonov¹

¹ S.P. Korolyov Samara State Aerospace University
34, Moskovskoye sh., Samara, 443086, Russian Federation

² Samara State Technical University
244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100, Russian Federation

This paper concerns the modelling of physical adsorption and masstransport processes in micropore systems by means of molecular dynamics (MD) simulation. An individual infinite-tube shape periodical-texture 3D pore with the 5-10 LJ potential of the walls was chosen as an example system. The spatial distributions of the sample particles in various timepoints and under various boundary conditions were obtained as a result of the modelling. In addition, the influence of the potential well parameters on the kinetics of the lengthwise adsorption and masstransport processes was shown. Besides, another result of the modelling is kinetic energy distributions without taking into account the effect of the system heterogeneity.

Keywords: micropore, masstransport, adsorption, molecular dynamics.

Andrey N. Agafonov (Ph.D. (Techn.)), Associate Professor.

Anatoly V. Eryomin, Student.

Sergey B. Konygin (Dr. Sci. (Techn.)), Professor, Head of Department.

Vladimir I. Platonov (Ph.D (Chem.)), Assistant.