

[\[PDF全文\]](#)

研究快讯

ZSM-5分子筛氮化的密度泛函理论研究

[武光军](#) [杨雅莉](#) [王贵昌](#) [章福祥](#) [关乃佳](#)

(南开大学化学学院新催化材料科学研究所, 天津 300071)

摘要 利用量子化学中的密度泛函理论, 基于ZSM-5分子筛的8T簇模型, 在Gaussian 98程序中采用B3LYP方法和6-311G(d, p)基组计算了ZSM-5分子筛中氮的最佳取代位置. 计算结果表明, 分子筛骨架中氧原子被氮原子取代的最佳位置为O11和O21位. 由于位于B酸位上的O11原子是氮原子的最佳取代位置之一, 所以氮化可以减弱分子筛表面的B酸强度.

关键词 [密度泛函理论](#); [ZSM-5分子筛](#); [氮化](#); [取代](#)