

甲烷在 $[WO_4]$ 中心活化的分子轨道研究

陈宏善¹, 李树本², 牛建中²

¹西北师范大学物理系

²中国科学院兰州化学物理研究所; 羰基合成与选择氧化国家重点实验室;

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

利用密度泛函方法研究了Mn -Na₂ WO₄ /SiO₂ 催化剂表面的活性中心结构 .对不同活性中心电子结构的分析表明 ,以单个桥氧负载的四面体 $[WO_4]$ 是最可能的甲烷活化中心 ;计算所得活化能为 6.7kJ/mol.

By using ab initio DFT method, the metal species formed over the silica surface on Na-W-Mn/SiO₂ are optimized, the electronic structure of the catalyst and the activation process of methane is studied. The silica support in the catalyst exists as α -cristobalite and its (111) face exposes preferentially to the surface. Over the surface of α -cristobalite, tungsten existed as monografted tetrahedral \ at the optimal loading amount, and manganese exists in monografted sites or oxide clusters...

关键词 [密度泛函方法](#) [活性中心结构](#) [甲烷活化](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: 陈宏善¹; 李树本²; 牛建中²

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF](#) (119KB)
- ▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“密度泛函方法” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [陈宏善](#)
- [李树本](#)
- [牛建中](#)