

Zaawansowane materiały żelazowe 3DOM do uwodornienia CO₂: wykorzystanie badań *in situ* stanów powierzchniowych alkaliów i ewolucji faz żelazowych do kontrolowanej aktywacji katalizatora

Przekształcanie dwutlenku węgla (CO₂), jednego z głównych czynników powodujących globalne ocieplenie, w wartościowe produkty, takie jak materiały do magazynowania energii (paliwa) i surowce chemiczne (np. niższe olefiny), stanowi praktyczną alternatywę dla jego długoterminowego składowania. Tę przemianę można zrealizować za pomocą katalitycznego uwodornienia – procesu, w którym dwutlenek węgla wychwycony z emisji przemysłowych łączy się z wodorem pozyskiwanym z odnawialnych źródeł energii. Podejście to nie tylko ogranicza emisje szkodliwych gazów, ale również wpisuje się w zasady gospodarki o obiegu zamkniętym, przekształcając odpady w cenne zasoby.

Katalityczna konwersja CO₂ do wysoko wartościowych węglowodorów wymaga katalizatora, a najaktywniejsze układy zawierają związki żelaza w połączeniu z sodem lub potasem. Różne kombinacje żelaza i pierwiastków alkalicznych umożliwiają konwersję CO₂ (aktywność) i kierują reakcję w stronę pożądaných produktów (selektywność). Wydajność katalizatora, czyli jego aktywność i selektywność, silnie zależy od ilości, rozmieszczenia i chemicznej formy składników alkalicznych, które modyfikują właściwości kwasowo-zasadowe i elektronowe katalizatora. Zrozumienie, w jaki sposób alkalia i żelazo oddziałują ze sobą i jakie warunki są potrzebne do utworzenia fazy aktywnej, ma kluczowe znaczenie dla optymalizacji wydajności procesu uwodornienia. Ponadto, redystrybucja i specjacja pierwiastków alkalicznych na powierzchni katalizatora w warunkach reakcji mają kluczowe znaczenie, istotnie wpływając na jego efektywność. Co istotne, dyspersja składników katalizatora jak i ich redystrybucja w warunkach procesu silnie zależą od jego mikrostruktury.

W niniejszym projekcie wprowadzamy nowatorskie zastosowanie trójwymiarowych uporządkowanych struktur makroporowatych (3DOM), w celu poprawy dyspersji i stabilności faz żelazowych i alkaliów. Tego rodzaju struktury zapewniają lepsze właściwości katalizatorów poprzez utrzymanie optymalnego stanu powierzchniowego alkaliów, zapewniającego przemianę faz żelazowych podczas procesu uwodornienia w kierunku faz o najwyższej aktywności.

Naszym celem jest identyfikacja kluczowych czynników wpływających na stabilność i dyspersję alkaliów, które decydują o selektywności katalizatorów żelazowych o strukturze 3DOM w procesie uwodornienia CO₂. Uzyskanie szczegółowego zrozumienia ewolucji stanów powierzchni alkaliów oraz przemian faz żelaza w obecności CO₂ i wodoru umożliwi opracowanie innowacyjnych katalizatorów o kontrolowanej selektywności do pożądaných produktów. Wiedza ta zostanie zdobyta dzięki zaawansowanym badaniom *in situ*, w tym analizom stanów powierzchni i badaniom dyfrakcji rentgenowskiej. Dodatkowo zrozumienie wpływu mikrostruktury katalizatora na redystrybucję alkaliów i zachowanie faz żelaza znajdzie szersze zastosowanie, obejmując inne katalityczne procesy uwodornienia, w których alkalia odgrywają kluczową rolę w wydajności katalizatora.

Podsumowując, fundamentalne wnioski płynące z tych badań ugotują drogę do projektowania bardziej efektywnych, zrównoważonych i przyjaznych środowisku procesów chemicznych. Postęp ten może znacząco przyczynić się do stworzenia czystszej i zdrowszej przyszłości.