

研究论文

Cu(I), Ag(I)/分子筛化学吸附脱硫的 π -络合机理

周丹红; 王玉清; 贺宁; 杨刚

辽宁师范大学化学化工学院, 功能材料化学研究所, 辽宁大连, 116029; 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

摘要:

应用DFT 研究了一系列含硫的杂环化合物(噻吩、苯并噻吩、二苯并噻吩和4, 6-二甲基二苯并噻吩)以及苯分子在Cu(I)-Y、Ag(I)-Y 分子筛上的化学吸附. 计算采用16T 分子筛簇模型(H₂₂Si₁₅AlO₂₂), 对过渡金属采用了赝势基组, 在BLYP/DNP水平上完成. 相互作用能的结果表明, 阳离子交换的分子筛对含硫杂环芳香族化合物吸附能力的顺序为Cu(I)-Y > Ag(I)-Y. 两种吸附剂对噻吩类分子的吸附能力大于苯分子. 噻吩衍生物的吸附能顺序依次为, 4, 6-二甲基二苯并噻吩 < 二苯并噻吩 < 噻吩 < 苯并噻吩, 与实验结果相近. 通过自然键轨道计算, 研究了分子筛上负载的Cu(I)、Ag(I)金属离子与噻吩和苯分子之间的 π -络合作用, 分析比较了自然键电子给体-受体之间的二阶微扰稳定化能, 并探索其络合机理.

关键词: DFT π -络合吸附 自然键轨道 金属负载分子筛 汽油脱硫

收稿日期 2005-09-22 修回日期 2005-11-07 网络版发布日期 2006-04-28

通讯作者: 周丹红 Email: dhzhou@dicp.ac.cn

本刊中的类似文章

1. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和. PuX + (X=H, O, N, C) 的结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 622-625
2. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 金志浩. (Cl₂AlNH₂)_n 和 (H₂AlNH₂)_n (n=1~5) 簇结构及其热力学性质[J]. 物理化学学报, 2001, 17(04): 324-328
3. 张敬来; 王连宾; 吴文鹏; 曹泽星. 线性簇合物 SC_{2n}S²⁻ (n = 1~12) 电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1428-1433
4. 耿志远; 王永成; 汪汉卿. 锆烯 X₂Ge (X=H, CH₃, F, Cl, Br) 与乙烯环加成反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1417-1422
5. 刘梅堂; 牟伯中. 狭缝滞留吸附性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 355-358
6. 和芹; 周立新. 铂配合物与DNA碱基对间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 846-851
7. 刘军娜; 陈志荣; 袁慎峰. 吡啶酮系偶氮类化合物可见吸收光谱的预测[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 402-407
8. 任彦亮; 万坚; 刘俊军; 万洪文. 吡吩垂直激发态的理论研究方法的比较[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1089-1092
9. 李永红; 陈丽萍; 徐文媛; 洪三国. 2-溴丙酸气相热消除反应的机理[J]. 物理化学学报, 2003, 19(05): 389-392
10. 翟志才; 柏云杉; 王遵尧; 王连生. Br₂ + 2HI = 2HBr + I₂ 应机理的密度泛函理论[J]. 物理化学学报, 2004, 20(04): 400-404
11. 李文佐; 肖翠平; 宫宝安; 程建波. 类锆烯 H₂C=GeLiCl 与 RH (R=F, OH, NH₂) 的插入反应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 720-724
12. 吕存琴; 凌开成; 尚贞锋; 王贵昌. 甲基、氨基和甲胺在清洁及 C(N, O) 改性的 Mo(100) 表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1366-1370
13. 李巍; 荣华; 吴新民; 陈中元. 苏氨酸对甲苯磺酸盐及其酯化物的微波合成、表征及量化计算[J]. 物理化学学报, 2008, 24(05): 868-872
14. 艾洪奇; 杨爱彬; 李允刚. 溶液中 Zn²⁺ 与腺嘌呤异构体间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1047-1052
15. 原现瑞; 刘英华; 李润岩; 陈晓霞. (s)-多沙唑嗪的核磁共振理论和实验研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1058-1062
16. 田真宁; 许旋. 配合物 [M(CO)₃(PPh₂py)₂] (M=Fe, Ru) 异构体的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1482-1486
17. 唐克; 宋丽娟; 段林海; 李秀奇; 桂建舟; 孙兆林. 杂原子 Y 分子筛的二次合成及其吸附脱硫性能[J]. 物理化学学报, 2006, 22(09): 1116-1120

扩展功能

本文信息

PDF(629KB)

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

▶ DFT

▶ π -络合吸附

▶ 自然键轨道

▶ 金属负载分子筛

▶ 汽油脱硫

本文作者相关文章

▶ 周丹红

▶ 王玉清

▶ 贺宁

▶ 杨刚

18. 王连宾;吴文鹏;张敬来;曹泽星.反式和顺式HOOH的电子光谱的理论研究[J].物理化学学报,2006,22(09): 1079-1084
19. 吴文娟;赖璐;郑康成;云逢存.抗癌性咪唑啉衍生物的定量构效关系[J].物理化学学报,2005,21(01): 28-32
20. 武海顺;许小红;马文瑾;贾建峰.AMT异构体互变机理的理论研究[J].物理化学学报,2003,19(05): 408-413
21. 陈宏善;牛建中;张兵;李树本.Mn-Na₂WO₄/SiO₂催化剂表面活性中心结构的DFT研究[J].物理化学学报,2001,17(02): 111-115
22. 刘跃;刘佳雯;杨小震.新型镍催化剂催化乙烯聚合的阳离子机理[J].物理化学学报,2002,18(12): 1068-1070
23. 刘梅堂;牟伯中;刘洪来;胡英.修正的格子空间的密度泛函理论在狭缝中的应用[J].物理化学学报,2004,20(06): 668-672
24. 庞先勇,邢斌,王贵昌,YOSHITADA Morikawa,JUNJI Nakamura.HCOO在Cu(110)、Ag(110)和Au(110)表面的吸附[J].物理化学学报,2009,25(07): 1352-1356
25. 黄小璇,许旋.Ir(CO)Cl_a(Ph₂Ppy)₂HgCl_b(HgCl₂)_c(a,b=1,2,c=0,1)的Ir-Hg相互作用和氧化还原反应性质[J].物理化学学报,2009,25(07): 1362-1366
26. 钟爱国,吴俊勇,闫华,金燕仙,戴国梁,蒋华江,潘富友,刘述斌.三聚氰胺金属(II)配合物的结构、紫外-可见光谱和反应活性[J].物理化学学报,2009,25(07): 1367-1372
27. 梁云霄,尚贞锋,许秀芳,赵学庄.C₅₉XH(X=N,B)与1,3-丁二烯Diels-Alder环加成反应的区域选择性[J].物理化学学报,2008,24(10): 1811-1816
28. 刘海洋;李立;应晓;王湘利;徐志广;廖世军;张启光.锰(III)5,10,15-三(五氟苯基)-Corrole配合物的DFT计算[J].物理化学学报,2008,24(09): 1602-1608
29. 任云鹏;鲁玉祥;娄琦.CO在Pt低指数面上吸附行为的理论研究[J].物理化学学报,2007,23(11): 1728-1732
30. 庞先勇;任瑞鹏;薛丽琴;王贵昌.Cu(100)表面HCOO对CO₂吸附的稳定作用[J].物理化学学报,2007,23(07): 1109-1112
31. 李文佐;谭海娜;肖翠平;宫宝安;程建波.不饱和类锗烯H₂C=GeLiCl的DFT研究[J].物理化学学报,2007,23(11): 1811-1814
32. ARSLAN Hakan;DEMIRCAN Aydin.Tert-butyl N-(2-bromocyclohex-2-enyl)-N-(2-furylmethyl) carbamate的结构和振动光谱[J].物理化学学报,2007,23(11): 1683-1690
33. 丁冰晶;黄世萍;汪文川.酸性分子筛催化乙烯二聚反应[J].物理化学学报,2007,23(12): 1864-1868
34. 李勤瑜;许旋.配合物[Fe(CO)₃(PPh₂R)₂(HgCl₂)](R=pym, fur, py, thi)的Fe-Hg相互作用及³¹P化学位移[J].物理化学学报,2007,23(12): 1875-1880
35. 苏克和;魏俊;胡小玲;岳红;吕玲;王育彬;文振翼.分子几何构型优化方法的系统性比较[J].物理化学学报,2000,16(07): 643-651
36. ZGOU Hsaine;HAMIDI Mohamed;LERE-PORTE Jean-Pierre;SEREIN-SPIRAU Francoise;BOUACHRINE Mohammed.

基于噻吩和亚苯基合成的新物质的结构和电子性质

- [J].物理化学学报,2008,24(01): 37-40
37. 徐国亮;肖小红;刘玉芳;孙金锋;朱正和.外电场作用下甲基乙烯基硅酮分子结构和电子光谱[J].物理化学学报,2007,23(05): 746-750
38. 谭金芝;肖鹤鸣;贡雪东;李金山.硝酸甲酯分子间相互作用的DFT和*ab initio*比较[J].物理化学学报,2002,18(04): 307-314
39. 王永成;耿志远;陈宏善.羰基氧化物环化反应动力学的计算研究[J].物理化学学报,2002,18(01): 45-49
40. 仇永清;刘春光;陈徽;苏忠民;杨国春;王荣顺.具有三维结构的Co(II)配合物二阶非线性光学性质的DFT研究[J].物理化学学报,2006,22(07): 836-839
41. 李权;刘晓亚;高涛;朱正和;傅依备;汪小琳;孙颖.PuOⁿ⁺的势能函数的稳定性[J].物理化学学报,2000,16(11): 987-991
42. 李文佐;宫宝安;程建波.不饱和类硅烯H₂C=SiNaF的DFT研究[J].物理化学学报,2006,22(06): 653-656
43. 张远;曹爱年;孙岳明;刘举正;顾璠.NO双分子和二聚体与Cu₂作用的理论计算[J].物理化学学报,2003,19(03): 193-197
44. 宋争林;张复实;陈锡侨;赵福群.酞菁基态和激发态的计算[J].物理化学学报,2003,19(02): 130-133
45. MOHAMED IMRAN P. K., SUBRAMANI K..L-鸟氨酸及其取代衍生物的结构和性质分析[J].物理化学学报,2009,25(11): 2357-2365