

[\[PDF全文\]](#)

研究论文

TS-1分子筛Lewis酸性的理论研究

[王伊蕾](#) [邢双英](#) [曹亮](#) [王善鹏](#) [周丹红](#)

(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 应用密度泛函理论和量子力学与分子力学联合的ONIOM2方法对含Ti的MFI分子筛(TS-1)中Ti⁴⁺离子在三种不同骨架落位上所表现的Lewis酸性进行了理论研究. 利用碱性探针分子(CO, NH₃, 乙腈和吡啶)在骨架Ti活性中心的吸附作用, 对吸附络合物的几何结构和吸附能进行了计算, 并通过自然键轨道(NBO)分析考察了吸附络合物的电子结构. 结果表明, 骨架Ti在T12位表现出明显的Lewis酸性, 对NH₃分子有较强的吸附作用. NBO分析表明, 骨架Ti活性中心的Lewis酸性是由于Ti-O键的空σ反键轨道接受碱性探针分子提供的孤对电子; NH₃分子吸附导致Ti⁴⁺离子由近正四面体中心对称变为五配位的三角双锥对称.

关键词 [钛硅分子筛](#); [Lewis酸性](#); [吸附](#); [密度泛函理论](#); [自然键轨道分析](#)