

Każdy proces w otaczającym nas świecie zachodzi w indywidualnej dla siebie skali czasowej. Znane są procesy trwające jedynie ułamki sekund oraz takie, których czas trwania można liczyć w dekadach a nawet wiekach. Mimo że czas trwania danej reakcji wydaje się być jej ściśle zdefiniowanym parametrem to jednak nie jest on inwariantny. Istnieje bowiem szeroka gama substancji, które znacząco wpływają na skrócenie czasu trwania wielu reakcji chemicznych, procesów biologicznych, a przede wszystkim *procesów przemysłowych*. *Katalizatory*, bo o nich mowa, wpływają znacząco na skrócenie czasu trwania procesu; i tak, te, naturalnie biegnące na przestrzeni wielu lat mogą zakończyć się w przeciągu kilku minut. Zjawisko *katalizy*, po raz pierwszy opisane w roku 1836, stanowi obecnie podstawę jednej z najprężniej rozwijających się dziedzin nauki. Praktyczne znaczenie katalizatorów ilustruje, z kolei fakt, iż około 90% produktów przemysłu chemicznego otrzymywanych jest na drodze procesów katalitycznych (głównie katalizy heterogenicznej). Poszukiwanie nowych katalizatorów oraz dokładny opis tych już rozpoznanych stanowi wyzwanie dla ogromnej rzeszy naukowców. Szczególnie dużym zainteresowaniem cieszą się katalizatory bazujące na porowatych materiałach krystalicznych, takie jak *zeolity* czy *tlenki metali*. Materiał pretendujący do miana efektywnego katalizatora musi posiadać w swojej strukturze liczne *centra aktywne*, czyli miejsca bezpośredniego kontaktu katalizatora z reagentami danego procesu. Ogromną wagę przywiązuje się również do tego, aby katalizator był *selektywny*, (tj. umożliwiający otrzymanie jak największej ilości spodziewanego produktu reakcji), trwały, oraz możliwie tani.

Projektowanie nowych katalizatorów nie jest możliwe bez wnikliwego scharakteryzowania zarówno katalizatorów obecnie stosowanych, jak i materiałów dopiero pretendujących do tego miana. Aktywność katalityczna, czyli miara umożliwiająca ilościowe określenie tego jak katalizator przyspiesza reakcję lub proces, nierozzerwalnie związana jest z jego centrami aktywnymi. Dlatego, uzyskanie ich pełnej charakterystyki od wielu lat stanowi obszar badań naukowców. Chociaż jakościowy opis centrów aktywnych, pozwalający na określenie ich rodzaju, jest niezbędny w zrozumieniu procesu katalitycznego to jednak jest niewystarczający. Dopiero połączenie tej informacji z ilościowym obrazem centrów pozwala w pełni zilustrować dany proces. Realizatorzy Projektu planują również wyjść na przeciw wyzwaniu, jakim jest prowadzenie badań w rzeczywistych "warunkach pracy" aktywnego katalizatora, z zastosowaniem cząsteczek reagentów typowych procesów katalitycznych, czyli w tzw. trybie *operando*. Podejście takie nie tylko dopełni obraz właściwości centrów, ale także umożliwi monitorowanie zmian jakie zachodzą w stężeniach tak centrów aktywnych, jak i poszczególnych indywidualów reakcji chemicznej powstających w jej trakcie.

Spektroskopie IR oraz UV-Vis są potężnymi narzędziami umożliwiającym przeprowadzenie, nie tylko jakościowej, ale także ilościowej analizy właściwości centrów aktywnych. Rejestracja widm katalizatorów jest jednak bezużyteczna, jeśli na ich powierzchni nie zostaną związane cząsteczki reagentów. W ramach realizacji projektu zaproponowano nowatorskie podejście wykorzystania rejestracji widma w całym zakresie IR-Vis-UV w ramach tego samego momentu reakcji katalitycznej. Pomiar zostanie przeprowadzony w trybie czasowo-rozdzielczym (rapid scan) umożliwiającym rejestrację widma w czasie 0.1-1 s. Skorelowanie tych dwóch technik rejestracji widm w warunkach pracy katalizatora (warunki *operando*) z pomiarem aktywności i selektywności katalizatora (analiza chromatograficzna GC oraz spektrometria mas) umożliwi określenie nie tylko globalnej specyfiki centrów aktywnych katalizatora, ale także pozwoli zobrazować faktyczny przebieg reakcji, która zazwyczaj trwa tylko ułamki sekund! Badania te zostaną wsparte analizą korelacyjną a otrzymane widma 2D pozwolą nam wnioskować o kolejności w zdarzeń w katalitycznym nanoświecie. Badania te mają unikalny charakter. Jak dotąd istnieje tylko kilka doniesień literaturowych dotyczących wykorzystania spektroskopii 2D COS IR do badań procesów katalitycznych. Jak dotąd nikt nie zaproponował rozwinięcia tej metodologii w kierunku wykorzystania zakresu promieniowania od ultrafioletu do podczerwieni do badań jakichkolwiek zjawisk mających miejsce na powierzchni nanoziarna zeolitu. Badanymi przez nas procesami będą reakcje utleniania w wykorzystaniem atomowego tlenu powstałego w wyniku rozkładu cząsteczek N_2O lub O_2 . Oprócz aspektu ekonomicznego badane procesy są ważne dla środowiska. Przy ich efektywnym wykorzystaniu jesteśmy w stanie kontrolować emisję do atmosfery szkodliwych tlenków azotu oraz lotnych związków organicznych.

Idea niniejszego Projektu zrodziła się z chęci rozwinięcia metodologii badań ilościowych centrów aktywnych. Spełnienie podstawowego zadania Projektu, jakim jest opracowanie stosunkowo prostego i efektywnego narzędzia umożliwiającego przeprowadzanie charakterystyki ilościowej centrów w całym zakresie widmowym UV-Vis-IR pozwoli w pełni zrozumieć mechanizmy wielu procesów katalitycznych. Co więcej, otworzy furtkę, dzięki której możliwe stanie się projektowanie nie tylko tanich i efektywnych katalizatorów, ale przede wszystkim, katalizatorów dedykowanych do konkretnych procesów.