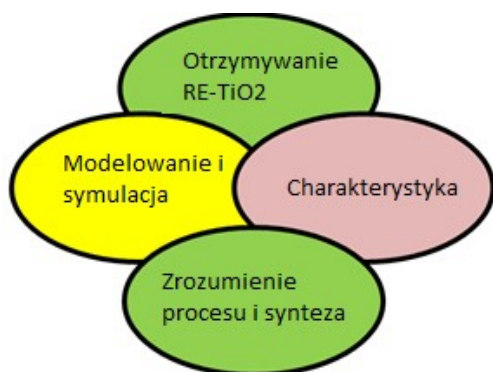


1. Cel naukowy

Celem projektu jest wyjaśnienie mechanizmu wzbudzenia TiO₂ modyfikowanego metalami ziem rzadkich (ang. rare earth metals, RE) oraz określenie modelowej zależności pomiędzy strukturą, właściwościami powierzchniowymi a aktywnością fotokatalityczną RE-TiO₂. Zgodnie z najnowszym trendem przedstawionym w "Chemical Vision 2020" – istnieje konieczność połączenia metod modelowania i symulacji z wynikami eksperymentalnymi, a następnie wyciągnięcia wniosków, które będą miały zastosowanie w procesie otrzymywania nanokompozytów o podanych właściwościach (struktura, aktywność fotokatalityczna). W oparciu o taki model, zostaną przygotowane fotokatalizatory, które będą go weryfikować (Rysunek 1). Zatem proponowane podejście pozwoli postąpić zgodnie z zasadą „Najpierw zaprojektuj potem zbuduj”(build-by-design).

Proponowane podejście opiera się na następujących założeniach:

- Lantanowce ze względu na położenie pasm energetycznych mają wpływ na aktywność fotokatalityczną TiO₂ pod wpływem promieniowania z zakresu widzialnego i bliskiej podczerwieni (NIR),
- Wzrost, obecny na powierzchni fotokatalizatora TiO₂ jest odpowiedzialny za obniżenie intensywności procesów luminescencji, które odpowiadają za niższą aktywność fotokatalityczną TiO₂,
- Poprawa właściwości luminescencyjnych fotokatalizatorów spowoduje wzrost ich aktywności fotokatalitycznej,
- Aktywność fotokatalityczną RE-TiO₂ pod wpływem promieniowania z zakresu oraz widzialnego oraz NIR można przewidzieć na podstawie jego wybranych właściwości fizykochemicznych i powierzchniowych.



Rysunek 1. Główne elementy proponowanego projektu

2. Znaczenie projektu

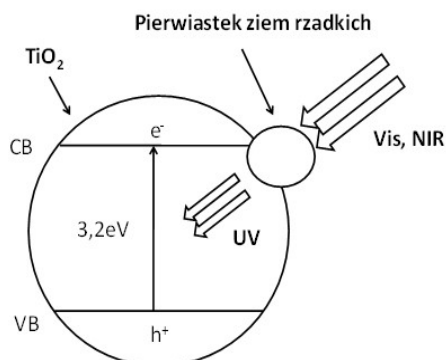
W ostatnich latach intensywnie poszukuje się przyjaznych dla środowiska metod usuwania zanieczyszczeń – metod konwersji substancji organicznych i nieorganicznych. Jedną z dostępnych metod usuwania zanieczyszczeń z fazy wodnej oraz gazowej jest fotokatalityczna degradacja w obecności nanocząstek TiO₂. W chwili obecnej, metoda fotodegradacji w obecności TiO₂ i promieniowania słonecznego wykorzystuje się do oczyszczania strumieni wody, usuwania zanieczyszczeń z cieków oraz substancji lotnych z atmosfery. W metodzie tej, w odróżnieniu od metod konwencjonalnych, nie wprowadzamy dodatkowych odczynników chemicznych na etapie oczyszczania.

Proponowane rozwiązanie pozwoli na opracowanie nowych efektywnych fotokatalizatorów i tym samym pozwoli na wykorzystanie odnawialnego źródła energii jakim jest promieniowanie słoneczne – nawet na obszarach gdzie promieniowanie słoneczne ma mniejszą intensywność – do usuwania lotnych zanieczyszczeń z atmosfery (poprzez fotodegradację zanieczyszczeń na powierzchniach pokrytych modyfikowanym TiO₂ lub na filtrach ze złożem z modyfikowanego TiO₂) oraz do usuwania zanieczyszczeń z fazy wodnej (zanieczyszczone wody i ciekły).

Powstałym ograniczeniem zastosowania TiO₂ na szeroką skalę jest zakres promieniowania niezbędnego do wzbudzenia fotokatalizatora. Tlenek tytanu(IV) absorbuje prawie wyłącznie promieniowanie UV, dlatego w procesie fotokatalizy wykorzystano na zaledwie od 3 do 5 % promieniowania słonecznego. Zastosowanie lamp UV, jako źródła światła, z uwagi na duże zużycie energii, stanowi poważne zwiększenie kosztów procesu, co jest istotnym czynnikiem limitującym szersze zastosowanie metod fotokatalitycznych w likwidacji zanieczyszczeń środowiska. Zatem otrzymanie półprzewodnika tytanowego nowej generacji, którego aktywność fotokatalityczna znajdowałaby się w zakresie promieniowania widzialnego (>400 nm) oraz NIR, znacząco rozszerzyłoby możliwości aplikacyjne fotokatalizy heterogenicznej w ochronie środowiska, przez wykorzystanie głównej części spektrum światła słonecznego lub zastosowanie źródła światła o mniejszym natężeniu promieniowania.

W tym odniesieniu najważniejszym wyzwaniem jest podniesienie efektywności procesów degradacji zanieczyszczeń oraz rozszerzenie zakresu czułości spektralnej TiO₂. W związku z tym, większość prac prowadzonych na wiecie w ostatnich latach, ukierunkowana jest na modyfikację TiO₂, celem uzyskania fotokatalizatora aktywowanego światłem widzialnym.

Od pewnego czasu prowadzone są badania nad wykorzystaniem właściwości luminescencyjnych niektórych pierwiastków ziem rzadkich w procesie fotokatalizy. Proponowany mechanizm działania ditlenku tytanu domieszkowanego pierwiastkiem luminescencyjnym przedstawiono na Rysunku 2. Promieniowanie z zakresu światła widzialnego oraz NIR jest absorbowane przez domieszkę. W procesie konwersji energii pierwiastek domieszkujący emituje promieniowanie z zakresu UV, które z kolei aktywuje TiO₂ powodując przeniesienie elektronu z pasma walencyjnego do pasma przewodnictwa i powstania dziury w paśmie walencyjnym.



Rysunek 2. Mechanizm wzbudzenia TiO_2 modyfikowanego metalami ziem rzadkich

W tym odniesieniu, w projekcie proponuje badania podstawowe mające na celu opracowanie nowego typu materiałów (RE-TiO_2) charakteryzujących się wysoką intensywnością luminescencji a tym samym wysoką aktywnością fotokatalityczną pod wpływem promieniowania z zakresu UV, Vis oraz NIR. Ponadto zostanie opracowany komputerowy model zależności strukturalnych właściwości powierzchniowych a aktywności fotokatalitycznej RE-TiO_2 .