



Хидроксилни групи в ВЕА зеолити: ИЧ спектроскопски изследвания

A. Penkova,^a R. Kefirov,^b S. Dzwigaj,^c K. Hadjiivanov^b

^a Departamento de Química Inorgánica, Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, CSIC, Avda Americo Vesputcio 49, 41092 Sevilla, Spain

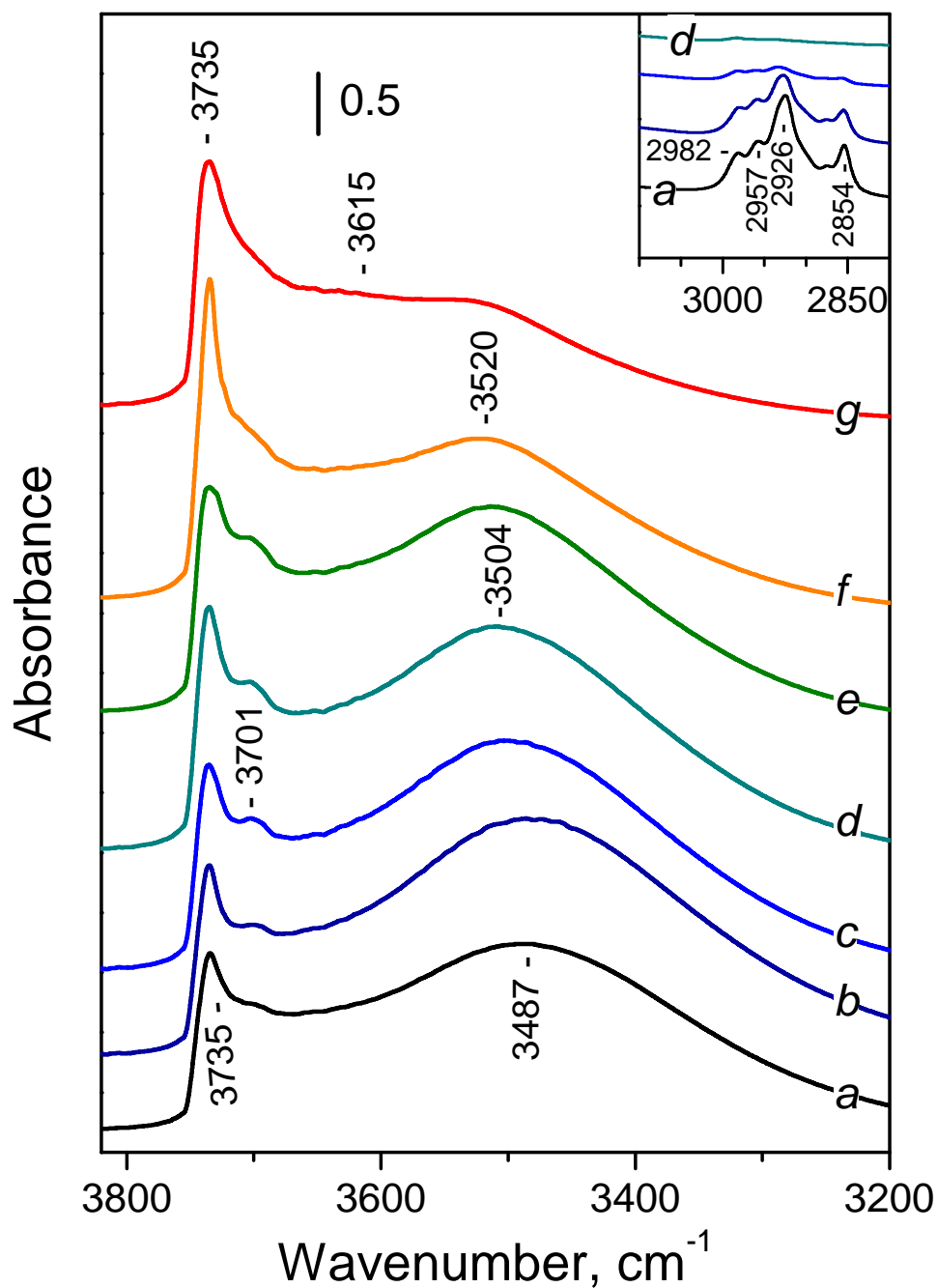
^b Institute of General and Inorganic Chemistry, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia 1113, Bulgaria

^c Laboratoire de Réactivité de Surface, UMR 7609 - CNRS, Université Pierre et Marie Curie, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05, France

ВЕА зеолита е изграден от пръстени (12 стенни), които притежават развита 3D структура от пори. Характерна особеност за ВЕА е, че лесно би могъл да бъде деалуминиран чрез третиране с киселина. Като резултат, на мястото на екстрахираните алуминиеви йони се формират хидроксилни гнезда. Те лесно взаимодействат с други метални катиони, които се инкорпорират в кристалната решетка на зеолита във вакантните Т-места. За материалите които се получават са характерни специфични свойства, различни от свойствата на йоннообменен Н-ВЕА зеолит. Поради това, детайлното охарактеризиране на ОН покритието на [Si]ВЕА е важно. Целта на тази работа е да се изследва създаването на ОН покритието на повърхността на [Si]ВЕА като функция на температурата и да се изучи детайлно киселинността на ОН групите в различна позиция чрез адсорбция на СО и влиянието на реакционните условия върху тази киселинност.

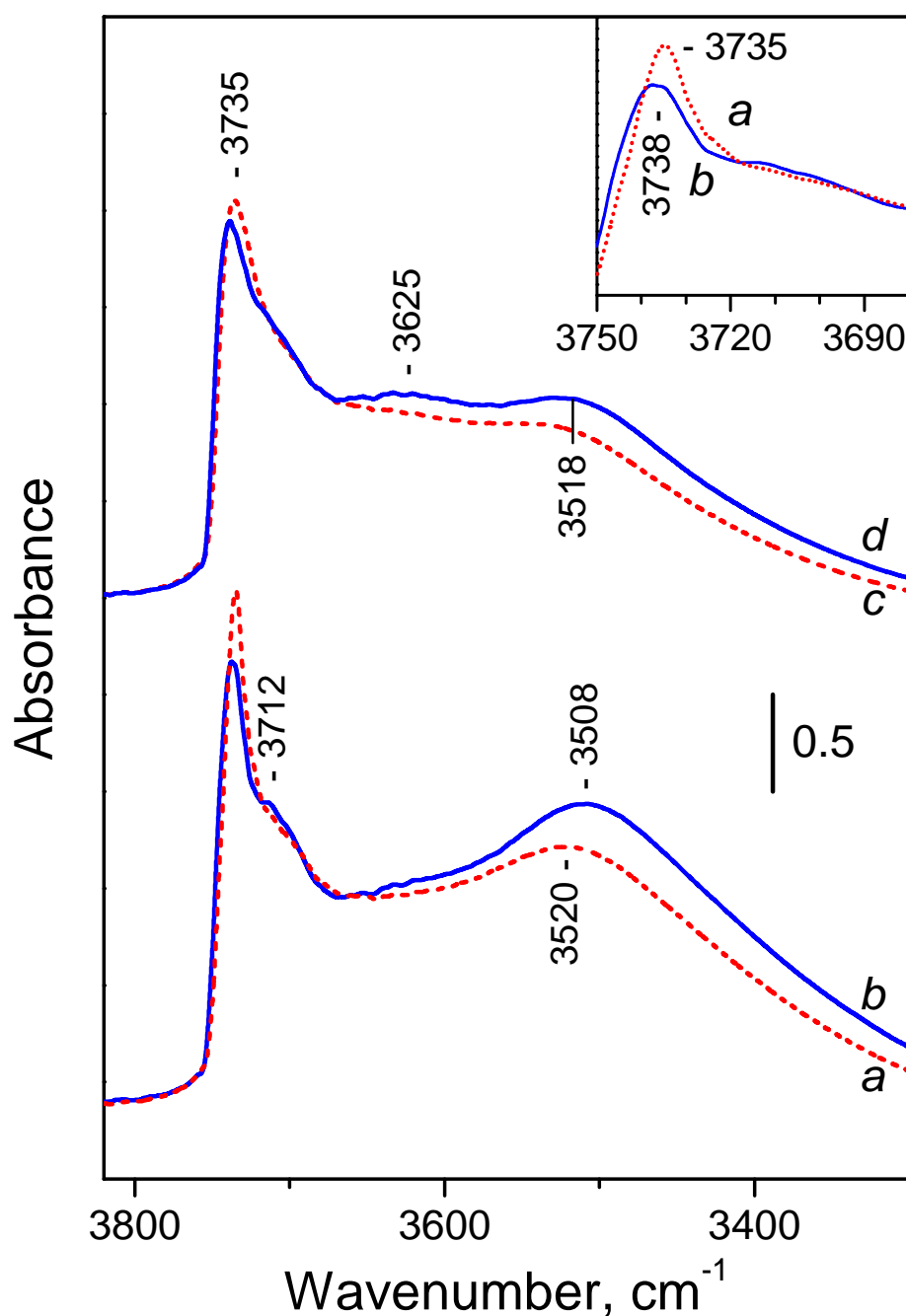
Acknowledgements. This work was supported by the Operational Program Human Resources and development.

IR spectra of [Si]BEA activated at different temperatures



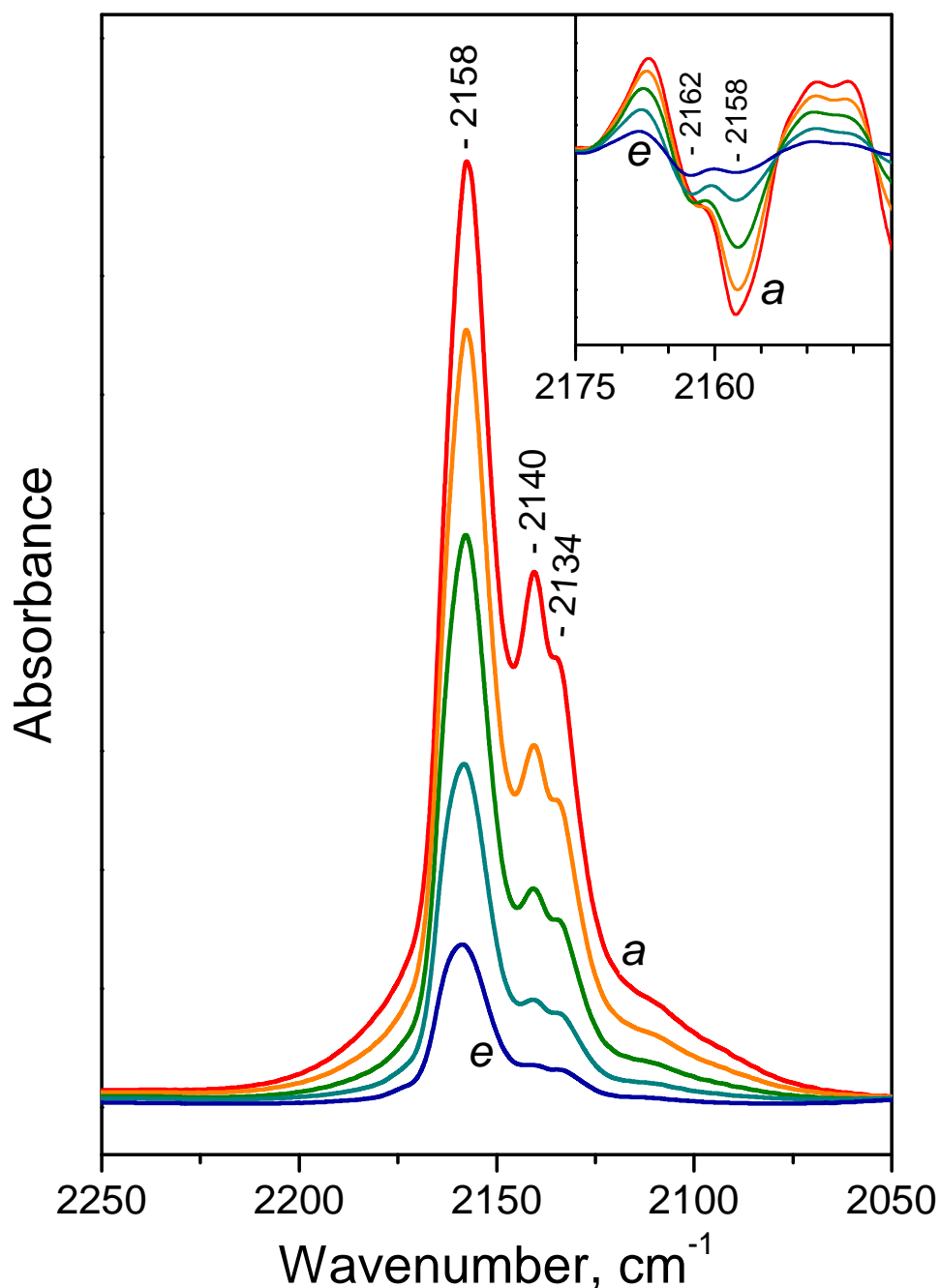
FTIR spectra (hydroxyl stretching region) of [Si]BEA sample activated at 473 (a), 523 (b), 573 (c), 623 (d), 673 (e), 723 (f) and 773 K (g). The inset shows the spectra in the C-H stretching region.

IR spectra of [Si]BEA activated at different temperatures

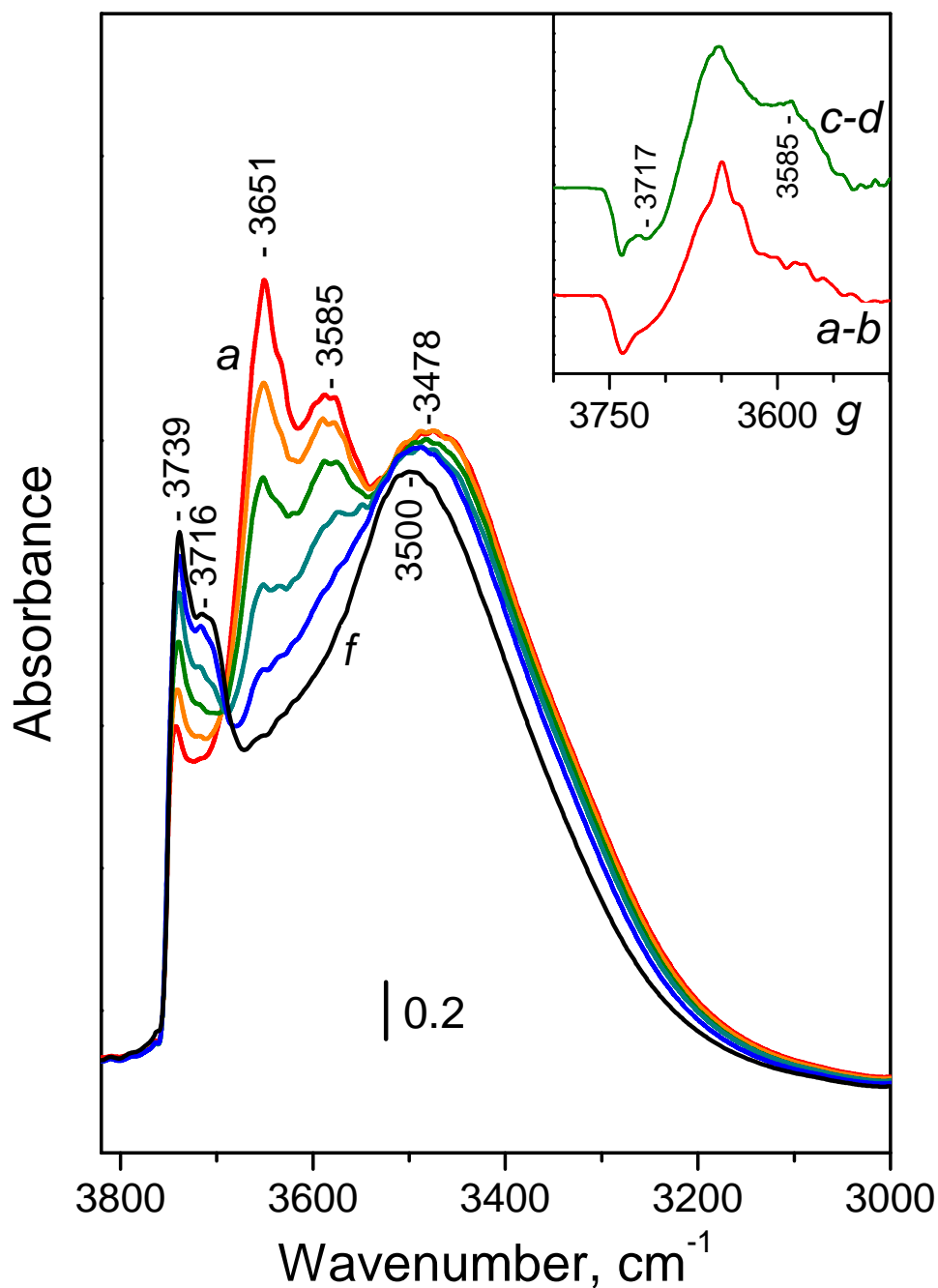


FTIR spectra (hydroxyl stretching region) of [Si]BEA sample activated at 723 (a, b) and 773 K. (c, d). Spectra registered at ambient temperature (a, c) and at 100 K. (b, d).

Adsorption of CO



FTIR spectra of CO adsorbed at 100 K. on [Si]BEA sample activated at 673 K. Equilibrium CO pressure of 400 Pa (a) and evolution of the spectra during evacuation at 100 K. (b-e). The inset shows the second derivatives.

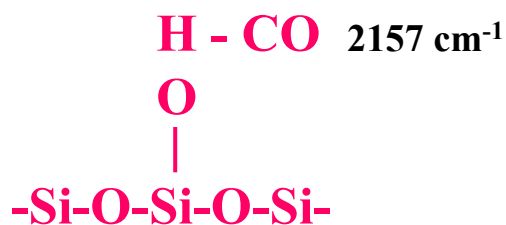


Changes in the FTIR spectra (OH region) of [Si]BEA sample activated at 673 K caused by CO adsorption at 100 K. Equilibrium CO pressure of 400 Pa (a) and evolution of the spectra during evacuation at 100 K (b-f).

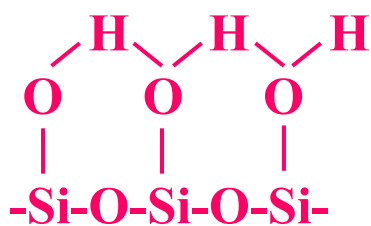
Structure and spectral performance of the OH groups.



3740 cm^{-1}

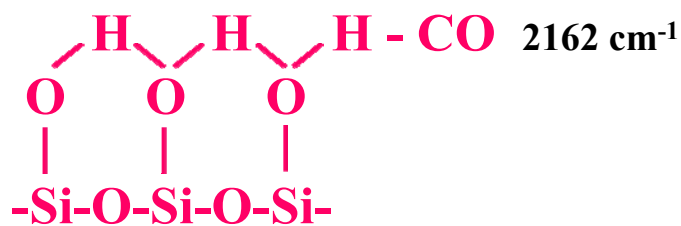


3650 cm^{-1}



3500 cm^{-1}

3710 cm^{-1}



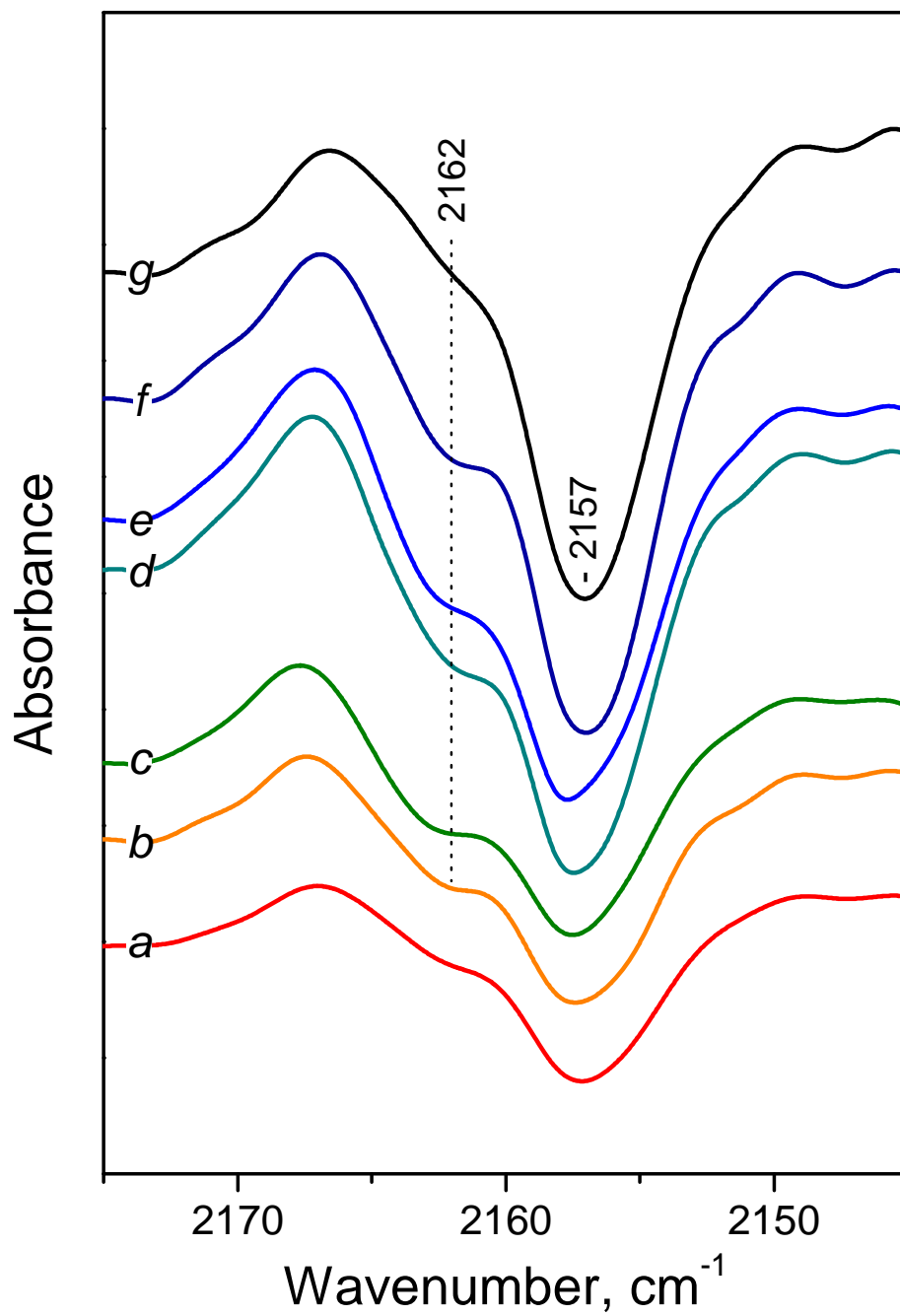
3480 cm^{-1}

3585 cm^{-1}

2162 cm^{-1}

2157 cm^{-1}

Second derivatives of the spectra



Изводи:

➤ Наблюдаваме наличието на свободни силанолни групи при 3740 cm^{-1} и хидроксилни гнезда съществуващи в деалуминирани ВЕА проби. Хидроксилните гнезда се характеризират чрез ивицата при 3500 cm^{-1} и ивицата около 3700 cm^{-1} , която се дължи на гранични (за хидроксилните гнезда) ОН групи.

➤ silanols (ca 3740 cm^{-1}) and hydroxyl nests exist on dealuminated ВЕА sample. The nests are characterized by a broad band around 3500 cm^{-1} and another one, around 3700 cm^{-1} , due to OHs terminating the nests.

➤ Хидроксилните гнезда показват забележителна термична стабилност, като тяхното разлагане се наблюдава при температури по високи от 673 K .

➤ Hydroxyls nests are characterized by a remarkable thermal stability. They start to decompose at temperatures higher than 673 K .

Благодаря за вниманието !