

研究论文

C5烷烃分子在A1P04-5分子筛中吸附的分子模拟研究

刘洁翔¹ ² 董梅¹ 秦张峰¹ 王建国¹

(1. 中国科学院山西煤炭化学研究所, 煤转化国家重点实验室, 山西 太原 030001; 2. 中国科学院研究生院, 北京 100039)

摘要 采用分子水平计算机模拟方法研究了环戊烷、正戊烷和2-甲基丁烷在A1P04-5分子筛中的吸附, 得到了有关吸附平衡常数、吸附热、吸附等温线以及平均势能等。结果表明, 在373 K, 2-甲基丁烷的饱和吸附量高于其他两种异构体; 473 K, 环戊烷的饱和吸附量高于其他两种异构体; 573 K, 在所测试的压力范围内, 环戊烷的吸附量都高于其他两种异构体, 2-甲基丁烷的吸附量高于正戊烷。C5烷烃分子在A1P04-5中吸附量的不同是由于他们在分子筛中的排列方式不同而引起的。低吸附量时C5烷烃分子平均势能随吸附量变化; 高吸附量时平均势能随着吸附量的增加而降低; 而2-甲基丁烷和环戊烷分子的平均势能变化更加明显。

关键词 [分子筛](#); [A1P04-5](#); [C5](#); [吸附](#); [分子模拟](#)

收稿日期 2003-12-3 修回日期 2004-4-26

通讯作者 王建国 iccjgw@sxicc.ac.cn

DOI 分类号 0643

