

## **Wielofunkcyjne katalizatory do elektrochemicznej konwersji czystej energii (*MultiCat*)**

W ostatnich latach wodór pozyskiwany z odnawialnych źródeł energii zyskuje na znaczeniu jako nośnik energii oraz surowiec dla przemysłu chemicznego. Wodór wytwarzany na drodze elektrolizy wody przy użyciu odnawialnej energii elektrycznej, ma nadrzędne znaczenie w zrównoważonej transformacji energetycznej oraz w celu zahamowania zmian klimatu. Niski koszt efektywnego wytwarzania wodoru poprzez elektrolizę (rozkład) wody wymaga opracowania nowych materiałów i wdrożenia nowatorskich metod. Projekt *MultiCat* ma na celu opracowanie zaawansowanych technologicznie wielofunkcyjnych katalizatorów do wydajnego generowania czystego („zielonego”) gazowego wodoru (na katodzie) oraz tlenu (na anodzie) w procesie elektrolitycznego rozkładu wody. Reakcja wydzielania tlenu z wody jest etapem najwolniejszym, ograniczającym szybkość całego procesu. Jako bardziej aktywne, selektywne i wydajne materiały katalityczne proponuje się zastosować fosforki metali przejściowych (przykładowo żelaza, kobaltu, miedzi, czy niklu), które stanowią alternatywę dla powszechnie używanych drogich tlenków metali szlachetnych, takich jak tlenek rutenu czy tlenek irydu. Niektóre fosforki metali będą również rozważone jako efektywne katalizatory reakcji wydzielania wodoru. W tym kontekście mogą być też rozpatrzone węgliki metali przejściowych. W trakcie trwania projektu opracowane zostaną nowe metody przygotowania nanostrukturalnych katalizatorów o określonej funkcjonalności i aktywności. Następnie zaproponowane układy zostaną unieruchomione na różnych nośnikach umożliwiających ich stabilizację oraz fizyczne rozdrobienie w celu zwiększenia elektrochemicznej powierzchni aktywnej. Prace badawcze współpracujących zespołów z Polski (*Uniwersytet Warszawski*), Austrii (*Politechnika Wiedeńska*) i Słowenii (*Uniwersytet Novej Goricy*) będą koncentrowały się na projektowaniu i optymalizacji działania zaawansowanych układów katalitycznych zawierających w swojej strukturze wygenerowane intencjonalnie defekty sieciowe (wakaty kationowe i anionowe), których obecność na powierzchni sprzyja podwyższeniu ich reaktywności i selektywności. Równie ważnym celem projektu *MultiCat* jest przygotowanie efektywnych katalizatorów indukujących proces reakcji redukcji tlenu, który obecnie ogranicza w znacznym stopniu wydajność niskotemperaturowych wodorowo-tlenowych ogniw paliwowych. W celu poszukiwania nowych alternatywnych materiałów katalitycznych dodatkowe prace będą skoncentrowane na syntezie sieci metalo-organicznych typu *MOF* (ang. *metal-organic frameworks*) wykorzystującej się kationy metali oraz łączniki organiczne (tzw. ligandy) o zróżnicowanym składzie, funkcjonalności i aktywności. W przedstawionym projekcie proponuje się nowe układy typu *MOF* zawierające w tych swoich strukturach kationy takich metali jak żelazo, tytan czy miedź o określonych właściwościach elektrochemicznych i stabilności. Przewiduje się też różnorodne pomiary diagnostyczne, w tym spektroskopowe, mikroskopowe i elektrochemiczne zmierzające do wyjaśnienia mechanizmów działania uzyskanych katalizatorów. Zaproponowane prace eksperymentalne będą poparte rozważaniami teoretycznymi opartymi na tzw. dyskretnych przekształceniach *Fouriera* (metoda *DFT*) w celu opracowania metodologii wytwarzania fosforków metali przejściowych z defektami sieci. Uzupełniające się umiejętności badawcze grup zaangażowanych w projekt doprowadzą do opracowania wydajnych, wielofunkcyjnych katalizatorów mających znaczenie dla technologii wodorowej i przyjaznej dla środowiska niskotemperaturowej konwersji energii elektrochemicznej.