

研究论文

新型储甲烷金属-有机骨架材料的设计

周子娥 薛春瑜 阳庆元 仲崇立*

(北京化工大学化学工程学院 计算化学研究室 北京 100029)

收稿日期 2008-7-30 修回日期 2008-10-6 网络版发布日期 2009-4-2 接受日期 2008-11-28

摘要

针对迄今具有最大甲烷存储量的金属-有机骨架(MOF)材料PCN-14, 采用质心分布图研究了甲烷在其中的吸附机理. 结果表明, PCN-14中主要存在两个吸附位, 并且有机配体对材料吸附甲烷有着重要影响. 因此, 通过改变有机配体的类型, 设计了对甲烷具有更高吸附性能的新型MOF材料PCN-M. PCN-M在3.5 MPa下、290 K时对甲烷的吸附量达到了257 V/V, 比PCN-14增加了12%; 298 K时对甲烷的吸附量达到了241 V/V, 超过了DOE标准180 V/V的34%. 此外, 本工作表明了改变有机配体是改善材料存储甲烷能力的一种可行方法, 为合成高甲烷储存量的新MOF材料提供了理论依据.

关键词

[分子模拟](#) [材料设计](#) [金属-有机骨架材料](#) [甲烷](#) [吸附](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

仲崇立 zhongcl@mail.buct.edu.cn

作者个人主页:

周子娥 薛春瑜 阳庆元 仲崇立*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(766KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[分子模拟” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [周子娥,薛春瑜,阳庆元,仲崇立](#)