

Współcześnie kataliza odgrywa kluczową rolę w przemyśle, gdzie katalizator pośrednicząc w reakcjach, przyczynia się do wydajniejszej produkcji związków chemicznych, takich jak amoniak, kwas siarkowy(VI) czy kwas azotowy(V), wykorzystywanych m.in. do produkcji nawozów. Ponadto, wychodząc naprzeciw współczesnym problemom klimatycznym, opracowuje się katalizatory, które umożliwią skuteczną redukcję tlenku węgla(IV), tym samym ograniczając efekt cieplarniany, który jest główną przyczyną ocieplania się klimatu. Kolejnym problem, który może być rozwiązany dzięki katalizie, jest wyczerpywanie paliw kopalnych (takich jak ropa naftowa). Transport, próbując alternatywnych źródeł energii, coraz częściej wykorzystuje pojazdy zasilane elektrycznie, gdzie jako paliwo wykorzystuje się wodór, który w procesie spalania, oprócz energii, wydziela parę wodną. Paliwowy wodór możliwy jest do otrzymania poprzez katalityczny rozkład wody, gdzie z dwóch cząsteczek wody otrzymuje się dwie cząsteczki wodoru i jedną cząsteczkę tlenu. Mimo wielu zalet, komercyjne katalizatory są bardzo drogie (wykonane z drogich metali), a przy tym dość szybko się zużywają. Naukowcy, próbując udoskonalić katalizatory, opracowują takie, które są oparte na powszechnie występujących metalach. Niemniej jednak, katalizatory oparte na niekomercyjnych pierwiastkach wykazują dużo niższą wydajność, stąd też rozwiązanie, które zakłada projektowanie zaawansowanych nanostruktur. Takie struktury umożliwią: zintensyfikowanie wydajności metalicznych katalizatorów, przy znacznym ograniczeniu ilości potrzebnych metali oraz znaczącą poprawę wytrzymałości, a tym samym dany katalizator będzie mógł być eksploatowany znacznie dłużej. W celu rozwiązania powyższych problemów, w niniejszym projekcie będą projektowane zaawansowane nanostruktury, które będą wykorzystywać pojedyncze atomy pierwiastków do elektrochemicznego rozkładu wody. Takie struktury, pozwolą na maksymalne wykorzystanie powierzchni katalitycznych, znacząco zmniejszając ilość potrzebnych metali, zachowując co najmniej taką samą wydajność (bądź lepszą) niż współcześnie wykorzystywane katalizatory. Ponadto, jednoatomowe katalizatory nie są tak szeroko opisane i zbadane, jak ich większe odpowiedniki, co pozwoli na lepsze poznanie ich właściwości i poszerzy ogólny stan wiedzy związany z katalizą. Poniżej w zamieszczonej grafice, zaprezentowano, jak zmienia się ilość wykorzystanego katalizatora, a tym samym struktura materiału. Poprzez przejście od komercyjnych siatek katalizatora, przez nanocząstki katalizatora kończąc na atomowej strukturze.

