

Διακριτές διαμορφώσεις και επιλεκτική ρύθμιση επικρατέστερων ειδών VO_x διεσπαρμένων σε TiO_2 . Η θέα μέσα από την οπτική της *in situ* μοριακής φασματοσκοπίας.

Σογομών Μπογοσιάν, Εργαστήριο Εφαρμοσμένης Μοριακής Φασματοσκοπίας, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών

Η μοριακή δομή και οι διαμορφώσεις που συνιστούν τη διεσπαρμένη φάση υποστηριγμένων οξομεταλλικών καταλυτών (πχ οξείδια μετάλλων μετάπτωσης VO_x , MoO_x , WO_x , ReO_x κλπ σε φορείς όπως TiO_2 , ZrO_2 κλπ) ή η δομή του ανιονικού πλέγματος μικτών οξειδίων (πχ $\text{Ce}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_{2-\delta}$ κλπ) δεν είναι στατικές, αλλά αποκρίνονται στις μεταβολές συνθηκών των θαλάμων (πχ αντιδραστήρων) μέσα στους οποίους λειτουργούν. Κατά συνέπεια, έχει μεγάλη σημασία ο έλεγχος παραμέτρων όπως η θερμοκρασία και η σύσταση της αέριας ατμόσφαιρας που περιβάλλει τα εξεταζόμενα υλικά στη διάρκεια της μελέτης τους με μοριακή φασματοσκοπία.

Στην περίπτωση των καταλυτών υποστηριγμένων μετάλλων μετάπτωσης, πρόσφατες συστηματικές μελέτες του Εργαστηρίου με *in situ* φασματοσκοπίες Raman και FTIR (η πρώτη και σε συνδυασμό με υποκατάσταση $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$) έδειξαν με συστηματική εξέταση παραμέτρων όπως η θερμοκρασία, η κάλυψη (φόρτιση) των καταλυτών και ο έλεγχος της αέριας ατμόσφαιρας ότι η διεσπαρμένη φάση MO_x ($M = \text{V}, \text{Mo}, \text{W}, \text{Re}$) είναι ετερογενής, αποτελείται δηλαδή από διακριτές δομικές μονάδες με διαφορετικές διαμορφώσεις τερματισμού (πχ mono-oxo $\text{M}=\text{O}$ ή di-oxo $\text{M}(\text{=O})_2$) ή/και διαφορετικούς αριθμούς συναρμογής [πχ $\text{O}=\text{M}(\text{--O--Ti})_3$, $\text{O}=\text{M}(\text{--O--Ti})_4$] ενώ η επικράτηση της μιας ή άλλης δομικής μονάδας καθώς κατανομή της παρουσίας τους στη διεσπαρμένη φάση εξαρτάται με αντιστρεπτό τρόπο από τη θερμοκρασία.

Θα παρουσιαστούν τεχνικές δειγματοληψίας για την *in situ* φασματοσκοπία Raman και για τη φασματοσκοπία Raman σε στατική ισορροπία (σε σφραγισμένες κυψελίδες χαλαζία) και πρωτόκολλα συστηματικών μετρήσεων με εστίαση σε αποτελέσματα που αφορούν το καταλυτικό σύστημα VO_x/TiO_2 .