

NO_x分子在[Ag]-AIMOR分子筛中的吸附

刘洁翔; 魏贤; 张晓光; 王桂香; 韩恩山; 王建国

河北工业大学化工学院, 天津 300130; 中国科学院山西煤炭化学研究所煤转化国家重点实验室, 太原 030001; 南开大学化学学院, 天津 300071

摘要:

采用Dmol3程序中密度泛函理论(DFT)的广义梯度方法GGA/BLYP和DND基组研究了银离子交换的丝光沸石([Ag]-AIMOR)结构及其对NO_x分子吸附性能的影响, 获得吸附复合物的平衡几何结构参数、吸附能以及红外振动频率等数据. 结果表明, NO_x分子与丝光沸石间的主要作用力为NO_x分子中的氮(或氧)原子上的孤对电子和Ag⁺间的静电作用力. 吸附能数据表明, NO_x分子以η¹-N模式吸附在[Ag]-AIMOR分子筛中的结构更稳定; 在η¹-N模式中, NO_x分子吸附作用强度的次序为NO>NO₂>N₂O. 红外振动频率结果表明, 吸附态NO_x分子中N—O和N—N键伸缩振动频率的位移趋势与N—O和N—N键变化规律基本相一致. 另外, 对[Ag]-AIMOR分子筛的抗硫、抗水及抗氧化性能也进行了研究和分析.

关键词: 氮氧化物 丝光沸石 银 吸附 密度泛函理论

收稿日期 2008-06-02 修回日期 2008-09-23 网络版发布日期 2008-11-11

通讯作者: 刘洁翔 Email: jxliu@hebut.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 孙琪;朱爱民;牛金海;徐勇;宋志民. 介质阻挡放电引发氮氧化物等离子体化学反应[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 192-196
2. 孙琪;任亮;牛金海;宋志民. 介质阻挡放电等离子体与吸附在CuZSM-5上的NO或NO/O₂的相互作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1214-1218
3. 裴梅香;林赫;上官文峰;黄震. 等离子体在同时去除NO_x和碳烟催化反应中的作用[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 255-260
4. 康守方;蒋政;郝郑平. Cu对Pt/Cu-Mg-Al-O催化剂上NO_x储存性能的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 278-282
5. 王仲鹏;陈铭夏;上官文峰. 类水滑石衍生CuAlO催化剂同时去除碳颗粒和氮氧化物[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 79-85
6. 肖建华;李雪辉;邓莎;徐建昌;王乐夫. Mn/Ba/Al₂O₃催化剂的NO_x氧化-储存和耐硫性能[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 815-819

扩展功能

本文信息

PDF(889KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 氮氧化物

▶ 丝光沸石

▶ 银

▶ 吸附

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 刘洁翔

▶ 魏贤

▶ 张晓光

▶ 王桂香

▶ 韩恩山

▶ 王建国