
Adsorptions simples et multiples de CO dans FAU échangée au métal : apport de la modélisation DFT

Hugo Petitjean , Dorothée Berthomieu^{*†1}, and Zalfa Nour

¹Institut Charles Gerhardt de Montpellier (ICGM) – CNRS : UMR5253 – UM2, Place E. Bataillon, CC1701 34095 Montpellier cedex 5, France, France

Résumé

L'utilisation de molécules sondes pour caractériser l'acidité des matériaux zéolithiques et leurs structures est une approche largement utilisée. Nous nous intéressons depuis plusieurs années à la caractérisation de la position des ions alcalins et métaux de transition dans la FAU par l'utilisation de la molécule sonde CO car elle conduit à un signal intense associé à l'élongation CO dans le domaine infrarouge.[1-3]

Nous montrerons comment les calculs quantiques DFT permettent de prédire le mode d'adsorption de CO dans le cas de la FAU échangées par des ions Na⁺ et CuI. Nous montrerons en particulier que le choix de la méthode DFT est crucial pour une bonne description des adsorptions multiples et qu'une telle investigation est une étape préliminaire nécessaire pour étudier ensuite la réactivité de surface.[4]

O. Cairon, J. Phys. Chem. C 116 (2012) 25949.

Z. Nour, H. Petitjean, D. Berthomieu, J. Phys. Chem. C 114 (2011) 17802.

Z. Nour, D. Berthomieu, Q. Yang, G. Maurin, J. Phys. Chem. C 116 (2012) 24512 ; Z. Nour, D. Berthomieu, G. Maurin J. Phys. Chem. C (2013) dx.doi.org/10.1021/jp402417m

Z. Nour, D. Berthomieu, Molecular Simulation 40 (2014) 33.

Mots-Clés: DFT, dispersion, adsorption de CO, zéolithe, périodique, cluster

*Intervenant

†Auteur correspondant: berthom@univ-montp2.fr