

Kataliza: niewidzialna siła napędowa przemysłu i życia codziennego

dr inż. Piotr Niemiec, prof. AT

10.12.2027

Wykład

9:45-11:15

Sala b028

Dzięki katalizatorom procesy przemysłowe, takie jak produkcja leków, tworzyw sztucznych czy paliw, są bardziej efektywne i ekonomiczne. W biologii enzymy, które działają jako katalizatory, pozwalają na przeprowadzanie niezbędnych reakcji biochemicznych w komórkach, co jest kluczowe dla życia. Kataliza przyczynia się również do ochrony środowiska, umożliwiając rozwój bardziej ekologicznych technologii i redukcję szkodliwych emisji. Podczas wykładu omówione zostaną teoretyczne podstawy niezwykle interdyscyplinarnego zjawiska katalizy (np. katalizator (aktywator/inhibitor), kataliza kwasowa/redoksowa, kataliza heterogeniczna, homogeniczna, autokataliza, centrum aktywne, profil energetyczny reakcji, stan i produkt przejściowy, bariera energetyczna itd.

Demonstracje:

1. Symulacje komputerowe – na podstawie symulacji komputerowych przedstawiony zostanie sposób komputerowego projektowania katalizatorów na przykładzie cząsteczek heteropolikwasów (HPA). Są to związki o niezwykle zróżnicowanej geometrii i architekturze wykazujące istnienie zarówno centrów kwasowych jak i redoksowych. Ogromną zaletą tych związków jest możliwość modyfikacji ich właściwości fizykochemicznych (np. energia i chemiczny charakter orbitali granicznych, rozmiar przerwy energetycznej, itd.) już na poziomie atomowym, co zostanie zademonstrowane podczas wykładu. Dodatkowo w oparciu o analizę „chargé-transfer” zaprezentowany zostanie sposób aktywacji małych cząsteczek, np. O_2 , CO czy H_2O_2 , na wybranym centrum aktywnym takiego heteropoliwkasku z uwzględnieniem ruchu elektronów poszczególnymi dozwolonymi kanałami.

2. Reakcje chemiczne – wybrane reakcje pokazujące wpływ obecności lub braku katalizatora (i jego stężenia) na szybkość reakcji np. utlenianie jonów tiosiarczanowych za pomocą kationów Cu^{2+} , rozkład wody utlenionej za pomocą związków manganu oraz wybrane reakcje fotokatalityczne.