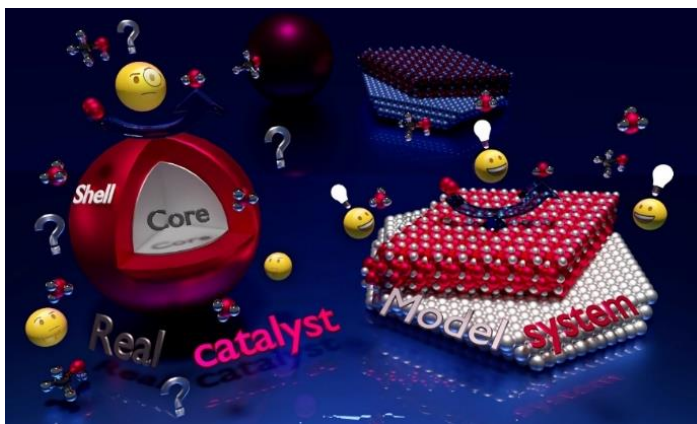


Nadrzędnym założeniem projektu jest przygotowanie i badanie nowych materiałów, które można wykorzystać do magazynowania i konwersji energii. Jest to priorytet nowoczesnych badań naukowych i technologicznych, ponieważ odpowiada na aktualne, ważne potrzeby społeczeństwa w kontekście **zrównoważonego rozwoju energii w oparciu o alternatywne i odnawialne źródła**. W tym aspekcie efektywne przetwarzanie energii chemicznej w energię elektryczną i odwrotnie wymaga opracowania innowacyjnych elektrokatalizatorów do zastosowania w ogniwach paliwowych (FC), bateriach i elektrolizerach, które są optymalizowane drogą empirycznej metody "trial&error". W tym projekcie podejście „knowledge-based” zostanie wykorzystane poprzez prowadzenie badań na poziomie podstawowym przy użyciu zaawansowanych technik fizykochemicznych powierzchni. Pozwolą one na wgląd we właściwości i procesy, zachodzące na granicy faz ciała stałe-ciecz w warunkach środowiskowych w **rozdzielczości atomowej** i w **czasie rzeczywistym**, koncentrując się na reakcjach elektrokatalitycznych ewolucji wodoru (HER), która jest podstawową reakcją powstającej gospodarki wodorowej i reakcji redukcji tlenu (ORR) jako reakcji katodowej w FC. Obecnie katalizatorami reakcji elektrochemicznych w FC, jak i przy produkcji tlenu bądź wodoru z elektrolizy, są najczęściej metale szlachetne. Powszechnie stosowanymi materiałami są platyna bądź pallad, pierwiastki o najlepszych właściwościach katalitycznych, jednak ich wysoki koszt oraz niskie zasoby wciąż utrudniają wdrażanie FC i produkcji wodoru przez elektrolizę na globalny rynek. Aktualnie stosuje się kilka strategii w celu zmniejszenia użycia lub całkowitego zastąpienia metali szlachetnych przy jednoczesnym utrzymaniu lub nawet zwiększeniu wydajności tych urządzeń. Używa się wtedy stopów Pt, katalizatorów nanostrukturalnych (np. rdzeniowo-powłokowych), metali spoza grupy platynowców, węglików i halogenków metali przejściowych lub azotków i fosforków.



Projekt ma na celu zbadanie systemów modelowych, odzwierciedlających elektrokatalizatory nanostrukturalne typu rdzeniowo-powłokowego na bazie materiałów 2D, takich jak grafen, grafen domieszkowany i chalcogenki metali przejściowych (TMDC), które, jak wykazano, posiadają nie tylko doskonałą wewnętrzną elektroaktywność, ale także biorą udział w ważnych zjawiskach w nanoskali, jeśli są osadzone na podłożach metali przejściowych bądź szlachetnych. Właściwości te nie są dostępne w przypadku osobnego użycia tych materiałów. Zjawiska takie jak **tunelowanie elektronowe, hybrydyzacja międzyfazowa oraz chemia powierzchni i kataliza w zamkniętych nano-przestrzeniach, utworzonych na interfejsie pomiędzy strukturą 2D a podłożem**, mogą być wykorzystane do racjonalnego projektowania zaawansowanych katalizatorów o radykalnie ulepszonych parametrach i właściwościach. Ponadto materiały 2D mogą być modyfikowane chemicznie poprzez wprowadzanie pojedynczych atomów tworzących tzw. **katalizatory jednoatomowe (SAC)**, które charakteryzujące się niekonwencjonalną koordynacją i strukturą elektronową i często wykazują unikalną aktywność chemiczną.

Wykonawcy projektu zamierzają **precyzyjnie określić zależności między aktywnością katalityczną a strukturą materiałów na poziomie atomowym** poprzez rygorystyczne podejście, oparte na syntezie układów modelowych w warunkach ultrawysokiej próżni (cienkich warstw 2D wspartych na monokryształach) oraz przy wykorzystaniu zaawansowanych i uzupełniających się technik *in operando* i *in situ*, takich jak elektrochemiczny skaningowy mikroskop tunelowy (EC-STM), spektroskopia Ramana i fotoelektrony wysokoenergetyczne (XPS). To nowatorskie podejście metodologiczne łączy techniki mikroskopowe, zdolne do identyfikowania katalitycznie aktywnych miejsc i ich struktury z atomową precyzją, z metodami spektroskopowymi, czułymi na zmiany stanów chemicznych i elektronowych, wywołane efektami pośrednimi i bezpośrednimi reakcji elektrokatalitycznej. Podejście to pozwoli na identyfikację: **i) ścieżki reakcji i czynników sterujących selektywnością; ii) mechanizmów aktywacji materiałów 2D, opartych na efektach elektronowych bądź zjawiskach chemicznych w nano-przestrzeni; iii) mechanizmów degradacji i przemian materiałów w warunkach pracy katalizatora**. Planowane badania mają charakter *interdyscyplinarny* łączący dziedziny nauki takie jak fizyka, chemia, nanotechnologia i inżynieria materiałowa i mają istotne znaczenie do racjonalnego projektowania nowoczesnych, wysoce wydajnych elektrokatalizatorów.