

Nanokompozyty RE-TiO₂: projektowanie, synteza i charakterystyka

Uniwersytet Gdański

1. Cel projektu

Celem projektu jest wyjaśnienie mechanizmu wzbudzenia TiO₂ modyfikowanego metalami ziem rzadkich (ang. *rare earth metals*, RE) oraz określenie modelowej zależności pomiędzy strukturą, właściwościami powierzchniowymi a aktywnością fotokatalityczną RE-TiO₂. Zgodnie z najnowszym trendem przedstawionym w „*Chemical Vision 2020*” – istnieje konieczność połączenia metod modelowania i symulacji z wynikami eksperymentalnymi, a następnie wyciągnięcia wniosków, które będzie można zastosować w procesie otrzymywania nanokompozytów o pożądanym właściwościach (struktura, aktywność fotokatalityczna). W oparciu o taki model, zostaną przygotowane fotokatalizatory, które będą go weryfikować. **Zatem proponowane podejście pozwoli postępować zgodnie z zasadą „Najpierw zaprojektuj potem zbuduj”(build-by-design).**

Proponowane podejście opiera się na następujących założeniach:

- Lantanowce ze względu na położenie pasm energetycznych mają wpływ na aktywność fotokatalityczną TiO₂ pod wpływem promieniowania z zakresu widzialnego oraz bliskiej podczerwieni (NIR),
- Węgiel, obecny na powierzchni fotokatalizatora TiO₂ jest odpowiedzialny za obniżenie intensywności procesów luminescencji, które odpowiadają za niższą aktywność fotokatalityczną TiO₂,
- Poprawa właściwości luminescencyjnych fotokatalizatorów spowoduje wzrost ich aktywności fotokatalitycznej,
- Aktywność fotokatalityczną RE-TiO₂ pod wpływem promieniowania z zakresu Vis można przewidzieć na podstawie jego wybranych właściwości fizykochemicznych i powierzchniowych.

2. Metodyka badawcza

Proponowany projekt obejmuje badania podstawowe prowadzące do opracowania nowych nanocząstek TiO₂ modyfikowanych za pomocą metali ziem rzadkich charakteryzujących się wysoką aktywnością fotokatalityczną pod wpływem promieniowania z zakresu widzialnego oraz NIR o niskiej zawartości węgla na ich powierzchni. Nanostruktury w postaci proszków będą otrzymywane metodą hydrotermalną oraz solwotermalną.

Ponadto proponowane we wniosku badania obejmują:

- Charakterystykę otrzymanych RE-TiO₂: metoda BET (powierzchnia właściwa), techniki XRD (struktura krystaliczna i skład fazowy), spektroskopia fotoelektronów rentgenowskich (skład warstwy powierzchniowej), spektroskopia UV-Vis (widma absorpcji), metoda spektroelektrochemiczna (wyznaczenie położenia pasma walencyjnego i przewodnictwa),
- Badania aktywności RE-TiO₂ w modelowych reakcjach fotokatalitycznego utleniania (fotodegradacja fenolu i kwasu octowego w fazie wodnej),
- Badanie mechanizmu fotokatalitycznej ścieżki degradacji fenolu w obecności RE-TiO₂,
- Badanie wpływu długości fali wzbudzającej z zakresu promieniowania widzialnego na wydajność kwantową reakcji fotodegradacji kwasu octowego w obecności RE-TiO₂,
- Badanie właściwości luminescencyjnych fotokatalizatorów RE-TiO₂: badanie zdolności konwersji promieniowania widzialnego do ultrafioletowego, badanie czasu zaniku luminescencji,
- Opracowanie modelowej zależności pomiędzy strukturą, właściwościami powierzchniowymi a aktywnością fotokatalityczną RE-TiO₂.

3. Wpływ rezultatów

Efektym końcowym pracy naukowej będzie nowy typ fotokatalizatorów umożliwiający efektywną fotodegradację zanieczyszczeń w fazie wodnej i gazowej. Proponowane badania pozwolą zaproponować mechanizm wzbudzenia TiO₂ modyfikowanego metalami ziem rzadkich pod wpływem promieniowania z zakresu widzialnego, NIR oraz UV. Ponadto wyniki badań będą również przedmiotem publikacji naukowych (Applied Catalysis B: Environmental IF 6,423, Langmuir IF 4,384) oraz referatów bądź komunikatów podczas konferencji międzynarodowych. Przewidziane jest również wzmocnienie współpracy międzynarodowej.

Rezultaty: (a) praca doktorska z recenzjami, (b) praca magisterska z recenzjami, (c) publikacje, (d) roczne raporty, (e) próbki fotokatalizatorów na bazie TiO₂ o wysokiej aktywności.