

## **Raport privind deplasarea la stagiul de lucru în Departamentul de Chimie de la Universitatea Politehnica din Valencia, Spania**

**Solicitant:** Dr. Oana Grad

**Echipa de cercetare:** E7 – Materiale poroase și nanostructuri de carbon

**Tipul acțiunii:** Stagiul de cercetare (SC)

**Destinația / tematică / durata:**

*Destinație:* Universitatea Politehnica din Valencia

*Tematică:* Stagiul de cercetare în domeniul catalizei eterogene în fază lichidă

*Durată mobilitate:* 15.06 - 02.07.2019

Principala tematică de cercetare din cadrul acestui stagiul a fost centrată pe perfecționarea abilităților cât și pe dobândirea de cunoștințe noi privind investigarea proprietăților catalitice ale materialelor hibride de tip MNPs@MOF (structuri metal-organice funcționalizate cu nanoparticule metalice), obținute în cadrul INCDTIM. Astfel s-au preparat 3 catalizatori: Pd(5%)@MIL-101, Au(5%)@MIL-101 și Pd(2.5%)Au(2.5%)@MIL-101, eficiența acestora fiind testată în reacții catalitice în fază lichidă. Reacțiile studiate în cadrul stagiului au fost reacțiile de oxidare respectiv hidrogenare.

Pe parcursul întregului stagiul, activitatea zilnică și rezultatele au fost discutate cu coordonatorii grupului (Prof. Dr. Hermenegildo Garcia și Associate Prof. Dr. Sergio Navalon) titulari în cadrul departamentului de chimie precum și cu doctoranzi ai grupului. Grupul în care am desfășurat stagiul de cercetare are o vastă expertiză în domeniul catalizei eterogene în fază lichidă precum și în dezvoltarea de noi materiale cu aplicații în chimie sintetică, energie și mediu.

În cadrul stagiului de cercetare am acumulat cunoștințe noi și abilități experimentale privind investigarea activității catalitice ai celor 3 catalizatori în reacții de tip cascadă:

(i) reacții de oxidare aerobe ale aminelor aromatice cu oxigen molecular la produșii corespunzători de cuplare oxidativă

(ii) reacții de hidrogenare a dublei legături C=N din produșii de cuplare oxidativă obținuți anterior cu hidrogen molecular la amine aromatice secundare.

În acest sens, s-au conturat următoarele beneficii:

Dobândirea de expertiză în testarea catalizatorilor, prin determinarea condițiilor optime de reacție (temperatura, presiune, timp de reacție, raportul optim reactant/catalizator).

Dobândirea de expertiză în studierea proprietăților catalitice ale materialelor de tip MNPs@MOF pentru reacții catalitice în fază lichidă. Astfel, primele experimente au fost realizate în prezența sau în absența catalizatorilor obținând o serie de rezultate importante legate de cinetica și mecanismul reacțiilor studiate.

Evoluția reacțiilor s-a urmărit cu ajutorul gaz cromatografului (GC) iar produșii de reacție s-au determinat prin intermediul gaz cromatografului cuplat cu spectrometru de masă (GCMS).

S-au calculat și trasat principalii parametri de apreciere ai activității catalitice: (i) profilele de conversie ale reactanților, (ii) selectivitățile produșilor obținuți în urma reacțiilor, (iii) numărul TON (*Turn Over Number*) care este reprezentat de numărul de molecule de reactant convertite pe fiecare centru activ, (iv) TOF (*Turnover Frequency*) care reprezintă numărul de molecule transformate pe fiecare centru activ în unitatea de timp respectiv (v) energia de activare ( $E_a$ ) a procesului.

S-a testat eterogenitatea catalizatorilor aplicând tehnica de "*hot filtration test*". Mai mult, s-a determinat capacitatea catalizatorilor de a funcționa în reacții, fără modificarea proprietăților de activitate și selectivitate prin experimente de stabilitate respectiv durată de viață.

Prin intermediul acestui stagiu de cercetare am învățat noțiuni noi legate de procesele catalitice în fază lichidă. De asemenea colaborarea cu acest grup de cercetare precum și transmiterea acestor cunoștințe către alte persoane din cadrul grupului va asigura o dezvoltare durabilă a acestei tematici în cadrul institutului.

Rezultatele care s-au obținut în urma acestui stagiu de cercetare vor fi dezvoltate în continuare în cadrul grupului și pe baza lor ne propunem să obținem în anul 2020 cel puțin 1 articol într-un jurnal cotate ISI și situat cel puțin în zona galbenă.