

Mechanizm wzbudzenia kropek kwantowych w reakcjach fotokatalitycznych

Zanieczyszczenie środowiska oraz kryzys energetyczny stanowią dwa najpotężniejsze problemy zagrażające rozwiniętem społeczeństwu i mogą znacząco wpłynąć na jakość naszego życia. Procesy inicjowane światłem w obecności nanocząstek półprzewodników (fotokataliza heterogeniczna) jest przykładem technologii przyjaznej dla środowiska i pozwalającej na degradację zanieczyszczeń w fazie wodnej oraz w powietrzu, na generowanie wodoru jako czystego nośnika energii w procesie fotorozkładu wody, produkcję użytecznych węglowodorów z procesie fotokonwersji CO₂ (tzw. sztuczna fotosynteza), na inaktywację mikroorganizmów jak również na wykorzystanie procesu w ogniwach słonecznych

Spośród materiałów półprzewodnikowych największą uwagę w ostatnim okresie przyciągają materiały zero-wymiarowe, czyli kropki kwantowe, które zawierają zwykle od 200 do 10 000 atomów (2 do 10 nm) i ze względu na wysoki stosunek powierzchni do objętości wykazują unikalne właściwości w stosunku do pozostałych nanomateriałów.

Jednym z kluczowych problem w przypadku zastosowania nanomateriałów w ochronie środowiska a także do konwersji energii słonecznej do energii chemicznej, jest problem wytwarzania materiałów aktywnych pod wpływem promieniowania z zakresu widzialnego, które stanowi większą część promieniowania słonecznego docierającego do powierzchni ziemi. Jednym z najnowszych trendów jest zastosowanie materiałów o rozmiarach kropek kwantowych w ochronie środowiska oraz konwersji energii.

W ramach projektu proponowane jest opracowanie metody otrzymywania nowych materiałów fotoaktywnych zawierających kropki kwantowe wielowarstwowe, domieszkowane lub modyfikowane związkami węgla, celem podniesienia ich stabilności, możliwości wzbudzenia pod wpływem promieniowania widzialnego oraz zwiększenia wydajności w procesach fotochemicznych. Badanie mechanizmu wzbudzenia nowych materiałów w zależności od rodzaju użytego promieniowania a także badanie mechanizmów reakcji w obecności nowych materiałów, powinno pozwolić na opracowanie materiałów wykazujących wyższą aktywność w reakcji degradacji zanieczyszczeń, w reakcjach generowania wodoru w procesie fotorozkładu wody oraz w procesie konwersji ditlenku węgla do użytecznych węglowodorów.

Jednocześnie w projekcie zaproponowano nowatorskie podejście z wykorzystaniem metod chemoinformatycznych oraz modelowania komputerowego, co powinno pozwolić w przyszłości na nowoczesne projektowanie nowych nanomateriałów o zwiększonej funkcjonalności a także na zmniejszenie kosztów badań eksperymentalnych.