

研究简报

NO、CO和O₂在铜离子分子筛上吸附的理论研究

孙岳明; 杨萍; 曹爱年; 张远

东南大学化学化工系 南京 210096

摘要:

以Cu-ZSM-5离子交换分子筛为例, 利用Hartree-Fock和DFT理论, 对小分子(NO, CO和O₂)在Cu⁺上吸附的空间立体模型进行了优化计算, 结果表明, Cu⁺与小分子之间形成直线形吸附最为稳定, 也存在其他成一定角度的吸附, 但是不稳定, 计算了吸附过程的势能曲线和温度对吸附的影响, 在500-800K的反应温度下, 温度越低吸附越稳定, NO在Cu表面能够形成Cu⁺(NO)(ON)双分子吸附, 最后, 比较了价态的变化对金属吸附性能的影响。

关键词: NO_x CO 选择催化还原(SCR) 吸附 Hartree-Fock

收稿日期 2000-12-29 修回日期 2001-04-05 网络版发布日期 2001-08-15

通讯作者: 孙岳明 Email: sun@seu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 赵峰; 刘英骏; 李能; 林炳雄. ABO₂型复合氧化物上CO-NO的反应性能[J]. 物理化学学报, 2001, 17(06): 511-515
2. 陈志航; 李雪辉; 杨青; 李华; 高翔; 江燕斌; 王芙蓉; 王乐夫. 新型铁锰复合氧化物催化低温脱除NO_x[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 601-605
3. 温斌; 何鸣元; 宋家庆; 宗保宁; 舒兴田. 铜铈协同作用对CuCeMgAl(O)催化活性的影响[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 402-404

扩展功能

本文信息

PDF(1151KB)

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

▶ NO_x

▶ CO

▶ 选择催化还原(SCR)

▶ 吸附 Hartree-Fock

本文作者相关文章

▶ 孙岳明

▶ 杨萍

▶ 曹爱年

▶ 张远