

W ramach niniejszej rozprawy doktorskiej zaprojektowano katalizatory zeolitowe dla selektywnych procesów konwersji biomasy do kwasu mlekowego i akrylowego. Badania wykonano dualnie poprzez połączenie części doświadczalnej z obliczeniami teoretycznymi przy pomocy metody DFT.

W części doświadczalnej otrzymano serie katalizatorów, gdzie jako osnowę zastosowano syntetyczny zeolit BEA oraz pochodzenia naturalnego klinoptylolit (CLI). Funkcjonalizacja zeolitów poprzez wprowadzenie w ich struktury metali takich jak Sn, Fe, Cu, Co oraz Zn, odbywała się na drodze wymiany jonowej w warunkach hydrotermalnych oraz przy udziale techniki sonikacji. Przeprowadzono również proces hierarchizacji materiałów w celu poprawienia właściwości użytkowych zeolitów poprzez zwiększenie dostępności do centrów aktywnych, obecnych w mikroporowatych kanałach. Właściwości fizykochemiczne katalizatorów zeolitycznych scharakteryzowano przy udziale technik analitycznych: BET, XRD, SEM-EDS, DR UV-VIS, ATR-FTIR, XPS oraz H₂-TPR.

Pomiary aktywności katalitycznych funkcjonalizowanych zeolitów przeprowadzono podczas procesów w fazie ciekłej oraz gazowej. W przypadku fazy ciekłej, przeprowadzono konwersję dihydroksyacetonu (DHA) do kwasu mlekowego (LA), natomiast w fazie gazowej na zaprojektowanej w ramach niniejszej rozprawy doktorskiej, przeprowadzono reakcję dehydratacji kwasu mlekowego do kwasu akrylowego (AA). Uzyskane produkty powstałe w procesach katalitycznych, analizowano przy udziale chromatografii gazowej (GC).

Z kolei w części teoretycznej zastosowano metodę DFT i zamodelowano struktury katalizatorów zeolitycznych na osnowie BEA oraz CLI. Do obliczeń teoretycznych użyto model klasterowy - formy idealnej oraz hierarchizowanej, gdzie wprowadzono metaliczne kompleksy w postaci dimerów – M-O-M (M = Sn, Fe, Cu i Co). Zamodelowano również proces dehydratacji kwasu mlekowego do akrylowego oraz porównano aktywność katalityczną poszczególnych materiałów zeolitycznych.