

## 化工学院导师个人情况表

|      |                   |   |
|------|-------------------|---|
| 姓名   | 陈玉                |  |
| 性别   | 男                 |   |
| 出生年月 | 1964.4            |   |
| 电子邮件 | chenyu@cup.edu.cn |   |
| 办公电话 | 010-89731072      |   |
| 是否博导 | 否                 |   |

### 个人简介

- 获得东北师范大学学士(1985)和硕士学位(1991), 硕士论文导师赵成大教授
- 获得德国 Marburg 大学博士学位(2000), 博士论文导师 G. Frenking 教授
- 主要从事理论与计算化学研究, 对石油、化工、材料等领域中重要的化学反应及催化剂等进行结构、性质和反应机理的理论研究和模拟。

### 发表论文

- 翟冬, 赵亮\*, 潘惠芳, 赵震, 段爱军, 高金森, 陈玉, C4 烃在 FAU、BEA、LTL 型分子筛中吸附的蒙特卡罗研究, **物理化学学报(Acta Phys. - Chim. Sin.)**, 2011, 27 (6), 1400-1406
- Zhongxue Wang, Daxi Wang\*, Zhen Zhao\*, Yu Chen, Jie Lan, A DFT study of the structural units in SBA-15 mesoporous molecular sieve, **Computational and Theoretical Chemistry**, 2011, 963, 403-411
- Bo Hu, Jingping Zhang\*, Yu Chen, Theoretical investigation on the white-light emission from a single-polymer system with simultaneous blue and orange emission (Part II), **European Polymer Journal**, 2011, 47, 208-224
- Yu-Qiu Jiao, Gui-Wu Lu\*, Kun Zhao, Yu Chen, et al. Theoretical studies on metal-metal interaction and luminescence, **Journal of Molecular Structure: THEOCHEM**, 2010, 957(1-3), 1-5
- Fuli Zhang, Liang Zhao, Chunming Xu, Yu Chen\*, Theoretical Revisit of a Fe(CO)<sub>5</sub>-Catalyzed Water-Gas Shift Reaction, **Inorg. Chem.**, 2010, 49(7), 3278-3281
- 赵亮, 吴玉坤, 高杉, 张福丽, 陈玉\*, ZSM-5 分子筛硅铝比与反应性能关系的量子化学研究, **分子科学学报**, 2010, 26(2), 86-91

- |   |
|---|
| <p>7. Liang Zhao, Yan Chen, Jinsen Gao, <u>Yu Chen</u>*, Desulfurization mechanism of FCC gasoline: A review, <b>Front. Chem. Eng. China</b>, 2010 , 4(3), 314-321</p> <p>8. 赵亮, 陈燕, 高金森, <u>陈玉</u>*, 噻吩在 Ni(100), Cu(100), Co(100)表面吸附的密度泛函研究, <b>分子科学学报</b>, 2010, 26(1), 18-22</p> |
|---|

### 科研项目

主持国家自然科学基金面上项目 1 项(2009-2011): 铁族羰基络合物催化水汽变换反应机理的理论研究(20873180)

主持国家留学回国人员科研启动基金 1 项

### 获得奖励

### 出版专著

### 获得专利

### 其它