

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Technologie wykorzystujące paliwa kopalne w celu wytwarzania energii wytwarzają miliardy ton dwutlenku węgla rocznie. Pomimo faktu że emisja ta jest niewielka w porównaniu do całkowitej emisji dwutlenku węgla w skali globalnej, zaburza ona równowagę między ilością CO₂ w atmosferze a możliwościami absorpcji tego związku przez roślinność i oceany. Ciągły wzrost stężenia dwutlenku węgla w atmosferze obserwowany jest przez ostatnie 150 lat i zakłada się że znacząco przyczynia się do powstania efektu cieplarnianego.

Wykorzystanie zbędnego CO₂ pochodzącego z paliw kopalnych do atmosfery stało się jednym z najbardziej istotnych zagadnień dla nauki w ostatnich czasach. Ponieważ dwutlenek węgla jest bardzo stabilną cząsteczką, proces utylizacji wymaga wkładu energii – najlepiej uzyskiwanej z odnawialnych źródeł. Przyroda radzi sobie z tym problemem poprzez proces fotosyntezy, gdzie CO₂ przetwarzany jest w bardziej użyteczne związki – w tym cukry – z użyciem światła słonecznego jako siły napędowej tego procesu.

Proces redukcji CO₂ jest w swojej naturze skomplikowany i wieloetapowy. Możliwych jest wiele ścieżek, które prowadzą do różnych produktów końcowych np. metan (CH₄) lub metanol (CH₃OH), które znajdują zastosowanie jako paliwa lub ich komponenty. W tych procesach, przynajmniej jedno wiązanie C-O musi zostać przerwane. Alternatywnie wodór cząsteczkowy może zostać przyłączony do jednego z wiązań C-O, która to reakcja prowadzi do powstania kwasu mrówkowego (HCOOH). Używane katalizatory charakteryzują się specyficzną selektywnością - kierują postępem reakcji do jednego z możliwych produktów. Omawiany projekt badawczy ma na celu wyjaśnienie szczegółów zachodzącego procesu, włączając w to mechanizm zachodzących reakcji chemicznych oraz interakcje reagentów z katalizatorem. Pozwoli to na lepsze zrozumienie samego procesu, jak również pozyskanie danych potrzebnych do specyficznego zmodyfikowania cząsteczki katalizatora w ramach dopasowania jego aktywności do indywidualnych potrzeb reakcji w ramach rozpatrywanego produktu końcowego.

Celem projektu jest stworzenie nieorganicznego urządzenia, posiadającego właściwości przetwarzania CO₂ naturalnego liścia. Urządzenie składać się będzie z dwóch części: pierwszą będzie fotoanoda, której rolą jest pozyskanie protonów i elektronów z cząsteczek wody pod wpływem światła. Drugim będzie katoda, na której protony i elektrony wytworzone przez anodę zostaną użyte do uwodornienia cząsteczek CO₂. Urządzenie będzie naśladować proces naturalnej fotosyntezy również poprzez fakt fizycznego odseparowania reakcji utleniania cząsteczki wody (proces na anodzie „sztucznego liścia” oraz w fotosystemie-II w układach roślinnych) od redukcji dwutlenku węgla (zachodzącego na katodzie urządzenia oraz w enzymie RuBisCo w liściach roślin fotosyntezujących).

Projekt wykonany zostanie poprzez synergii dwóch podejść – symulacji komputerowych procesu, które dostarczą cennych danych dotyczących mechanizmu reakcji oraz oddziaływań międzycząsteczkowych. Uzyskane wyniki obliczeniowe przyczynią się do pogłębienia wiedzy o procesie fotowzbudzeń badanego układu. Z drugiej strony – eksperymenty laboratoryjne potwierdzą wyniki teoretyczne oraz dostarczą niezbędnych danych do zbudowania właściwych modeli układów katalitycznych.