

Celem badań prowadzonych w ramach niniejszego projektu jest opracowanie nowych materiałów w postaci efektywnych katalizatorów (SILP) opartych na nanostrukturach węglowych i nośnikach tlenkowych dedykowanych dla czystych technologii chemicznych. Otrzymane materiały zostaną wykorzystane jako katalizatory w procesach otrzymywania związków z grupy fine chemicals w reaktorze przepływowym.

Badania będą obejmowały następujące etapy: otrzymywanie katalizatorów, ich charakterystykę oraz badania właściwości katalitycznych z wykorzystaniem reaktora przepływowego w wybranych procesach chemicznych, takich jak: reakcja Dielsa-Aldera oraz estryfikacja laktonu α -Angelica. Ze względu na szerokie zastosowania produktów tych reakcji, czyli estrów kwasu lewulinowego oraz adduktów Dielsa-Aldera jako rozpuszczalników, dodatków do paliw, monomerów, czy farmaceutyków, wydajne metody ich otrzymywania są bardzo poszukiwane. Podstawową zaletą katalizatorów heterogenicznych, czyli takich, które tworzą odrębną fazę, najczęściej stałą, w układzie reakcyjnym jest prosty sposób ich wydzielania i zwracania do reakcji. Kataliza heterogeniczna, choć znana od ponad wieku, jest ciągle udoskonalana i odgrywa kluczową rolę w rozwiązywaniu obecnych problemów w technologii chemicznej. Dzięki rozwojowi inżynierii materiałowej dostępne są nowoczesne, stałe nośniki katalizatorów posiadające wysoce rozwiniętą powierzchnię.

W ramach projektu będą realizowane zagadnienia związane z projektowaniem nowych heterogenicznych katalizatorów, czyli optymalizacją - wzajemnym wyważeniem jego właściwości katalitycznych oraz mechanicznych czy fizykochemicznych. Poprzez odpowiedni wybór składników katalizatora, czyli fazy aktywnej oraz nośnika można wpływać na jego aktywność, selektywność oraz stabilność pracy. Istotne jest również zapewnienie dobrego dostępu reagentów do fazy aktywnej, czyli jego powierzchnia właściwa. Innym ważnym zagadnieniem jest sposób osadzania fazy aktywnej na nośniku, czyli mechanizm immobilizacji.

Jako nośniki katalizatorów zastosowane zostaną nanostruktury węglowe oraz nośniki tlenkowe. Nanostruktury węglowe zrewolucjonizowały dziedzinę nanotechnologii, znajdując zastosowania w elektronice, optyce, mechatronice i jako elementy konstrukcyjne. Specyficzne właściwości nanostruktur węglowych, takie jak duża powierzchnia właściwa, inercyjność chemiczna, stosunkowo wysoka odporność na procesy utleniania, możliwość różnorodnej modyfikacji powierzchni sprawiają, że są one obiecującym nośnikiem w katalizie heterogenicznej. Nośniki tlenkowe SiO_2 , Al_2O_3 czy ich mieszanki $\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$ lub $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ są materiałami tanimi w produkcji, charakteryzują się dużą porowatością i wysoce rozwiniętą powierzchnią właściwą, dodatkowo posiadają wysoka odporność mechaniczną. Nośniki modyfikowane będą poprzez osadzanie na ich powierzchni grup aktywnych, posiadających zdolności katalityczne, w postaci kwaśnych lub cukrowych cieczy jonowych (ILs) oraz enzymów. Osadzanie będzie się odbywać poprzez adsorpcję fazy aktywnej (ILs) lub poprzez przywiązanie jej do nośnika za pomocą wiązania chemicznego. To drugie rozwiązanie jest bardziej efektywne i uniemożliwia wymywanie fazy aktywnej w trakcie procesu, wydzielania i zwrótu katalizatora. Połączenie dużego potencjału katalitycznego cieczy jonowych oraz enzymów z doskonałymi właściwościami nośnika prowadzi do otrzymania materiałów hybrydowych o innowacyjnych właściwościach.

Jako nanostruktury węglowe zastosowane będą niemodyfikowane i modyfikowane powierzchniowo jedno- i wielościennie nanorurki węglowe, natomiast jako nośniki tlenkowe w głównej mierze będą stosowane różne układy mieszane tj. $\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$ lub $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ oraz porównawczo SiO_2 , Al_2O_3 , ZrO_2 . Warto podkreślić, że wykorzystanie materiałów hybrydowych (SILP) jako katalizatorów w reaktorach przepływowych w fazie ciekłej zostało dotychczas opisane w niewielu pracach. Jednocześnie brak w nich porównania wpływu struktury nośnika na zdolność modyfikacji i stabilności katalizatora.

Przeprowadzone zostaną badania nad doбором korzystnych warunków prowadzenia procesów, takich jak temperatura, stężenie reagentów, ilość katalizatora czy dobór rozpuszczalnika. Dodatkowo w ramach badań przeprowadzona zostanie analiza rodzaju nośnika i jego morfologii na immobilizację fazy aktywnej i stabilność katalizatora.

Podsumowując, można stwierdzić, że poszukiwania nowych wysoce efektywnych, a jednocześnie nietoksycznych, przyjaznych dla środowiska katalizatorów są obecnie obiektem wielu badań. Proponowany projekt zakłada wykorzystanie nowych, słabo jeszcze poznanych heterogenicznych katalizatorów opartych na materiałach hybrydowych zbudowanych z połączenia nanostruktur węglowych czy mieszanych nośników tlenkowych oraz cieczy jonowych i enzymów w wybranych procesach chemicznych.