

OPIS POPULARNO-NAUKOWY

Zanieczyszczenia środowiska, a w szczególności zanieczyszczenia atmosfery stanowią jeden z głównych szkodliwych aspektów ubocznych rozwoju współczesnej cywilizacji. Zanieczyszczenia te można usuwać poprzez zastosowanie odpowiednich procesów katalitycznych takich jak utlenienie bądź rozkład (redukcja), z wykorzystaniem różnorodnych katalizatorów redoksowych, czyli układów chemicznych pozwalających na prowadzenie pożądanej reakcji w sposób cykliczny, bez zmiany składu i struktury samego katalizatora. Należy podkreślić, że skuteczność katalitycznego działania uzależniona jest od wielu czynników, których pełne poznanie ze względu na komplikowanie heterogenicznego układu - katalizator-reagenty- wymaga przeprowadzenia szeroko zakrojonych i pogłębionych badań zarówno eksperymentalnych jak i teoretycznych. W ostatnim okresie szczególnym zainteresowaniem cieszą się katalizatory oparte na nanometrycznych tlenkach metali przejściowych, ze względu na ich dużą reaktywność oraz stosunkowo niewielkie koszty.

Ogólnym celem poznawczym niniejszego projektu jest opracowanie racjonalnych podstaw dla regulacji właściwości redoksowych modelowych tlenków metali przejściowych w celu kontroli przebiegu reakcji katalitycznych z udziałem małych cząsteczek reagentów, związanych z zrywaniem i tworzeniem wiązań O–O, N–O, C–O, C–H, O–H i N–N. Procesy te związane są z ważnymi dla ochrony środowiska reakcjami spalania metanu, całkowitego i selektywnego utleniania tlenku węgla oraz rozkładu tlenków azotu (N_2O i NO_x). Gazy te wykazują szkodliwe działanie oraz wnoszą istotny wkład w efekt cieplarniany. W ramach projektu sprawdzona zostanie możliwość ustalenia głównych czynników wpływających na właściwości redoksove katalizatorów tlenkowych w relacji do ich struktury i właściwości elektronowych, które można racjonalnie kształtować poprzez odpowiednie domieszkowanie i kontrolę kształtu nanoziaren katalizatora.

W ramach projektu zadane będą trzy grupy katalizatorów tlenkowych o narastającym stopniu skomplikowania. W pierwszym etapie, przedmiotem badań będzie modelowy układ Co_3O_4 o kontrolowanym sześciennym i ośmiościennym kształcie ziaren, którego właściwości redoksove będą regulowane za pomocą domieszkowania jonami litu i boru. W drugą grupę katalizatorów stanowić będą mieszane spinele metali przejściowych zawierające podwójne pary redoksove, których optymalizacja pozwoli na dostosowanie ich potencjału redoks do danej reakcji katalitycznej. Heterozłącza składające się z dwóch rodzajów tlenków redoksowych połączonych spójną granicą międzyziarnową to strukturalnie najbardziej złożone układy, które pozwolą na określenie potencjalnych synergicznych efektów związanych z wpływem naprężeń międzyfazowych i segregacji ładunku wzdłuż granicy na aktywność katalityczną. Końcowym etapem projektu będzie przeprowadzenie szeroko zakrojonych testów katalitycznych na wyselekcjonowanych katalizatorach o najwyższej aktywności i najlepszych parametrach użytkowych w reakcjach spalania metanu, utleniania i selektywnego utleniania tlenku węgla, rozkładu N_2O w obecności typowych zanieczyszczeń oraz w reakcji redukcji tlenków azotu.

Aby zrealizować wyznaczone cele, konieczne jest wykonanie złożonych interdyscyplinarnych badań łączących syntezę nanomateriałów katalitycznych, ich dokładną charakterystykę fizykochemiczną z wykorzystaniem szerokiej gamy metod spektroskopowych, mikroskopowych, pomiarów właściwości fizycznych oraz testów reaktywności chemicznej. Badania eksperymentalne będą wspomagane modelowaniem teoretycznym struktury wybranych katalizatorów, ich oddziaływania z reagentami oraz modelowaniem mechanizmu i przebiegu katalizowanych reakcji. Proponowany projekt dostarczy nie tylko podstawowej wiedzy do projektowania nowych katalizatorów, ale również w szerszej perspektywie stwarza przesłanki do praktycznego wytwarzania tlenkowych katalizatorów o polepszonych właściwościach, opartych na łatwo dostępnych składnikach.