

Wszystkie procesy spotykane w otaczającym nas świecie zachodzą w indywidualnej dla siebie skali czasowej. Znane są procesy trwające jedynie ułamki sekund oraz takie, których czas trwania może liczyć w latach, dekadach a nawet wiekach. Choć czas trwania danego procesu wydaje się być jego charakterystycznym parametrem to jednak nie jest on inwariantny. Istnieje bowiem szeroka gama substancji, które znacząco wpływają na skrócenie czasu trwania wielu reakcji chemicznych, procesów biologicznych, a przede wszystkim procesów przemysłowych. Katalizatory, bo o nich mowa, chociaż nie biorą bezpośredniego udziału w reakcji czy procesie wpływają znacząco na skrócenie czasu jego trwania; i tak, procesy naturalnie biegnące na przestrzeni wielu lat mogą zakończyć się w przeciągu kilku minut. Zjawisko katalizy, po raz pierwszy opisane w roku 1836 przez szwedzkiego chemika Jönsa Berzeliusa, stanowi obecnie podstawę jednej z najprężniej rozwijających się dziedzin nauki. Praktyczne znaczenie katalizatorów ilustruje, z kolei fakt, iż około 90% produktów przemysłu chemicznego otrzymywanych jest na drodze procesów katalitycznych (głównie katalizy heterogenicznej). Poszukiwanie nowych katalizatorów oraz dokładny opis tych już rozpoznanych stanowi chleb powszedni ogromnej rzeszy naukowców. Szczególnym zainteresowaniem cieszą się katalizatory bazujące na porowatych materiałach krystalicznych, takie jak zeolity czy tlenki metali. Dekady badań nad katalizatorami zeolitowymi i tlenkowymi ujawniły istnienie kilku ważnych aspektów, jakie musi spełniać materiał, aby mógł być z powodzeniem wykorzystywany jako katalizator w przemyśle np. petrochemicznym czy rafineryjnym. Materiał pretendujący do miana efektywnego katalizatora musi posiadać w swojej strukturze liczne centra aktywne, czyli miejsca bezpośredniego kontaktu katalizatora z reagentami danego procesu. Ponadto, pory występujące w ziarnie zeolitu lub tlenku muszą tworzyć systemy wzajemnie przecinających się kanałów i komórek umożliwiających łatwe dotarcie cząsteczek reagentów do centrów aktywnych zlokalizowanych wewnątrz ziarna katalizatora. Ogromną wagę przywiązuje się również do tego, aby katalizator był selektywny, (czyli umożliwiający otrzymanie jak największej ilości spodziewanego produktu reakcji), trwały, oraz możliwie tani.

Projektowanie nowych katalizatorów nie jest możliwe bez wnikliwego scharakteryzowania zarówno katalizatorów obecnie stosowanych, jak i materiałów pretendujących do tego miana. Aktywność katalityczna, czyli miara umożliwiająca ilościowe określenie tego jak katalizator przyspiesza reakcję lub proces, nierozdzielnie związana jest z jego centrami aktywnymi. Dlatego, uzyskanie ich pełnej charakterystyki od wielu lat stanowi obszar badań naukowców. Choć jako ilościowy opis centrów aktywnych, pozwalający na określenie ich rodzaju, jest niezbędnym w zrozumieniu procesu katalitycznego to jednak jest niewystarczający. Dopiero połączenie tej informacji z ilościowym obrazem centrów pozwala w pełni zilustrować dany proces. Badania ilościowe centrów aktywnych, ze względu na stopień trudności oraz swój problematyczny podejmowany niezwykle rzadko. Dlatego, podstawowy cel niniejszego Projektu stanowiłoby próba opracowania nowych, a przede wszystkim prostych i efektywnych metod ilościowej analizy centrów aktywnych. Realizatorzy Projektu planują również wyjść na przeciw wyzwaniu, jakim jest prowadzenie badań w rzeczywistych "warunkach pracy" aktywnego katalizatora, z zastosowaniem cząsteczek reagentów typowych procesów katalitycznych, czyli w tzw. trybie in operando. Podejście takie nie tylko dopełni obraz właściwości centrów, ale także umożliwia monitorowanie zmian jakie zachodzą w stężeniach tak centrów aktywnych, jak i poszczególnych indywidualów reakcji chemicznej powstających w jej trakcie.

Spektroskopia w podczerwieni IR jest potężnym narzędziem umożliwiającym przeprowadzenie, nie tylko ilościowej, ale także jakościowej analizy właściwości centrów aktywnych. Rejestracja widm IR zeolitów i tlenków jest jednak bezużyteczna, jeżeli na ich powierzchni nie zostaną zaadsorbowane tzw. cząsteczki sondy. Pasma pojawiające się w widmie IR są bowiem efektem drgania cząsteczek sond oddziałujących z centrami aktywnymi. W badaniach proponowanych w niniejszym Projekcie jako sondy wykorzystane zostaną powszechnie stosowane cząsteczki takie jak amoniak, pirydyna, tlenek węgla(II), tlenek azotu(II) oraz co najwyżej, cząsteczki reagentów procesów katalitycznych. Pomiar IR prowadzony będzie przy zastosowaniu klasycznego spektrometru, oraz takiego, dzięki któremu możliwa jest znacznie szybsza rejestracja widm (tzw. metoda Rapid Scan). Skorelowanie tych, dwóch technik rejestracji widm umożliwi określenie nie tylko globalnej specyfiki centrów aktywnych katalizatora, ale także pozwoli zobrazować faktyczny przebieg reakcji, która zazwyczaj trwa tylko ułamki sekund! Pomimo niepodważalnych zalet, spektroskopia IR posiada niestety pewne ograniczenia; otóż nie umożliwia ona dokonania jednoznacznego rozróżnienia pomiędzy wszystkimi typami centrów aktywnych tak o charakterze kwasowym jak i tych związanych z kationami metali przejściowych. Z pomocą przychodzi jednak metody takie jak spektroskopia Ramana czy spektroskopia UV-Vis. Techniki te pozwalają określić rodzaj centrów aktywnych poprzez detekcję formy, w jakiej znajduje się metal przejściowy (np. forma kationu wymiennego lub tlenkowa). W celu dopełnienia obrazu właściwości, materiały zbadane zostaną w warunkach reakcji SCR NO_x, SCO NH₃ i eliminacji VOC, w których ostatecznie zweryfikowana zostanie przydatność zaproponowanych metod badań ilościowych oraz mechanizmy samej reakcji katalitycznej.

Idea niniejszego Projektu zrodziła się z chęci poszerzenia wiedzy na temat badań ilościowych centrów aktywnych różnego typu. Spełnienie podstawowego zadania Projektu, jakim jest opracowanie stosunkowo prostego i efektywnego narzędzia umożliwiającego przeprowadzenie charakterystyki ilościowej centrów, pozwoli w pełni zrozumieć mechanizmy wielu procesów katalitycznych. Co więcej, otworzy furtkę, dzięki której możliwe stanie się projektowanie nie tylko tanich i efektywnych katalizatorów, ale przede wszystkim, katalizatorów dedykowanych do konkretnych procesów.