

研究论文

烷烃混合物在Cu-BTC中的吸附与分离

陈丹 张丽 刘迎春 王琦*

(浙江大学化学系 杭州 310027)

收稿日期 2007-12-26 修回日期 2008-4-17 网络版发布日期 2008-11-5 接受日期 2008-6-2

摘要

用巨正则系综Monte Carlo (GCMC)和构型导向Monte Carlo (CBMC)相结合的方法模拟了298 K下甲烷-乙烷-丙烷体系以及正丁烷-异丁烷体系在1,3,5-苯三甲酸铜(II) (Cu-BTC)中的吸附行为. 结果表明, Cu-BTC对丙烷以及异丁烷的吸附分离都有较好的选择性. 通过我们发展的“材料剖面成像”方法研究了烷烃混合物在Cu-BTC中不同压力下的吸附位点, 从而进一步分析了烷烃混合物在Cu-BTC中的分离性能. 结果发现, 在吸附过程中主要存在着两种效应, 即能量效应和尺寸效应的竞争. 在甲烷-乙烷-丙烷体系中, 较高压力下, 由于尺寸效应的影响, 丙烷主要吸附在主孔道中, 而对甲烷和乙烷组分, 能量效应占主导地位, 从而导致乙烷主要吸附在四面体孔内, 甲烷则主要吸附在三角形孔窗外. 在正丁烷-异丁烷体系中, 能量效应起主导作用, 从而使异丁烷主要吸附在四面体孔内, 而正丁烷主要吸附在主孔道中.

关键词

[烷烃混合物](#) [吸附](#) [分离](#) [Cu-BTC](#) [吸附位点](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

王琦 qiwang@zju.edu.cn

作者个人主页:

陈丹 张丽 刘迎春 王琦*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(491KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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 “](#)

[烷烃混合物” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)