

研究论文

11-丁烯在MCM-2222分子筛中的吸附与扩散：  
Monte Carlo与动力学模拟研究

张 国a,b 张红星\*,a 朱宇君a,b 潘清江b 付宏刚b

(a吉林大学理论化学研究所 理论化学计算国家重点实验室 长春 113300002233)

(b黑龙江大学化学化工与材料学院 哈尔滨 115500008800)

收稿日期 2008-2-29 修回日期 2008-4-11 网络版发布日期 2008-11-5 接受日期 2008-6-19

摘要

采用巨正则Monte Carlo方法和分子动力学方法研究了11-丁烯在MCM-2222分子筛中的吸附现象和扩散行为,得到了11-丁烯吸附在该分子筛孔道中的相互作用能和在不同孔道中的扩散轨迹和扩散系数.结果表明11-丁烯在MCM-2222分子筛中主要存在两个相互作用能区间,11-丁烯优先吸附在十元环孔道中;11-丁烯的扩散和移动主要发生在十二元环超笼的中部,十元环孔道中的11-丁烯扩散速度明显小于十二元环超笼系统中的扩散速度.

关键词

[MCM-2222分子筛](#) [巨正则Monte Carlo模拟](#) [分子动力学模拟](#) [11-丁烯](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

张红星 [zhanghx@mail.jlu.edu.cn](mailto:zhanghx@mail.jlu.edu.cn)

作者个人主页:

张 国a;b 张红星\*;a 朱宇君a;b 潘清江b 付宏刚b

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(313KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(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 “](#)

[MCM-2222分子筛” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [张国,张红星,朱宇君,潘清江,付宏刚](#)