

Cel prowadzonych badań/hipoteza badawcza

W związku z rozwojem nowoczesnego społeczeństwa, z którym związany jest szybki wzrost zapotrzebowania na energię, nastąpił gwałtowny rozwój alternatywnych źródeł energii. Pośród nich, ogniwa paliwowe stały się jedną z najszybciej rozwijających się technologii ostatnich lat. Wysoka sprawność wykorzystania energii paliwa oraz eliminacja lub ograniczenie emisji toksycznych składników spalin stanowią o ich atrakcyjności jako alternatywnych źródeł energii elektrycznej. Ponadto, ogniwa paliwowe z polimerową membraną jonoprzewodzącą są powszechnie uznawane za najbardziej obiecującą koncepcję innowacyjnego źródła elektryczności, głównie ze względu na ich ekologiczny charakter. Jednakże, pełna komercjalizacja tego typu technologii jest ciągle wyzwaniem, głównie z powodu powolnej kinetyki reakcji redukcji tlenu (ORR) zachodzącej na katodzie oraz wysokiego kosztu opartych na platynie katalizatorów katodowych. W związku z tym faktem, projektowanie i synteza katalizatorów nie zawierających metali szlachetnych jest jednym z najważniejszych celów w kontekście rozwoju ogniw paliwowych.

W ramach proponowanego projektu planowane jest opracowanie oraz pełna charakterystyka innowacyjnych katalizatorów do redukcji tlenu. Katalizatory oparte będą na tlenkach metali przejściowych o strukturze spinelu (Sp), osadzonych na nośniku węglowym, jednocześnie domieszkowanym heteroatomami (HE), takimi jak: N, S, B, P, Se. Głównym **celem naukowym** projektu jest określenie mechanizmu ORR na proponowanych materiałach oraz zrozumienie wzajemnego oddziaływania między tlenkami metali o strukturze spinelu, a modyfikowaną matrycą węglową. W szczególności, dokładnie zbadany zostanie synergetyczny efekt właściwości redoksowych spinelu oraz kwasowo-zasadowych podłoża. Podczas katalitycznej redukcji tlenu, w zwłaszcza gdy stosuje się katalizator nie zawierający platyny, zawsze wytwarzana jest pewna ilość H_2O_2 . Nadtlenek wodoru może się rozpaść z utworzeniem rodników, które niszczą zarówno podłoże węglowe, jak i membranę polimerową stosowaną w ogniwie paliwowym. Proponujemy więc dodanie do układu Sp/HE-C katalizatora nieorganicznego, naśladującego **katalazę**, który rozłoży H_2O_2 do cząsteczek tlenu. Rozkład nadtlenu wodoru ma kluczowe znaczenie dla membrany polimerowej, ponieważ najbardziej aktywne katalizatory bez Pt zawierają żelazo, które jest katalizatorem w reakcji Fentona, w wyniku której generowane są $\cdot OH$, będące główną przyczyną ich degradacji. Drugim celem jest wyjaśnienie roli ekspozycji płaszczyzn krystalograficznych oraz dystrybucji spinelu, w odniesieniu do aktywności elektrokatalitycznej proponowanych kompozytów. W celu realizacji postawionych celów, prowadzone będą systematyczne badania właściwości redoksowych i kwasowo-zasadowych katalizatorów oraz identyfikacja produktów pośrednich. Zakłada się, że zwiększona aktywność proponowanych materiałów będzie wynikiem jednoczesnego działania kilku czynników. Pierwszy z nich związany jest ze składem spinelu, wielkością, dyspersją oraz morfologią jego nanocząsteczek. Do drugiej grupy czynników zaliczyć można właściwości zmodyfikowanego heteroatomami nośnika węglowego, a trzecia określona jest przez obecność nanocząsteczek metalu przejściowego. Postawiona **hipoteza badawcza** zakłada, że redukcja tlenu w roztworze wodnym zachodzi na drodze międzycząsteczkowego mechanizmu elektroprótonowego (skorelowanego transferu elektronów i protonów), połączonego z adsorpcją powstających jonów przez powierzchnię tlenku.

Zastosowana metoda badawcza/metodyka

Projekt składa się z trzech połączonych ze sobą części – syntezy, charakterystyki fizykochemicznej oraz testów aktywności katalitycznej. W pierwszym etapie kompozyty TM-HE-C będą syntezowane przez zastosowanie zmodyfikowanego podejścia, w którym, nowy prekursor organiczny zawierający HE będzie otrzymywany w reakcji oksydacyjnej polimeryzacji związków heterocyklicznych, pozwalając na uzyskanie homogenicznego rozkładu HE, z równoczesnym włączeniem *in situ* metali przejściowych do struktury węglowej. Synteza spinelu na modyfikowanym nośniku węglowym będzie prowadzić do uzyskania aktywnych i stabilnych katalizatorów o zoptymalizowanej strukturze i morfologii. W drugim etapie badania skupią się na charakterystyce fizykochemicznej materiałów przy wykorzystaniu nowoczesnych metod spektroskopowych i mikroskopowych, które pozwolą na określenie rodzaju centrów aktywnych. Jednocześnie przeprowadzone zostaną testy elektrochemiczne, które pozwolą na określenie aktywności katalizatorów oraz możliwych ścieżek reakcji redukcji tlenu. W ostatnim etapie, najbardziej aktywne katalizatory będą testowane w modelowym ogniwie paliwowym w celu ustalenia ich efektywności i stabilności w warunkach zbliżonych do rzeczywistych.

Wpływ spodziewanych rezultatów na rozwój nauki, cywilizacji, społeczeństwa

Wyjaśnienie procesów zachodzących podczas równoczesnego domieszkowania węgla HE i TM będzie znaczące z naukowego i praktycznego punktu widzenia. Pozwoli to na opracowanie nowego kompozytowego katalizatora dla ORR, nie zawierającego metali szlachetnych. Rozwój niedrogiego i efektywnego katalizatora reakcji katodowej w ogniwach paliwowych, w znacznym stopniu przyczyni się do rozpowszechnienia tego typu urządzeń jako źródeł zasilania w urządzeniach mobilnych oraz motoryzacji. Badania te są kluczowe dla rozwiązania problemów ekologicznych, ponieważ szeroka komercjalizacja ogniw paliwowych znacznie obniży emisję zanieczyszczeń spowodowanych spalaniem paliw kopalnych.