

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ПЕРЕНОСА МОЛЕКУЛ ВОДОРОДА В ПОРЫ НАНОСТРУКТУРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Борецкий Е.А., Верхорубов Д.Л., Видяев Д.Г.

Научный руководитель: Видяев Д.Г., д.т.н., доцент

Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30

E-mail: eboretsky@mail.ru

Водород, как источник энергии является существенной альтернативой традиционному углеводородному топливу. Одной из ключевых проблем, стоящих на пути развития водородной энергетики является вопрос о создании систем, способных сорбировать водород. Разработан ряд требований, которым должны соответствовать подобные сорбционные системы.

Одним из перспективных сорбентов водорода считается технический углерод (carbon black). С целью изучения сорбционных свойств данного материала было разработана математическая модель, описывающая процесс переноса водорода в поры вещества и его дальнейшую сорбцию.

В случае наличия силы  $F$  постоянной во времени, процесс переноса молекул водорода в пористые наноструктуры, описывается модифицированным первым законом Фика:

$$J_m = -D \left( \frac{dc}{dx} - \frac{F}{kT} C \right), \quad (1)$$

где  $\frac{DF}{kT}$  – средняя скорость движения атомов, под воздействием силы  $\nu$ .

Коэффициент  $D$  зависит от условий среды и типов частиц, участвующих в диффузии [1].

Отличительным свойством некоторых углеродных материалов, является высокая степень их пористости. В таких случаях перенос молекул газа может осуществляться как вследствие молекулярной диффузии (при столкновении молекул между собой), так и за счет соударений частиц с поверхностью пор – кнудсеновская диффузия.

В случае низкого давления вероятность столкновения молекул друг с другом невелика, поэтому будут преобладать столкновения молекул с поверхностью материала, а, следовательно, определяющей будет являться диффузия Кнудсена.

Коэффициент  $D_K$  диффузии Кнудсена определялся по формуле (2):

$$D_K = \frac{2}{3} r_p \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}}, \quad (2)$$

где  $r_p$  – радиус поры;  $M$  – молярная масса вещества.

Коэффициент молекулярной диффузии представлен следующей формулой:

$$D_M = \frac{3}{8\sqrt{2}\sigma_{AB}^2} \frac{kT}{p} \sqrt{\frac{kT}{m^*\pi}}, \quad (3)$$

где  $\sigma_{AB}$  – средний размер молекулы;  $p$  – давление;  $m^*$  – средняя молекулярная масса смеси.

При описании взаимодействия отдельно взятой молекулы с поверхностью поры применяется механизм Кнудсена-Смолуховского. В соответствии с этим механизмом, столкновение частиц с поверхностью осуществляется двумя способами: зеркальным и диффузным. Осуществление того или иного способа носит вероятностный характер.

Молекулы газа, которые попали в пору, подвергаются столкновениям с внутренней поверхностью пор по принципу абсолютно-упругого удара. Время, на которое происходит удержание молекул вблизи поверхности пор называют временем сорбции, концентрация адсорбированных молекул вблизи поверхности пор составляет:

$$\sigma = \frac{N_A p}{\sqrt{2\pi MRT}} \tau_0 e^{\frac{Q}{RT}}, \quad (4)$$

где  $N_A$  – число Авогадро,  $T$  – температура,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $Q$  – теплота адсорбции,  $\tau_0$  – время молекулярного колебания  $\sim 10^{-13}$ .

Степень покрытия поверхности находится с учетом постоянная Ленгмюра ( $b$ ) по формуле:

$$\theta = \frac{bp}{1+bp}, \quad (5)$$

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Математическая модель массопереноса в поре на основе молекулярной динамики с применением алгоритма параллельных вычислений / Чан Х.К., Поветкин А.Д., Кольцова Э.М., Петухов Д.И., Елисеев А.А. // Фундаментальные исследования. – 2012. – №3. – 432-436.