



ΙΤΕ / ΕΙΧΗΜΥΘ

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ Μ.Υ. ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ Μ.Υ.

ΟΜΙΛΗΤΗΣ: κ. Γεώργιος Τσιλομελέκης

Υπεύθυνος Διατριβής: Αναπλ. Καθηγητής Σογομών Μπογοσιάν

ΘΕΜΑ: Μελέτη μοριακής δομής υποστηριγμένων μολυβδενικών καταλυτών σε φορείς Al_2O_3 , ZrO_2 και TiO_2 με χρήση φασματοσκοπιών Raman και IR σε συνδυασμό με ισοτοπική εναλλαγή με $^{18}\text{O}_2$

In situ Raman and FTIR spectroscopy of molybdenum(VI) oxide supported on titania, alumina and zirconia combined with $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ exchange: molecular structure, vibrational properties and vibrational isotope effects

ΤΟΠΟΣ: Αίθουσα Σεμιναρίων ΙΤΕ/ΕΙΧΗΜΥΘ

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: Τετάρτη, 13 Οκτωβρίου 2010

ΩΡΑ: 12:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Μελετήθηκαν υποστηριγμένα καταλυτικά συστήματα MoO_3 σε φορείς Al_2O_3 , ZrO_2 και TiO_2 τόσο με χαμηλές όσο και με φορτίσεις πλησίον της μονοστρωματικής κάλυψης ($\sim 5\text{Mo}/\text{nm}^2$) με χρήση in situ δονητικών φασματοσκοπιών (Raman και FTIR) σε συνδυασμό με πειράματα ισοτοπικής υποκατάστασης $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$. Αντικειμενικός στόχος ήταν η διερεύνηση της μοριακής δομής των διεσπαρμένων μολυβδενικών ειδών στη βάση της αποσαφήνισης του αριθμού των τερματικών δεσμών $\text{Mo}=\text{O}$ ανά άτομο Mo. Ο αριθμός των νέων κορυφών εξαιτίας της υποκατάστασης $^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$ δεσμών τύπου μετάλλου - οξυγόνου μπορεί να οδηγήσει στη διάκριση μεταξύ *μόνο-όξο* και *δι-όξο* διαμορφώσεων. Τα αποτελέσματα που προέκυψαν προκρίνουν σαν κυρίαρχες μοριακές [είτε απομονωμένες είτε και $(\text{MoO}_x)_n$] διαμορφώσεις πάνω στους καταλυτικούς φορείς τις *μονο-όξο* διαμορφώσεις σε κάθε καταλυτικό σύστημα για κάθε επιφανειακή πυκνότητα. Η πορεία που θα ακολουθηθεί κατά την ισοτοπική εναλλαγή σε κάθε καταλυτικό σύστημα φαίνεται να εξαρτάται σημαντικά τόσο από την φύση του καταλυτικού φορέα όσο και από την φόρτιση σε ενεργό συστατικό. Η ικανότητα αναγωγής των επιφανειακά διεσπαρμένων ειδών κρίνεται υψηλής σημασίας (*next - nearest - neighbor vibrational isotope effect*) επηρεάζοντας την τελική θέση της κορυφής των $\text{Mo}=\text{O}$ δεσμών.