

Mn-Na₂WO₄/SiO₂催化剂表面活性中心结构的DFT研究

陈宏善; 牛建中; 张兵; 李树本

西北师范大学物理系, 兰州 730070; 中科院兰州化学物理研究所, 羧基合成与选择氧化国家重点实验室, 兰州 730000

摘要:

利用密度泛函方法(DFT)研究了Mn Na₂WO₄/SiO₂催化剂表面的活性中心结构. 计算表明, 在较平整 5. (111)面上, W能以单个或三个桥氧与载体作用形成稳定的四面体配位结构, Mn则能以单个桥氧与载体配位或形成不同结构的氧化物团簇; 以单个桥氧承载的[WO₄]四面体是最可能的甲烷活化中心.

关键词: Mn-Na₂WO₄/SiO₂ 表面活性中心 DFT

收稿日期 2000-05-09 修回日期 2000-07-21 网络版发布日期 2001-02-15

通讯作者: 陈宏善 Email: chenhs@nwnu.edu.cn

本刊中的类似文章