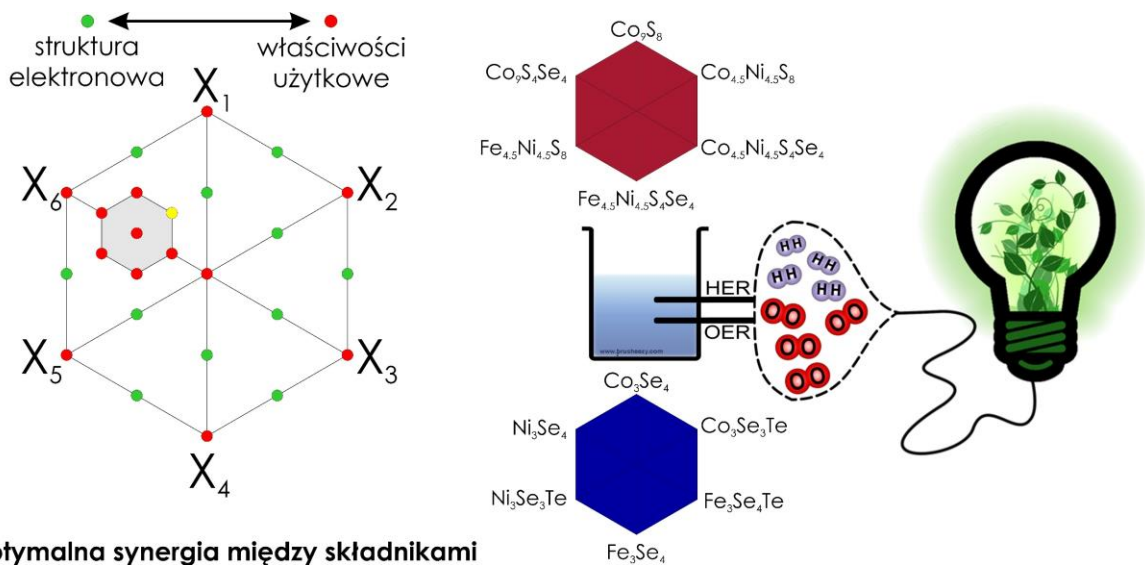


Stale rosnące światowe zapotrzebowanie na energię elektryczną wraz z postępującym kryzysem klimatycznym, wymuszają rozwój nowych technologii konwersji energii, które pozwolą w najbliższej przyszłości na zastąpienie rozwiązań wykorzystujących paliwa kopalne. Do jednych z najbardziej perspektywicznych kierunków należą szeroko rozumiane technologie wodorowe oparte na procesach elektrokatalitycznych, pozwalające osiągnąć bardzo wysokie sprawności procesów konwersji przy znikomym poziomie zanieczyszczenia środowiska. Fundamentalnym w tym kontekście procesem jest rozpad (elektroliza) cząsteczek wody na gazowy wodór (ang. *hydrogen evolution reaction*, HER) oraz tlen (ang. *oxygen evolution reaction*, OER). Otrzymany w ten sposób wodór może być następnie wykorzystany np. jako paliwo w ogniwach paliwowych. Biorąc pod uwagę stale rosnącą popularność technologii wodorowych, a także fakt, że obecnie około 95% wodoru niezbędnego do produkcji amoniaku, stali, tlenku glinu czy konwersji CO₂, pochodzi z przeróbki paliw kopalnych, opracowanie niedrogich metod produkcji tego gazu ma kluczowe znaczenie dla ochrony środowiska. Na chwile obecną najbardziej popularnymi katalizatorami do procesów HER i OER są platyna i związki metali szlachetnych, których wykorzystanie wiąże się niestety z wysokim kosztem całej technologii. Spośród rozlicznych proponowanych zamienników należy wyróżnić chalcogenki metali przejściowych, ze szczególnym uwzględnieniem struktur typu pentlandytu oraz pseudo-spinelu, które łączą w sobie przystępną cenę i prostotę przetwarzania materiałów, z ich dobrą aktywnością katalityczną. Niemniej jednak, w celu uczynienia ich rozwiązaniem opłacalnym na skalę przemysłową, konieczne jest dalsze podniesienie ich wydajności. Aby osiągnąć ten cel, w projekcie wykorzystana zostanie nowatorska strategia projektowania materiałów, polegająca na maksymalizacji efektów synergicznych pomiędzy poszczególnymi składnikami. Główna idea tego podejścia sprowadza się do wykorzystania szeregu składników znacznie podnosząc liczbę ich potencjalnych oddziaływań, co często prowadzi do generowania nowych właściwości, jak również podniesienia stabilności takich materiałów.



Rys. 1 Schematyczne przedstawienie koncepcji projektu.

W proponowanym projekcie, w celu wykorzystania pełnego potencjału opisanego podejścia, charakterystyka eksperymentalna badanych materiałów zostanie uzupełniona o szeroko zakrojone obliczenia teoretyczne, pozwalające na wyznaczenie tzw. deskryptorów aktywności katalitycznej – parametrów wynikających ze struktury elektronicznej, które mogą być skorelowane z wydajnością elektrochemiczną materiałów. W efekcie, możliwe jest otrzymanie narzędzia do ich projektowania o znacznej mocy predykcyjnej, pozwalającego na efektywne przeszukiwanie nawet bardzo szerokich zakresów składów. Zidentyfikowane materiały o najlepszej wydajności elektrochemicznej, zostaną następnie dokładnie zbadane, w tym w warunkach symulujących zastosowania przemysłowe, tak aby zapewnić dogłębne zrozumienie ich zależności skład-struktura-wydajność. Otrzymane rezultaty jednocześnie będą stanowiły potwierdzenie słuszności proponowanej koncepcji efektywnych i relatywnie tanich katalizatorów bazujących na pierwiastkach metali przejściowych.