

论文

密度泛函方法研究甲烷与碳材料之间的相互作用

孙文晶, 江成发, 薛英

四川大学 化工学院, 四川 成都 610065

摘要:

基于密度泛函方法, 研究了甲烷在两种碳材料模型 (Armchair 和Tip) 表面的物理吸附和化学解离过程。物理吸附过程考察了甲烷在两种模型上7种活性位的吸附能与结构参数, 结果表明, 甲烷在碳材料表面倾向于吸附在具有苯环结构的碳原子顶位; 化学解离过程考察了甲烷在两种构型的活性位上的化学解离过程, 结果表明, 甲烷C—H键在Tip模型上比在Armchair模型更容易解离, 解离路径倾向于沿着T2—T6—T5路径。

关键词: 密度泛函方法 甲烷 碳材料 吸附 解离 分子模拟

A DFT study of the interaction of methane with carbonaceous materials

Abstract:

Based on the density functional theory(DFT) study, the physisorption and chemical dissociation of methane on the surface of carbonaceous materials(Armchair and Tip model) were investigated.The adsorption energy and structural parameters of methane on seven active sites of two carbonaceous materials were investigated.The results show that methane is infavor of physical adsorption on the top of carbon atom with the benzene ring structure.The processes of methane dissociated on the two carbonaceous materials were also investigated.The results show that the C—H bond is easier to be dissociated on the Tip model and the dissociation pathway following the T2—T6—T5 pathway.

Keywords: density functional theory; methane; carbonaceous material; adsorption; dissociation; molecular simulation

收稿日期 2011-08-01 修回日期 网络版发布日期 2012-01-12

DOI:

基金项目:

国家重点基础研究发展计划 (973) 资助项目 (2011CB201202)

通讯作者: 孙文晶

作者简介: 孙文晶 (1984—), 女, 青海海西蒙古族藏族自治州人, 博士研究生

作者Email: sunwenjing_a@163.com

参考文献:

本刊中的类似文章

1. 杨建春, 徐龙君, 陈伟民.基于敏感膜折射率变化的光纤甲烷传感器[J]. 煤炭学报, 2010,(3): 420-423
2. 杨宏民 张铁岗 王兆丰 赵长春.煤层注氮驱替甲烷促排瓦斯的试验研究[J]. 煤炭学报, 2010,35(5): 792-796
3. 文虎, 王秋红, 邓军, 罗振敏.超细Al(OH)₃粉体浓度对甲烷爆炸压力的影响[J]. 煤炭学报, 2009,34(11): 1479-1482
4. 蔡昌凤, 郑西强, 高辉, 左名景.煤粉对焦化废水二级出水中有机物的吸附动力学研究[J]. 煤炭学报, 2010,35(2): 299-302
5. 王继仁, 陈启文, 邓存宝, 邓汉忠, 王鑫阳.煤自燃生成甲烷的反应机理[J]. 煤炭学报, 2009,34(12): 1660-1664

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF(1307KB)
- ▶ [HTML全文]
- ▶ 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
- ▶ 文章反馈
- ▶ 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- ▶ 密度泛函方法
- ▶ 甲烷
- ▶ 碳材料
- ▶ 吸附
- ▶ 解离
- ▶ 分子模拟

本文作者相关文章

PubMed

6. 刘转年, 刘源, 赵晓光.采煤机运动参数对块煤产量的影响[J]. 煤炭学报, 2009,34(9): 1263-1267
7. 张小东, 王利丽, 张子戌.山西古交矿区马兰煤矿肥煤注水后煤体吸附膨胀行为[J]. 煤炭学报, 2009,34(10): 1310-1315
8. 邓存宝, 王继仁, 邓汉忠, 洪林, 陆卫东.氧在煤表面—CH₂—NH₂基团上的化学吸附[J]. 煤炭学报, 2009,34(9): 1234-1238
9. 雒和明, 俞树荣, 冯辉霞, 张建强, 赵霞, 王毅.改性焦粉对亚甲基蓝吸附特性及其机理[J]. 煤炭学报, 2009,34(7): 971-976
10. 吴永忠, 程文娟, 韩江洪, 郭太峰, 陈丹艳.一种新型的红外甲烷测量定量分析模型[J]. 煤炭学报, 2009,34(2): 275-279
11. 张天军, 许鸿杰, 李树刚, 任树鑫.温度对煤吸附性能的影响[J]. 煤炭学报, 2009,34(6): 802-805
12. 杨秀敏, 胡振琪, 李宁, 杨秀红, 张迎春.钠基膨润土对重金属离子Cu²⁺, Zn²⁺, Cd²⁺ 的吸附实验[J]. 煤炭学报, 2009,34(6): 819-822
13. 张子戌, 刘高峰, 张小东, 杨晓娜.CH₄/CO₂不同浓度混合气体的吸附—解吸实验[J]. 煤炭学报, 2009,34(4): 551-555
14. 代世峰, 张贝贝, 朱长生, 曾荣树.河北开滦矿区晚古生代煤对CH₄/CO₂二元气体等温吸附特性[J]. 煤炭学报, 2009,34(5): 577-582
15. 周来, 冯启言, 陈中伟, 李向东, 刘波.煤膨胀对CO₂吸附结果拟合的影响与修正方法[J]. 煤炭学报, 2009,34(5): 673-677