

**Karolina Tarach** *Odmotać wyniki badań spektroskopowych dla heterogenicznych układów katalitycznych*

Spektroskopowy obraz reakcji katalitycznej w układach heterogenicznych jest niezwykle skomplikowany gdyż stanowi złożenie wielu widm pochodzących od bardzo dużej liczby reagentów uczestniczących w tym procesie. W każdym z takich procesów znaleźć można zarówno reagenty aktywnie uczestniczące w biegu reakcji jak i te jedynie towarzyszące jej, nie wpływające na selektywność procesu. Aby możliwa była ich obserwacja konieczne jest prowadzenie reakcji w warunkach laboratoryjnych w sposób jak najbardziej zbliżony do tego jak realnie przebiega ona w przemyśle. Warunki te określa się mianem „operando”. W celu najlepszej identyfikacji procesów zachodzących w czasie reakcji stosuje się równocześnie wiele technik charakterystyki powierzchni katalizatora, na której zachodzi reakcja, jak i produktów reakcji opuszczających ją. Jednak aby z całą pewnością stwierdzić, które z reagentów są tymi aktywnymi a które jedynie towarzyszącymi pomiary „operando” nie są wystarczające. Jedynie odpowiednie modulowanie układu reakcyjnego, np. poprzez zmianę stężenia jednego z reagentów (ang. Modulation Excitation Spectroscopy, MES), i równoczesne badanie stężenia wszystkich innych reagentów umożliwia wykrycie tych, które w rzeczywistości są aktywne a nie jedynie towarzyszą reakcji. Wyniki zebrane z wielu takich eksperymentów a następnie matematycznie przekształcone (ang. Phase Sensitive Detection, PSD, oraz Multivariate Curve Resolution by Alternating Least Squares, MCR-ALS) pozwolą na identyfikację aktywnych reagentów reakcji katalitycznej. To z kolei pozwoli na lepsze zaprojektowanie katalizatora tak aby wykazywał wyższą aktywność i selektywność. Dobrym wyborem z dostępnych metod badawczych jest spektroskopia w podczerni, gdyż umożliwia prowadzenie pomiarów w skali czasowej zjawisk, które chcemy obserwować. Głównym celem projektu jest opracowanie zestawu narzędzi, który pozwoli nam rozplątać skomplikowany obraz spektroskopowy układu katalitycznego oraz rozróżnić ważne aktywne reagenty od tych jedynie towarzyszących reakcji.

