



# Zbadanie zależności termodynamicznych nanomateriałów przy zastosowaniu metody Potencjałem Chemicznym Programowanej Reakcji

Projekt 2017/27/B/ST8/02970

**Tytuł:** Zbadanie zależności termodynamicznych nanomateriałów przy zastosowaniu metody Potencjałem Chemicznym Programowanej Reakcji

**Kierownik:** dr hab. inż. Rafał Pelka prof. ZUT.

**Typ projektu:** projekt badawczy w ramach konkursu OPUS 14 organizowanego przez NCN

**Numer:** 2017/27/B/ST8/02970

**Lata realizacji:** 2018 – 2022

**Informacje o projekcie:**

## POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Wiele dziedzin życia w końcu XX. i początku XXI. wieku zostało zdominowanych przez zagadnienia związane z nanomateriałami. Nanomateriały są to substancje, których rozmiar w przynajmniej jednym kierunku jest mniejszy niż 100 nm. Właściwości nanomateriałów znacząco różnią się od właściwości substancji grubokrystalicznych, identycznych pod względem chemicznym. Zaobserwowano także różnice w kinetyce i termodynamice procesów z udziałem nanomateriałów. Nanomateriały stosowane są już od setek lat, np. jako pigmenty, a w ostatnich dziesięcioleciach np. jako katalizatory metaliczne, lecz dopiero dzięki nowoczesnym technikom pomiarowym możliwe stało się badanie tak niewielkich struktur. Stwierdzono, że właściwości fizykochemiczne nanomateriałów zależą od wielkości kryształitów, przy czym nanomateriały to najczęściej substancje polikrystaliczne o szerokim rozkładzie wielkości kryształitów. Zainteresowanie nanomateriałami i ich właściwościami nieustannie wzrasta. W efekcie obserwuje się, szczególnie w ostatnich latach, coraz intensywniejszy rozwój nanotechnologii. Wytwarzaniem nanomateriałów oraz badaniem ich właściwości elektrycznych, magnetycznych, mechanicznych i innych zajmują się zespoły badawcze w większości państw wysokorozwiniętych.

Według aktualnego stanu wiedzy, korelacje pomiędzy właściwościami nanomateriałów a parametrami dotyczącymi procesu ich otrzymywania (temperatura, prężność itd.) określa się w sposób eksperymentalny. Oznacza to, że obecnie synteza nanomateriałów jest prowadzona w sposób empiryczny, metodą prób i błędów, co pochłania znaczne nakłady finansowe. Brak wiedzy w obszarze termodynamiki nanomateriałów uniemożliwia świadome prowadzenie syntezy tych

materiałów w sposób kontrolowany. Poznanie podstaw termodynamicznych procesów z udziałem nanomateriałów umożliwi projektowanie technologii otrzymywania (kontrola i sterowanie procesem syntezy) materiałów nanokrystalicznych o pożądanych, wcześniej zaprojektowanych właściwościach.

Katalizator żelazowy syntezy amoniaku został zastosowany w produkcji ok. 100 lat temu. Znacznie później ustalono, że jego aktywność w procesie syntezy amoniaku jest efektem jego nanokrystalicznej budowy. Katalizator żelazowy, czyli nanokrystaliczne żelazo, którego powierzchnia pokryta jest tlenkami promotorów (głównie  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ) jest wykorzystywany jako struktura modelowa do badania zjawisk powierzchniowych w reakcjach pomiędzy ciałem stałym a fazą gazową. Bezustannie trwają badania i dyskusje na temat jego funkcjonowania.

Prace nad otrzymywaniem i właściwościami nanokrystalicznego żelaza prowadzone są w Katedrze Technologii Chemicznej Nieorganicznej i Inżynierii Środowiska ZUT w Szczecinie już od kilkunastu lat. Opracowano metodę otrzymywania nanokrystalicznego żelaza promowanego tlenkami glinu, wapnia i potasu. Prowadzono badania zjawisk zachodzących na powierzchni nanokrystalicznego żelaza, dotyczące: syntezy i rozkładu amoniaku, a także procesów azotowania, nawęglania i utleniania. Ponadto, opracowano metodę umożliwiającą wyodrębnienie, z polikrystalicznego nanomateriału, materiału o określonych i pożądanych wielkościach nanokrystalitów.

W trakcie procesu chemicznego z udziałem nanokrystalicznego żelaza i mieszaniny  $\text{NH}_3/\text{H}_2$  ustalają się: (1) stany stacjonarne, w których skład fazy gazowej i stałej nie zmienia się w czasie, a stopień przereagowania ( $\alpha$ ) substancji nanokrystalicznej jest funkcją temperatury i potencjału chemicznego ( $P$ ) fazy gazowej; oraz (2) stany równowagi chemicznej pomiędzy fazą gazową a ciałem stałym. W stanach stacjonarnych w układzie dwufazowym zaobserwowano występowanie zjawiska histerezy (dla zależności  $\alpha=f(P)$ ) dla procesów chemicznych azotowania nanokrystalicznego żelaza i redukcji azotków żelaza (dotąd zjawisko histerezy wiązane było ze zjawiskami fizycznymi).

Prace badawcze podjęte w niniejszym projekcie pozwolą określić zależności termodynamiczne właściwości fizykochemicznych nanomateriałów (nanokrystalicznego Fe, Ni, Co promowanego  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CaO}$ ,  $\text{K}_2\text{O}$ ) od potencjału nawęglającego fazy gazowej, z którą one reagują w stanach równowagowych lub bliskich równowagi przy zastosowaniu metody Programowanej Potencjałem Chemicznym Reakcji.