

مطالعه‌ی تولید هیدروژن از تفکیک اتانول بر روی سطح کاتالیزگر Ni(100) با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلوی سینتیکی

پروانه کبوتری^۱، حدیث بشیری^۲

۱- دانشجوی دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی دانشگاه کاشان، (p-k-1987@yahoo.com)

۲- دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه کاشان، (hbashiri.kashanu.ac.ir)

واژگان کلیدی: تولید هیدروژن، مونت کارلوی سینتیکی، الکل‌ها

۱- مقدمه

سوخت‌های فسیلی منجر به افزایش گازهای گلخانه‌ای و مشکلات زیست محیطی شده‌اند. گاز هیدروژن یک منبع جایگزین مناسب است. تولید هیدروژن از الکل‌ها به‌ویژه اتانول به دلیل مزیت‌هایی چون چگالی انرژی بالا، تجدید پذیری و سهولت ذخیره سازی مورد توجه قرار دارد [۱]. استفاده کاتالیزگرهای نیکل و پالادیوم نیز به طور گسترده‌ای در واکنش‌های هیدروژنی مورد توجه است [۲]. مکانیسم‌های واکنش شیمیایی روی سطوح، اهمیت زیادی دارد. استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مونت کارلو (DMC) به عنوان یک ابزار قدرتمند امکان بررسی دقیق‌تر و مدل سازی کمی از این واکنش‌ها را فراهم می‌کند. هدف اصلی این کار استفاده از شبیه‌سازی DMC مدل شبکه-گاز برای بررسی فرآیند تولید هیدروژن از تجزیه اتانول بر روی Ni(100) است [۳]. در پایان، نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی با داده‌های تجربی مربوط به برنامه‌ریزی دمایی واجذب (TPD) مقایسه می‌شوند.

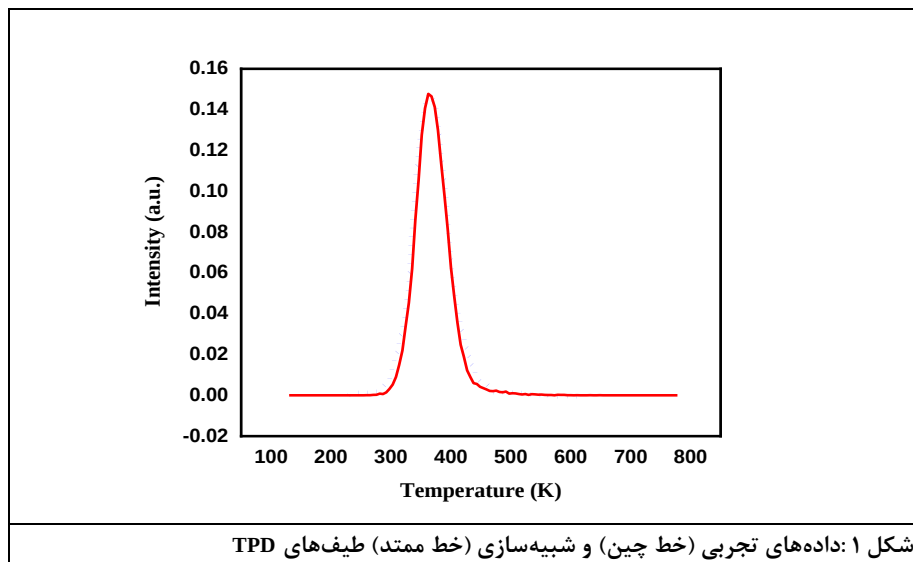
۲- روش کار

در این مطالعه با طراحی مکانیسمی برای تجزیه‌ی اتانول روی سطح کاتالیزگر Ni(100) و مشخص کردن مقدارهای انرژی فعالسازی و ضرایب آرنیوس برای هر مرحله از واکنش با استفاده از برنامه CARLOS توانستیم نمودارهای TPD کار شبیه‌سازی و تجربی را برهم تطابق دهیم.

۳- بحث و نتیجه‌گیری

پس از آزمون و خطاهای بسیار توانستیم مکانیسمی که در جدول ۱ مشاهده می‌کنید را برای تجزیه‌ی اتانول روی سطح کاتالیزگر Ni(100) پیشنهاد بدهیم. محصولات این مکانیسم متان، مونوکسید کربن و هیدروژن هستند. همان گونه که در شکل ۱ می‌بینید نمودار TPD حاصل از شبیه‌سازی مکانیسم پیشنهادی ما تطابق و هم‌پوشانی بسیار خوبی با نمودار TPD حاصل از آزمایش تجربی دارد [۴].

جدول ۱: مکانیسم پیشنهادی و داده‌های سینتیکی مربوطه			
مرحله	مراحل واکنش	$\nu \left(\frac{1}{s}\right)$	E_a (kJ/mol)
۱	$CH_3CH_2OD + * \rightarrow CH_3CH_2OD_{(ads)}$	0.23×10^5	۰/۰۰
۲	$CH_3CH_2OD_{(ads)} \rightarrow CH_3CHOD_{(ads)} + H_{(ads)}$	$9/0.8 \times 10^{13}$	۸۹/۱۱
۳	$CH_3CHOD_{(ads)} \rightarrow CH_3CHO_{(ads)} + D_{(ads)}$	$6/2.0 \times 10^{13}$	۵۱/۸۸
۴	$CH_3CHO_{(ads)} \rightarrow CH_3CO_{(ads)} + H_{(ads)}$	$1/0.1 \times 10^{14}$	۲۸/۴۵
۵	$CH_3CO_{(ads)} \rightarrow CH_3_{(ads)} + CO_{(ads)}$	$5/31 \times 10^{15}$	۱۲۴/۷۳
۶	$CH_3_{(ads)} + H_{(ads)} \rightarrow CH_4_{(ads)}$	$1/0.0 \times 10^{14}$	۵۳/۹۷
۷	$H_{(ads)} + H_{(ads)} \rightarrow H_{2(dcs)} + 2*$	$9/8.0 \times 10^{14}$	۹۶/۵۹
۸	$H_{(ads)} + * \rightarrow * + H_{(ads)}$	$1/0.0 \times 10^6$	۳۷/۶۰
۹	$CO_{(ads)} \rightarrow CO_{(dcs)} + *$	$30/0.0 \times 10^{12}$	۹۴/۶۲
۱۰	$CO_{(ads)} + * \rightarrow * + CO_{(ads)}$	$1/0.0 \times 10^3$	۵/۷۷
۱۱	$H_{(ads)} + D_{(ads)} \rightarrow HD_{(dcs)} + 2*$	$5/0.0 \times 10^{12}$	۹۶/۹۴
۱۲	$D_{(ads)} + D_{(ads)} \rightarrow D_{2(dcs)} + 2*$	$5/0.0 \times 10^{13}$	۹۶/۹۴



منابع و مراجع

- [1] Kratochwil, T., Wittmann, M., & Küppers, J. (1993). Adsorption of ethanol on Ni(100) surfaces. *Journal of electron spectroscopy and related phenomena*, 64, 609-617.
- [2] Li, M., Guo, W., Jiang, R., Zhao, L., & Shan, H. (2010). Decomposition of ethanol on Pd (111): a density functional theory study. *Langmuir*, 26(3), 1879-1888.
- [3] Gates, S. M., Russell Jr, J. N., & Yates Jr, J. T. (1986). Bond activation sequence observed in the chemisorption and surface reaction of ethanol on Ni (111). *Surface science*, 171(1), 111-134.
- [4] Johnson, S., & Madix, R. J. (1981). Sulfur induced selectivity changes for methanol decomposition on Ni (100). *Surface Science*, 103(2-3), 361-396.