



Исследование адсорбционных свойств катиона Ca с использованием теории функционала плотности

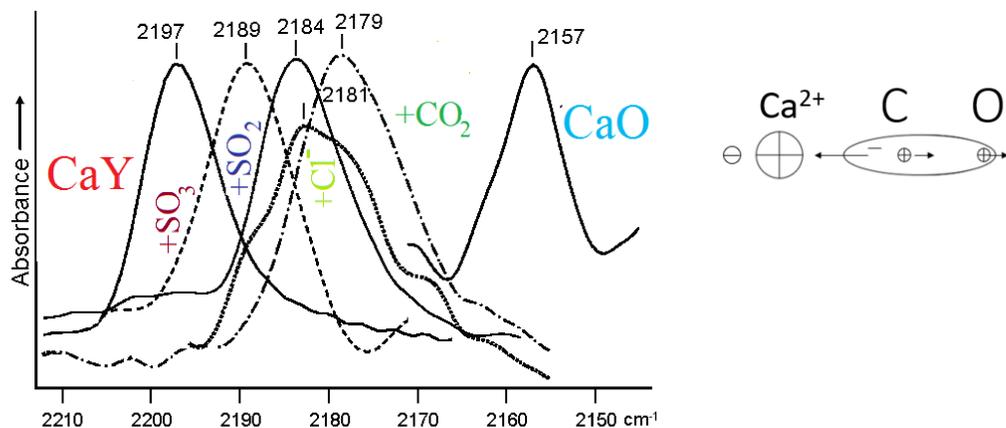
Я. В. Шергин (st054872@student.spbu.ru)

Санкт-Петербургский Государственный Университет

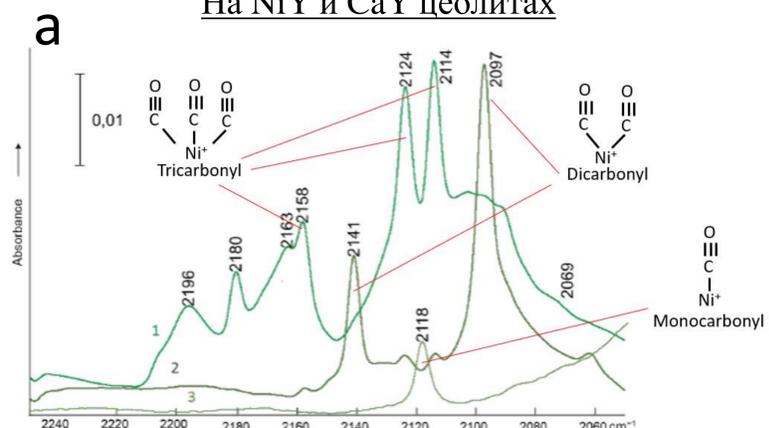
Аннотация

Адсорбционные свойства катионов цеолитов резко отличаются от свойств оксидов тех же элементов. Для объяснения этого эффекта были проведены ИК-спектры CO, адсорбированного на CaO, подвергнутого воздействию различных газообразных кислот [1]. Было показано, что преобразование окружающих ионов O²⁻ в карбонатные, сульфитные или сульфатные ионы приводит к синему смещению полосы валентных колебаний C-O молекул, связанных с катионом Ca²⁺, приближаясь к величине, характерной для цеолитов CaY. Также в экспериментах с CaY цеолитом обнаруживается изомерия связывания, когда молекула CO может адсорбироваться как углеродом, так и кислородом.

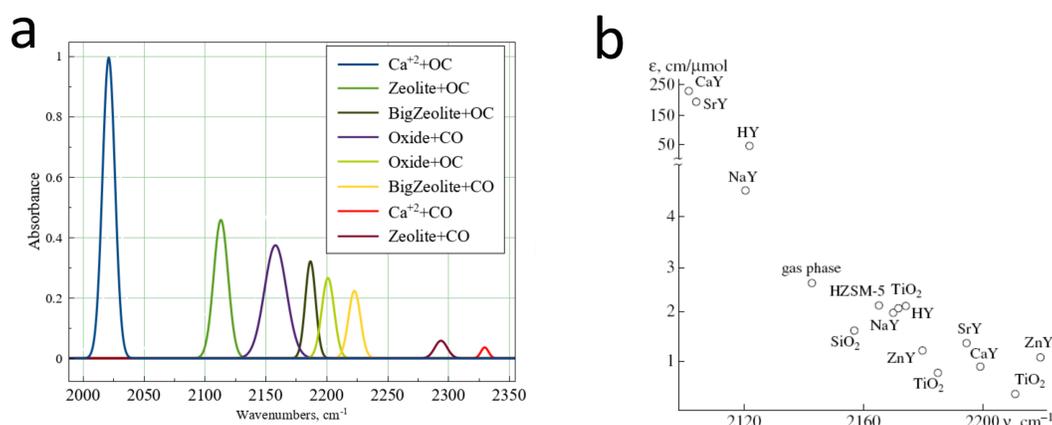
Смещение частоты колебания адсорбированной молекулы CO



Сравнение спектров адсорбции CO на NiY и CaY цеолитах

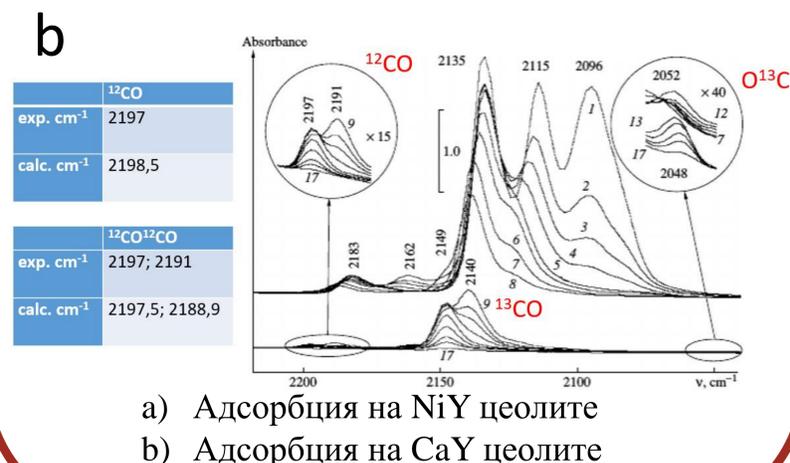


Связь между частотой и интенсивностью адсорбированной молекулы CO



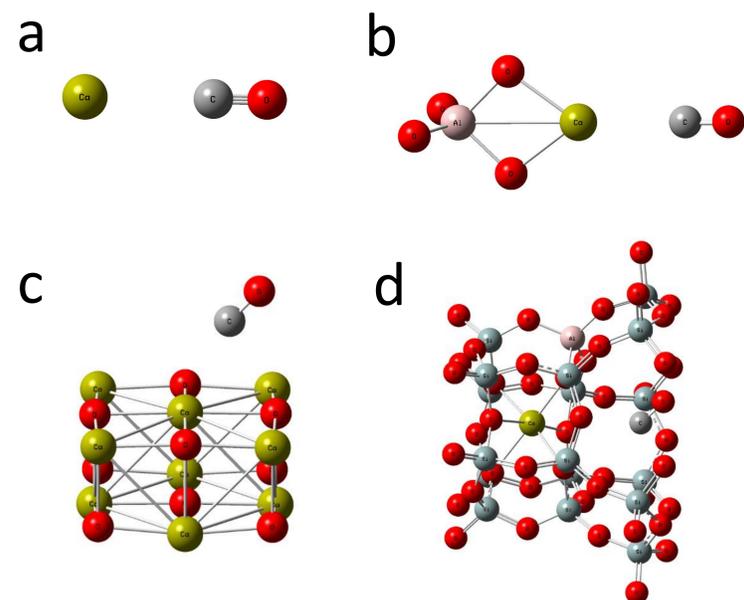
	Расч. частота	Отклонение
CO	2203,63	
Ca+CO	2328,92	125,29
Ca+OC	2026,41	-177,22
SimpleModel+CO	2298,17	94,54
SimpleModel+OC	2107,08	-96,55
BigModel+CO	2224,48	20,85
BigModel+OC	2186,76	-16,87

Связь между частотой колебания и интенсивностью для а) расчетных и б) экспериментальных данных



а) Адсорбция на NiY цеолите
б) Адсорбция на CaY цеолите

Модели для исследования изомерии связывания



а) Свободный катион
б) Простая модель цеолита
с) Модель оксида
д) Большая модель цеолита

Заключение

- Для расчета адсорбции CO на моделях использовался метод ТФП;
- Было показано, что в спектре адсорбции CO на цеолите CaY не происходит расщепления дикарбонильной полосы, т.к. одна из полос дикарбонила совпадает с полосой монокарбонила;
- Модели цеолита CaY обнаруживают изомерию связывания. Когда CO адсорбируется кислородом, частота уменьшается примерно на ту же величину, на которую она увеличивается при адсорбции углеродом;
- Чем больше влияние окружающих анионов, тем ниже частота адсорбции CO на катионе кальция
- Увеличение частоты колебания CO сопровождается уменьшением интенсивности, что согласуется с экспериментальными данными