

W obliczu zmian klimatycznych świat nauki poszukuje skutecznych rozwiązań, które zastąpią dotychczasowe technologie wywierające negatywny wpływ na środowisko naturalne. Ponadto, w związku z ciągłym wzrostem globalnego zapotrzebowania na energię i jednoczesnym przewidywanym wyczerpaniem rezerwy paliw kopalnych wdrażanie alternatywnych źródeł energii staje się konieczne. W tym kontekście ważnym surowcem, którego produkcja nabiera znaczenia, jest wodór. Aktualnie, znajduje on zastosowanie przede wszystkim w procesach rafineryjnych i w procesie produkcji amoniaku. Jednakże, wodór zaczyna być istotny także dla rynku samochodowego stojącego w obliczu potężnych zmian związanych z nowym sposobem napędzania silników. Koncern naftowy Grupa Lotos S.A. realizuje obecnie projekt PURE H2, który ma zostać sfinalizowany do 2023 roku. Jego celem jest rozbudowa infrastruktury do produkcji i sprzedaży wodoru o wysokiej czystości przeznaczonego do zasilania ogniw paliwowych. Lotos planuje budowę stacji tankowania autobusów i ciężarówek, samochodów osobowych, jak również instalacji do tankowania statków i pociągów dalekomorskich. Podobnie PKN Orlen S.A. rozpoczął realizację programu Hydrogen Eagle, który zakłada budowę międzynarodowej sieci hubów wodorowych zasilanych odnawialnymi źródłami energii i instalacji przetwarzających odpady komunalne w zielony i niebieski wodór.

Choć wytwarzanie wodoru ze źródeł odnawialnych nie ma jeszcze znaczącego udziału w światowej produkcji (~95% wodoru pochodzi z gazu naturalnego i węgla), to jednak na horyzoncie pojawiają się zmiany. Na uwagę zasługuje proces otrzymywania wodoru na drodze katalitycznego reformingu parowego etanolu, który można pozyskać z biomasy. W ciągu ostatnich dwóch dekad badaniom procesu reformingu parowego etanolu poświęcono wiele uwagi. Zbadano szeroki zakres układów katalitycznych opartych zarówno na szlachetnych, jak i nieszlachetnych metalach przejściowych. Obecnie najczęściej stosowane są katalizatory na bazie kobaltu lub niklu – pierwiastków znacznie tańszych i szerzej dostępnych aniżeli metale szlachetne. Zarówno katalizatory kobaltowe jak i niklowe cechuje niestety znacząca niestabilność w warunkach procesu. Ulegają one szybko dezaktywacji, głównie w wyniku tworzenia depozytu węglowego. Dlatego na rynku nadal brakuje katalizatora, który zapewniłby zadowalającą praktyczną wydajność produkcji wodoru.

Spośród kilku różnych strategii stosowanych w celu poprawy stabilności katalizatorów procesu reformingu parowego etanolu, modyfikacja przez dodanie promotorów alkalicznych zasługuje na szczególną uwagę. Warto również podkreślić, że bioetanol, wytwarzany w wyniku wstępnej obróbki biomasy na drodze hydrolizy alkalicznej, może zawierać resztkowe ilości metali alkalicznych. Zaobserwowany pozytywny wpływ alkaliów tłumaczony jest w literaturze zarówno ograniczaniem ilości tworzącego się depozytu węglowego jak i modyfikacją kwasowości katalizatora, dyspersji fazy aktywnej metalu, czy też ich wpływem na stopień utlenienia metalu w katalizatorze. Pomimo szeroko zakrojonych badań, wciąż brakuje jednak kompleksowej, jednoznacznej interpretacji obserwowanego efektu promocyjnego alkaliów. Jest to związane z trudnościami w charakteryzowaniu alkaliów spowodowanymi ich niską zawartością w katalizatorach oraz zmianami ich stanu chemicznego i lokalizacji w podwyższonych temperaturach i w obecności gazów.

Wobec powyższego, głównym celem projektu jest zrozumienie roli alkaliów na relację powierzchnia-struktura-działanie katalizatorów kobaltowych stosowanych w procesie reformingu parowego etanolu. Systematyczna, wieloaspektowa charakterystyka szerokiego spektrum katalizatorów nośnikowych na bazie kobaltu dotowanych różnymi metalami alkalicznymi dostarczy nowej wiedzy na temat oddziaływania alkaliów na badane katalizatory. W ramach projektu ustalony zostanie wpływ obecności metali alkalicznych na stan utlenienia kobaltu, kwasowość katalizatora/nośnika, właściwości elektrono-donorowe katalizatora, oddziaływanie kobaltowej fazy aktywnej z nośnikiem oraz przebieg procesu dezaktywacji. Celem uzyskania wglądu w mechanizm reakcji na badanych próbkach, przeprowadzone zostaną badania *in situ* i *operando* IR. Detekcja produktów pośrednich reakcji powstających podczas przemiany etanolu pozwoli na szczegółowe określenie ścieżek reakcji, a tym samym wpływu alkaliów na mechanizm ESR. Wyniki te zostaną zweryfikowane w oparciu o wyniki modelowania termodynamicznego dla modelowych powierzchni fazy kobaltowej. Kluczowy dla niniejszych badań stan powierzchniowy promotorów alkalicznych określony zostanie poprzez zastosowanie dedykowanych metod eksperymentalnych przy wykorzystaniu nowego układu próżniowego integrującego unikatową w kraju i na świecie aparaturę do badania termicznej desorpcji alkaliów (SR-TAD) i układu do badania zmian pracy wyjścia metodą Kelvina. Skonstruowana na potrzeby projektu nowoczesna aparatura próżniowa stworzy nową jakość w badaniach katalitycznych, umożliwiając badania *in situ* katalizatora w stanie reakcji, dzięki możliwości transferu próbki bez ekspozycji na powietrze. Badania eksperymentalne zmiany pracy wyjścia w wyniku domieszkowania alkaliom zostaną wsparte obliczeniami DFT.

Spodziewane wyniki umożliwią zrozumienie natury wpływu alkaliów na właściwości katalizatorów kobaltowych i tym samym wspomogą racjonalne zaprojektowanie długoterminowego, aktywnego i selektywnego katalizatora procesu reformingu parowego bioetanolu.