

C₂H₄在Fe₃C(100)表面吸附及脱氢裂解的密度泛函理论研究

王丙寅^{a,b}, 于小虎^a, 霍春芳^{a,c}, 王建国^a, 李永旺^{a,c}

a 中国科学院山西煤炭化学研究所煤转化国家重点实验室, 山西太原 030001;

b 中国科学院大学, 北京 100049;

c 中科合成油技术有限公司国家能源煤制液体燃料研发中心, 北京 101407

Density functional theory study of the adsorption and reaction of C₂H₄ on Fe₃C(100)

Bingyin Wang^{a,b}, Xiaohu Yu^a, Chunfang Huo^{a,c}, Jianguo Wang^a, Yongwang Li^{a,c}

a State Key Laboratory of Coal Conversion, Institute of Coal Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Taiyuan 030001, Shanxi, China;

b University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

c National Energy R&D Center for Coal to Liquid Fuels, Synfuels China Co. Ltd, Beijing 101407, China

摘要

图/表

参考文献(39)

相关文章 (15)

版权所有 © 2010 中国科学院大连化学物理研究所《催化学报》编辑部 辽ICP备10003855号

辽宁省大连市沙河口区中山路457号, 邮编 116023

电话: (0411)84379240 传真: (0411)84379543 E-mail: chxb@dicp.ac.cn

本系统由北京玛格泰克科技发展有限公司设计开发 技术支持: support@magtech.com.cn