

Povzetek

V sklopu doktorske disertacije smo s spektroskopskimi in mikroskopskimi metodami preiskovali in opisali aktivnost kompozitov, ki smo jih v nadaljevanju raziskovalnega dela uporabili kot katalizatorje za sintezo CH_3OH . Izkazalo se je, da so Cu/ZnO katalizatorji, pripravljene z nanašanjem Cu kristalitev na predhodno sintetizirane nosilce ZnO nekajkrat aktivnejši od komercialnih $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ katalizatorjev in sočasno tudi stabilnejši pri pogojih sinteze CH_3OH iz reakcijskih plinov CO_2 in H_2 (pri temperaturi $250\text{ }^\circ\text{C}$ in tlaku 1 bar).

V doktorskem delu smo s spektroskopsko metodo EXAFS dokazali, da med redukcijo oziroma reakcijo sinteze CH_3OH deloma prihaja do redukcije ZnO v kovinski Zn in, da slednji difundira v kristalno strukturo Cu kristalita. EXAFS analiza je pokazala, da je Cu-Zn zlitina v preiskovanih katalizatorjih prisotna v obliki $\text{Cu}_{0,2}\text{Zn}_7$ z heksagonalno kristalno strukturo. V pripravljenih katalizatorjih je okoli 18% Cu prisotnega v obliki zlitine, medtem ko je delež zlitine v komercialnih katalizatorjih nižji (okoli 11% Cu je prisotnega v obliki zlitine). Višjo aktivnost pripravljenih katalizatorjev v primerjavi s komercialnim katalizatorjem smo pripisali prav visokemu deležu zlitine v katalizatorjih. Visok delež zlitine je indikator, da je med ZnO in Cu prisotna sinergija, mehanizem prelivanja (angl. "*spillover*") pa je v takih katalizatorjih izrazit.

S TEM mikroskopijo smo pokazali, da so Cu kristaliti pripravljenih katalizatorjev bogati z napakami zloga oziroma dvojčičnimi mejami. Okoli dvojčične meje je kristalna rešetka napeta, kar smo dokazali z mapiranjem generirane napetosti. Poleg nastanka zlitine, smo visoko katalitsko aktivnost pripravljenih katalizatorjev tako pripisali tudi visoki koncentraciji napak v Cu kristalutih, na mestih kjer dvojčična meja pride na površino, saj je iz literature znano, da so prav ta mesta najugodnejša za adsorpcijo reakcijskih molekul.