

## $\text{NH}^{0-1+}_{2-3}$ 离解能等的高级 *ab initio* 计算与评价

苏克和;文振翼;胡小玲;李秀仪;王育彬

西北工业大学化工系, 西安 710072; 西北大学现代物理研究所, 西安 710069

摘要:

关键词:  $\text{NH}_3$   $\text{NH}_3^+$   $\text{NH}_2$   $\text{NH}_2^+$  离解能 电离能 从头算

收稿日期 1996-01-22 修回日期 1996-03-13 网络版发布日期 1996-05-15

通讯作者: 苏克和 Email:

### 本刊中的类似文章

1. 余励勤;王多才;李宣文;刘兴云;韩明. 铟在ZnZSM-5沸石中的形态及其催化作用[J]. 物理化学学报, 1994, 10(03): 247-253
2. 徐柏庆;山口力;田部浩三;梁娟;郑禄彬.  $\text{ZrO}_2$  酸碱性质的TPD表征 II.  $\text{NH}_3$  和  $\text{CO}_2$  共吸附研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 114-120
3. 肖淑勇;姚杰;孟中岳. 载镍沸石上  $\text{NH}_3$ -TPD 脱附峰的非酸性探讨[J]. 物理化学学报, 1991, 7(06): 721-724

扩展功能

本文信息

[PDF\(1157KB\)](#)

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

[▶  \$\text{NH}\_3\$](#)

[▶  \$\text{NH}\_3^+\$](#)

[▶  \$\text{NH}\_2\$](#)

[▶  \$\text{NH}\_2^+\$](#)

[▶ 离解能](#)

[▶ 电离能](#)

[▶ 从头算](#)

本文作者相关文章

[▶ 苏克和](#)

[▶ 文振翼](#)

[▶ 胡小玲](#)

[▶ 李秀仪](#)

[▶ 王育彬](#)