

甲醇在Pt-Mo(111)/C表面上的吸附

李来才; 王译伟; 田安民

四川师范大学化学与材料学院, 成都 610066; 四川大学化学学院, 成都 610064

摘要:

采用密度泛函理论和周期平板模型相结合的方法, 对CH₃OH分子在Pt-Mo(111)/C表面的顶位、穴位和桥位共计9种吸附模型进行了构型优化、能量计算和频率分析, 结果表明top-Pt位是较有利的吸附位. Mo掺杂后价带与导带位置均有不同程度的降低, 电子结构的变化使得Pt-Mo(111)/C的催化活性提高. 并且在考虑催化剂抗中毒性能时发现: CO在Pt(111)/C面上的吸附能比甲醇吸附能要高, CO在Pt-Mo(111)/C上的吸附能比甲醇的要低, 说明CO在Pt(111)/C面上的吸附会阻碍甲醇的吸附, 并影响催化过程的进行, 而Pt-Mo(111)/C的抗CO中毒化能力增强, 是催化氧化甲醇较好的催化剂.

关键词: 甲醇 Pt-Mo(111)/C表面 密度泛函理论 电子结构

收稿日期 2008-04-21 修回日期 2008-07-09 网络版发布日期 2008-10-06

通讯作者: 李来才 Email: lilcmail@163.com

本刊中的类似文章

1. 张锁江, 韩世钧, 金银东. NaCl(或KCl)-CH₃OH-H₂O体系的摩尔电导[J]. 物理化学学报, 1996, 12(01): 75-80
2. 陈崧哲; 钟顺和. Cu/TiO₂-NiO上光促表面催化CO₂和H₂O合成CH₃OH反应规律[J]. 物理化学学报, 2002, 18(12): 1099-1103
3. 魏子栋; 三木敦史; 大森唯义; 大泽雅俊. 甲醇在欠电位沉积Sn/Pt电极上催化氧化[J]. 物理化学学报, 2002, 18(12): 1120-1124
4. 张雪红; 唐星华; 程新孙. TiO₂-CeO₂介孔复合氧化物的合成及应用[J]. 物理化学学报, 2006, 22(05): 532-537
5. 席靖宇; 吕功煊; 王志飞. Cu/Zn、Cu/Zn/Ni催化剂甲醇部分氧化制氢[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 655-658
6. 郭霞; 徐慧; 郭荣. 十二烷基硫酸钠/苯甲醇/水微乳液中吩噻嗪对葱的荧光猝灭[J]. 物理化学学报, 2002, 18(06): 500-503
7. 杨成; 董庆年; 张静; 任杰; 孙子罕; 谢亚宁; 胡天斗. 铈和镧改性γ-Al₂O₃ 负载Pd催化剂的结构效应[J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 170-174
8. 李基涛; 张伟德; 区泽棠. CO对CO₂加氢合成甲醇的影响[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 275-277
9. 张雅明; 王延儒; 时钧. 氯化钙/水-醇溶液稀释热[J]. 物理化学学报, 1994, 10(06): 555-559
10. 李基涛; 高利珍; 张伟德. CO在YBa₂Cu₃O_x薄膜上吸附与加氢的研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(08): 700-705
11. 张小岗; 郭向云; 钟炳; 彭少逸. 甲醇在超临界环己烷中形成簇团的Monte Carlo初探[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 898-903
12. 陈煜; 唐亚文; 孔令涌; 刘长鹏; 邢巍; 陆天虹. 碳纳米管表面修饰程度对碳纳米管载Pt电催化性能的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(01): 119-123
13. 陈玲; 王新东; 郭敏. NdOx作为助催化剂对PtRu/C电催化氧化甲醇活性的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 141-145
14. 王振波; 尹鸽平; 史鹏飞. 三组Pt-Ru/C催化剂前驱体对其性能的影响[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1156-1160
15. 杨辉; 李长志; 陆天虹; 薛宽宏; 孙世刚; 卢国强; 陈声培. 甲醇在铂微粒修饰的聚硫董电极上的电催化氧化[J]. 物理化学学报, 1997, 13(06): 542-547
16. 张文郁; 董庆年; 赵宁; 魏伟; 孙子罕. 环氧丙烷和甲醇在MgO上合成1-甲氧基-2-丙醇反应机理[J]. 物理化学学报, 2005, 21(06): 653-657
17. 陈煜; 唐亚文; 刘长鹏; 邢巍; 陆天虹. 直接甲醇燃料电池中质子交换膜的研究进展[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 458-462
18. 邓会宁; 李磊; 许莉; 王宇新. 直接甲醇燃料电池中的膜性能比较[J]. 物理化学学报, 2004, 20(11): 1372-1375

扩展功能

本文信息

PDF(874KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 甲醇

▶ Pt-Mo(111)/C表面

▶ 密度泛函理论

▶ 电子结构

本文作者相关文章

▶ 李来才

▶ 王译伟

▶ 田安民

19. 周海晖;焦树强;陈金华;魏万之;旷亚非.Pt微粒修饰纳米纤维聚苯胺电极对甲醇氧化电催化[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 9-14
20. 黎汉生;钟顺和;王建伟;肖秀芬.K₂O对合成DMC用Cu-Ni/V₂O₅-SiO₂催化剂性能的影响[J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 552-554
21. 胡吉明;张鉴清;张金涛;曹楚南.IrO₂电极在含有机小分子水溶液中的电化学活性[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 740-744
22. 云虹;陈建华;张慧;林敬东;陈鸿博;林昌健.ZrO₂在Cu-ZnO-ZrO₂甲醇水蒸汽重整制氢催化剂中的作用[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 550-553
23. 云虹;张慧;陈建华;陈鸿博;林昌健.CuO-ZnO-ZrO₂催化甲醇水蒸汽重整反应机理和中间态[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 524-528
24. 彭程;程璇;张颖;陈羚;范钦柏.负载Pt和PtRu催化剂的甲醇电氧化比较[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 436-439
25. 邓国扬;Jes Henningsen.光声法定量测定甲醇在常规材料表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 764-768
26. 郑根稳;龚春丽;文胜;解孝林.磺化聚醚酰亚胺/聚醚砜共混型质子交换膜的制备及其性能[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 855-860
27. 郑博;李贺先;王国昌;刘琨;袁伟;李赫;梁波.水-甲醇混合体系的超分子复合作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1503-1506
28. 李庆水, 林玉琴, 廖远琰.甲醇催化脱氢反应的研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 442-446
29. 张新荣;史鹏飞.CeO₂改性Cu/Al₂O₃催化剂上甲醇水蒸气重整制氢[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 85-89
30. 王贵昌;孙予罕;钟炳.合成甲醇Cu基催化剂结构敏感性的模拟[J]. 物理化学学报, 1998,14(04): 337-342
31. 王进;陈鸿博;云虹;林敬东;易军;张鸿斌;廖代伟.合成甲醇的催化剂Rh-ZnO/MWNTs的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 65-69
32. 贾玉香;郭向云.超临界流体中CO和H₂吸附过程的Monte Carlo模拟[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 306-309
33. 杨红艳 郭盼盼 李伟善.抗CO中毒的Pt-H_xWO₃电沉积制备及其对甲醇氧化的催化作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 719-723
34. 倪哲明 毛江洪 潘国祥 胥倩 李小年.Pd催化甲醇裂解制氢的反应机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 876-882
35. 王建设 郭勋 宋成盈 王留成 赵建宏 邱新平.在Pt/CNTs催化层中预混-溶解La₂O₃颗粒来构筑孔结构促进甲醇电氧化[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 767-772
36. 徐磊;吴淑杰;张文祥;贾明君;刘钢.铁铬氧化物催化剂上苯酚和甲醇气相邻位烷基化反应[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 242-246
37. 常晓途 王建明 邵海波 王俊波 曾晓旭 张鉴清 曹楚南.纯铝在一种新型碱性电解液中的腐蚀和阳极行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1620-1624
38. 邓会宁;王宇新.磷酸/磺化杂萘苯聚醚酮复合质子交换膜的制备及其性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1235-1240
39. 徐慧远;储伟;慈志敏.辉光放电等离子体对合成甲醇用铜基催化剂的改性作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1042-1046
40. 梁营;廖代伟.pH值对微波协助乙二醇法制备PtRu/C催化剂的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 317-322
41. 郑海涛;李永亮;梁剑莹;沈培康.甲醇在Pd基电催化剂上的氧化[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 993-996
42. 严宗诚;陈砺;王红林.甲醇溶液辉光放电等离子体电解[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 835-840
43. 李兰兰;魏子栋;严灿;罗义辉;尹光志;孙才新.甲醇在欠电位沉积Ru修饰Pt电极上的催化氧化[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 723-727
44. 赵文霞;胡满成;李淑妮;蒋育澄;张晓蕾;胡蕾;陈怀军.RbBr/CsBr-CH₃OH/C₂H₅OH-H₂O三元体系的溶解度[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 695-700
45. 吴伟;曹洁明;陈煜;陆天虹.四氢呋喃-水-乙醇三元溶液体系制备高合金化Pt-Ru/CMK-3催化剂[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 559-564
46. 张成根;李文佐;黄明宝.溶液中甲醇和二氯亚砷的化学反应[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 399-403
47. 席靖宇;王志飞;王卫平;吕功煊.Cu-Ni/Zn催化剂甲醇裂解机理原位XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 82-86
48. 钟顺和;黎汉生;王建伟;肖秀芬.CO₂和CH₃OH直接合成碳酸二甲酯Cu-Ni/V₂O₅-SiO₂催化剂[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 226-231
49. 陈鸿博;于腊佳;廖代伟;林国栋;张鸿斌;蔡启瑞.Cr₂O₃在铜基甲醇合成催化剂中的作用[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 534-539

50. 钟顺和;高峰;叶文强;肖秀芬.激光促进甲醇氧化偶联表面反应的规律[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 601-607
51. 张小岗;李永旺;钟炳;彭少逸.一氧化碳、氢、甲醇和正乙烷体系的分子模拟[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1036-1040
52. 张荣;孙予罕;彭少逸.Cu/SiO₂表面性质对甲醇脱氢反应性能的影响[J]. 物理化学学报, 1999,15(07): 652-656
53. 仲崇民 王德崢 Takashi Ushikubo; Keisuke Wada.甲醇、水及乙烯在氧化铈薄膜上吸附行为研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 219-225
54. 吴贵升;任杰;孙予罕.焙烧温度对Cu/ZrO₂和Cu-La₂O₃/ZrO₂催化性能的影响[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 564-567
55. 李旭光;韩飞;邢巍;唐亚文;陆天虹.甲醇对炭载铂和四羧基酞菁钴催化氧化还原动力学的影响[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 380-384
56. 陈卫;孙世刚;司迪;陈声培.团聚铂纳米粒子电极在甲醇氧化中的电催化特性[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 441-444
57. 张树东;朱湘君;王艳;孔祥和.甲醇团簇的多光子电离质谱及其从头算[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 379-383
58. 王沂轩;赵健萍;戴明.极性非质子溶剂与甲醇或1,2-二氯乙烷的汽液平衡[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 636-641
59. 周志华;胡卫东;卢文庆;周益明;薛宽宏.支持电解质对无水甲醇电氧化途径的影响[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 707-711
60. 苏文焮;周绍民;周小林.电极/溶液界面单分子吸附层的统计力学处理 III. 汞电极上水-甲醇混合溶剂化层结构[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 443-448
61. 黄绵延;陈华艳;郭剑钊;王志涛;许莉;王宇新.DMFC用PES/SPEEK共混阻醇质子交换膜[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 44-49
62. 沈培康;汪圣龙;胡智怡;李永亮;曾蓉;黄岳强.电解醇制氢[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 107-110
63. 邓会宁;王宇新.含杂萘联苯结构聚合物膜的直接甲醇燃料电池性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 187-191
64. 赵彦春, 兰黄鲜, 田建裛, 杨秀林, 王凤阳.多孔聚乙酰苯胺纳米纤维载铂催化剂对甲醇的电催化氧化[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2050-2054
65. 毛东森, 郭强胜, 孟涛, 卢冠忠.水热处理对纳米HZSM-5分子筛酸性及催化甲醇制丙烯反应性能的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0