

Celem badań prowadzonych w ramach niniejszego projektu jest opracowanie nowych materiałów w postaci efektywnych katalizatorów opartych na nanostrukturach węgla (CNSs, ang. Carbon Nanostructures) dedykowanych dla czystych technologii chemicznych. Otrzymane materiały zostaną wykorzystane jako katalizatory w procesach otrzymywania związków z grupy fine chemicals.

Badania będą obejmowały następujące etapy: otrzymywanie katalizatorów, ich charakterystyk oraz badania właściwości katalitycznych w wybranych procesach chemicznych, takich jak: alkiłowanie związków aromatycznych, utlenianie ketonów w reakcji Baeyera-Villigera, oraz reakcja Dielsa-Aldera. Ze względu na szerokie zastosowania produktów tych reakcji, czyli laktonów, długoła cuchowych alkiloaromatów oraz adduktów Dielsa-Aldera jako monomerów, prekursorów rodków powierzchniowo czynnych czy farmaceutyków, wydajne metody ich otrzymywania są bardzo poszukiwane. Ostatnim etapem, podsumowującym badania będzie komputerowo wspomagane modelowanie procesu utleniania Baeyera-Villigera wobec wybranego na podstawie powyższych badań katalizatora.

Najważniejsze cechy efektywnego katalizatora to wysoka aktywność, selektywność oraz stabilność. Podstawową zaletą katalizatorów heterogenicznych czyli takich, które tworzą odrębną fazę, najczęściej stałą, w układzie reakcyjnym jest prosty sposób ich wydzielenia i zwrócenia do reakcji. Kataliza heterogeniczna, choć znana od ponad wieku, jest ciągle udoskonalana i odgrywa kluczową rolę w rozwiązywaniu obecnych problemów w technologii chemicznej. Dzięki rozwojowi inżynierii materiałowej dostępne są nowoczesne, stałe nośniki katalizatorów posiadające wysoko rozwiniętą powierzchnię.

W ramach projektu autorzy będą realizowali zadania związane z projektowaniem nowych heterogenicznych katalizatorów, czyli optymalizację wzajemnym wyważeniem jego właściwości katalitycznych oraz mechanicznych czy fizykochemicznych. Poprzez odpowiedni wybór składników katalizatora, czyli fazy aktywnej oraz nośnika można wpływać na jego aktywność, selektywność oraz stabilność pracy. Istotne jest również zapewnienie dobrego dostępu reagentów do fazy aktywnej, czyli jego powierzchnia właściwa. Innym ważnym zagadnieniem jest sposób osadzania fazy aktywnej na nośniku, czyli mechanizm immobilizacji.

Jako nośniki katalizatorów zastosowane zostaną nanostruktury węgla (CNSs). CNSs zrewolucjonizowały dziedzinę nanotechnologii, znajdują zastosowania w elektronice, optyce, mechatronice i jako elementy konstrukcyjne. Specyficzne właściwości CNSs, takie jak duża powierzchnia właściwa, inercja chemiczna, stosunkowo wysoka odporność na procesy utleniania, możliwość różnorodnej modyfikacji powierzchni sprawiają, że są one obiecującym nośnikiem w katalizie heterogenicznej. CNSs modyfikowane będą poprzez osadzanie na ich powierzchni grup aktywnych, posiadających zdolności katalityczne w postaci kwasydnych cieczy jonowych (ILs). Osadzanie będzie się odbywać poprzez adsorpcję fazy aktywnej lub poprzez przywiązanie jej do nośnika za pomocą wiązania chemicznego. To drugie rozwiązanie jest bardziej efektywne i uniemożliwia wymywanie fazy aktywnej w trakcie procesu, wydzielenia i zwrócenia katalizatora. Adsorpcja ILs na powierzchni CNSs jest jedną z metod polepszenia dyspersyjności katalizatora w układzie reakcyjnym. Połączenie dużego potencjału katalitycznego cieczy jonowych z doskonałymi właściwościami nośnika prowadzi do otrzymania materiałów hybrydowych o innowacyjnych właściwościach.

Jako CNSs zastosowane będą niemodyfikowane i modyfikowane powierzchniowo jedno- i wielofazowe nanorurki węgla, także inne CNSs – nanowłókna węgla, nanocząstki węgla, struktury grafenoidalne. Ponadto, integralną cechą struktury niektórych proponowanych nanomateriałów będzie obecność w ich rdzeniu nieusuwalnych na drodze modyfikacji chemicznych superparamagnetycznych nanocząstek tlenka żelaza. Cechą tą będzie możliwość łatwego usunięcia katalizatora po reakcji poprzez zastosowanie pola magnetycznego. Cechą wspólną katalizatorów będzie obecność funkcji kwasu Lewisa w cząsteczce aktywnej katalizatora. Warto podkreślić, że wykorzystanie materiałów hybrydowych: nanomateriał węgla-ciecz jonowa (CNSs-ILs) jako katalizatorów w procesach chemicznych zostało dotychczas opisane zaledwie w kilku pracach. Wykazano, że zastosowanie CNTs jako nośników fazy cieczy jonowej przyniosło wiele korzyści w porównaniu do konwencjonalnych nośników tlenkowych. Wysoka aktywność katalityczna wynika mianowicie innymi z zastosowania mezoporowatego nośnika, co polepsza wymianę masy.

Potencjał katalityczny nowych materiałów będzie badany w układzie reakcyjnym okresowym, w wybranych modelowych procesach: Baeyera-Villigera, Dielsa-Aldera oraz alkiłowaniu związków aromatycznych. Przeprowadzone zostaną badania nad doбором korzystnych warunków prowadzenia procesów, takich jak temperatura, stężenie reagentów, ilość katalizatora czy dobór rozpuszczalnika. Dzięki nowoczesnemu reaktorowi kalorymetrycznemu wyposażonemu w sondę FTIR umożliwiający śledzenie przebiegu procesu wyznaczona zostanie kinetyka oraz ciepło procesu. Otrzymane w ramach projektu kwasowe katalizatory będą się charakteryzowały wysoką stabilnością hydrolytyczną co rozwiąże dotychczasowe problemy z zastosowaniem w badanych reakcjach katalizatorów Lewisa, które ulegają szybkiej hydrolyzie nawet w obecności niewielkich ilości wody.

Współczesne metody projektowania procesów technologicznych w coraz większym stopniu opierają się na modelowaniu i optymalizacji przy użyciu modelowania matematycznego i symulacji komputerowej. Zastosowanie programu ChemCad jako nowoczesnego narzędzia inżynierii chemicznej ułatwi czy projekt. Pozwoli on na szczegółową analizę procesu, określenie równań bilansowych aparatów oraz równań bilansów masowych i energetycznych procesu.

Podsumowując, można stwierdzić, że poszukiwania nowych wysoko efektywnych, a jednocześnie nietoksycznych, przyjaznych dla środowiska katalizatorów są obecnie obiektem wielu badań. Proponowany projekt zakłada wykorzystanie nowych, słabo jeszcze poznanych heterogenicznych katalizatorów opartych na materiałach hybrydowych zbudowanych z połączenia nanomateriałów węgla oraz cieczy jonowych w wybranych procesach chemicznych.