

## STRESZCZENIE ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

*Modelowanie katalitycznej redukcji CO<sub>2</sub> na CuNi*

Autor: mgr inż. Elżbieta Dziadyk-Stopyra

Promotor: dr hab. inż. Bartłomiej Szyja, prof. PWr

Wzrost stężenia CO<sub>2</sub> w atmosferze obserwowany jest przez ostatnie 150 lat i w dużej mierze jest on skorelowany ze stopniowym wzrostem temperatury globalnej przez co przyczynia się do zmian klimatycznych. W pracy podjęto problem utylizacji tego wielkotonażowego odpadu, który jest wyjątkowo ważnym zagadnieniem szczególnie w dobie nieustannego rozwoju technologicznego. Obecnie zdecydowana większość energii ludzkość pozyskuje z paliw kopalnych, co powoduje zwiększenie emisji CO<sub>2</sub>.

Zarówno technologia efektywnej redukcji emisji poprzez selektywną adsorpcję jak i chemicznej redukcji CO<sub>2</sub> do wartościowych produktów jest już znana, jednakże mało rozpowszechniona. Na przeszkodzie temu stoją takie problemy jak wysoka stabilność termodynamiczna cząsteczki CO<sub>2</sub>, przez co konwersja wymaga nakładu energetycznego, a także konieczność stosowania wysoce aktywnych katalizatorów, co z kolei często wiąże się z wysokimi kosztami.

Niniejsza rozprawa doktorska podejmuje problematykę badawczą związaną z redukcją ditlenku węgla na wybranych materiałach miedziowo-niklowych, w kierunku otrzymywania wysokowartościowych związków chemicznych, które mają potencjał być stosowane jako nośniki energii. W pracy opisano elektrokatalityczną konwersję CO<sub>2</sub> na powierzchniach Cu/Ni, przyjmując jako referencyjną powierzchnię czystej Cu. Ponadto przeanalizowano możliwość elektroredukcji CO<sub>2</sub> do HCOOH lub CO na 13-atomowych nanoklastkach CuNi. Wreszcie zaproponowano modyfikację układu Cu/ZnO, znanego ze swoich właściwości uwodorniających w syntezie metanolu, która polegała na dodatku Ni do fazy aktywnej.

Badania przeprowadzone na potrzeby pracy mają charakter poznawczy i wykorzystują techniki chemii obliczeniowej w celu określenia mechanizmów reakcji i czynników wpływających na efektywność procesu. W głównej mierze skupiono się na modyfikacji właściwości fazy miedziowej przez obecność niklu, co pozwoliło na określenie efektu synergii obu metali, czy też charakteru promocyjnego lub ko-katalitycznego.