

合成气(CO+H<sub>2</sub>)在Ni, Cu及Ni-Cu合金上甲烷化反应的键级守恒法能学研究

夏文生,汪海有,万惠霖,张乾二

厦门大学化学系;厦门大学物理化学研究所;固体表面物理化学国家重点实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 将键级守恒-Morse势方法应用于合金体系,作了部分修正。通过与Ni(100), Cu(100)比较,研究了NiCu(100)上合成气甲烷化反应活性。表明,因Cu的加入, NiCu上甲烷化反应活性较Ni上显著降低,并通过CO在Ni上解离形成的积碳现象给予了解释。此外,还考察了甲烷化反应的速控步骤,及因解离物种可能在表面上的沉积使表面有所改性,从而影响CO甲烷化表面反应的活性。

**关键词** [多相催化](#) [镍](#) [镍合金](#) [铜](#) [铜合金](#) [积碳](#) [甲烷化](#) [合成气](#) [沉积](#) [表面变性](#) [键级守恒](#)  
[国家重点实验室基金](#)

分类号 [0647](#)

## An energetics study on syngas(CO+H<sub>2</sub>) methanation reaction on Ni, Cu and Ni-Cu alloy surfaces by bond-order conservation model

XIA WENSHENG, WANG HAIYOU, WAN HUILIN, ZHANG QIANER

**Abstract** Bond-order conservation-Morse potential method has been some modified for alloy systems. Comparison with Ni(100) and Cu(100), syngas (CO+H<sub>2</sub>) methanation activity on NiCu(100) has been studied. The results show, due to the introduction of Cu, methanation on NiCu has much lower activity than on Ni, which can be explained by the formation of deposited C-s from CO dissociation on Ni surfaces. Also, we investigate the rate-determining-step of methanation reaction on those surfaces, and the influences of the deposited surface species at reaction beginning on the reactivity of CO methanation.

**Key words** [HETEROGENOUS CATALYSIS](#) [NICKEL](#) [NICKEL ALLOYS](#) [COPPER](#) [COPPER ALLOYS](#) [CARBON DEPOSITS](#) [METHANATION](#) [SYNTHETIC GAS](#) [SEDIMENTATION](#) [SURFACE MODIFICATION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(459KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“多相催化”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [夏文生](#)
- [汪海有](#)
- [万惠霖](#)
- [张乾二](#)