

铝在MCM-22分子筛骨架上分布的 ^{27}Al MQ MAS NMR研究

陈雷; 邓风; 叶朝辉

中国科学院武汉物理与数学研究所, 波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071

摘要:

利用二维多量子魔角旋转(2D MQ MAS)技术并结合量子化学计算,研究了铝在MCM-22分子筛骨架上的分布,并对铝的不等价四面体位进行了归属.在 ^{27}Al 2D 5Q MAS NMR谱中骨架四配位铝的范围内观察到3个信号,证明MCM-22分子筛有3种骨架铝.经计算这3种骨架四配位铝的各向同性化学位移和四极作用常数分别为: δ 50.5、 δ 57.3、 δ 62.4和1.74、1.68、1.92 MHz. MCM-22分子筛结构中有8种结晶学不等价四面体(T)位.我们通过模拟MCM-22分子筛的 ^{27}Al 2D 5Q MAS NMR谱,认为8种不等价T位分为3组. T2、T6位上的铝分别与 δ 61、 δ 49处的信号相关, T1、T3、T4、T5、T7、T8位上的铝对 δ 56处的共振峰有贡献.当硅铝原子数比(Si/Al)在10~15之间变化时,铝在MCM-22分子筛的骨架上是无规占据的.

关键词: MCM-22 铝的分布 NMR MQ MAS 量子化学计算

收稿日期 2003-02-13 修回日期 2003-04-08 网络版发布日期 2003-09-15

通讯作者: 邓风 Email: dengf@wipm.ac.cn

本刊中的类似文章

1. 张国; 白福全; 周欣; 刘涛; 潘清江; 付宏刚; 张红星. 噻吩分子及其与异辛烷二元混合物在MCM-22分子筛中吸附的蒙特卡罗模拟[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 218-222

扩展功能

本文信息

[PDF\(1563KB\)](#)

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

[▶ MCM-22](#)

[▶ 铝的分布](#)

[▶ NMR](#)

[▶ MQ MAS](#)

[▶ 量子化学计算](#)

本文作者相关文章

[▶ 陈雷](#)

[▶ 邓风](#)

[▶ 叶朝辉](#)