**Studium chemisorbovaných zeolitických katalyzátorů metodou neutronové difrakce**

**Stanislav Vratislav**

Mikroporézní materiály, jako jsou zeolity-katalyzátory typu faujasitu, mají důležité použití v široké škále průmyslových procesů, které využívají katalýzu nebo molekulární separaci. Povaha a distribuce sodných kationtů a chemisorbovaných methylových skupin v mřížce zeolitu patří k nejdůležitějším problémům povrchové chemie. Znalosti těchto strukturních parametrů poskytnou podklady pro přípravu nových materiálů pro katalýzu a zeolity, které vykazují pravidelnou strukturu, jsou vhodným výchozím materiálem. Základním stavebním pro vytvoření široké škály variací krystalové struktury s póry a kanály různých rozměrů jsou čtyřstěny SiO4 a AlO4.

Neutronová prášková difrakce nachází významné uplatnění ve vědě o materiálech, fyzice, chemii, mineralogii a strojírenství. Významným přínosem rozptylu tepelných neutronů bylo stanovení vazebných parametrů chemisorbovaných objektů k základnímu strukturnímu skeletu. Byly stanoveny délky vazeb mezi skeletovými atomy kyslíku a atomy H (respektive D) umístěnými v chemisorbovaných methylových skupinách CH3 (resp. CD3). Naše laboratoř studovala sorpční a katalytické vlastnosti zeolitů typu A /3/ (Na80.0Ca1.2 [(AlO2) 82,4 (SiO2) 109,6]) a typu Y /4/ (Na48.9Ca1.6 [(AlO2) 52,1 ( SiO2) 139,9]). Experimenty byly realizovány na difraktometru KSN-2, který je umístěn ve výzkumném reaktoru LVR-15 v Řeži u Prahy. Kompletní strukturní parametry byly stanoveny Rietveldovou analýzou dat práškové neutronové difrakce pomocí sytému GSAS a Fourierových diferenčních hustotních map.

Cílem této práce je neutronografický výzkum strukturních změn nových typů zeolitů po chemisorpci v návaznosti na výsledky dosavadních prací /3, 4/. Realizovat strukturní výzkum těchto nových typů zeolitů-faujasitů se zaměřením na stanovení strukturních parametrů před a po chemisorpci, zejména určit obsazení a souřadnice kationtů, jakož i vazební parametry chemisorbovaných objektů ve vztahu k atomům kyslíku základního strukturního skeletu. Uvedené poznatky o strukturním uspořádání hrají důležitou roli v katalytických a sorpčních vlastnostech nově připravených zeolitů**.**

[1] D. H. Olson: *The crystal structure of dehydrated NaX,* Zeolites 15, 1995, pp. 439-443. ISBN 0144-2449

[2] J. Plevert, F. Di Renzo, F. Fajula, G. Chiary: *Structure of dehydrated zeoliteLi-LSX by neutron diffraction: evidence for a low-temperature orthorhombic faujasite.* J.Phys. Chem. B 101, 1997, pp.10340-10346. ISBN S 1089-5647.

[3] S. Vratislav, M. Dlouhá, V. Bosáček: *Location of chemisorbed methylium ionsin zeolites by neutron diffraction and 13C MAS NMR.* Appl. Phys. A 75, 2002, pp.1320 -1322. ISBN 33-9020-1698.

[4] S. Vratislav, M. Dlouhá, V. Bosáček: Acta physica slovaca 56, 2006, pp. 137 -140. ISBN0323 - 0465.