

ДЕКОМПОЗИЦИЯ СПЕКТРОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КАТАЛИЗАТОРОВ

Chistoforova N.V

DECOMPOSITION OF LUMINESCENCE SPECTRA OF CATALYSTS

Аннотация. С помощью разработанной программы была выполнена декомпозиция лазерно-люминесцентных характеристик образцов катализаторов ГРБ с различными носителями.

Ключевые слова: носитель, катализатор, люминесценция, лазерное излучение.

Abstract. Using the developed program, the decomposition of laser-luminescent characteristics of catalyst samples (GRB) with different carriers was performed.

Keywords: carrier, catalyst, luminescence, laser radiation.

При изучении люминесценции катализаторов требуется анализировать сложную структуру спектра излучения. Во многих катализаторах спектральный состав света, испускаемого центрами люминесценции, полностью определяется их строением. Спектр люминесценции катализатора в этом случае представляет суперпозицию спектров центров люминесценции содержащихся в нем веществ. Для распознавания природы центров люминесценции и выяснения механизма передачи энергии возбуждения в исследуемых образцах возникает необходимость разложения спектра на отдельные элементарные контуры, каждый из которых может быть связан с отдельными излучающими центрами (ионами, дефектами решетки).

Автором разработана программа декомпозиции спектров люминесценции на элементарные контуры, описываемые кривыми Гаусса. Аппроксимация экспериментальных данных полимодальной гауссиадой производилась методом наименьших квадратов:

$$\sum_i \left(y_i^{\text{эксн}} - \sum_j y_{ij}^{\text{расч}} \right)^2 \rightarrow \min ,$$

где $y_i^{\text{эксн}}$ - экспериментальные данные ($i = \overline{1, n}$); $y_{ij}^{\text{расч}}$ - расчетные данные ($j = \overline{1, k}$, k - количество пиков);

$$y_{ij}^{\text{расч}} = A_j \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_j} \exp \left[-\frac{(x_i - \bar{x}_j)^2}{2\sigma_j^2} \right];$$

где A_j - высота j -го пика; σ_j - ширина j -го пика; \bar{x}_j - центр j -го пика.

С помощью разработанной программы была выполнена декомпозиция лазерно-люминесцентных характеристик образцов катализаторов серии ГРБ с различными носителями: 290 (цеолит, SiO₂), 292 (цеолит, Al₂O₃, прокален в потоке азота), 215 (цеолит-морденит, Al₂O₃), 284 (в цеолите SiO₂ / Al₂O₃ = 100), 209 (в цеолите SiO₂ / Al₂O₃ = 53), 227 (НЦВМ-583, Al₂O₃), ЦКР-74 (ЦВМ, Al₂O₃) [1].

Результат расчета и разложение спектра приведены для катализатора ГРБ-292 (таблица 1, рисунок 1).

Цифрами пронумерованы пики. Расчетная полимодальная гауссиада (кривая Р) незначительно отличается от экспериментальной кривой (кривая Э), что свидетельствует об адекватности предложенной модели декомпозиции спектра люминесценции.

Таблица 1 - Результат расчета для катализатора ГРБ-292

Катализатор	№ пика	Интенсивность люминесценции J, (отн. ед)	Центр р (Эв)	Ширина (Эв)	Полуширина (Эв)	Площадь (отн.ед)	Сумма квадратов отклонений	90% довер. интервал
ГРБ-292	1	39,96	2,47	3,11	1,22	100,16	63,23	1,765
	2	19,54	3,11	1,52	0,60	48,97		
	3	16,63	3,42	0,75	0,30	41,69		

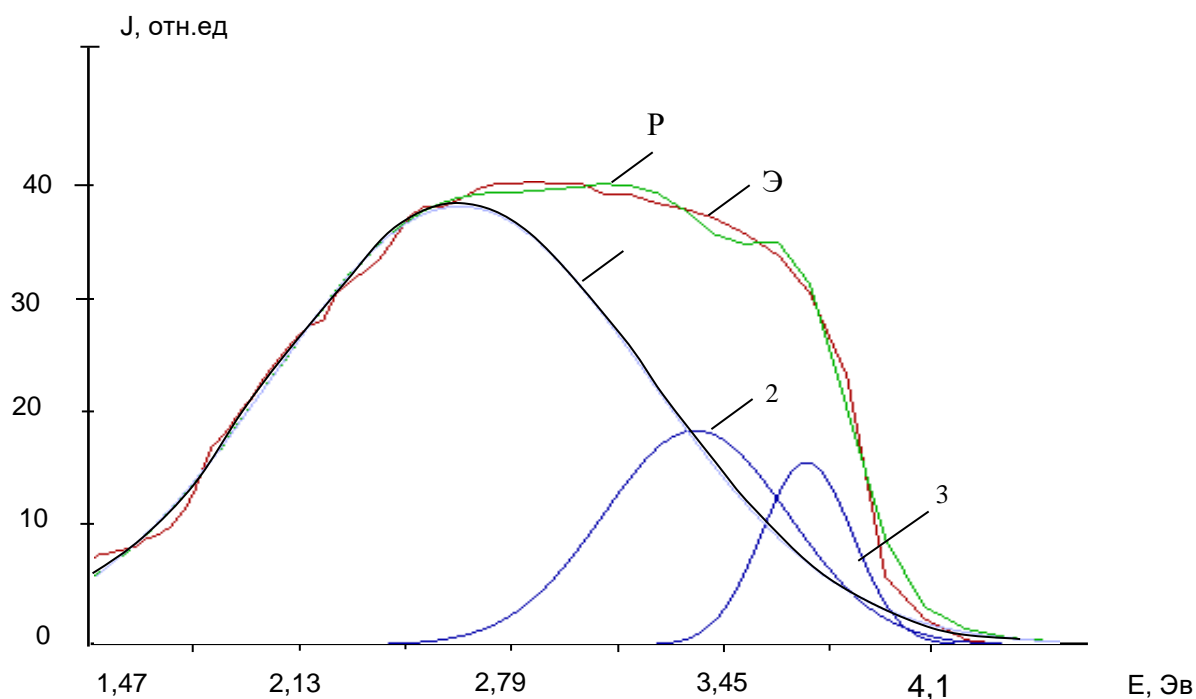


Рисунок 1 - Декомпозиция спектра катализатора ГРБ-292

Данная методика позволит получить дополнительную информацию о свойствах носителей и катализаторов в области их синтеза и диагностики качества.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Яровой, П.Н.** Люминесценция катализаторов при лазерном возбуждении / П.Н.Яровой, С.А.Скорникова, Н.В.Чистофорова. – Ангарск: АГТА, 2003. – 104 с. : ил. – 500 экз. – Текст: непосредственный.