

[\[PDF全文\]](#)

研究论文

不同金属离子交换的FAU型分子筛的超极化 ^{129}Xe NMR研究[徐舒涛](#) ^{1 2} [张维萍](#) ¹ [韩秀文](#) ¹ [包信和](#) ¹

(1 中国科学院大连化学物理研究所催化基础国家重点实验室, 辽宁大连 116023 2 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要 采用连续流动的激光诱导超极化 ^{129}Xe 为探针分子, 利用高分辨固体核磁共振技术研究了不同电子结构的金属阳离子 (Na^+ , Ag^+ , Cu^{2+} , Cu^+ , Cs^+) 交换的 FAU 型分子筛与超极化 ^{129}Xe 之间的相互作用. 结果表明, 超极化 ^{129}Xe 能够很灵敏地检测不同电子结构的金属离子对受限空间中电场梯度的影响. Na^+ 对超笼内电场梯度的影响很小, NaX 与 NaY 分子筛中 Xe 的化学位移表现出相似的行为. 对于具有 nd^{10} 电子结构的 Ag^+ 或 Cu^{2+} 经自还原生成的 Cu^+ , 其与 Xe 的 5d^0 轨道形成 $\text{d}\pi\text{-d}\pi$ 键, 导致 Xe 的化学位移明显向高场方向位移. Cu^{2+} 由于具有一定的顺磁性, 使得 ^{129}Xe NMR 谱展宽, 甚至无法观测. Cs^+ 的电子结构与 Xe 原子相同, 它能吸附更多的 Xe 原子, 导致 Xe 的化学位移明显向低场方向偏移.

关键词 [超极化 \$^{129}\text{Xe}\$ 核磁共振](#); [固体核磁共振](#); [离子交换](#); [FAU 型分子筛](#)