

<<纳米孔材料化学>>

图书基本信息

书名：<<纳米孔材料化学>>

13位ISBN编号：9787030370273

10位ISBN编号：7030370279

出版时间：2013-3

出版时间：科学出版社

作者：于吉红,闫文付

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## <<纳米孔材料化学>>

### 内容概要

《纳米孔材料化学:NMR表征、理论模拟及吸附分离》内容简介：“纳米孔材料化学”汇集了国内科技工作者在纳米孔材料科学领域所取得的优秀研究成果。

书中介绍纳米孔材料的NMR表征、理论模拟以及吸附分离，包括纳米孔材料结构与性能的固体核磁共振研究、分子筛的理论计算和分子模拟、介孔材料的理论模拟、金属-有机框架材料中气体吸附与分离的分子模拟、微孔分子筛材料的吸附与分离、介孔材料的吸附与分离以及金属-有机框架化合物的吸附与分离等内容。

《纳米孔材料化学:NMR表征、理论模拟及吸附分离》可供高等院校以及科研院所相关专业的教师和研究生参考，也可供化工、生物医药、环境、材料与其他高新技术领域从事开发应用研究及在厂矿企业工作的科技工作者、工程技术人员参考。

## <<纳米孔材料化学>>

### 作者简介

于吉红，吉林大学化学学院无机合成与制备化学国家重点实验室教授、博士生导师，国家杰出青年科学基金获得者、教育部“长江学者”特聘教授、国家重点基础研究发展计划（“973”计划）项目首席科学家。

1985～1995年于吉林大学获得学士、硕士和博士学位，毕业后留校工作。

1996～1998年先后在香港科技大学和日本东北大学从事博士后研究。

1999年晋升为教授。

研究方向是分子筛多孔功能材料的定向设计与合成。

在Science、AccChem Res、Chem Soc Rev、Angew Chem Int Ed、J Am Chem Soc等SCI收录期刊上发表论文220余篇。

申请中国发明专利10余项、。

PCT专利1项，其中授权专利6项。

合作出版中英文专著各1部。

获国家自然科学基金二等奖、中国青年科技奖、中国青年女科学家奖及鲍氏无机化学奖等奖项。

现任ChemSci杂志副主编，Chem Mater杂志顾问编委，《科学通报》及《化学进展》杂志编委。

曾担任Micropor Mesopor Mater以及Solid State Sci杂志亚洲编辑。

## &lt;&lt;纳米孔材料化学&gt;&gt;

## 书籍目录

《纳米科学与技术》丛书序

前言

第1章 纳米孔材料结构与性能的固体核磁共振(NMR)研究

1.1 固体核磁共振原理和实验方法

1.1.1 固体中的核自旋相互作用

1.1.2 固体NMR实验方法

1.2 纳米孔材料自组装过程的固体NMR研究

1.2.1 分子筛的形成机理

1.2.2 磷铝酸盐分子筛的晶化机理

1.2.3 介孔硅酸盐的合成机理

1.2.4 介孔磷铝酸盐的合成机理

1.3 纳米孔道结构特征的 $^{129}\text{Xe}$  NMR研究

1.3.1  $^{129}\text{Xe}$  NMR测量孔大小的方法

1.3.2  $^{129}\text{Xe}$  NMR测定金属离子效应

1.3.3  $^{129}\text{Xe}$  NMR测定负载金属效应

1.3.4  $^{129}\text{Xe}$  NMR表征分子筛孔结构

1.4 纳米孔材料活性中心的固体NMR研究

1.4.1 表面羟基的 $^1\text{H}$  NMR研究

1.4.2 表面酸性的探针分子NMR研究

1.4.3 Brønsted/Lewis酸中心协同效应的NMR研究

1.4.4 金属离子活性中心的NMR研究

1.5 纳米孔材料中催化反应的固体NMR研究

1.5.1 原位NMR实验方法

1.5.2 催化反应机理的原位NMR研究

1.6 结论与展望

参考文献

第2章 分子筛的理论计算和分子模拟

2.1 引言

2.2 分子筛及多孔材料的分子模拟

2.2.1 模拟方法和基本概念

2.2.2 分子筛中的吸附

2.2.3 分子筛中的扩散

2.2.4 择形催化过程的分子模拟

2.2.5 吸附分离过程的分子模拟

2.2.6 纳米孔材料的分子模拟

2.3 分子筛及多孔材料的量化计算

2.3.1 理论背景与计算方法

2.3.2 分子筛理论模型

2.3.3 分子筛活性中心分布

2.3.4 复杂催化反应过程的量化计算

2.4 模拟计算新方法及在分子筛材料研究中的应用

2.4.1 从头计算分子动力学基本原理

2.4.2 从头计算分子动力学在分子筛材料研究中的应用

2.5 结论与展望

参考文献

## &lt;&lt;纳米孔材料化学&gt;&gt;

## 第3章 介孔材料的理论模拟

## 3.1 介孔材料与理论模拟简介

## 3.1.1 介孔材料简介及分类

## 3.1.2 理论模拟方法简介

## 3.2 介孔材料结构和性质的理论模拟

## 3.2.1 形成过程理论模拟

## 3.2.2 孔材料结构的理论模拟表征

## 3.2.3 孔径分布的理论模拟

## 3.2.4 配位和酸性位等的模拟计算

## 3.3 介孔材料中分子的吸附、分离及扩散

## 3.3.1 M41S系列分子筛中的吸附

## 3.3.2 AIPO分子筛中的吸附

## 3.3.3 有序介孔碳及类似材料中的吸附

## 3.3.4 MOR分子筛中的吸附

## 3.3.5 ZSM-5分子筛中的吸附

## 3.3.6 其他分子筛中的吸附

## 3.3.7 MOF及相关材料中的吸附

## 3.3.8 孔材料中扩散的理论模拟

## 3.4 介孔材料内化学反应的理论模拟

## 3.5 结论与展望

## 参考文献

## 第4章 金属-有机框架材料中气体吸附与分离的分子模拟

## 4.1 引言

## 4.2 研究MOF材料气体吸附与分离的分子模拟方法

## 4.2.1 量子化学方法

## 4.2.2 周期性边界条件的化学计算和量子力学/分子力学(QM/MM)组合方法

## 4.2.3 分子力学力场

## 4.2.4 蒙特卡罗方法

## 4.2.5 分子动力学方法

## 4.3 应用

## 4.3.1 储氢材料

4.3.2 多孔材料捕捉与分离CO<sub>2</sub>的模拟研究

## 4.3.3 甲烷及其他气体分子的吸附和分离

## 4.4 结论与展望

## 参考文献

## 第5章 微孔分子筛材料的吸附与分离

## 5.1 引言

## 5.2 微孔分子筛的吸附性能及表征

## 5.2.1 吸附基本理论

## 5.2.2 微孔分子筛孔结构表征

## 5.2.3 吸附性能的表征

## 5.3 微孔材料的扩散性能及测定

## 5.3.1 晶内扩散

## 5.3.2 影响晶内扩散的因素

## 5.3.3 晶内扩散模型

## 5.3.4 晶内扩散的测量技术

## 5.4 微孔材料在吸附分离方面的应用

## <<纳米孔材料化学>>

5.4.1 石油化工领域的应用

5.4.2 气体的分离与净化

5.4.3 清洁能源与储能

5.4.4 环保领域的应用

5.4.5 医药卫生领域的应用

5.4.6 其他领域

参考文献

第6章 介孔材料的吸附与分离

6.1 引言

6.2 介孔材料吸附二氧化碳和其他气体

6.3 介孔材料吸附去除环境污染物

6.4 应用于固载酶和生物大分子分离的介孔材料

6.5 介孔材料和可控药物缓释

6.6 结论与展望

参考文献

第7章 金属-有机框架化合物的吸附与分离

7.1 引言

7.2 基本概念

7.2.1 配位聚合物

7.2.2 金属-有机框架化合物

7.3 金属-有机框架化合物的结构设计

7.3.1 金属节点

7.3.2 有机配体

7.4 气体吸附

7.4.1 能源气体储存

7.4.2 温室气体

7.4.3 有害气体

7.5 提高MOF材料的储气能力

7.5.1 增强稳定性

7.5.2 优化活化方法

7.5.3 增大比表面积和孔容

7.5.4 轻金属构筑

7.5.5 不饱和金属配位点

7.5.6 穿插和互锁

7.5.7 氢溢流作用

7.6 气体的选择性吸附分离

7.6.1 CO<sub>2</sub>

7.6.2 O<sub>2</sub>

7.6.3 H<sub>2</sub>

7.6.4 蒸气

7.7 液体的选择性吸附分离

7.7.1 构造异构体的分离

7.7.2 手性拆分

7.7.3 顺反异构体的分离

7.8 薄膜分离

7.9 结论与展望

参考文献



<<纳米孔材料化学>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>