

Popularnonaukowe streszczenie projektu

Jednym z głównych zadań stojących przed chemią w ujęciu praktycznym jest opracowanie metod produkcji paliw z łatwo osiągalnych źródeł. Przemiana substancji w pożądanym kierunku jest możliwa na ogół wyłącznie przy użyciu katalizatora, czyli substancji zmieniającej przebieg poszczególnych reakcji chemicznych. Właśnie w przemyśle petrochemicznym, głównym dostarczycielu ciekłych paliw silnikowych wyjątkowe miejsce, jako katalizatory mają zeolity. Zeolity jest to grupa glinokrzemianów, zarówno pochodzenia naturalnego, jak i syntetycznego. Wykazują one unikalną budowę krystaliczną, przenikają ją kanały o różnej szerokości, przecinające się z utworzeniem komór. Co więcej, w strukturze zeolitów można wytworzyć niezwykle silne centra kwasowe, których moc znacznie przekracza kwasowość nawet stężonych kwasów mineralnych. Oprócz centrów kwasowych do struktury zeolitu można wprowadzić także centra o własnościach utleniających lub redukujących. Całe bogactwo możliwych centrów wraz z unikalną możliwością syntezy zeolitów o zadanych parametrach geometrycznych kanałów i komór są powodem wyjątkowo szerokiego wachlarza zastosowań zeolitów, a także są powodem niezwyklego zainteresowania nimi w kontekście badań podstawowych. Umiejętność sterowania podczas syntezy geometrią kanałów oraz rozmieszczeniem reaktywnych chemicznie centrów stwarza niemal nieograniczone możliwości projektowania nowoczesnych materiałów katalitycznych o unikalnych własnościach. Warunkiem jednak takiego sterowania własnościami zeolitów jest dogłębne zrozumienie mechanizmami rządzącymi przemianami chemicznymi we wnętrzu porów.

Takiemu właśnie celowi poświęcony jest niniejszy projekt badawczy. Głównym jego celem jest zastosowanie szeregu metod doświadczalnych (spektroskopia w podczerwieni, transmisyjna mikroskopia elektronowa, dyfraktometria rentgenowska) do zbadania struktury syntezowanych zeolitów oraz zastosowanie metod symulacji obliczeniowych, odnoszących w ostatnich latach zdumiewające sukcesy w zastosowaniu do badań naukowych, w tym także fizycznych i chemicznych. Metody obliczeniowe chemii dysponują metodami zarówno opisu poszczególnych etapów reakcji chemicznych na poziomie atomowym i cząsteczkowym, jak i opisu układów makroskopowych. Połączenie tych metod jest drugim kluczowym elementem niniejszego projektu. Połączone badania teoretyczne oraz doświadczalne są metodami znakomicie się uzupełniającymi w ten sposób, iż obserwacje doświadczalne stanowią więzy dla modelowania komputerowego, natomiast symulacja teoretyczna opracowanego modelu przewiduje wyniki innych technik doświadczalnych, które z kolei mogą zostać eksperymentalnie zweryfikowane potwierdzając lub odrzucając postulowany model. Można powiedzieć, iż współcześnie metody obliczeniowe, szczególnie opisujące świat chemiczny w skali atomowej stanowią nową metodę doświadczalną, której udział w badaniach naukowych dramatycznie rośnie.

W ramach wnioskowanego projektu planuje się zbadanie wpływu rodzaju centrum aktywnego w zeolicie na jego aktywność i selektywność oraz wpływu aranżacji porów jednego typu na specjację centrów aktywnych i ich dostęp dla cząsteczek reagentów. Istotne będzie rozstrzygnięcie wpływu aranżacji systemu kanałów na dyfuzję cząsteczki reagenta i na rodzaj powstałego kompleksu chemisorpcyjnego. Zostanie zweryfikowana przydatność metod obliczeniowych sprzężonych z metodami doświadczalnymi w pełni ilościowych metodach badania procesów fizykochemicznych w ujęciu wieloskalowym. Zostanie zbadane rozmieszczenie i rodzaj centrów kwasowych, jakie przewidują metody chemii kwantowej.

Wyniki badań będą materiałem bazowym dla prac doktorskich, których promotorami będą członkowie Zespołu, w którym realizowany będzie niniejszy projekt.