

عنوان مقاله:

مطالعه نظری تبدیل متان به متانول روی لایه نازک Rh بر سطح فلز Ag

محل انتشار:

اولین کنفرانس ملی کاربرد نانوتکنولوژی در صنایع نفت و پتروشیمی (سال: 1391)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

آمنه دادک - گروه مهندسی شیمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد امیدیه

فریدون خضعلی

خلاصه مقاله:

در این پژوهش، تشکیل متانول به عنوان یک ماده صنعتی مهم، از گاز متان و در حضور اکسیژن بر روی سطوح دو فلزی نقره رودیوم به طور نظری مورد مطالعه قرار گرفت. محاسبات در قالب نظریه تابع چگالی، با به کارگیری تقریب شیب تعمیم یافته، انجام شد. سطوح مورد بررسی نیز بوسیله مدل بُره ای متناوب شبیه سازی شد؛ که این سطوح بر پایه صفحات تکریستالوگرافی با اندیس های میلر (001) از بلور فلوزی نقره بواشوبکهمکعبی مرکز وجه پر، FCC، در نظر گرفته شد. برای دو فلوزی کوردن سطوح مورد نظر، به ضی از اتم های نقره واقع بر سطح، با اتم های رودیوم تعویض شدند. توابع پایه امواج تخت، برای نمایش توابع موج سیستم های مورد بررسی به کار گرفته شد. مکانیسم های مختلفی برای تبدیل متان به متانول، بر روی این سطوح، که شامل چندین واکنش بنیادی می باشد در نظر گرفته شد. تغییر انرژی، انرژی فعال سازی و ساختار حالت گذار برای هر کدام از این واکنش های بنیادی محاسبه و تعیین شد. انرژی جذب گونه های مختل شرکت کننده در این واکنش های بنیادی در جایگاه های مختل بر روی سطوح مذکور نیز محاسبه و پایداریترین جایگاه برای جذب آنها تعیین گردید.

کلمات کلیدی:

سطح دو فلزی، سطح نقره، روش بُره ای، متانول

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/179532>

