

利用 FraGen 程序预测沸石分子筛的骨架结构

卢君然 李乙* 于吉红 陆莹

(吉林大学无机合成与制备化学国家重点实验室, 长春 130012)

Predicting Hypothetical Zeolite Frameworks Using Program FraGen

LU Jun-Ran LI Yi* YU Ji-Hong LU Ying

(State Key Laboratory of Inorganic Synthesis and Preparative Chemistry, Jilin University, Changchun 130012, P. R. China)

*Corresponding author. Email: yili@jlu.edu.cn; Tel: +86-431-85168609.

表 1 31 种预测结构的结构代码、骨架能量、骨架密度、 $\langle D_{TO} \rangle$ 、 σ_{TO} 、 R_{TO} 、 $\langle D_{OO} \rangle$ 、 σ_{OO} 、 R_{OO} 、 ε_{OO} 、 $\langle D_{TT} \rangle$ 、 σ_{TT} 、 R_{TT} 和 ε_{TT} 。

Table 1 The framework code, ΔE , FD, $\langle D_{TO} \rangle$, σ_{TO} , R_{TO} , $\langle D_{OO} \rangle$, σ_{OO} , R_{OO} , ε_{OO} , $\langle D_{TT} \rangle$, σ_{TT} , R_{TT} , and ε_{TT} in 31 hypothetical structures.

Code	ΔE /(kJ·mol ⁻¹)	FD /(T·nm ⁻³)	$\langle D_{TO} \rangle$ / nm	σ_{TO} / nm	R_{TO} / nm	$\langle D_{OO} \rangle$ / nm	σ_{OO} / nm	R_{OO} / nm	ε_{OO} / nm	$\langle D_{TT} \rangle$ / nm	σ_{TT} / nm	R_{TT} / nm	ε_{TT} / nm
H63-1	11.4843	20.9711	0.160134	0.000716	0.002605	0.261454	0.003079	0.014114	0.000017	0.307530	0.004902	0.017276	0.000233
H63-2	11.9144	21.0968	0.160195	0.000857	0.003403	0.261555	0.003107	0.015203	0.000017	0.307196	0.004347	0.017966	0.000265
H63-3	12.9313	18.2558	0.160258	0.000990	0.004957	0.261667	0.002934	0.019171	0.000007	0.306996	0.005954	0.025316	0.000159
H63-4	13.3979	20.5117	0.160326	0.000997	0.004952	0.261762	0.003316	0.014934	0.000022	0.306598	0.004145	0.014991	0.000224
H63-5	13.7528	21.3319	0.160453	0.000995	0.003345	0.261979	0.003023	0.014187	0.000013	0.305943	0.006230	0.019836	0.000255
H63-6	14.6215	17.8518	0.160422	0.000902	0.004308	0.261934	0.002852	0.019128	0.000007	0.306253	0.006071	0.022232	0.000097
H63-7	14.8282	20.2088	0.160272	0.001118	0.004490	0.261682	0.003903	0.017251	0.000014	0.306888	0.005012	0.017206	0.000200
H63-8	15.7133	20.6948	0.160188	0.001050	0.005215	0.261524	0.004206	0.018986	0.000036	0.307404	0.006721	0.025647	0.000094
H63-9	15.7934	20.4357	0.160227	0.001019	0.004555	0.261588	0.004001	0.016933	0.000036	0.307238	0.006714	0.027938	0.000065
H63-10	16.4647	20.7018	0.160369	0.001240	0.005232	0.261828	0.003895	0.015293	0.000027	0.306448	0.006432	0.025436	0.000161
H63-11	16.9620	19.7240	0.160342	0.000976	0.004240	0.261790	0.003658	0.016557	0.000021	0.306769	0.006557	0.024607	0.000026
H63-12	16.9858	18.7342	0.160476	0.001377	0.005013	0.262040	0.002034	0.007787	0.000010	0.305844	0.005553	0.021038	0.000242
H63-13	17.2069	19.7163	0.160763	0.001011	0.004695	0.262486	0.003062	0.013489	0.000010	0.304468	0.005067	0.020294	0.000216
H63-14	17.6281	18.5536	0.160486	0.001360	0.004942	0.262048	0.002663	0.010165	0.000003	0.305834	0.005935	0.022098	0.000206
H63-15	17.8643	17.4140	0.160520	0.000991	0.004367	0.262085	0.003582	0.021746	0.000016	0.305862	0.005979	0.022077	0.000009
H63-16	17.9658	17.4591	0.160425	0.001285	0.005947	0.261894	0.004198	0.020864	0.000051	0.306303	0.007313	0.026089	0.000035
H63-17	18.0201	16.9942	0.160385	0.001135	0.004586	0.261854	0.003656	0.017344	0.000027	0.306646	0.007498	0.025154	0.000113
H63-18	18.3608	20.8287	0.160705	0.001293	0.005833	0.262379	0.003826	0.013594	0.000022	0.304704	0.007375	0.023238	0.000264
H63-19	18.6060	20.0429	0.160533	0.001201	0.005004	0.262086	0.004559	0.020128	0.000035	0.305747	0.005577	0.026443	0.000062
H63-20	19.0549	19.9663	0.160551	0.001016	0.004299	0.262100	0.004620	0.017817	0.000052	0.305755	0.007434	0.026380	0.000037
H63-21	19.4483	17.9640	0.160318	0.001619	0.005433	0.261771	0.002817	0.010109	0.000001	0.306807	0.006743	0.022964	0.000053
H63-22	19.5591	16.8169	0.160499	0.001254	0.004798	0.262023	0.004263	0.017680	0.000043	0.306091	0.007780	0.025876	0.000115
H63-23	19.9436	17.8837	0.160456	0.001541	0.005289	0.261994	0.003113	0.009826	0.000002	0.306101	0.006553	0.024047	0.000085
H63-24	20.6999	17.9582	0.160576	0.001448	0.006200	0.262189	0.003207	0.014373	0.000004	0.305499	0.007065	0.025673	0.000097
H63-25	21.7510	19.4765	0.160706	0.001039	0.004763	0.262326	0.005393	0.022155	0.000078	0.305045	0.007169	0.027583	0.000084
H63-26	21.8538	17.4202	0.160841	0.000963	0.004311	0.262604	0.003677	0.018414	0.000020	0.304274	0.007383	0.024263	0.000026

H63-27	22.1256	19.5764	0.160782	0.000974	0.004889	0.262459	0.005100	0.020636	0.000068	0.304637	0.007879	0.027103	0.000046
H63-28	22.2184	17.3294	0.160745	0.001478	0.005446	0.262472	0.003108	0.011404	0.000005	0.304718	0.006559	0.025428	0.000052
H63-29	22.5010	18.8110	0.160375	0.001578	0.005813	0.261804	0.005167	0.022886	0.000061	0.306724	0.007963	0.028550	0.000142
H63-30	23.4199	17.7113	0.160832	0.001260	0.005317	0.262541	0.004871	0.025382	0.000068	0.304496	0.008223	0.022640	0.000151
H63-31	25.5800	17.4437	0.161012	0.001465	0.005665	0.262838	0.004974	0.026965	0.000064	0.303546	0.008005	0.025620	0.000081
