

密度泛函与分子模拟计算介孔孔径分布比较

邵晓红; 张现仁; 汪文川

北京化工大学化学工程学院, 北京 100029

摘要:

用巨正则系综Monte Carlo模拟(GCMC)方法和密度泛函理论(DFT)结合统计积分方程(SIE)计算了介孔材料的孔径分布. 为比较这两种方法, 以77 K氮气在介孔活性炭微球中的吸附数据为依据, 求出其孔径分布. 在GCMC模拟和DFT计算中, 流体分子模型化为单点的Lennard-Jones球; 流体分子与吸附剂材料之间的作用采用平均场理论中的10-4-3模型. 在DFT方法中, 自由能采用Tarazona提出的加权近似密度泛函方法(weighted density approximation, WDA)求解. 结果表明, 对于孔径大于1.125 nm的介孔材料, GCMC和DFT两种方法都可以用来研究介孔材料的孔径分布; 对于小于1.125 nm的介孔材料, 不能用DFT方法计算孔径分布(DFT方法本身的近似产生了误差), 只能用分子模拟方法.

关键词: 巨正则系综Monte Carlo方法 密度泛函理论 孔径分布 吸附

收稿日期 2002-10-24 修回日期 2003-01-14 网络版发布日期 2003-06-15

通讯作者: 汪文川 Email: wchwang@163bj.com

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(1523KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [巨正则系综Monte Carlo方法](#)

▶ [密度泛函理论](#)

▶ [孔径分布](#)

▶ [吸附](#)

本文作者相关文章

▶ [邵晓红](#)

▶ [张现仁](#)

▶ [汪文川](#)