

研究论文

NMR探针分子表征分子筛酸性的理论研究

邬忠琴<sup>1, 2</sup>; 郑安民<sup>1</sup>; 杨俊<sup>1</sup>; 邓风<sup>1</sup>

1. 波谱与原子分子物理国家重点实验室(中国科学院武汉物理与数学研究所), 湖北武汉430071;  
2. 中国科学院研究生院, 北京100049

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用量子化学计算的方法, 采用三甲基氧膦(TMPO)、吡啶和三甲基膦(TMP)3种探针分子, 研究了工业上常用的3种分子筛H-Y、H-ZSM5、H-MOR的Brønsted酸强度, 讨论了这3种探针分子化学位移与Brønsted相对酸强度的相关性, 揭示了各种探针分子在表征Brønsted酸性上的适用性.

关键词 [核磁共振](#); [化学位移](#); [探针分子](#); [量化计算](#); [分子筛](#); [吸附能](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

邓风 [dengf@wipm.ac.cn](mailto:dengf@wipm.ac.cn)

作者个人主页: [邬忠琴<sup>1, 2</sup>](#); [郑安民<sup>1</sup>](#); [杨俊<sup>1</sup>](#); [邓风<sup>1</sup>](#)

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(690KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“核磁共振; 化学位移; 探针分子; 量化计算; 分子筛; 吸附能”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

· [邬忠琴<sup>1, 2</sup>](#); [郑安民<sup>1</sup>](#); [杨俊<sup>1</sup>](#); [邓风<sup>1</sup>](#)