

论文

苯与丙烯在MCM-22型分子筛内吸附行为的Monte Carlo研究

孙晓岩, 李建伟, 余海清, 李英霞, 陈标华

北京化工大学化工资源有效利用国家重点实验室, 北京 100029

摘要:

采用巨正则统计系综Monte Carlo模拟方法研究了不同温度、不同吸附方式下纯硅MCM-22型分子筛ITQ-1上苯与丙烯分子的吸附行为。分子筛内吸附质粒子云分布模拟结果显示, 苯和丙烯主要吸附在超笼和十元环孔道内, 其中丙烯分子几乎充满了孔道内部大部分区域, 在链接超笼之间的十元环窗口也充满了丙烯分子, 而苯分子在超笼内和十元环孔道内的吸附却较为分散、均匀。丙烯与分子筛之间相互作用能高于苯与分子筛之间的相互作用能, 使苯分子吸附相对丙烯分子更为稳定。温度变化对分子筛上丙烯吸附远大于对苯吸附的影响, 100 kPa时温度由298 K升高至443 K导致丙烯分子吸附量迅速减少, 而对苯分子却没有显著的影响。ITQ-1分子筛上存在苯和丙烯分子的竞争吸附, 使两者吸附相互作用能最可几分布朝着折中方向移动。苯与丙烯在分子筛内吸附等温线的模拟结果表明, 在温度较高、压力较低时, 丙烯的吸附量小于苯的吸附量。

关键词: MCM-22分子筛 苯 丙烯 巨正则统计系综Monte Carlo模拟 吸附

Studies on Adsorption Behavior of Benzene and Propylene in MCM-22 by Grand Canonical Monte Carlo Simulation

SUN Xiao-Yan, LI Jian-Wei*, YU Hai-Qing, LI Ying-Xia, CHEN Biao-Hua

State Key Laboratory of Chemical Resource Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China

Abstract:

The adsorption behavior of benzene and propylene in MCM-22 zeolite was studied by grand canonical Monte Carlo(GCMC) simulations. From the mass clouds of GCMC simulations, it can be found that the benzene and the propylene molecules show different adsorption behavior in the zeolite cavities. Both benzene and propylene molecules were mainly adsorbed in the 10-MR channels and the 12-MR supercages. But obviously, propylene has higher localization than that of benzene. Besides the two localizations, propylene can be steadily located in the short 10-MR windows interconnecting the 12-MR supercages, while the benzene can not do. From the potential energy distribution, it can be seen that both benzene and propylene have two-pinked and the potential energy of propylene is higher than that of benzene, so benzene can be adsorbed more steadily than propylene. When the temperature rises from 298 K to 443 K, the numbers of propylene reduce significantly, while benzene changes little. When benzene and propylene were adsorbed in zeolite at the same time, they have competitive adsorption, therefore the potential energy distribution is changed obviously. The adsorption isotherms of benzene and propylene at different temperatures and 1×10^{-3} —5.0 kPa were simulated, the loadings of propylene are significantly lower than those of benzene.

Keywords: MCM-22 molecular sieve Benzene Propylene Grand canonical Monte Carlo simulation Adsorption

收稿日期 2007-11-06 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(549KB)

[HTML全文](OKB)

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

▶ MCM-22分子筛

▶ 苯

▶ 丙烯

▶ 巨正则统计系综Monte Carlo模拟

▶ 吸附

本文作者相关文章

▶ 孙晓岩

▶ 李建伟

▶ 余海清

▶ 李英霞

▶ 陈标华

▶ 孙晓岩

▶ 李建伟

▶ 余海清

▶ 李英霞

▶ 陈标华

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

参考文献:

1. Krishna R., Van Baten J. M.. Chem. Phys. Letters[J], 2005, 407: 159—165
2. Corma A., Catlow C. R. A., Sastre G.. J. Phys. Chem. B[J], 1998, 102: 7085—7090
3. Leonowicz M. E., Latow I. A., Lawton S. L., *et al.*. Science[J], 1994, 264(5167): 1910—1913
4. Perego C., Amarilli S., Millini R., *et al.*. Micro. Mater.[J], 1996, 6: 395—404
5. Sastre G., Richard C., Catlow A., *et al.*. J. Phys. Chem. B[J], 1999, 103: 5187—5196
6. Cambor M. A., Corma A., Díaz-Cabañas M. J., *et al.*. J. Phys. Chem. B[J], 1998, 102: 44—51
7. Hou T. J., Zhu L. L., Li Y. Y., *et al.*. J. Mol. Struct-Thenchem.[J], 2001, 535: 9—23
8. HOU Ting-Jun(侯廷军), ZHU Li-Li(朱丽荔), XU Xiao-Jie(徐筱杰). Acta Chim. Sinica(化学学报)[J], 2000, 58: 1216—1220
9. Accelrys. Materials Studio Getting Started, Release 4.0[CP] San Diego: Accelrys Software Inc., 2006
10. Randall Q. S., Alexis T. B., Doros N. T.. J. Phys. Chem.[J], 1993, 97: 13742—13752
11. Van Tassel P. A., Davis H. T., McCormick A. V.. Langmuir[J], 1994, 10: 1257—1267
12. PENG Xuan(彭旋), WANG Wen-Chuan(汪文川). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2006, 27(8): 1530—1534
13. Corma A., Corell A., Pérez-Pariente J., *et al.*. Zeolites[J], 1996, 17: 7—14

本刊中的类似文章

1. 陈国良,周剑章,林仲华,卢江红,林进妹.酸性介质中丙烯基硫脲对铜阳极溶出和阴极沉积过程影响的EQCM研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1699-1702
2. 孙建敏,王亚丽,屈学俭,蒋大振,肖丰收,藤田进一郎,荒井正彦.溴化四丁铵催化苯乙烯一步合成苯乙烯环状碳酸酯[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1522-1525
3. 杨二冰,李永红,刘秀峰,李正名. α -芳氧基乙酸-(2-取代氧基)-苄酯的合成与生物活性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1077-1079
4. 魏忠,黄微,李纪红,袁直.吸附剂结构的计算机辅助设计及吸附机理[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1735-1738
5. 李莉莉,蔡传伦,辛志荣,石强,殷敬华.反应型非离子表面活性剂的制备及其组成和结构[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 779-782
6. 丁伟,刘海燕,于涛,曲广淼.离子液体中AM/AMPS/N8AM三元共聚物的合成及溶液性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(4): 868-870
7. 夏树伟,徐香,于红,张慧玲.丙烯腈在Cu(111)面上化学吸附的密度泛函研究及NBO分析[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 751-754
8. 向怡弦,董晓雯,潘庆谊,程知萱,徐甲强.三氧化钼/苯胺层状复合材料的制备[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1095-1098
9. 刘亮,董德明,路永正,花修艺,高秋菊.自然水体悬浮颗粒物中主要化学组分对铅、铜的吸附作用——实验室模拟吸附特征与水环境中富集特征的比较[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 851-855
10. 王雷,唐蜜,李文明,李永红,王素华,李正名.新型1,2,4-三唑酮类化合物的合成及生物活性[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1371-1375
11. 陈捷,刘延,黄磊,冯威,熊德琪.焙烧温度对TiO₂柱撑膨润土结构、吸附及光催化性能的影响[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1406-1411
12. 马晓野,关绍巍,陈春海,王贵宾,姜振华.含苯乙炔的可自交联高温高性能聚芳醚酮的合成与性能[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 600-602
13. 龚军芳,刘广宇,朱玉,杜晨霞,宋毛平,吴养洁.环钡化二茂铁亚胺-三苯基膦配合物的合成、表征及催化Suzuki反应研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1266-1271
14. 丁春华,王祥生,郭新闻.水热处理对MCM-22催化剂酸性、孔结构及甲苯/甲醇烷基化性能的影响[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 922-927
15. 郭卓,袁悦.介孔碳CMK-3对苯酚的吸附动力学和热力学研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 289-292
16. 孙向英,周政,刘斌.

二西基锡分子印迹聚合物的合成与性能研究

- [J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1443-1447
17. 范闯光,方金龙,周龙昌,李望良,李斌,邢建民,刘自力. CuHY分子筛中铜离子的分布与吸附脱硫性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1834-1840
18. 王梅,姚建林,顾仁敖. Au-Ag合金纳米粒子制备及其表面增强拉曼光谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1518-1521

19. 李丽,刘志强,刘春明,Tsao Rong,吕磊,刘淑莹.车前草中苯乙醇苷化合物的电喷雾多级串联质谱研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1430-1434
20. 石金娥,闫吉昌,王悦宏,闫福成,陈大伟,王莹,赵凯,李晓坤,崔晓莹,翟玉娟.不同形貌TiO₂的水热合成及对苯酚的降解研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1513-1517
21. 孙建敏,王路,王亚丽,屈学俭,蒋大振,肖丰收.溴化锌-卤化正四丁基铵高效催化合成苯乙烯环状碳酸酯[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 502-505
22. 倪克钊;单国荣;翁志学.甲基丙烯酸-3-三甲氧基硅丙酯/苯乙烯共聚乳胶粒微结构[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1186-1188
23. 李鱼,王晓丽,张正,郭书海.表层沉积物(生物膜)非残渣态组分的选择性萃取分离及其吸附铜/锌的特性[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2285-2290
24. 曹现福,陈德宏,张靓靓,许凯,陈鸣才.超临界二氧化碳中丙烯酸与苯乙烯共聚[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(11): 2188-2192
25. 邱瑾,陈声培,田利,曾冬梅,甄春花,孙世刚.碱性介质中L-赖氨酸在纳米金膜电极上的吸附和氧化过程[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1841-1845
26. 饶先花,党国栋,周宏伟,邓勇强,路迎宾,陈春海,吴忠文.苯乙炔封端的BTDA系列酰亚胺预聚体的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1775-1778
27. 赵莉;杨华;李卓;李泽生;孙家锺.聚苯乙烯在石墨表面吸附的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1340-1342
28. 张培青,郭洪臣,祝洪杰,王祥生,姜雪梅,王萍.纳米HZSM-5催化剂催化烃类转化反应[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2366-2371
29. 王津南,李爱民,许丽,周扬.复合功能树脂对水体中天然有机酸的吸附[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(5): 1046-1051
30. 耿彩云,李吉来,孙广领,黄旭日,孙家锺.金属Ir₄ Cluster催化丙烯加氢反应势能面的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2372-2375
31. 陈友三,王绪绪,李旦振,付贤智.高活性低失活In(OH)₃纳米晶光催化剂的制备和表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 355-357
32. 李巧霞,严彦刚,徐群杰,蔡文斌.镉电极上的衰减全反射表面增强红外光谱[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2414-2416
33. 邹向宇,周建光,冯国栋,张磊,李明,金钦汉.表面等离子体子共振技术用于分析手性药物与蛋白作用差异的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1631-1634
34. 王梦亮,杜刚,刘滇生.光控生物不对称还原苯乙酮的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1686-1688
35. 白炳莲,李敏.含甲氧基偶氮苯基元的苯甲酸衍生物的合成与液晶性研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1767-1770
36. 谢福中,胡华荣,乔明华,闫世润,范康年,雷浩,谭大力,包信和,宗保宁,张晓昕.噻吩在猝冷骨架Ni上吸附脱硫的XPS研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1729-1732
37. 蔡传伦,辛志荣,姚占海,石强,殷敬华.预辐射聚丙烯反应挤出接枝丙烯酸的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1969-1973
38. 王虹苏,黄家辉,徐臣,徐玲,宋科,徐海燕,王竹倩,阚秋斌.8-羟基喹啉铜(II)功能化SBA-15的制备、表征及催化性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1333-1336
39. 尹勇,陈海涵,孔令东,陈建民.NaCl与Fe₂O₃混合物对SO₂的有效吸收[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1337-1341
40. 王虹苏,黄家辉,徐臣,徐玲,宋科,徐海燕,王竹倩,阚秋斌.8-羟基喹啉铜(II)功能化SBA-15的制备、表征及催化性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1333-1336
41. 尹勇,陈海涵,孔令东,陈建民.NaCl与Fe₂O₃混合物对SO₂的有效吸收[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1337-1341
42. 郑超,刘照胜,高如瑜,张玉奎.前沿分析法研究对-羟基苯甲酸印迹整体柱的热力学行为[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1443-1448
43. 那立艳,姜慧明,杨宝灵,海华,宁桂玲.三维开放骨架镧系金属有机配位聚合物Tm(BTC)(DMF)(DMSO)的合成、结构和性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1437-1439
44. 刘晔,张红娇,吴海虹,刘秀丽,蔡月琴,路勇.离子液体体系中离子型锰卟啉对苯乙烯的催化氧化[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1523-1527
45. 李岩,封继康,任爱民,杨丽.芴与苯并噻二唑共聚物的电子结构和光谱性质的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1561-1565
46. 常玉广,马放,郭静波,张金凤.絮凝基因的克隆及其絮凝形态表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1685-1689
47. 张钰,王丽霞,吴淑杰,杨胥微,贾明君,吴通好,孙家锺.磷酸修饰MCM-49分子筛的结构、酸性及苯与丙烯液相烷基化反应催化性能[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1726-1730
48. 王存国,何丽霞,董献国,高晓平,刘维,董晓臣,袁涛,张军.富含纤维素类农作物秆与丙烯酸接枝共聚制备高倍率吸水树脂[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1787-1790
49. 史达清,李正义,窦国兰,石春玲,王香善,纪顺俊.低价钛促进的苯并咪唑并[1,2-c]喹啉衍生物的合成[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1889-1892
50. 慕长炜,袁会珠,李楠,傅滨,肖玉梅,马永强,齐淑华,覃兆海.4-[3-(吡啶-4-基)-3-取代苯基]丙烯酸酯吗啉类化合物的合成及杀菌活性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1902-1906
51. 康春莉;苏春彦;郭平;赵宇侠;董德明.自然水体生物膜胞外蛋白质吸附铅和镉的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1245-1246

52. 王金成; 徐青; 薛兴亚; 章飞芳; 梁鑫淼. 苯基脲类除草剂分子印迹聚合物的合成和识别性能研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1227-1231
53. 罗春花, 吴朝阳, 沈国励, 俞汝勤. 新型一氧化氮表面增强拉曼光谱探针[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 50-54
54. 李剑利, 尹文婷, 张金, 郭媛, 武祥龙, 白银娟, 史真. 环己基甲酮类化合物的仿生合成新方法[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 100-103
55. 王亚丽, 孙建红, 向丹, 王路, 孙建敏, 肖丰收. 负载型金基催化剂Au/Fe(OH)₃催化苯乙烯环氧化反应[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(1): 135-139
56. 魏荣宝, 梁娅. 无溶剂法合成4,6,10,12,16,18,22,24-八羟基-2,8,14,20-四-(联三-(3-苯基-2,4,8,10-四氧杂螺[5.5]十一烷基))-(4-(2-(4,6,10,12,16,18,22,24-八羟基)杯芳基)苯基)}杯芳烃螺环树形大分子化合物[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 309-313
57. 王晓丽, 李鱼, 王一喆, 董德明, 李绪谦. 选择性萃取对沉积物非残渣态、粘土矿物结构及吸附特性的影响[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 288-293
58. 刘春华, 潘才元. 通过RAFT聚合制备SiO₂/接枝共聚物纳米杂化粒子[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 404-408
59. 聂福德, 刘建, 李金山, 赵晓平, 李越生, 范仲勇. VDF-CTFE共聚物在TATB表面吸附链构象的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 605-610
60. 杨利国, 姚雷, 王永国, 贲腾, 张万金. 电话性聚芳醚酮类环状分子的合成和性质[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 655-657
61. 褚效中, 徐继明. 氢同位素吸附容量与吸附剂比表面积的关系[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(4): 775-778
62. 叶平伟, 栾志强, 张敬畅, 张忠良, 李凯, 李岩, 马兰, 曹维良. 活性炭的高温脱氧改性及其床层对全氟异丁烯的吸附动力学研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 954-958
63. 周明松, 邱学青, 杨东杰. 木质素系和萘系分散剂在煤水界面的吸附性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 987-992
64. 张晓鹏, 陆世维. 硒作用下苯胺和硫醇羰基化合成硫代氨基甲酸酯[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1137-1140
65. 李纪红, 张原玮, 杨眉, 张静, 马翼, 袁直. 寡肽吸附剂的制备及吸附机理[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1159-1162
66. 沈启慧, 邹永存, 万利丰, 刘文婷, 王润伟, 裘式纶. 羟基磷酸铜的快速绿色合成[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1331-1333
67. 徐乃库, 肖长发, 封严. 甲基丙烯酸正丁酯/甲基丙烯酸β羟乙酯共聚吸附功能纤维的制备及表征[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1677-1683
68. 黄剑莹, 邹友思. TEMPO调控下的苯乙烯光聚合[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1689-1693
69. 夏树伟, 马骁楠, 于良民, 潘纲. Zn(II)/γ-MnOOH体系化学吸附的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1804-1809
70. 李倩, 岳钦艳, 高宝玉, 刘莉莉. 阳离子膨润土对分散染料的吸附动力学研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1113-1117
71. 王发祥, 夏立秋, 丁学知, 赵新民, 单世平, 莫湘涛, 张友明, 喻子牛. W544F定点突变提高苏云金杆菌Cry1Ac蛋白的稳定性[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(10): 1999-2002
72. 付群, 王德庆, 焦正, 吴明红. 预辐射接枝四氟乙烯-乙烯共聚物湿敏膜的制备及特性研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(10): 2111-2114
73. 刘佳, 赵莉, 吕中元, 李泽生. 聚乙烯链在碳纳米管侧壁吸附的动力学模拟研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2389-2392
74. 林睿, 庄家明, 许锐, 赵军, 林华端, 邹友思. 氧化硼对苯乙烯原子转移自由基聚合的加速作用[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2299-2302
75. 张霞, 赵月, 周春彬, 孙挺. 纳米TiO₂对Ag(I)配合物的吸附[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 121-124
76. 张雪娜, 黄卫民, 高宇, 王璇, 林海波. 隔膜式电解槽生物膜阴极降解苯酚的过程及其条件的优化[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 144-147
77. 王津南, 李爱民, 周友冬, 张全兴. 弱碱性大孔吸附树脂对腐殖酸的吸附[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 181-184
78. 庄占兴, 路福绥, 陈甜甜, 刘月, 罗万春. 苯乙烯丙烯酸共聚物分散剂在氟铃脲颗粒界面的吸附性能[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 332-336
79. 杨玉环, 潘纲, 马骁楠, 陈灏, 张美一, 何广智, 李薇. Zn(II)在TiO₂表面上的微观吸附模式研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 387-390
80. 薛严冰, 唐祯安. CO在SnO₂(110)面吸附特性的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 583-587
81. 赵仁保. CO₂对硅酸钠-丙烯酰胺溶液聚合行为及产物性质的影响[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 596-600
82. 张国海, 高保娇, 王蕊欣, 王飞宇. 在交联聚苯乙烯微球表面实现苯基卟啉的同步合成与固载[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 607-612
83. 李纪红, 俞玫, 王慧彦, 袁直, 马翼. 计算机模拟内毒素吸附剂吸附机理的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1066-1069
84. 李嘉宾, 刘海春, 张立, 王涛, 江振洲, 夏霖. 新型α₁受体拮抗剂先导化合物的寻找: 2-[4-(芳氧烷基)哌嗪-1-基]苯并噁唑的合成、生物活性及3D-QSAR研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(5): 903-907

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-	reviewuins	edfwen@163.com	edwelle	Buy discount ugg cheap ugg shoes ugg ugg rainier b ugg usa discour boots ugg 582E shoes sale ugg su