

MCM-22型分子筛中苯分子吸附行为的蒙特卡罗模拟研究

侯廷军,朱丽荔,徐筱杰

北京大学化学与分子工程学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用巨正则统计系综蒙特卡罗模拟方法研究了纯硅MCM-22型分子筛(ITQ-1)

中苯分子的吸附行为。结果表明苯分子在ITQ-1型分子筛中主要存在4

个吸附位点。从苯分子粒子分布云图上可以看到苯分子的扩散和吸附主要在12

元环超笼内发生。在苯分子的扩散过程中, S2位置附近的苯分子分布较为集中, 而S3和S4

附近的苯分子分布则较为离散。苯分子通过10元环窗口的运动路径势能面的计算结果表明, 苯分子在12

元环超笼内可以较为自由迁移, 而通过10元环窗口从一个超笼扩散到附近的超笼时则需要较高的激发能量,

这个能量大约为100kJ/mol。

关键词 [分子筛](#) [苯](#) [吸附](#) [蒙特卡罗模拟](#)

分类号 [0647](#)

Adsorption of benzene in MCM-22 zeolite by grand canonical monte carlo simulation

Hou Tingjun,Zhu Lili,Xu Xiaojie

Abstract The adsorption behaviors of benzene in ITQ-1 zeolite have been studied by using grand canonical Monte Carlo (GCMC) simulations. The results indicate that there exist four separate active adsorption sites of benzene in the ITQ-1 zeolite. Moreover, it can be found that the diffusion and migration of benzene mainly happed in 12-MR cavity. In the adsorption process, the benzene molecules near S2 site are generally localized, but the benzene molecules near S2 and S3 site are located in a relatively large area. The potential surface of benzene cross the 10-MR window indicates that in one 12-MR cavity, the benzene molecule can migrate from one place to another relatively freely, while relatively high activation energy (about 100kJ/mol) must be needed when it is to migrate from one 12-MR cavity to another 12-MR cavity nearby through the 10-MR windows.

Key words [MOLECULAR SIEVE](#) [BENZENE](#) [ADSORPTION](#) [MONTECARLO SIMULATIONS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“分子筛”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [侯廷军](#)

· [朱丽荔](#)

· [徐筱杰](#)