

[\[PDF全文\]](#)

研究论文

应用理论计算研究MCM-22分子筛相邻酸性位上乙烯和苯的吸附

[倪丹](#) [周丹红](#) [张佳](#)

(辽宁师范大学化学化工学院功能材料化学研究所, 辽宁大连 116029)

摘要 应用ONIOM计算方法研究了MCM-22分子筛超笼12元环上存在两个酸性位时的酸强度及其与骨架铝之间距离的关系, 并研究了乙烯和苯分子吸附的规律. 计算采用52T簇模型和B3LYP/6-31G**/MNDO方法. 结果表明, 存在两个酸性位且两个骨架铝之间间隔1个骨架硅时, 酸强度比孤立的酸性位明显降低; 当间隔的硅原子数增加时, 酸强度呈上升趋势, 间隔3个以上骨架硅时, 其酸强度与孤立的酸性位几乎没有差别. 对于乙烯的吸附, 当两个骨架铝之间间隔1~4个骨架硅时, 其吸附能几乎没有差别(31~35 kJ/mol); 对于苯的吸附, 当两个骨架铝之间间隔1个骨架硅时, 其吸附能有所提高, 因为两个桥羟基同时对苯分子产生氢键吸附作用. 当两个骨架铝之间的距离增大时, 苯的吸附能几乎相同(21~29 kJ/mol). 若两个乙烯分子或苯分子同时吸附在双酸性位上, 其吸附能与单个分子在孤立酸性位吸附时几乎没有差别. 应用自然键轨道计算分析了吸附配合物的电子结构, 进一步探明了乙烯和苯在分子筛酸性位上吸附的本质.

关键词 [密度泛函](#); [MCM-22分子筛](#); [乙烯](#); [苯](#); [吸附能](#)