

研究论文

ITQ-1分子筛中二甲苯吸附特征的计算机模拟

朱丽荔; 侯廷军; 徐筱杰

北京大学化学与分子工程学院 北京 100871

摘要:

用巨正则蒙特卡罗模拟研究了邻二甲苯和间二甲苯在ITQ-1分子筛中的吸附特征。模拟结果表明两种吸附质分子在分子筛骨架中的吸附特征不存在明显的差别。从两种吸附质分子在12员环超笼之间运动的势能曲线, 可以说明在通过10员环窗口时, 邻二甲苯和间二甲苯都需要克服较大的势垒, 但邻二甲苯需要的激发能量明显大于间二甲苯, 计算机模拟以及实验结果表明间二甲苯可以通过10员环窗口到达分子筛的内部, 而邻二甲苯则只能在分子筛的表面发生吸附或扩散。

关键词: ITQ-1 巨正则蒙特卡罗模拟 吸附 扩散

收稿日期 2000-02-22 修回日期 2000-04-18 网络版发布日期 2000-11-15

通讯作者: 徐筱杰 Email:

本刊中的类似文章

1. 侯廷军; 朱丽荔; 徐筱杰; 计明娟; 叶学其. MCM-22型分子筛中苯分子吸附行为的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000, 16(08): 701-707
2. 徐臣, 管景奇, 吴淑杰, 阚秋斌. 硅源对ITQ-13分子筛水热合成的影响[J]. 物理化学学报, 2009, 25(11): 2275-2278

扩展功能

本文信息

PDF(1605KB)

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

▶ ITQ-1

▶ 巨正则蒙特卡罗模拟

▶ 吸附

▶ 扩散

本文作者相关文章

▶ 朱丽荔

▶ 侯廷军

▶ 徐筱杰