

研究论文

烷烃在丝光沸石型分子筛中吸附和扩散行为

陈玉平; 吕玲红; 邵庆; 黄亮亮; 陆小华

南京工业大学化学化工学院, 南京 210009

摘要:

采用巨正则系综蒙特卡罗(grand canonical Monte Carlo, GCMC)与分子动力学(molecular dynamics, MD)相结合的方法, 研究烷烃分子在丝光沸石(MOR)型分子筛中的吸附和扩散性质. 采用GCMC 方法研究温度为300 K、330 K时, MOR型分子筛中甲烷、乙烷、丙烷、丁烷的吸附. 研究表明, 随着压力的增加吸附量增加, 随温度的升高吸附量有所降低. 饱和吸附量从大到小依次为: 甲烷>乙烷>丙烷>丁烷. 由模拟所得到的单组分吸附等温线, 通过理想吸附溶液理论(IAST)计算二元混合物的吸附平衡相图, 模拟结果与计算结果一致. 采用分子动力学方法, 研究乙烷、丙烷在MOR分子筛上的扩散性质, 结果表明各个方向上的扩散系数不同, z方向上的扩散系数最大.

关键词: 烷烃 分子筛 吸附 扩散 分子模拟

收稿日期 2006-10-31 修回日期 2006-12-08 网络版发布日期 2007-04-18

通讯作者: 陆小华 Email: xhlu@njut.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 郑康成; 张仲钦; 沈勇; 云逢存. 计算多氯代烷烃异构体生成焓的新方法[J]. 物理化学学报, 2001, 17(05): 448-452
2. 王建基; 李汝雄; 张玉喜. 卤代烷烃的交叉构象的计数[J]. 物理化学学报, 2001, 17(05): 465-470
3. 贺鹤勇; 邹艳; 马卓娜; 岳斌. 低碳烷烃催化反应机理的固体核磁共振研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08S): 1024-1031
4. 丁伟; 刘先军; 于涛; 吴文祥; 刘娜; 张艳秋. 直链烷烃取代衍生物Wiener指数的简便计算方法[J]. 物理化学学报, 2004, 20(11): 1369-1371
5. 张越; 张高勇; 王佩维; 牛金平; 关景财; 谷惠先. 重烷基苯磺酸盐的界面性质和驱油机理[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 161-165
6. 唐颖; 姬磊; 唐碧峰; 朱荣淑; 张嵩; 张冰. 溴代烷烃在紫外波段的光解离过程[J]. 物理化学学报, 2004, 20(04): 344-349
7. 高义德; 胡长进; 金瑾; 陈旻; 陈从香. $\text{CCl}_2(A^1B_1, a^3B_1)$ 自由基被烷烃类分子猝灭动力学[J]. 物理化学学报, 2001, 17(06): 516-520
8. 张国政; 英徐根; 刘国杰. 链烷烃的内压与分子连通指数[J]. 物理化学学报, 1998, 14(05): 407-412
9. 曹晨忠; 高硕. 单取代烷烃液相生成焓估算新方法[J]. 物理化学学报, 2005, 21(09): 1028-1035
10. 司维江; 嵇淑萍. 线性氟代烷烃电子相关能的基团加和性[J]. 物理化学学报, 2009, 25(06): 1131-1135
11. 曹晨忠; 刘金玲. 烷烃电离能和生成焓的相关性[J]. 物理化学学报, 2007, 23(06): 955-958
12. 郑康成; 何峰; 许植涛; 云逢存. 取代烷烃极性交替规律的进一步探讨[J]. 物理化学学报, 1999, 15(08): 698-703
13. 郑康成; 匡代彬; 云逢存; 何峰. 计算烷烃异构体生成焓的新方法[J]. 物理化学学报, 2000, 16(02): 133-137
14. 倪才华; 冯致云. 信息拓扑指数与烷烃分子热力学性质的关系[J]. 物理化学学报, 1996, 12(05): 440-445
15. 郝策; 孙志刚; 陈宗淇; 石彩云. 非离子型表面活性剂组成的微乳液热力学性质 (IV) 烷烃的碳原子数影响[J]. 物理化学学报, 1993, 9(02): 229-232
16. 高硕; 曹晨忠. 拓扑量子方法估算液相链烷烃导热率[J]. 物理化学学报, 2006, 22(12): 1478-1483
17. 肖红艳; 甄珍; 孙焕泉; 曹绪龙; 李振泉; 宋新旺; 崔晓红; 刘新厚. 阴离子表面活性剂在水/正烷烃界面的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 0, 0: 0-0

扩展功能

本文信息

PDF(306KB)

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

▶ 烷烃

▶ 分子筛

▶ 吸附

▶ 扩散

▶ 分子模拟

本文作者相关文章

▶ 陈玉平

▶ 吕玲红

▶ 邵庆

▶ 黄亮亮

▶ 陆小华