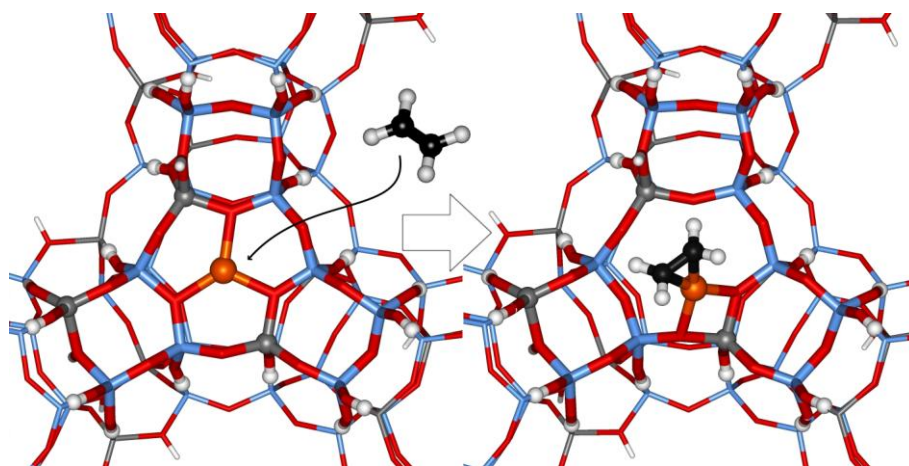


SEMINARIUM RENTGENOWSKIE

Dnia 14.01.2014r. o godz. 10.30, w Sali D Instytutu Fizyki PAN, odbędzie się seminarium rtg. na którym dr Paweł Rejmak z Instytutu Fizyki PAN, wygłosi referat na temat:

"Modelowanie centrów Cu(I) w zeolitach i ich oddziaływań z małymi cząsteczkami metodami QM/MM"



Streszczenie:

Zeolity są grupą krystalicznych mikroporowatych glinokrzemianów, która znalazła duże zastosowanie w przemysłowych procesach katalizy i adsorpcji. Pośród nich zeolity zawierające jednowartościowe kationy miedzi zostały zidentyfikowane jako katalizatory w usuwaniu tlenków azotu, syntezie organicznej czy jako selektywne adsorbenty do odsiarczania paliw. Ponieważ eksperymentalna charakteryzacja centrów Cu(I) w zeolitach daje często niepełne lub niejednoznaczne efekty, badania teoretyczne stanowią cenne uzupełnienie metod eksperymentalnych.

Celem niniejszej pracy była teoretyczna charakteryzacja izolowanych centrów Cu(I) w zeolitach typu fozajytu i MFI oraz zbadanie oddziaływań tych centrów z wybranymi cząsteczkami (CO, NO, eten), które są zarówno reagentami w procesach o praktycznym znaczeniu, jak również są szeroko używane jako cząsteczki sondy w spektroskopii IR zeolitów. Badanie teoretyczne były prowadzone hybrydowymi metodami mechaniki molekularnej/mechaniki kwantowej (QM/MM), w których wybrany fragment sieci z aktywnym centrum Cu(I) jest opisywany dokładnymi, lecz kosztownymi obliczeniowo metodami chemii kwantowej, zaś reszta periodycznego otoczenia jest opisywana przybliżonymi metodami mechaniki molekularnej. Symulacje teoretyczne pozwoliły na wyjaśnienie obserwowanych widm IR cząsteczek sond na zeolitach oraz wyjaśnić pewne różnice w reaktywności fozajytu i MFI.

dr hab. Sławomir Kret