

# 乙烷在中孔分子筛 MCM-41 中吸附 的计算机分子模拟<sup>\*</sup>

张现仁<sup>1)</sup> 沈志刚<sup>2)</sup> 陈建峰<sup>2)</sup> 汪文川<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>北京化工大学化学工程学院, 北京 100029)

<sup>2)</sup>北京化工大学教育部超重力工程研究中心, 北京 100029)

(2002 年 4 月 25 日收到, 2002 年 5 月 16 日收到修改稿)

采用计算机模拟方法研究不同温度下乙烷在不同孔径的 MCM-41 中的吸附. 其中乙烷分子采用两个 LJ 中心的势模型表征, 乙烷分子与 MCM-41 孔壁的相互作用采用一个连续的势模型表示. 除考察了温度、孔径对吸附量的影响外, 还研究这些量对乙烷分子在孔中的甲基和质心的分布, 以及它们对乙烷分子在孔中的排列方向的影响. GCMC 模拟结果发现, 在 180K 和 300K 时壁面处都有较多的乙烷分子倾向于沿着壁面排列, 同时在 180K 时其余的流体分子倾向于垂直于壁面排列, 而在 300K 时其余的分子并不像在 180K 时一样倾向于垂直于壁面排列. 模拟结果还表明, 除壁面附近外, 即使是在 180K 的较低温度下, 乙烷分子的排列也是混乱和无序的.

关键词: 乙烷, MCM-41, 吸附, 计算机分子模拟

PACC: 6120J, 8265M, 6845D

## 1. 引 言

天然气的储存是能源工程中的重要课题. 由于纳米微孔材料的出现, 有可能中压下在微孔介质中吸附存储天然气, 安全性明显增加. 而最近出现的 MCM-41 和碳纳米管束等规整的圆柱状孔为天然气的吸附存储提供了新的吸附材料. 乙烷不仅是天然气的一种成分, 也是线性分子的原型. 而 MCM-41 被广泛用于吸附、分离、催化等领域, 由于其理想的结构使其可用于现有吸附理论的检验和发展. 因此乙烷分子在 MCM-41 的吸附的研究具有实际和理论意义.

尽管限制空间中流体的相行为的计算机模拟研究方面的文献很多, 但是关于非球形分子的研究相对较少. 线性分子如氮气<sup>[1,2]</sup>, 氧气<sup>[3]</sup>, CS<sub>2</sub><sup>[4]</sup>, CO<sub>2</sub><sup>[5]</sup>, 氯气<sup>[6]</sup>, 乙烷<sup>[7]</sup>等在石墨表面上的吸附曾是一个广泛研究的课题. 狭缝孔作为一种微孔和中孔的最常见的孔模型. 用两个 LJ 原子表示的线性分子在其中的吸附的研究也逐渐增加. Sokolowski<sup>[8,9]</sup> 研究了两个

LJ 原子表征的氧分子在狭缝孔中的吸附. Jiang 等<sup>[10]</sup>采用实验和计算机模拟的方法研究了乙烷在活性炭中的吸附. Cracknell 等<sup>[11]</sup>用巨正则系综 Monte Carlo (GCMC) 方法研究了 LJ 流体混合物在狭缝孔中的吸附, 其中乙烷分子采用的是两个 LJ 中心的势模型, 他们发现与球形 LJ 势模型相比, 采用两个 LJ 中心的势模型时, 两个 LJ 中心之间的距离对选择性吸附的孔径依赖性有很大的影响. Vishnyakov 等<sup>[12]</sup>研究了平均密度、吸附力、温度对乙烷在狭缝孔中吸附行为的影响, 他们发现在  $T = 140\text{K}$  乙烷分子倾向于垂直于壁面. Klochko 等<sup>[13]</sup>用 Monte Carlo 方法和 MD 方法研究了乙烷在狭缝孔中的吸附. 而随着 MCM-41 和碳纳米管束等规整的圆柱状孔的出现, 线性分子在圆柱状孔中的吸附也变得相对重要. Ali Kham 和 Ayappa<sup>[14]</sup>以及作者<sup>[15]</sup>研究了线性分子在圆柱状孔单壁碳纳米管中的吸附行为. 目前以 MCM-41 为研究对象的计算机模拟方面的文献较少. Maddox 等人<sup>[16-19]</sup>分别采用 GCMC 方法研究了纯流体(氮气, 甲烷, 丙烷, 氙气)以及等摩尔二元混合物在 MCM-41 中的吸附. 并且在以上的计算机模拟的理论工作

<sup>\*</sup> 国家重点基础研究发展规划项目(批准号: G2000048010) 国家高性能计算基金(批准号: 99118) 及北京化工大学教育部超重力工程研究中心资助的课题.

中流体都是用球状 LJ 分子表示的.

本文旨在用 GCMC 方法模拟乙烷在 MCM - 41 中的吸附. 其原因是一方面乙烷也是天然气中的重要成分, 其吸附存储具有实际意义; 另一方面对此类线性分子的模拟, 有助于了解复杂分子在限定空间中吸附和相行为. 本文分别考察了不同温度和孔径下乙烷在 MCM - 41 中的吸附和相行为.

## 2. 势能模型与 GCMC 模拟

### 2.1. 势能模型

#### 2.1.1. 流体的势能模型

在本节中采用两个 LJ 中心的势模型表征乙烷分子, 其中一个甲基用一个 LJ 原子表示. 任意两个乙烷分子之间的相互作用势为不同分子上任两个 LJ 原子相互作用势的和, 即

$$u(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \sum_{i,j=1,2} u_{ij}(r_{ij}),$$

$$u_{ij}(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

式中位矢  $\mathbf{R} = (r, \Omega)$  包括位移  $r$  和方向角  $\Omega$ ,  $r_{ij}$  是两 LJ 原子  $i$  和  $j$  之间的距离,  $\sigma$  是 LJ 原子的直径,  $\epsilon$  是 LJ 原子势能的阱深. 本文所采用的 LJ 参数  $\sigma_{ff}$ ,  $\epsilon_{ff}$  的值以及两个 LJ 原子间的距离  $l_{\text{CH}_3-\text{CH}_3}$  取自文献 [11] 并列于表 1. 在模拟中截断半径取为  $5\sigma_{ff}$ .

表 1 表征乙烷分子以及孔壁内粒子的 LJ 势能参数

$\sigma_{ff}/\text{nm}$	$\epsilon_{ff}/k^{-1}/\text{K}$	$l_{\text{methyl-methyl}}/\text{nm}$	$\epsilon_{ss}/k^{-1}/\text{K}$	$\sigma_{ss}/\text{nm}$
0.3512	139.81	0.2343	329.0	0.265

注: 下标  $s$  代表 MCM - 41 墙内的氧原子,  $f$  代表乙烷分子中的甲基.

#### 2.1.2. 墙势模型

由于 MCM - 41 是一种规则的圆柱状孔, 本文采用作者提出的一个解析的势函数来描述圆柱状孔中的流体分子与孔墙的相互作用势<sup>[20]</sup>. 经验证明这个势模型和虚拟原子势能模型 (pseudoatom potential model) 相一致, 并在孔壁厚度趋于零的极限条件下和圆柱面的势函数吻合较好.

同  $\text{C}_2\text{H}_4$  在  $\text{Ru}(0001)$  表面的吸附<sup>[21]</sup> 不同, 本文采用 van de Waals 作用表征乙烷与 MCM - 41 孔壁的相互作用势 (见 Maddox 等人的工作<sup>[16-19]</sup>). 按惯例, 本文只考虑 MCM - 41 中氧原子对孔中流体分子的

作用势, 而忽略掉硅和其他原子或离子对流体分子的作用. 当然在计算机分子模拟中应调节氧原子的能量参数以包含后一部分作用. 一个 LJ 流体分子与圆柱状孔的相互作用的势能, 可表示为<sup>[20]</sup>

$$U(R, \rho) = \frac{63\pi\rho_s}{64} I_1 - \frac{3\pi\rho_s}{2} I_2, \quad (2)$$

式中

$$I_1 = f_1(R - \rho) - f_1(R + \rho) + \frac{2\pi}{9} \frac{1}{(R + \rho)^9} \quad (3)$$

$$I_2 = f_2(R - \rho) - f_2(R + \rho) + \frac{2\pi}{3} \frac{1}{(R + \rho)^3} \quad (4)$$

在 (3) 式和 (4) 式中, 函数  $f_1$  和  $f_2$  可由下式决定:

$$f_1(y) = \frac{\pi}{9y^9} - \frac{3\pi(R^2 - \rho^2)}{80\rho y^{10}} + \frac{3\pi}{64\rho y^8}, \quad (5)$$

$$f_2(y) = \frac{\pi}{3y^3} - \frac{3\pi(R^2 - \rho^2)}{32\rho y^4} + \frac{3\pi}{16\rho y^2}, \quad (6)$$

式中  $R$  为孔径,  $\rho$  是流体分子到孔轴的距离,  $\rho_s$  为孔墙内的原子或分子数密度. 应指出, 大多数的 x 射线衍射实验表明 MCM - 41 的结构是无定型的, 而无定型硅石的密度  $\rho_s$  为  $2.2\text{g}/\text{cm}^3$ . 因此 MCM - 41 的孔壁密度应在这个数值附近. 在 Feuston 等人的理论工作<sup>[22]</sup> 中, 孔壁密度大约取为  $2.0\text{g}/\text{cm}^3$ , 因此在本文中, 孔壁密度取为  $2.0\text{g}/\text{cm}^3$ .

如果墙厚是有限的, 且内外径分别是  $R_1$  和  $R_2$ , 则孔中的一个流体分子与孔墙的相互作用可由  $U(R_1, \rho) - U(R_2, \rho)$  计算. 本文取壁厚为  $0.69\text{nm}$ <sup>[23]</sup>. 其中以上势能函数中的量均以交互作用参数  $\sigma_{sf}$  和  $\epsilon_{sf}$  为对比量, 而  $\sigma_{sf}$  和  $\epsilon_{sf}$  采用 Lorentz-Berthelot 混合规则计算, 即

$$\epsilon_{sf} = (\epsilon_{ss}\epsilon_{ff})^{0.5}, \quad (7)$$

$$\sigma_{sf} = 0.5(\sigma_{ss} + \sigma_{ff}), \quad (8)$$

其中  $\epsilon_{ss}$  和  $\sigma_{ss}$  是孔墙的 LJ 分子或原子势参数<sup>[24]</sup> (见表 1), 而  $\epsilon_{sf}$  和  $\sigma_{sf}$  是流体分子和孔墙中 LJ 氧原子的相互作用势参数.

## 2.2. GCMC 方法

本文采用 GCMC 方法模拟氮气在 MCM - 41 中的吸附, 考察孔径和温度对吸附行为的影响. 模拟中取 MCM - 41 的轴向为  $z$  轴. 对于固定了孔径的 MCM - 41 来说, 周期边界条件只能在  $z$  方向采用.

在具体实施模拟时,每一步都包含下述四种振动:1)插入一个分子到模拟盒子中.2)从模拟盒子中删除一个分子.3)在模拟盒子里分子从一个位置平移到另一个位置.4)分子的转动.在模拟中,我们采用等权重选择分子算法,使得在插入、删除、平移和转动这四种扰动下,各构型产生的可能性都为 1/4.

在模拟时,每个状态都将产生  $10 \times 10^6$  个构型,为了消除初始构型的影响,最初的  $5 \times 10^6$  个构型将被丢掉,在计算热力学量的系综平均时,只对后面  $5 \times 10^6$  个构型进行统计平均.

在模拟计算中,各变量都采用对比量.在本文中对比量定义如下:

$$\begin{aligned} D^* &= D/\sigma_{ff}, R^* = R/\sigma_{ff}, H^* = H/\sigma_{ff}, \mu^* = \mu/\varepsilon_{ff}, \\ U^* &= U/\varepsilon_{ff}, \rho^* = \rho\sigma_{ff}^3, \end{aligned} \quad (9)$$

式中  $D$  为孔直径,  $R$  为孔的半径,  $H$  表示任意长度量,例如到孔壁的距离等,  $\mu$  为化学位,  $U$  为相互作用势能,  $\rho$  为粒子数密度,  $\rho = N/V$ , 其中  $N$  为分子数,  $V$  为体积.所有提到的到孔壁的距离或孔径都是到孔壁的最内层原子中心的距离.

### 3. 乙烷在 MCM-41 中吸附的计算机模拟

本文考察了温度、孔径对乙烷在 MCM-41 中吸附行为的影响.在图 1 和图 2 分别给出了在温度 180K 和 300K 下,乙烷在孔径分别为 2.0nm 和 3.5nm 的 MCM-41 中的吸附等温线.

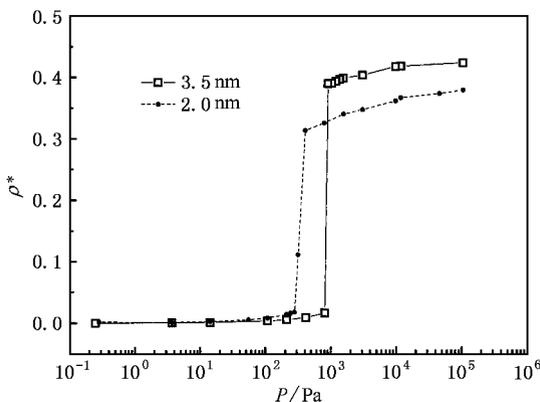


图 1 180K 时乙烷分子流体在不同孔径的 MCM-41 中的吸附等温线

由图 1 可以看出乙烷在较小孔径的孔中达到饱和和吸附的压力均小于较大的孔所需的压力,这是由于乙烷分子在较小的孔径中受到较强的吸附力作

用,故它可以在较小压力下达到最大吸附量.但是由于较小的 MCM-41 在充满吸附流体的情况下,对应的流体分子不能达到的体积比较大(本文中孔径都是从孔壁内表面的氧原子的中心算起的),因此达到最大吸附时其吸附的乙烷分子密度较小.

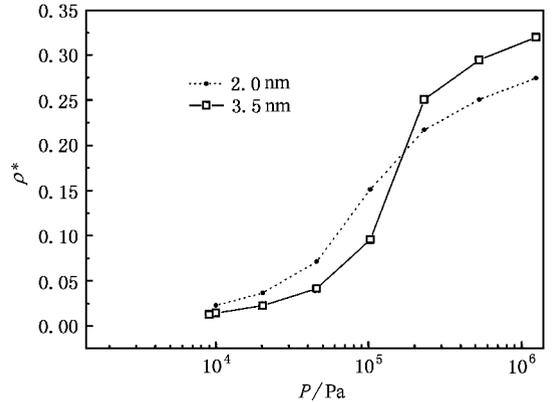


图 2 300K 时乙烷分子流体在不同孔径的 MCM-41 中的吸附等温线

由图 2 可以看出,在吸附过程中,壁面对流体分子的作用和孔的容积是一对竞争的因素.较小的孔的孔壁对流体分子的吸附作用力强,有利于流体的吸附,但同时其较小的容积限制了孔的吸附能力.对图 2 来讲,在低压部分中,孔的吸附力起主要作用,这时 2.0nm 的孔由于较大的吸附力而使孔内吸附的流体分子的数密度较大.而在较高的压力下,3.5nm 的 MCM-41 孔的较大体积起主要作用,这时较大的孔径中的流体的数密度较大.

通过比较图 1 和图 2 中的吸附等温线可知,当温度由 180K 升高到 300K,不但相应的限制空间的相变消失,而吸附量也相应降低.

图 3 和图 4 中分别给出了 180K 和 300K 及 0.1MPa 下乙烷分子在 2.0nm 和 3.5nm 的两个孔径中相应的甲基和质心的局部密度分布.从图 3 和图 4 中的局部密度分布可以观察到,在最靠近壁面处,甲基基团的局部密度有一个较高的峰和一个离它较远的较小的峰,而这时质心的局部密度也有一个较高的峰和一个与之接近的较小的峰,这表明乙烷分子在最靠近壁面处倾向于沿壁面排列,其中较高的甲基和质心密度峰对应于沿壁面排列的乙烷分子,而较小的甲基和质心密度峰对应于倾向于垂直壁面排列的乙烷分子.

从图中 180K 及  $P = 0.1\text{MPa}$  时的局部密度分布可以观察到两个较高的峰,其中第二个峰并不像第

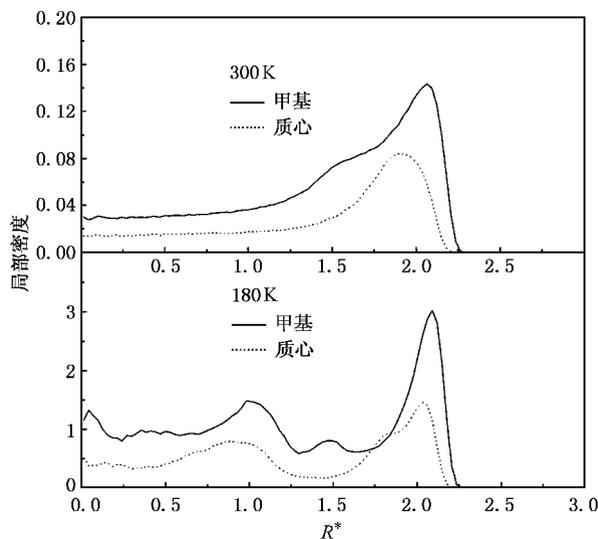


图 3 在 180K 和 300K 及 0.1MPa 的压力下乙烷在 2.0nm 的 MCM-41 中的甲基及质心的密度分布

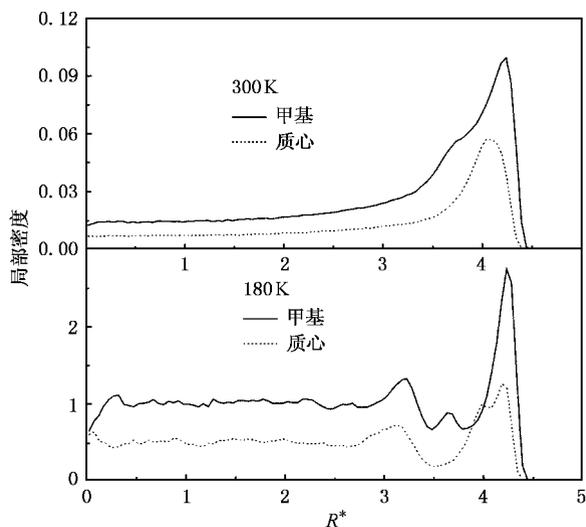


图 4 在 180K 和 300K 及 0.1MPa 压力下乙烷在 3.5nm 的 MCM-41 中的甲基及质心的密度分布

一个峰一样在其后有一个较小的峰,这意味着乙烷分子在第二个峰的位置处排列并不像第一个峰所在处那样有序.而在孔中心处,即使是在 180K 的较低温度下,乙烷分子的排列就像理想气体一样是混乱和无序的.而在 300K 及  $P = 0.1\text{MPa}$  时仅能观察到一个较高的峰,在其后对应的较小的甲基密度峰和质心密度峰变得模糊或消失,这表明低温下乙烷分子的排列更为有序.

为研究乙烷分子在 MCM-41 中的取向性,定义了两个角度量  $\theta$  和  $\phi$ .  $\theta$  为乙烷分子与通过分子质

心的管壁面法线方向的夹角,它用来表示乙烷分子是否沿着壁面排列.而  $\phi$  为乙烷分子与 MCM-41 管轴的夹角,它用来表示乙烷分子是否沿管径方向排列.这两个角度的取值范围均在  $0-\pi/2$ . 作为特例,  $\theta = \pi/2$  以及  $\phi = 0$  时,分子在空间顺着轴向排列,而  $\theta = 0$  及  $\phi = \pi/2$  时,分子沿径向排列.图 5 中给出了  $\theta$  和  $\phi$  的示意图.

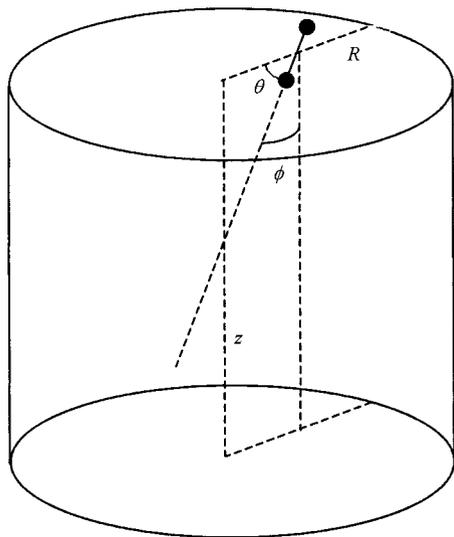


图 5  $\theta$  和  $\phi$  角的定义

在图 6 和图 7 中分别给出了 2.0nm 和 3.5nm 的 MCM-41 中温度为 180K 和 300K 以及  $P = 0.1\text{MPa}$  时管内的  $\theta$  和  $\phi$  角分布.从图中可以看出,在 180K 和 300K 的两个温度下靠近壁面处角  $\theta$  的分布近于  $0.4\pi$ ,大于随机分布的平均值  $0.3\pi$ ,这意味着倾向于沿着壁面排列的乙烷分子较之沿其他方向排列的分子为多.这可能是由于流体与壁面间的相互作用,使得乙烷分子的两个点位(site)尽可能同时接近壁面以使得体系具有较小的势能.

在 180K 时,在角  $\theta$  约  $0.4\pi$  的高峰后存在一个角  $\theta$  约为  $0.2\pi$  的极小值,而在这个位置处  $\phi$  约为  $0.4\pi$ .这意味着乙烷分子在这个位置处倾向于垂直于壁面.这同图 3 和图 4 给出的结论一致,即在 180K 时紧靠壁面处的较高的密度峰后有一个较小的峰对应于一部分乙烷分子倾向于垂直壁面排列.例如,在 180K 2.0nm 的孔中,在距孔中心的对比距离约 1.5 处乙烷分子的甲基分布有一个较小的峰,同时在此处  $\theta$  对应于  $0.2\pi$  的极小值, $\phi$  对应于  $0.4\pi$  的极大值,这表明乙烷分子在此附近倾向于垂直壁面排列.

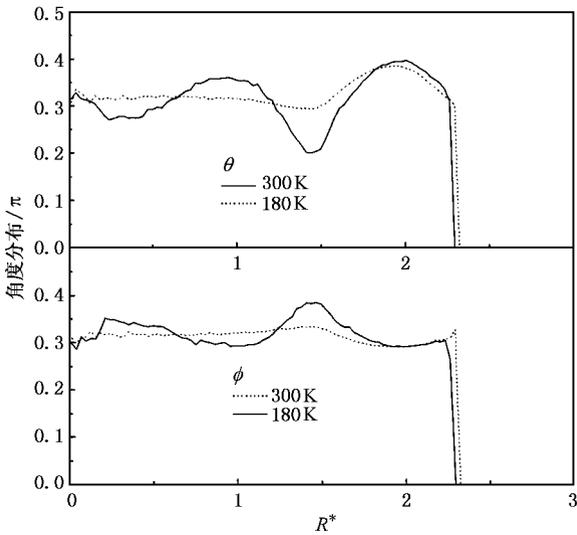


图 6 乙烷在 2.0nm 的 MCM-41 中的角度分布

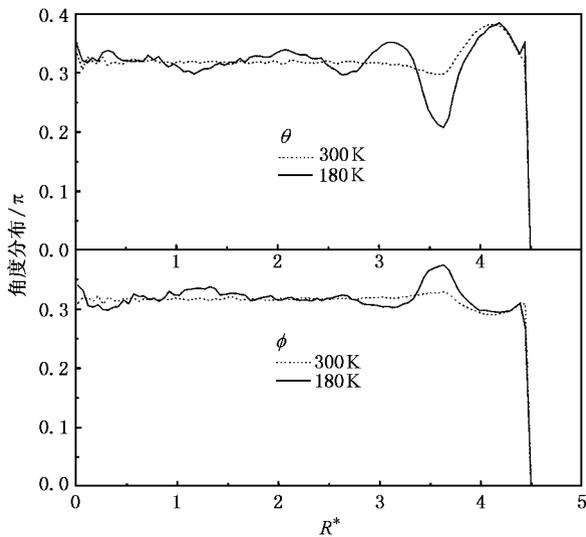


图 7 乙烷在 3.5nm 的 MCM-41 中的角度分布

而在 300K 时,除在靠近壁面处角  $\theta$  的分布存在一个极大值以外,其他位置处的  $\theta$  和  $\phi$  角分布均在随机分布的  $0.3\pi$  附近,这意味着乙烷分子除在壁面处较倾向于沿壁面排列外,其余乙烷分子在 MCM-41 孔中排列近乎无序.与温度为 180K 时乙烷分子的角度分布相比,在 300K 时,靠近壁面处角  $\theta$  约

$0.4\pi$  的高峰后的极小值消失.这表明在 300K 时,壁面处的乙烷分子除有一部分倾向于沿着壁面排列外,其余的并不像在 180K 时一样倾向于垂直于壁面排列.这同图 3 和图 4 给出的结论一致,即在 300K 时仅能在紧靠壁面处观察到一个较高的峰,在其后对应于乙烷分子垂直于壁面的较小的甲基密度峰和质心密度峰变得模糊或消失.

图 8 分别给出了 300K 和 180K 以及在 0.1MPa 压力下,乙烷分子在 3.5nm 的中孔分子筛 MCM-41 中的构型.

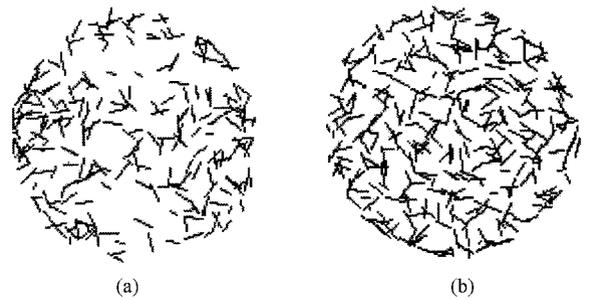


图 8 在 300K (a) 和 180K (b) 及 0.1MPa 压力下乙烷在 3.5nm 的 MCM-41 中的分子构型

## 4. 结 论

综上所述,在吸附过程中,壁面对流体分子的作用和孔的容积(也就是孔径)是一对竞争的因素.较小孔的孔壁对流体分子的吸附作用力强,有利于流体的吸附,但同时其较小的容积限制了孔的吸附能力.当温度由 180K 升高到 300K,不但乙烷分子在 MCM-41 中的吸附量会相应减少,乙烷分子在孔中的分布和排列方向也会相应变化.GCMC 模拟发现,在 180K 和 300K 时壁面处都有较多的乙烷分子倾向于沿着壁面排列,同时在 180K 时其余的流体分子倾向于垂直于壁面排列,而在 300K 时其余的分子并不像在 180K 时一样倾向于垂直于壁面排列.模拟结果还表明,除壁面附近外,即使是在 180K 的较低温度下,乙烷分子的排列也是混乱和无序的.

- [1] Talbot J, Tildesley D J and Steele W A 1984 *Mol. Phys.* **51** 1331  
 [2] Kuchta B and Eiters R D 1987 *Phys. Rev. B* **36** 3400  
 [3] Joshi Y P and Tildesley D J 1986 *Surf. Sci.* **166** 169

- [4] Joshi Y P, Tildesley D J, Ayres J S and Thomas R K 1988 *Mol. Phys.* **65** 991

- [ 5 ] Hammonds K D , McDonald I R and Tildesley D J 1991 *Mol. Phys.* **70** 175
- [ 6 ] Hammonds K D , McDonald I R and Tildesley D J 1993 *Mol. Phys.* **78** 173
- [ 7 ] Moller M A and Klein M L 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 1960
- [ 8 ] Sokolowski S 1991 *J. Chem. Phys.* **95** 7513
- [ 9 ] Sokolowski S 1992 *Mol. Phys.* **75** 999
- [ 10 ] Jiang S , Zollweg J A and Gubbins K E 1994 *J. Chem. Phys.* **98** 5709
- [ 11 ] Cracknell R F , Nicholson D and Quirke N 1997 *Current Topics in Mol. Sim.* 1 ( London :Gordon and Breach )p457
- [ 12 ] Vishnyakov A , Piotrovskaya E M and Brodskaya E N 1996 *Langmuir* **12** 3643
- [ 13 ] Klochko A V , Brodskaya E N and Piotrovskaya E M 1999 *Langmuir* **15** 545
- [ 14 ] Ali Kham I , Ayappa and K G 1998 *J. Chem. Phys.* **109** 4576
- [ 15 ] Zhang X R and Wang W C 2002 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **4** 3720
- [ 16 ] Maddox M W and Gubbins K E 1994 *Int. J. Thermophys.* **15** 1115
- [ 17 ] Maddox M W and Gubbins K E 1996 *Fundamentals of Adsorption* ( Boston :Kluwer Academic Publisher )p563
- [ 18 ] Maddox M W , Sowers S and Gubbins K E 1996 *Adsorption* **2** 23
- [ 19 ] Maddox M W , Olivier J P and Gubbins K E 1997 *Langmuir* **13** 1737
- [ 20 ] Zhang X R and Wang W C 2001 *Chinese J. of Chem. Eng.* **9** 348
- [ 21 ] Zhuang Y Y , Wu Y , Zhang J H , Zhang H J , Li B ,Li H Y , He P M and Bao S N 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1185 ( in Chinese ) 庄友谊、吴悦、张建华、张寒洁、李波、李海洋、何丕模、鲍世宁 2001 *物理学报* **50** 1185 ]
- [ 22 ] Feuston B P and Higgins J B 1994 *J. Phys. Chem.* **98** 4459
- [ 23 ] He J , Duan X and Howe R F 1999 *Acta Chim. Sin.* **57** 125 ( in Chinese ) 何静、段雪、Howe R F 1999 *化学学报* **57** 125 ]
- [ 24 ] Zhang X R and Wang W C 2002 *Acta Phys. Chim. Sin.* **18** 856 ( in Chinese ) 张现仁、汪文川 2002 *物理化学学报* **18** 856 ]

## Adsorption of linear ethane molecules in MCM-41 by molecular simulation \*

Zhang Xian-Ren<sup>1)</sup> Shen Zhi-Gang<sup>2)</sup> Chen Jian-Feng<sup>2)</sup> Wang Wen-Chuan<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> College of Chemical Engineering , Beijing University of Chemical Technology , Beijing 100029 , China )

<sup>2)</sup> Research Centre of the Ministry of Education for High Gravity Engineering and Technology ,  
Beijing University of Chemical Technology , Beijing 100029 , China )

( Received 25 April 2002 ; revised manuscript received 16 May 2002 )

### Abstract

Grand canonical Monte Carlo method is used to simulate the adsorption of linear two-centre ethane molecules in MCM - 41 of different pore sizes at different temperatures and a range of pressures. Beside the amount of adsorption , the local density profiles for the mass centre and methyl groups as well as the angle distributions simulated for the ethane molecules are used to explore microscopic and orientational structures of the adsorbate inside MCM - 41 . The results indicate that ethane molecules near the wall of MCM - 41 prefer to lie on the surface both at 180 and 300 K , while the rest molecules exhibit a trend to be perpendicular to the wall , and the increase of temperature makes the molecules placed more randomly. In addition , the distributions show that the molecules in the vicinity of the centre are basically disordered even at a low temperature of 180 K.

**Keywords :** ethane , MCM - 41 , adsorption , molecular simulation

**PACC :** 6120J , 8265M , 6845D

\* Project supported by the Key Foundation Research Plan ( Grant No. G2000048010 ) , and National High performance Computing Foundation of China ( Grant No. 99118 ) and the Research Centre of the Ministry of Education for High Gravity Engineering and Technology.