

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет»
Физический факультет**

Кафедра _____
Направление подготовки _____
(код направления и наименование)
Дисциплина _____

АННОТАЦИЯ К КУРСОВОЙ РАБОТЕ

Ф.И.О. Иванов Валерий Иванович, группа 24308

Тема Исследование методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии поверхности молибденовых катализаторов селективного окисления этанола

Научный руководитель (Айдаков Егор Евгеньевич)

Тема: Исследование методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии поверхности молибденовых катализаторов селективного окисления этанола.

Актуальность исследования обусловлена необходимостью понимания природы поверхностных активных центров молибденсодержащих катализаторов, от которых напрямую зависят эффективность и селективность процессов окисления спиртов — важнейших реакций в промышленной химии. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) является одним из наиболее информативных методов для изучения химического состояния поверхности таких материалов.

Целью работы было выяснить влияние термической обработки в атмосфере паров этанола на химическое состояние молибдена и кислорода на поверхности молибденового катализатора, нанесённого на TiO₂. В ходе написания работы решались задачи: получение и обработка РФЭС-спектров Mo 3d, O 1s и C 1s; определение валентных состояний молибдена при различных температурах; анализ изменений элементного состава приповерхностного слоя.

Методология включала использование РФЭС на спектрометре SPECS с источником Al K α , обработку данных с помощью программного пакета CasaXPS и разложение спектров на компоненты с учетом химического сдвига и фоновой коррекции по методу Ширли.

Основные результаты показали, что с ростом температуры в диапазоне от 100 °C до 300 °C происходит постепенное восстановление молибдена с преобладанием Mo⁵⁺ и увеличением доли Mo⁴⁺, одновременно наблюдается рост концентрации углерода и снижение содержания кислорода на поверхности, что свидетельствует об адсорбции продуктов реакции и участием решёточного кислорода в процессе окисления.

Проведённое исследование показало, что РФЭС позволяет эффективно отслеживать динамику изменения химического состояния поверхности катализатора в условиях, приближенных к каталитическим, и может быть использовано для целенаправленного проектирования систем с заданной селективностью. Несмотря на ограниченность модели (отсутствие кислорода в газовой фазе), работа демонстрирует высокую информативность метода и его значимость для фундаментальных и прикладных исследований в области гетерогенного катализа.

Ключевые слова: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС), молибденовый катализатор, селективное окисление этанола, химическое состояние, энергия связи, восстановление оксидов, поверхностный анализ.

« ____ » _____ 20 ____ г. _____
подпись студента /Фамилия ИО студента