ศึกษาสมบัติทางโครงสร้างและทางพลังงานของซีโอไลต์ธรรมชาติที่ดูดซับโลหะแคตไอออนด้วยระเบียบวิธีฮาร์ทรี-ฟ็อคและทฤษฎีเดนซิตี ฟังก์ชันนัล ที่ระดับการคำนวณ B3LYP/6-31G(d) ในการศึกษานี้โครงสร้างของซีโอไลต์ธรรมชาติชนิดคลินอพทิลโอไลต์จะถูกจำลองแบบขึ้นมาใช้ในการวิจัยทางเคมีควอนตัมโดยแบบจำลองที่ใช้จะมีขนาด 20T โดยจะศึกษาการดูดซับโซเดียมและโพแทสเซียมแคตไอออนเพื่อหาประสิทธิภาพการดูดซับโลหะแคตไอออนของคลินอพทิลโอไลต์ พบว่านั้นสมบัติทางโครงสร้างและทางพลังงานของสารประกอบที่เกิดขึ้นนี้จะสัมพันธ์กับประจุและขนาดของโลหะที่ถูกดูดซับ จากผลการศึกษาพลังงานการดูดซับของโลหะโซเดียมแคตไอออนและโพแทสเซียมแคตไอออนของคลินอพทิลโอไลต์ ที่คำนวณได้นั้นมีค่าเท่ากับ 142.3 และ 128.1 กิโลแคลอรีต่อโมลตามลำดับโดยโซเดียมแคตไอออนซึ่งมีขนาดเล็กกว่าจะเกิดอันตรกิริยากับคลินอพทิลโอไลต์ได้ดีกว่าซึ่งจะเห็นได้จากพลังงานและระยะระหว่างโลหะแคตไอออนกับคลินอพทิลโอไลต์ นอกจากนี้ยังได้ศึกษาการดูดซับโมเลกุลของแอมโมเนียและการถ่ายโอนโปรตอนซึ่งทำให้เกิดคู่ไอออนด้วย โดยกระบวนการถ่ายโอนโปรตอนจากซีโอไลต์ไปยังโมเลกุลของแอมโมเนียที่เกิดขึ้นนั้นเป็นกระบวนการคายพลังงานซึ่งมีค่าเท่ากับ 13.5 กิโลแคลอรีต่อโมล

226237

The structural and energetic properties of metal cations adsorbed on Clinoptilolite has been theoretically studied by means of the Hartree-Fock (HF) and density functional theory (DFT) at B3LYP/6-31G(d) level of calculation. The structure of Clinoptilolite (HEU) had been represented by 20T quantum cluster model. The adsorptions of Na^+ and K^+ were considered for inspecting the efficiency of cation adsorption in the framework of natural zeolite. We found that the structural and energetic properties of adsorption complexes depend strongly on the atomic charges and size. The adsorption energies of Na^+ and K^+ ions were calculated to be 142.3 and 128.1 kcal mol^{-1}, respectively. Moreover, the distances between Na^+ ion and oxygen atoms of zeolite framework are closer than those of K^+ ion due to the smaller ionic radii. The adsorption of NH_3 was also investigated as well as the transfer of acidic proton from zeolite to ammonia molecule, yielding the ion-paired complex. This proton transfer process is an exothermic process corresponding to the energy of 13.5 kcal mol^{-1}.