

# Śledzenie zmian struktury elektronowej w pomiarach in situ na przykładzie procesu termicznego utleniania tytanu

Mgr Klaudia Wojtaszek

## Abstrakt

Pomiary in situ z wykorzystaniem rentgenowskiej spektroskopii absorpcyjnej (XAS) i emisyjnej (XES) stały się ważnym narzędziem pozwalającym na uzyskanie informacji o zmianie stopnia utlenienia, struktury elektronowej i lokalnego środowiska wiązań w rzeczywistym czasie trwania procesów chemicznych. Metody te mają szczególne znaczenie m.in. w badaniu procesów katalitycznych, dla których określenie struktury elektronowej powierzchni katalizatora jest kluczowym wymogiem do zrozumienia zachodzących reakcji<sup>1,2</sup>.

W prezentowanych podczas seminarium wynikach badawczych, wykorzystano metody XAS i XES w pomiarach in situ do badania zmian struktury elektronowej zachodzących w czasie termicznego utleniania tytanu. Pomiary absorpcyjne krawędzi K tytanu pozwoliły na obserwację przemiany metal-tlenek zachodzącej w czasie rzeczywistym badanego procesu oraz zbadanie dynamiki zmian zachodzących w próbce. Wyznaczono zakres temperatur najszybszych przemian metal-tlenek oraz przejścia z fazy krystalicznej anatazu do rutylu. W pracy przeprowadzono analizę różnic widmowych w zakresie linii emisyjnych  $K\beta'$  oraz  $K\beta_{1,3}$  co pozwoliło na zobrazowanie przejścia od stanu wysokospinowego do niskospinowego, podczas termicznego utleniania. Zaproponowana analiza energii środka masy (ang. Energy Center of Mass,  $E_{CM}$ ) dla linii  $K\beta'$  oraz  $K\beta_{1,3}$  wykazała, że wartości  $E_{CM}$  zmieniają się wraz ze wzrostem temperatury utleniania. Wykorzystując dane literaturowe wykazano również, że wartość  $E_{CM}$  dla temperatury 306°C, która spada poniżej wartość  $E_{CM}$  charakterystycznej dla metalicznego Ti, może świadczyć o obecności tytanu na +II stopniu utlenienia w utlenionej próbce. Ponadto, w pracy połączono wybrane widma XAS i XES wraz z obliczeniami gęstości stanów przy użyciu energetycznej skali względnej  $E-E_f$ . Badania pozwoliły na określenie pochodzenia badanych struktur widmowych oraz obserwację tworzenia się pasma wzbronionego pomiędzy strukturami pasmowymi z jednoczesnym tworzeniem się struktur przedkrawędziowych tlenku tytanu.

[1] Wang, M., Árnadóttir, L., Xu, Z. i inni, i. (2019). In Situ X-ray Absorption Spectroscopy Studies of Nanoscale Electrocatalysts. *Nano-Micro Lett.* 11.

[2] Knop-Gericke, A., De Groot, F., Van Bokhoven, J. i Ressler, T. (2004). Soft X-ray Absorption Methods. W H. S. Nalwa, *In-situ Spectroscopy of Catalysts*. American Scientific Publishers.