



(<http://www.apm.cas.cn/>)

当前位置: [首页](#) (>>) [科研动态](#) (>>)

科研动态

精密测量院发现分子筛限域传质扩散中的“热阻效应”

来源: 时间: 2021-05-20

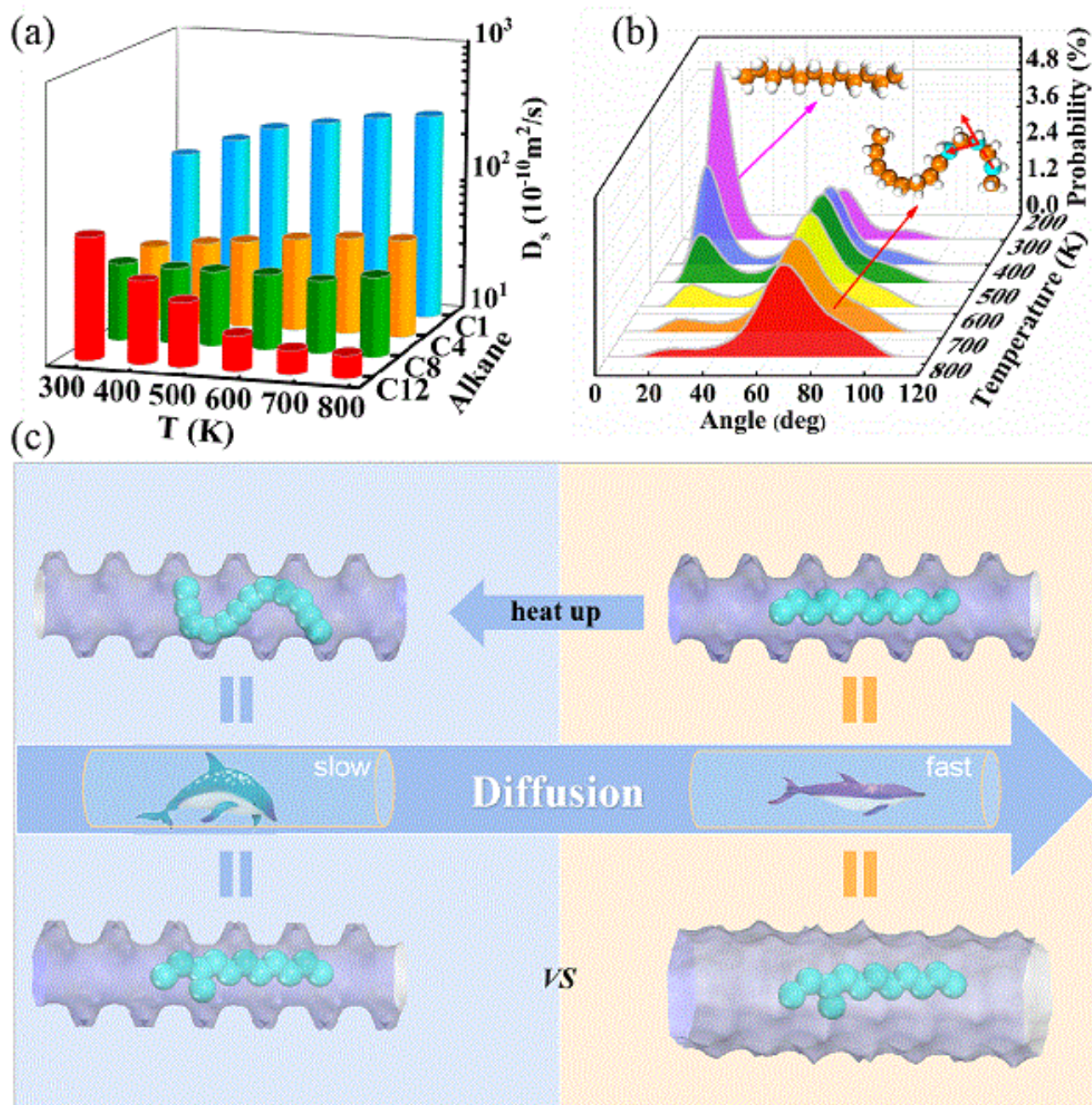
近日, 精密测量院郑安民研究团队在沸石分子筛扩散领域取得新进展。该团队结合多尺度理论模拟和实验研究发现分子筛限域孔道中存在反常的“热阻效应”。相关研究成果发表在国际期刊《美国科学院院刊》(PNAS) 上。

众所周知, 温度越高热运动越剧烈, 扩散越快, 通常满足Arrhenius公式 $D_s = D_0 \cdot \exp(-E_a/RT)$: 扩散系数和温度成正相关。然而研究者通过系统研究惊奇地发现在沸石分子筛限域孔道内出现了违反该常识的现象: 随着温度升高, 长链分子(如正十二烷烃)在ZSM-5等分子筛限域孔道中扩散系数逐渐减慢(图a)。分子动力学理论模拟发现, 温度升高促使长链分子弯曲, 形变加剧, 从而增加了分子筛孔壁与吸附分子之间的相互作用, 扩散阻力随之增加(图b), 因此呈现出扩散系数与温度之间的负相关, 即“热阻效应”。

“热阻”通常指的是物体对热量传导的阻碍效果。该工作将“热阻”概念引入到传质过程中, 发现“热阻效应”引起分子筛反常的扩散需要满足以下两个条件。首先吸附分子需要有一定的长度和柔性, 其分子链长和弯曲程度随温度呈现明显变化。其次, 该类反常扩散现象需要特定的限域环境。只有当孔径与高温下长链分子形变后的维度接近时, “热阻效应”导致的反常扩散现象才会呈现。而在气相或者在孔径较大的多孔材料中通常呈现正常的扩散现象(温度越高扩散越快), 不易发生此类反常现象(图1c)。该工作丰富了反常扩散的种类, 揭示了高温下长链烷烃扩散受阻的微观机理, 对于分子筛催化反应条件选择和优化也具有重要指导意义。

精密测量院博士研究生袁家敏为论文的第一作者，特别研究助理/博士后刘志强和研究员郑安民为论文通讯作者。该研究工作得到国家自然科学基金委、中国科学院以及湖北省科技厅的支持。

论文链接：<https://www.pnas.org/content/118/21/e2102097118>



(a) 烷烃分子扩散系数随温度变化图，(b) 长链烷烃弯曲角度随温度变化图，(c) “热阻效应”原理图

下一篇：[精密测量院在沸石分子筛催化甲烷制芳烃反应活性中心的研究中取得重要进展](https://www.pnas.org/content/118/21/e2102097118)
(./202104/t20210423_5996245.html)



中国科学院

CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

(<http://www.cas.cn>)

中国科学院精密测量科学与技术创新研究院

地址：武汉市武昌小洪山西30号 电话：027-87199543 邮政编码：430071

ICP备案号：鄂ICP备20009030号-1 (<https://beian.miit.gov.cn>) 鄂公网安备 42011102003884号