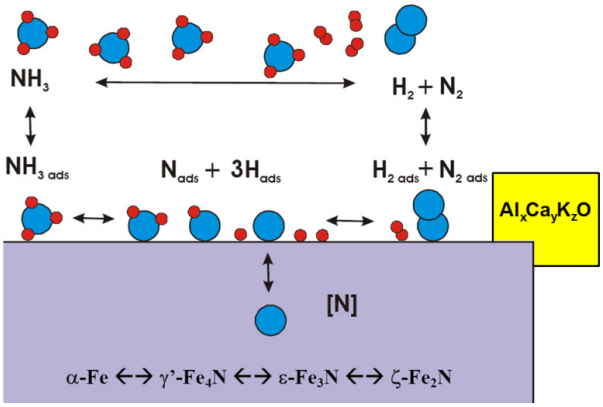
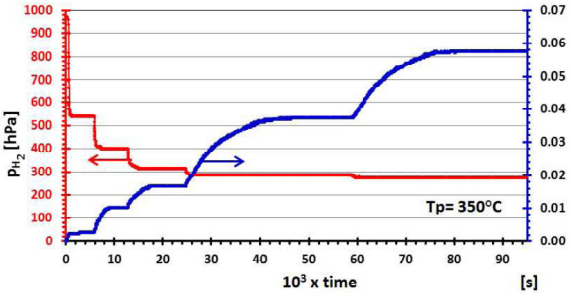
Badania układu żelazo/amoniak/wodór są o tyle istotne, że procesy przemysłowe oparte na procesach w nich zachodzących, tj. katalityczna synteza amoniaku i proces azotowania (modyfikacja utwardzająca) powierzchni metali są realizowane w przemyśle od ok. 100lat, a wciąż trwają badania i dyskusje na temat jego funkcjonowania.

Katalizator żelazowy składa się z nanokrystalicznego żelaza, którego powierzchnia pokryta jest tlenkami promotorów (głównie Al_2O_3, CaO, K_2O) i w warunkach procesów technologicznych znajduje się w stanie równowagi chemicznej. Układ NC-Fe/NH_3/H_2 jest wykorzystywany jako układ modelowy do badania zjawisk powierzchniowych w reakcjach pomiędzy nanokrystalicznym ciałem stałym a fazą gazową. W 2007r. Profesor G. Ertl otrzymał Nagrodę Nobla z chemii „za badania procesów chemicznych zachodzących na powierzchni ciał stałych", które oparł na mechanizmie katalitycznej syntezy amoniaku na powierzchni żelaza. W swoich rozważaniach nie uwzględnił możliwości istnienia stanów równowagowych.

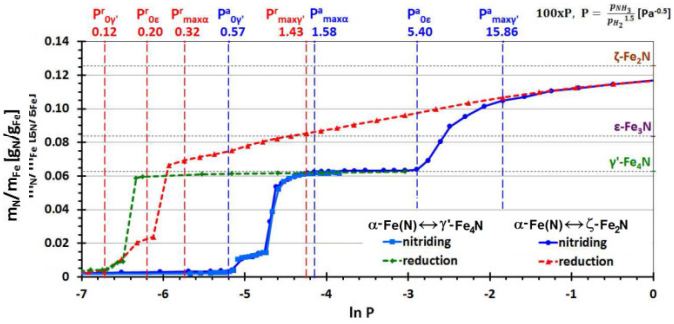


Rys. 1. Procesy zachodzące w układzie NC-Fe/NH_3/H_2

W trakcie procesu chemicznego z udziałem nanokrystalicznego żelaza z atmosferą amoniakalno-wodorową ustalają się: (1) stany stacjonarne (Rys.2), w których stopień przereagowania substancji nanokrystalicznej zależy od temperatury i potencjału chemicznego fazy gazowej; oraz (2) stany równowagi chemicznej pomiędzy fazą gazową a ciałem stałym, na powierzchni zachodzi jedynie katalityczny rozkład amoniaku. W stanach stacjonarnych w układzie dwufazowym zaobserwowano występowanie zjawiska histerezy (Rys.3) dla procesów chemicznych azotowania nanokrystalicznego żelaza i redukcji azotków. Dotychczas zjawisko histerezy wiązane było ze zjawiskami fizycznymi. Z naszych dotychczasowych badań wynika, że struktura nanokrystalicznego żelaza dotowanego trudno redukowalnymi tlenkami metali jest efektem ustalania się stanu równowagi.



Rys. 2. Zmiany stopnia zaazotowania żelaza (niebieska linia) i stężenia wodoru (czerwona) w czasie azotowania.



Rys. 3. Zależność stopnia zaazotowania żelaza od potencjału azotującego - HISTEREZA

Celem tego projektu jest poznanie kinetyki i termodynamiki katalitycznego rozkładu amoniaku i rekrystalizacji NC-Fe zachodzących równolegle z procesem azotowania w układzie NC-Fe/NH_3/H_2. Prace badawcze podjęte w niniejszym projekcie pozwolą określić zależności termodynamiczne właściwości fizykochemicznych, magnetycznych i elektrycznych nanomateriałów od potencjału chemicznego fazy gazowej, z którą one reagują w stanach równowagowych lub bliskich równowagi.

Aktualnie korelacje pomiędzy właściwościami nanomateriałów a parametrami dotyczącymi procesu ich otrzymywania (temperatura, prężność itd.) określa się w sposób eksperymentalny, metodą prób i błędów. Brak wiedzy w obszarze termodynamiki nanomateriałów uniemożliwia świadome prowadzenie syntezy tych materiałów w sposób kontrolowany. Poznanie podstaw termodynamicznych procesów z udziałem nanomateriałów umożliwi projektowanie technologii otrzymywania (kontrola i sterowanie procesem syntezy) materiałów nanokrystalicznych o pożądanych, wcześniej zaprojektowanych właściwościach.