

B、Al、Ga同晶取代丝光沸石的从头计算

袁淑萍; 王建国; 李永旺; 彭少逸

中国科学院山西煤炭化学研究所 煤转化国家重点实验室, 太原 030001

摘要:

用从头计算Hartree Fock方法研究了B、Al、Ga等同晶取代进入丝光沸石骨架后可能存在的位置, 确定了与电荷平衡质子结合的氧位置, 考察了B、Ga等杂原子进入骨架对丝光沸石Brønsted酸性的影响. 能量分析表明B、Al、Ga在丝光沸石骨架中最容易进入T3和T4位; 当Al、Ga在T4位时, 质子与O10结合为能量最低即最稳定结构, 而当B在T4位时, 质子与O2或O10结合比较稳定. 质子亲合势分析表明与硅铝丝光沸石相比, B和Ga进入骨架导致丝光沸石分子筛的Brønsted酸性有所减弱, 其酸性依次为: B ZSM-5 Ga ZSM-5 < Al ZSM-5.

关键词: B、Al、Ga 同晶取代 丝光沸石 酸性 从头计算

收稿日期 2001-03-07 修回日期 2001-05-09 网络版发布日期 2001-09-15

通讯作者: 王建国 Email: iccjgw@sxicc.ac.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1402KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ B、Al、Ga

▶ 同晶取代

▶ 丝光沸石

▶ 酸性

▶ 从头计算

本文作者相关文章

▶ 袁淑萍

▶ 王建国

▶ 李永旺

▶ 彭少逸