

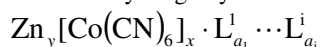
SEMINARIUM RENTGENOWSKIE

Dnia 9 maja 2013r. o godz. 12.00, w sali 203 Instytutu Fizyki PAN, odbędzie się seminarium rtg. na którym **dr inż. Arkadiusz Chruściel** z MEXEO Kędzierzyn-Koźle, Konsorcjum Naukowe ADVANCE DMC, oraz **dr inż. Zygmunt Flisak** Uniwersytet Opolski, Opole, Konsorcjum Naukowe ADVANCE DMC, wygłoszą referat p.t.:

„BADANIA NAD STRUKTURALNYMI UWARUNKOWANIAMII AKTYWNOŚCI KATALIZATORÓW DIMETALOCYJANKOWYCH”

Streszczenie:

Przedmiotem referowanych prac badawczych są właściwości strukturalne katalizatorów dimetalocyjankowych (DMC), będących bertolidami o składzie definiowanym ogólnym wzorem sumarycznym:



gdzie $\text{L}_{a_1}^1 \cdots \text{L}_{a_i}^i$ to wybrane ligandy organiczne i nieorganiczne zaś liczby x i y zależą od ilości i ładunku elektrycznego ligandów.

Katalizatory DMC znajdują stosowane w przemysłowych procesach syntezy polieteroli stanowiących główny półprodukt w wielu gałęziach szeroko rozumianej technologii polimerów.

Jakkolwiek katalizatory typu DMC wykorzystywane są z powodzeniem od kilku dekad, dostępna wiedza dotycząca natury właściwości katalitycznych tej grupy związków, w szczególności ich bardzo wysokiej aktywności i znacznej selektywności, ogranicza się do kilku niepotwierdzonych na drodze eksperymentalnej hipotez o podłożu czysto fenomenologicznym opartych na przesłankach ogólnochemicznych.

Celem opisywanych prac badawczych realizowanych ze wsparciem środków pozyskanego grantu NCBiR^{*)} jest znalezienie uzasadnienia mechanizmu właściwości katalitycznych wspomnianej grupy katalizatorów w oparciu o właściwości struktury molekularnej tych związków.

Program badań obejmuje prace w obszarze eksperymentalnym oraz teoretycznym z wykorzystaniem kwantowo-mechanicznych metod modelowania molekularnego.

Badania eksperymentalne zrealizowane w ramach wstępnego etapu projektu przeprowadzono z wykorzystaniem metod spektroskopii promieniowania rentgenowskiego (XANES, EXAFS, XRD), elektronowej mikroskopii skaningowej (SEM) oraz analizy termicznej (TG-DSC, EGA-FTIR) i spektrofotometrii FTIR. Komplementarna analiza i interpretacja wyników uzyskanych za pomocą powyższych technik analitycznych pozwoliła na ustalenie znamienych, nie publikowanych dotąd faktów eksperymentalnych dotyczących właściwości strukturalnych katalizatorów DMC decydujących o ich aktywności katalitycznych oraz sformułowanie istotnych hipotez roboczych, pozwalających na ukierunkowanie dalszych prac badawczych w obszarze doświadczalnym projektu.

Wstępny etap badań teoretycznych w zakresie modelowania molekularnego prowadzonych z wykorzystaniem metod funkcjonału gęstości, dotyczył trzech zagadnień istotnych z punktu widzenia otrzymywania i aktywacji katalizatora DMC. Zbadano entalpie tworzenia kompleksów cyjankowych i izocyjankowych kobaltu i cynku oraz wpływ struktury elektronowej anionu cyjankowego na uzyskane wyniki. Określono również profile energetyczne wymiany cząsteczki wody związanej koordynacyjnie z kationem cynku na cząsteczkę metanolu. Ponadto zaproponowano strukturę centrów aktywnych katalizatora DMC.

^{*)} Projekt INNOTECH K2/IN2/21/181982/NCBR/12 (K-DMC) *Opracowanie technologii produkcji dimetalocyjankowego katalizatora poliaddycji homologów oksiranu*