

Tytuł polski: SolarMethaChem: Procesy wywoływane światłem słonecznym dla fotochemicznej konwersji metanu

Tytuł angielski: SolarMethaChem: Solar Light-Driven Processes for Methane Photochemical Conversion

Kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska - Żbik

Numer projektu: 2019/01/Y/ST4/00024

Bezpośrednia przemiana metanu w paliwa i związki chemiczne o znaczeniu przemysłowym przez długi czas uważana była za „Święty Graal” chemii. U źródeł niskiej reaktywności CH₄ leży wysoka energia wiązania C-H (434 kJ mol⁻¹), brak grup funkcyjnych i brak polarności. Przeróbka chemiczna metanu z reguły wymaga wysokich temperatur i wysokiego ciśnienia. Warunki te skutkują ogromnym zużyciem energii, istotną emisją CO₂, powstawaniem licznych produktów ubocznych i szybką dezaktywacją katalizatora. Światło słoneczne stanowi idealne alternatywne źródło energii i jest stosowane w fotokatalizie do sterowania reakcjami chemicznymi. Celami projektu SolarMethaChem są i) nanoinżynieria nowych wydajnych materiałów do utleniającego sprzęgania metanu pod wpływem światła, ii) identyfikacja mechanizmów reakcji sprzęgania metanu oraz iii) optymalizacja reaktora fotochemicznego i warunków jego pracy. Głównym przedmiotem badań jest reakcja fotochemicznej konwersji metanu na katalizatorach trójskładnikowych: metal – heteropolikwas – półprzewodnik, gdzie jako metale proponowane są Zn, Pd, Ag, Cu, Co, V, Fe, jako heteropolikwas H₃PW₁₂O₄₀, a jako półprzewodnik TiO₂, ZnO lub BiVO₄. Projekt realizują trzy grupy badawcze pracujące we Francji (Partner 1, CNRS-UCCS), Finlandii (Partner 2, Uniwersytet w Helsinkach) i Polsce (Partner 3, Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN). Realizacja projektu możliwa jest dzięki połączeniu umiejętności w zakresie zaawansowanej charakterystyki fizykochemicznej otrzymywanych układów katalitycznych, modelowania teoretycznego oraz metod inżynierii materiałowej. Polski partner projektu odpowiedzialny jest za badania teoretyczne metodami Teorii Funkcjonałów Gęstości, które obejmują: i) charakterystykę struktury geometrycznej i elektronowej komponentów badanych katalizatorów (nanocząstki metali, sole heteropolikwasów, najbardziej aktywne powierzchnie półprzewodników); ii) charakterystykę struktury geometrycznej i elektronowej układów heteropolikwas – półprzewodnik; iii) charakterystykę struktury geometrycznej i elektronowej układów metal – heteropolikwas – półprzewodnik; iv) określenie mechanizmu reakcji sprzęgania metanu do etanu.