

Obecny stan wiedzy na temat powierzchni ciała stałego katalizatorów przyjmuje, że jest ona dynamiczna, zwłaszcza biorąc pod katalizatory tlenkowe. Naukowcy rozważają powierzchnię katalizatorów jako "żyjącą" lub "oddychającą" i zmieniającą się w warunkach reakcji katalitycznych (zmiana temperatury, ciśnienia, itd.). Jeden z badaczy - Tamaru - napisał ponad 35 lat temu, że: "Kataliza jest procesem dynamicznym. Nie badając dynamiki zachowania powierzchni katalizatora, nie można dokładnie scharakteryzować właściwości katalizatorów ". Stwierdzenie to jest prawdziwe także obecnie.

Przedstawiony projekt spełnia najbardziej oczekiwane potrzeby na opracowanie nowej metodologii, która umożliwi obserwację bogactwa i charakteru struktury powierzchni, angażując w tym celu nowoczesne metody spektroskopii *in situ* i *operando* (Raman, IR, UV-Vis) oraz ich kombinacje z technikami mikroskopowymi. Pomiar spektroskopowy powierzchni idealnie należy przeprowadzić w realnych warunkach katalitycznych. Pomiar *in situ* odnosi się do dowolnego pomiaru spektroskopowego, który jest prowadzony w zadanych warunkach reakcji, przez co daje lepszy wgląd w proces katalityczny. Nowy termin określający spektroskopię *operando* wprowadzono do zagadnień literatury z dziedziny katalizy na początku XXI wieku. Jego znaczenie określa szczególną wagę połączenia zasadniczej metody spektroskopii powierzchni z procesem katalitycznym zachodzącym w tym samym czasie i w tej samej próbce, w rzeczywistych warunkach reakcji. Zrozumienie ścieżki przemiany jakiej dokonuje cząsteczka substratu w procesie przekształcania się w produkt, jej sposób interakcji z powierzchnią materiału katalitycznego jest wyzwaniem napędzającym ciekawość. Chociaż wielu chemików włożyło wiele wysiłku w wyjaśnianie procesów katalitycznych, liczba przypadków wymagających głębszego zrozumienia wciąż rośnie.

Największa uwaga, w ramach tego projektu, skupiona zostanie na ulepszeniu techniki sprzężonej mikroskopii sił atomowych i spektroskopii ramanowskiej (AFM / Raman) w celu uzyskania pożądanego poziomu rozdzielczości przestrzennej wraz z jednoczesną informacją chemiczną. Udoskonalenie metod analizy wywrze znaczący wpływ na nowe możliwości określenia zależności struktury-aktywności/selektywności centrów aktywnych katalizatorów. Jednoczesne wykorzystanie uzupełniających się detektorów umożliwi monitorowanie powstających na powierzchni produktów przejściowych oraz mechanizmu ich formowania i zanikania. Bliższe spojrzenie na strukturę centrów aktywnych znajdujących się na powierzchni katalizatora przyniesie nowe spojrzenie na ich charakter, a tym samym możliwość projektowania ulepszonych lub nawet nowych materiałów katalitycznych z istotnymi właściwościami w zwiększeniu konwersji i selektywności wobec pożądanego produktu reakcji. Godne uwagi jest to, że rezultaty projektu wpłyną na racjonalne projektowanie katalizatorów w skali atomowej, a tym samym na rozwój nowoczesnej dziedziny Inżynierii Materiałów Katalitycznych.