

乙烷在 V_2O_5 (001) 表面深度氧化反应机理的周期性密度泛函理论研究

戴国梁^a, 李振华^a, 王文宁^a, 刘晶^b, 范康年^a

a 复旦大学化学系, 上海市分子催化和新材料重点实验室, 上海 200433;

b 华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 湖北 武汉 430074

Periodic DFT study of the deep oxidation in the oxidative dehydrogenation of ethane over V_2O_5 (001)

DAI Guoliang^a, LI Zhenhua^a, WANG Wenning^a, LIU Jing^b, FAN Kangnian^a

a Shanghai Key Laboratory of Molecular Catalysis and Innovative Materials, Department of Chemistry, Fudan University, Shanghai 200433;

b State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, Hubei, China

摘要

图/表

参考文献

相关文章 (15)