

- 2017/01/X/ST4/00731 [2017-2018] Rola wodorowych brązów molibdenowych i wolframowych w uwodornieniu biosurowca 5-(hydroksymetylo)furfuralu na katalizatorach Pd/MoO₃ i Pd/WO₃ – dr R. Kosydar

Potencjał wodorowych brązów molibdenowych i wolframowych jako nośników katalizatorów heterogenicznych oraz ich zdolność tworzenia centrów aktywnych nie zostały dotychczas w pełni poznane i wykorzystane w katalitycznym uwodornieniu związków organicznych. Mimo, że samo zjawisko tworzenia się brązów jest badane od wielu lat to nadal nie jest ono w pełni wyjaśnione, o czym świadczą najnowsze publikacje np. praca w *J. Phys. Chem. C* (20014) opisująca modelowanie tworzenia wodorowych brązów wolframowych w układzie Pt/WO, czy w *Nature Sci. Rep.* (2017) dotycząca mechanizmu tworzenia się wodorowego brązu molibdenowego H_xMoO₃ w układzie Pd/MoO₃. Potwierdza to aktualność podejmowanych badań w dziedzinie badań podstawowych. Co ważne, nie opublikowano dotychczas prac obliczeniowych, jak i doświadczalnych dotyczących reaktywności katalizatorów Pd/H_xMoO₃ lub Pd/H_xWO₃ w uwodornieniu 5-(hydroksymetylo)furfuralu. Wypełnienie tej luki poprzez poznanie układów katalitycznych Pd/H_xMoO₃ i Pd/H_xWO₃ pod kątem ich selektywności w reakcji uwodornienia 5-(hydroksymetylo)furfuralu i określenie roli wodoru pochodzącego z brązów w tej reakcji będzie stanowić ważny wkład w rozwój wiedzy podstawowej z obszaru katalizy. Wnioski uzyskane dla cząsteczki 5-(hydroksymetylo)furfuralu zawierającej zarówno wiązaną C=C w pierścieniu furanowym, jak i grupę aldehydową CHO mogą być przeniesione na inne związki organiczne np. alfa,beta-nienasycone aldehydy.