

研究论文

Gibbs系综Monte Carlo模拟甲烷的吸附平衡

周健; 汪文川

北京化工大学化学工程学院, 北京, 100029

摘要:

在263、298和313 K下,对甲烷在1.91 nm的活性炭孔中的吸附平衡进行了Gibbs系综Monte Carlo(GEMC)模拟的研究.改进了GEMC方法,使之可用于模拟指定压力下的吸附平衡.通过改进的GEMC模拟,得到了在1.91 nm的活性炭中甲烷在263、298和313 K时的吸附等温线;发现263 K时的超额吸附量要大于298 K、313 K时的超额吸附量;且不同温度下的超额吸附等温线均存在一最大超额吸附.263 K时,超额吸附量在5.0 MPa时出现最大值;而298 K、313 K时超额吸附量则在7.0 MPa时出现最大值.此工作为不同温度下天然气吸附存贮过程的开发及设计提供了依据.

关键词: 甲烷 吸附 分子模拟 Gibbs系综Monte Carlo

收稿日期 2001-01-08 修回日期 2001-04-09 网络版发布日期 2001-08-15

通讯作者: 汪文川 Email: wangwc@buct.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 陈吉祥; 邱业君; 张继炎; 苏万华.  $\text{La}_2\text{O}_3$  和  $\text{CeO}_2$  对  $\text{CH}_4$ - $\text{CO}_2$  重整  $\text{Ni}/\text{MgO}$  催化剂结构和性能的影响[J]. 物理化学学报, 2004, 20(01): 76-80
2. 王军威; 徐金光; 田志坚; 徐云鹏; 徐竹生; 林励吾. Ba、Mn 对  $\text{Al}_2\text{O}_3$  热稳定性和甲烷催化燃烧活性的影响[J]. 物理化学学报, 2002, 18(11): 1018-1022
3. 邹吉军; 李阳; 张月萍; 刘昌俊. 甲烷二氧化碳介质阻挡放电转化产物分布研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 759-763
4. 冀永强; 冯文林; 郝茂荣; 李会英.  $\text{CH}_3\text{NO}_2$  和  $\text{CH}_3$  自由基吸氢反应途径和变分速率常数计算[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 721-726
5. 周灵萍; 李伟; 陶克毅; 李赫啍; 李宣文. NaBr/KY 催化剂在甲苯氧化甲基化反应中的稳定性[J]. 物理化学学报, 2002, 18(10): 916-919
6. 阎震; 寇元. 氧化条件下  $\text{NO}_x$  催化的甲烷均相部分氧化[J]. 物理化学学报, 2002, 18(11): 1048-1051
7. 张现仁; 汪文川. 甲烷在中孔分子筛 MCM-41 中吸附的计算机模拟[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 680-685
8. 季亚英; 李文钊; 徐恒泳; 陈燕馨. 用 MS-PSR 技术研究甲烷部分氧化反应的引发过程[J]. 物理化学学报, 2001, 17(03): 201-205
9. 唐晓萍; 王素凡; 高丽蓉; 王操; 孔繁敏. 甲烷在飞秒强激光场中的解离[J]. 物理化学学报, 2003, 19(07): 661-665
10. 曹达鹏; 汪文川; 沈志刚; 陈建峰. 超临界甲烷在纳米材料中最适吸附压力的确定 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(10): 940-943
11. 杨咏来; 徐恒泳; 李文钊. Ni 基催化剂上  $\text{CH}_4$ 、 $\text{C}_2\text{H}_6$  和  $\text{C}_2\text{H}_4$  的裂解积炭性能 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(09): 773-775
12. 纪敏, 毕颖丽, 甄开吉, 徐立羽华, 魏途. 利用  $\text{Eu}^{3+}$  荧光特性研究  $\text{CaO}-\text{La}_2\text{O}_3$  催化剂结构[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 175-179
13. 熊国兴; 夏新瑞; 陈恒荣; 郭燮贤. NaCl 和  $\text{B}_2\text{O}_3$  在修饰  $\text{FeO}_x$  催化剂中的协同作用[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 971-977
14. 赵震; 远松月; 于作龙. 锂在甲烷氧化偶联多元氧化物催化剂中的作用[J]. 物理化学学报, 1994, 10(07): 616-622
15. 潘竟军; 韩布兴; 闫海科; 李芝芬; 刘瑞麟. 甲烷在水-叔丁醇混合溶剂中的溶解度[J]. 物理化学学报, 1994, 10(06): 501-507
16. 赵震; 远松月; 于作龙. 甲烷氧化偶联 Ti-La-Li 系混合氧化物催化剂[J]. 物理化学学报, 1994, 10(04): 324-329
17. 罗晓鸣; 韩巧凤; 陈懿; 韩世堂; 金通政; 睦霞霞.  $\text{Na}_2\text{SnO}_3$  系催化剂表面吸附氧的 EPR 研究[J]. 物理化学学报, 1993, 9(06): 746-751
18. 刘薇; 徐奕德; 李丽云; 胡红兵.  $^{27}\text{Al}$  和  $^{29}\text{Si}$  MAS-NMR 对 Mo/HZSM-5 催化剂的研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(08): 693-699

扩展功能

本文信息

PDF(643KB)

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

▶ 甲烷

▶ 吸附

▶ 分子模拟

▶ Gibbs系综Monte Carlo

本文作者相关文章

▶ 周健

▶ 汪文川

19. 王达望;马腾才;崔锦华.大气压旋转螺旋状电极辉光放电等离子体催化甲烷偶联[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1291-1294
20. 王操;孔繁敖.多原子分子在强飞秒激光场中的解离[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 1055-1062
21. 白玫瑰,陶旭梅,吴青友,黄志军,李育亮,印永祥,戴晓雁.不同进气方式对热等离子体应用于 $\text{CH}_4$ - $\text{CO}_2$ 重整的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2455-2460
22. 崔锦华;许根慧;刘昌俊.新型多尖端旋转电极甲烷偶联等离子体反应器[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 557-560
23. 李春义;余长春;沈师孔. $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 催化剂上甲烷部分氧化制合成气反应 $\text{CO}_2$ 主要来源[J]. 物理化学学报, 2000,16(02): 97-100
24. 耿春宇;丁丽颖;韩清珍;温浩.气体分子对甲烷水合物稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 595-600
25. 郭亮;吴占松.超临界条件下甲烷在纳米活性炭表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 737-742
26. 曾余瑶;张秉坚.金属-有机骨架材料MOF-5的改进与吸附甲烷的巨正则蒙特卡罗模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1493-1497
27. 陈来元,徐竹生,张涛,李新生,林励吾.甲烷在 $\text{Mo}/\text{HZSM}-5$ 催化剂上的脱氢聚合反应[J]. 物理化学学报, 1995,11(07): 601-606
28. 刘新华,苗茵,李晓丽,盛世善. $\text{La}_2\text{O}_3$ 对 $\text{Ni}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 甲烷化催化剂的助催化作用[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 746-750
29. 曾金龙;熊智涛;林国栋;于腊佳;张鸿斌.甲烷脱氢芳构化 $\text{Mo}/\text{HZSM}-5$ 基催化剂表征[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 394-400
30. 樊晓伟;周少杰;张庆祥;邓景康;郑延友;高乃飞;陈学俊.精确的甲烷分子价轨道的电子动量谱学研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 573-576
31. 刘彦方;赵敏;申世刚;高俊刚.TBBPAER/DDM的固化反应动力学[J]. 物理化学学报, 1998,14(10): 927-931
32. 蒋政;侯红霞;郝郑平;康守方;李进军;胡春. $\text{La}$ 促进型六铝酸盐 $\text{Ba}_{1-x}\text{La}_x\text{FeAl}_{11}\text{O}_{19-\delta}$ 催化甲烷燃烧性能[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1313-1319
33. 李永昕;郭玉华;冀永强. $\text{M}/(\text{MgO})_y(\text{CeO}_2)_{1-y}$ ( $\text{M}=\text{Ni}, \text{Co}, \text{Cu}$ )催化剂的催化甲烷燃烧性能[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 468-473
34. 田宜灵;肖衍繁;朱红旭;董习靖;任晓文;张风才.高温高压下水与非极性流体间的界面张力[J]. 物理化学学报, 1997,13(01): 89-95
35. 樊晓伟;周少杰;郑延友;陈学俊.甲烷分子价电子的能谱和动量谱[J]. 物理化学学报, 1996,12(12): 1106-1109
36. 褚衍来;李树本;龚华;陈正石. $\text{Ni}-\text{Cu}-\text{Al}_2\text{O}_3$ 催化剂的活性相及作用机理[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 429-435
37. 曾凡桂,贾建波.霍林河褐煤热解甲烷生成反应类型及动力学的热重-质谱实验与量子化学计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1117-1124
38. 徐军科;李兆静;汪吉辉;周伟;马建新.甲烷干重整催化剂 $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 表面积炭表征与分析[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 253-260
39. 陈善俊;戴伟;罗江山;唐永建;王朝阳;孙卫国.甲烷在AFS型分子筛中的吸附模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 285-290
40. 万丽华 颜克凤 李小森 樊栓狮.热力学抑制剂作用下甲烷水合物分解过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 486-494
41. 张诺伟 黄传敬 匡飞平 高晓晓 翁维正 万惠霖. $\text{Mg}$ 助剂对 $\text{Co}/\text{Mg}/\text{HZSM}-5$ 催化剂结构及其催化甲烷部分氧化制合成气性能的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2165-2171
42. 肖利华 孙鲲鹏 徐贤伦. $\text{CeO}_2-\text{MO}_x$  ( $\text{M}=\text{La}^{3+}, \text{Ca}^{2+}$ )改性 $\text{Pd}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 催化甲烷燃烧性能[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2108-2113
43. 马淳安;王晓娟;李国华;李美超;陈松.硝基甲烷在离子液体 $\text{BMImBF}_4$ 中的电还原特性[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1719-1722
44. 姜勇;储伟;江成发;王耀红. $\text{Pd}_n$  ( $n=1-7$ )团簇及其与甲烷相互作用的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1723-1727
45. 任秀彬;李换英;郭向云.甲烷部分氧化反应过程中的振荡行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 197-200
46. 张涯远;蒋政;张世超;朱庆山. $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{FeMn}_{1.5}\text{Al}_{9.5}\text{O}_{19-\delta}$ 六铝酸盐气溶胶催化剂的催化性能[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 211-216
47. 张晓菲;胡瑞生;高官俊;孟和;苏海全.两种络合剂对 $\text{Ce}-\text{Sn}-\text{O}$ 复合氧化物结构与性能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 659-663
48. 崔锦华;许根慧;韩森.等离子体甲烷偶联体系中纯氢气放电消除积炭 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 276-278

49. 严前古;罗春容;翁维正;杨乐夫;万惠霖;吴廷华.甲烷在Ni/TiO<sub>2</sub>催化剂表面的活化[J].物理化学学报,2001,17(08):733-738
50. 周长军;朱月香;谢有畅.甲烷催化燃烧催化剂Ag/SnO<sub>2</sub>体系的研究 [J].物理化学学报,2001,17(09):850-854
51. 李建昌;宋延林;薛增泉;刘维敏;江雷;朱道本.聚苯胺-TCNQ复合薄膜的微观结构与电学特性[J].物理化学学报,2000,16(04):289-293
52. 苏文悦;付贤智;魏可镁.SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>表面修饰对TiO<sub>2</sub>结构及其光催化性能的影响[J].物理化学学报,2001,17(01):28-31
53. 朱爱民;张秀玲;宫为民;张报安.有氧气氛下等离子体甲烷偶联反应的研究[J].物理化学学报,2000,16(09):839-843
54. 陈宏善;牛建中;夏春谷;李树本.甲烷氧化偶联Na-W-Mn/SiO<sub>2</sub>催化剂的喇曼光谱[J].物理化学学报,2000,16(06):543-546
55. 李建昌;薛增泉;张浩;曾燕;刘维敏;吴全德.真空沉积TCNQ薄膜的手性分形结构[J].物理化学学报,2000,16(07):579-582
56. 金荣超;陈燕馨;崔巍;李文钊;于春英;江义.甲烷催化部分氧化制合成气的反应机理[J].物理化学学报,1999,15(04):313-318
57. 金荣超;陈燕馨;李文钊;季亚英;秦永生;江义.甲烷部分氧化Ni催化剂及助剂的研究[J].物理化学学报,1998,14(08):737-741
58. 周长军;林伟;朱月香;谢有畅.氧化锡基甲烷催化燃烧催化剂的硫中毒反应机理[J].物理化学学报,2003,19(03):246-250
59. 朴铃钰;李永丹.气凝胶催化剂上甲烷裂解制备的碳纳米管结构特征[J].物理化学学报,2003,19(04):347-351
60. 侯思聪;刘凌涛;寇元.低温甲烷氧化偶联Li-ZnO/La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>催化剂[J].物理化学学报,2006,22(08):1040-1042
61. 杨达林;凌云;丁传凡;周游;朱起鹤.碘甲烷通过 $\tilde{A}$ 态和C态的多光子电离[J].物理化学学报,1993,9(04):442-446
62. 王江;甄开吉;魏谗;毕颖丽.ABO<sub>3</sub>型稀土铝酸盐的表面状态及其催化性能[J].物理化学学报,1992,8(02):247-250
63. 詹明生;周士康;储焰南;宋芳青;杨新;李方琳.F(2P)与CH<sub>2</sub>Br<sub>2</sub>反应的化学发光光谱及其动力学[J].物理化学学报,1992,8(02):274-278
64. 邵淑敏;席光康;王君容;李胜林;杨学柱;王金合;周志强;贺添喜;于宝霞.甲烷在Ni表面及La薄膜上激活解离化学吸附[J].物理化学学报,1992,8(06):767-771
65. 龚桦;姜永基;王贻;陈铭之;郑国康.某些Lewis碱与CCl<sub>4</sub>和CHCl<sub>3</sub>在298.15K的过量体积[J].物理化学学报,1991,7(01):49-56
66. 郭敬忠;顾月姝;刘传朴;李保中;印永嘉;蔡继业;曹德兆.He(2<sup>3</sup>S)与含氢卤代甲烷传能反应中产生的CH(A<sup>2</sup>Δ,v'=0)的新态转动分布[J].物理化学学报,1991,7(02):211-214
67. 曹晨忠;曾荣今.原子电负性和极化度对卤代甲烷C 1s电子电离能的影响[J].物理化学学报,2006,22(09):1085-1089
68. 余林;徐奕德;郭燮贤.红外光谱研究甲烷和氧与SrO-La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/CaO表面的相互作用[J].物理化学学报,1995,11(10):902-906
69. 张昌华,张延,张嵩,张冰.氯碘甲烷在A带的光解动力学[J].物理化学学报,2009,25(08):1708-1712
70. 王罗新,许杰,邹汉涛,易长海.硝基甲烷受限于单壁碳纳米管内的热解反应:手性和尺寸的影响[J].物理化学学报,0(),0-0