

研究论文

圆柱形纳米孔道内受限溶液I₂/Ar的分子动力学模拟研究

胡凡 郑学仿 李钦宁 李慎敏*

(大连大学环境与化学工程学院 辽宁省生物有机化学重点实验室 大连 116622)

收稿日期 2008-3-7 修回日期 2008-4-29 网络版发布日期 2008-11-17 接受日期 2008-11-12

摘要

利用分子动力学模拟方法, 考察了受限圆柱形纳米孔道内I₂/Ar溶液的振动传能及扩散动力学. 计算得到了溶质振动弛豫时间T₁、溶剂轴向扩散系数D_z随孔道半径变化的规律. 结果表明: T₁随着孔道半径的增大而减小; 而D_z随着孔道半径的增大而增大; 与预期的一致, 随着孔道半径的增大, 孔道的限制作用逐渐减小, T₁与D_z趋近于相应的非受限溶液体相值. 此外, 通过考察溶质、溶剂与孔道的相互作用, 在原子、分子层次上揭示了限制作用对传能与传质影响的机制.

关键词

[分子动力学模拟](#) [径向密度分布](#) [振动能量弛豫时间](#) [扩散系数](#) [圆柱形纳米孔道](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

李慎敏 shenmin@dl.cn

作者个人主页:

胡凡 郑学仿 李钦宁 李慎敏*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(379KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(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 “](#)

[分子动力学模拟” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [胡凡, 郑学仿, 李钦宁, 李慎敏](#)