

不同金属催化水煤气变换反应活性的Monte Carlo模拟研究

王贵昌,崔永斌,孙子罕,钟炳

中国科学院山西煤炭化学研究所.太原(030001);煤转化国家重点实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 运用BOC-MP方法对Cu(110),Cu(111),Pd(111)和Au(111)

等过渡金属催化的WGS反应的可能微观动力学步骤进行了详尽的能学数据计算,

并结合MonteCarlo方法对WGS反应的表面氧化还原机理进行了计算机模拟。结果表明,Cu的催化活性优于Pd,Au的催化活性,

并获得了相应金属上WGS反应的表现活化能及动力学指前因子(相对值);在此基础上,对该反应的结构敏感性进行了研究,

发现该反应为一结构敏感反应,与实验结果相符。

关键词 [蒙特卡洛模拟](#) [反应动力学](#) [水煤气](#) [一氧化碳变换](#) [单金属催化剂](#) [铜](#) [金](#) [钯](#) [催化活性](#) [结构](#) [敏感性](#) [转移概率](#)

分类号 [TQ52](#)

Study on the activity of water gas shift reaction catalyzed by several metals using Monte Carlo simulation

Wang Guichang,Cui Yongbin,Sun Yuhan,Zhong Bing

Shanxi Inst Coal Chem., CAS.Taiyuan(030001)

**Abstract** In this paper, the microkinetic parameters of water gas shift reaction catalyzed by Cu(110), Cu(111), Au(111) and Pd(111) have been calculated by means of BOC-MP empirical method, and then its surface redox mechanism has been simulated by Monte Carlo method. During the Monte Carlo simulation, the transition probability ( $P_{i \sim j}$ ) was defined by us. The apparent activation energies (in relative values) were obtained i.e., the ratio is 1:1.34:3.2:3.6 for Cu(110), Cu(111), Au (111) and Pd(111). The simulation results suggest that Cu is more active than other metals and water gas shift reaction is a structure sensitive reaction.

**Key words** [MONTE CARLO SIMULATION](#) [REACTION KINETICS](#) [WATER GAS](#) [CARBON MONOXIDE CONVERSION](#) [SINGLE-METAL REFORMING CATALYST](#) [COPPER](#) [GOLD](#) [PALLADIUM](#) [CATALYTIC ACTIVITY](#) [STRUCTURE SENSITIVITY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(439KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“蒙特卡洛模拟”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [王贵昌](#)
- [崔永斌](#)
- [孙子罕](#)
- [钟炳](#)