

## 超临界流体中CO和H<sub>2</sub>吸附过程的Monte Carlo模拟

贾玉香; 郭向云

中国科学院山西煤炭化学研究所,煤转化国家重点实验室,太原 030001; 中国科学院研究生院,北京 100039

摘要:

利用Monte Carlo (MC) 方法,研究了一氧化碳和氢气在不同密度正己烷中的等温吸附情况.模型考虑了正己烷密度对一氧化碳和氢气在催化剂表面吸附量与吸附速率的影响.结果表明,主要有三个因素会影响溶质的吸附量:当溶剂密度低于其临界密度时,体系压力是影响溶质吸附量的主要因素;当体系处于超临界区时,超临界溶剂的溶解能力以及溶质和溶剂之间的竞争吸附是影响溶质吸附量的主要因素.在一定范围内增加溶剂的密度(压力)可以提高溶质在催化剂表面的吸附速率.

关键词: 超临界流体 Monte Carlo模拟 吸附 甲醇合成

收稿日期 2004-07-09 修回日期 2004-10-27 网络版发布日期 2005-03-15

通讯作者: 郭向云 Email: xyguo@sxicc.ac.cn

### 本刊中的类似文章

1. 董国利;高荫本;陈诵英.不同干燥过程对超细TiO<sub>2</sub>粉体性质的影响[J]. 物理化学学报, 1998,14(02): 142-146
2. 相宏伟;钟炳;彭少逸;吴东;范文浩.超临界流体干燥过程的分析[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 46-50
3. 周健;朱宇;汪文川;陆小华;王延儒;时钧.超临界NaCl水溶液的分子动力学模拟 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 207-212
4. 石磊;张小岗;张喜丰;杨冠英;韩布兴;闫海科.混合超临界流体的密度及分子间相互作用[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 31-35
5. 赵永祥;秦晓琴;侯希才;徐贤伦;刘滇生.镍基催化剂的制备、表征及选择加氢性能[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 450-454

扩展功能

本文信息

PDF(1410KB)

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

▶ 超临界流体

▶ Monte Carlo模拟

▶ 吸附

▶ 甲醇合成

本文作者相关文章

▶ 贾玉香

▶ 郭向云