

## ΣΤΑΘΕΡΟΠΟΙΗΣΗ Η/ΚΑΙ ΕΠΙΤΟΠΙΑ ΕΠΑΝΑ-ΔΙΑΣΠΟΡΑ ΚΑΤΑΛΥΤΙΚΩΝ ΝΑΝΟ-ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΜΕΣΩ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ ΜΕΤΑΛΛΟΥ-ΦΟΡΕΑ. ΕΡΜΗΝΕΙΑ ΜΕΣΩ ΚΑΙΝΟΤΟΜΟΥ ΜΗΧΑΝΙΣΤΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

Ιωάννης Γεντεκάκης<sup>1,\*</sup>, Γραμματική Γούλα

<sup>1</sup> Σχολή Μηχανικών Περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης, Χανιά, Ελλάδα

(\* Corresponding Author, [yyentek@isc.tuc.gr](mailto:yyentek@isc.tuc.gr))

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η πλειοψηφία των βιομηχανικών ετερογενών καταλυτών βρίσκονται υπό μορφή διεσπαρμένων νανοσωματιδίων των ενεργών φάσεων (συνήθως μετάλλων) πάνω σε φορείς οξειδίων, μικτών οξειδίων, ή και άλλων εξειδικευμένων, με μεγάλη γενικώς επιφάνεια. Επιτυγχάνοντας και διατηρώντας αυτού του τύπου την νανο-δομή των ενεργών φάσεων, μεγιστοποιείται ο αριθμός των ενεργών καταλυτικών κέντρων και, παράλληλα, ενισχύεται το εύρος ή και η ένταση αλληλεπίδρασης μεταξύ της ενεργούς φάσης και του φορέα με αποτέλεσμα την ενδεχόμενη ενύσχυση της καταλυτικής συμπεριφοράς μέσω φαινομένων αλληλεπίδρασης μετάλλου-φορέα. Τα τελευταία χρόνια έχει επιτευχθεί μεγάλη πρόοδος στον τομέα της νανο-κατάλυσης, καθώς έχει αναπτυχθεί μια ποικιλία σύγχρονων μεθόδων σύνθεσης ή έχουν βελτιστοποιηθεί παραδοσιακές μέθοδοι, οι οποίες επιτρέπουν την εναπόθεση των σωματιδίων του καταλύτη στα επίπεδα των λίγων νανομέτρων και μάλιστα με πολύ στενή κατανομή σωματιδίων ιδανικά μέχρι και επίτευξη ατομικής διασποράς.

Παρόλα αυτά, το φαινόμενο της συσσωμάτωσης (θερμική γήρανση) των καταλυτικών νανοσωματιδίων, στην οποία υπόκεινται οι νανο-δομημένοι καταλύτες κατά την λειτουργία τους στις επιθυμητές αναβαθμισμένες θερμοκρασίες της ετερογενούς κατάλυσης, συνεχίζει να αποτελεί ένα σημαντικό πρόβλημα για την βιομηχανία. Κρίνεται, λοιπόν, θεμελιώδους σημασίας, αλλά και μεγάλου πρακτικού ενδιαφέροντος, η αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος: η ανάπτυξη δημιουργίας νανο-δομημένων καταλυτών δεν είναι σήμερα το μείζον πρόβλημα. Η σταθεροποίηση της νανο-δομής με αποφυγή της συσσωμάτωσης είναι το κυρίαρχο.

Στην παρούσα εργασία αναπτύσσεται και προτείνεται μια καινοτόμος μέθοδος και ένα μηχανιστικό μοντέλο αποτροπής συσσωμάτωσης, η οποία υπό ελεγχόμενες συνθήκες μπορεί να φθάσει έως και επιτόπιας επανα-διασποράς των καταλυτικών νανο-σωματιδίων. Η μέθοδος βασίζεται στην χρήση φορέων με υψηλή τιμή ευμετάβλητου πλεγματού οξυγόνου, δηλαδή ευκίνητων ιόντων  $O^{2-}$ , τα οποία μέσω αλληλεπιδράσεων μετάλλου-φορέα έχουν τη δυνατότητα, σε υψηλές θερμοκρασίες λειτουργίας, να προστατεύουν τα νανο-σωματίδια από συσσωμάτωση, τόσο τύπου «Particles Diffusion and Coalescence, PDC» όσο και τύπου «Ostwald ripening (OR)» [1], αλλά και να οδηγήσουν σε επανα-διασπορά. Παράλληλα, αναπτύξαμε και πλήρες μηχανιστικό μοντέλο [2] βασιζόμενο στην προσέγγιση της ενεργού διπλοστοιβάδας (*effective double layer* [3]) που αναπτύσσεται στην επιφάνεια των σωματιδίων και στο φαινόμενο της ατομικής παγίδευσης (atom trapping [4]) στην επιφάνεια των φορέων, μέσω του οποίου ερμηνεύονται με ευχέρεια τα πειραματικά παρατηρούμενα φαινόμενα.

[1] T.W. Hansen *et al.*, Acc. Chem. Res. 46 (2013) 1720-1730.

[2] I.V. Yentekakis *et al.*, Appl. Catal. 192 (2016) 357-364; Catal. Lett. 148 (2018) 341-347.

[3] C.G. Vayenas *et al.*, J. Catal. 216 (2003) 487-504.

[4] A. Datye, Y. Wang, National Science Review 5 (2018) 630-332

### ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η εργασία υλοποιήθηκε στο πλαίσιο της Δράσης ΕΡΕΥΝΩ-ΔΗΜΙΟΥΡΓΩ-ΚΑΙΝΟΤΟΜΩ και συγχρηματοδοτήθηκε από την Ευρωπαϊκή Ένωση και εθνικούς πόρους μέσω του Ε.Π. Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα & Καινοτομία (ΕΠΑνΕΚ) (κωδικός έργου: Τ1ΕΔΚ-00782).

