

用CA模型研究SO₂在锰盐表面上的催化氧化反应

潘慧云,张波涛

郑州大学化学系;信息工程学院物理组

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用CA模型借助部分模拟法求得SO₂在锰盐表面上催化氧化反应的动力学相图;若反应按Langmuir-Hinshelwood机制进行,且H₂O以气态出现,则模拟结果表明,相图中有四个双组分中毒相和一个反应相,反应相在一个线性的浓度区域上出现;如在催化反应过程中,尚需考虑反应物种的脱附,则反应相将随脱附几率的增加而扩大。

关键词 [二氧化硫](#) [锰化合物](#) [催化氧化](#) [相图](#)

分类号 [0643](#)

A CA study on the catalytic oxidation of SO₂ by manganese salts

PAN HUIYUN,ZHANG BOTAO

Abstract The kinetic phase diagram for the catalytic oxidation of SO₂ by manganese salts is determined with the partial simulation method on the basis of the CA model, only the Langmuir-Hinshelwood mechanism is considered and H₂O is assumed to be originally in the gas phase, simulation results show that, if no desorption of adsorbed species is considered, the phase diagram has four two-species poisoned phases and one reaction phase which is a linear region; and the other hand, when the desorption of H₂O is taken into account, the region of the reaction phase will be extended.

Key words [SULFUR DIOXIDE](#) [MANGANESE COMPOUNDS](#) [CATALYTIC OXIDATION](#) [PHASE DIAGRAM](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(302KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“二氧化硫”的
相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [潘慧云](#)

· [张波涛](#)