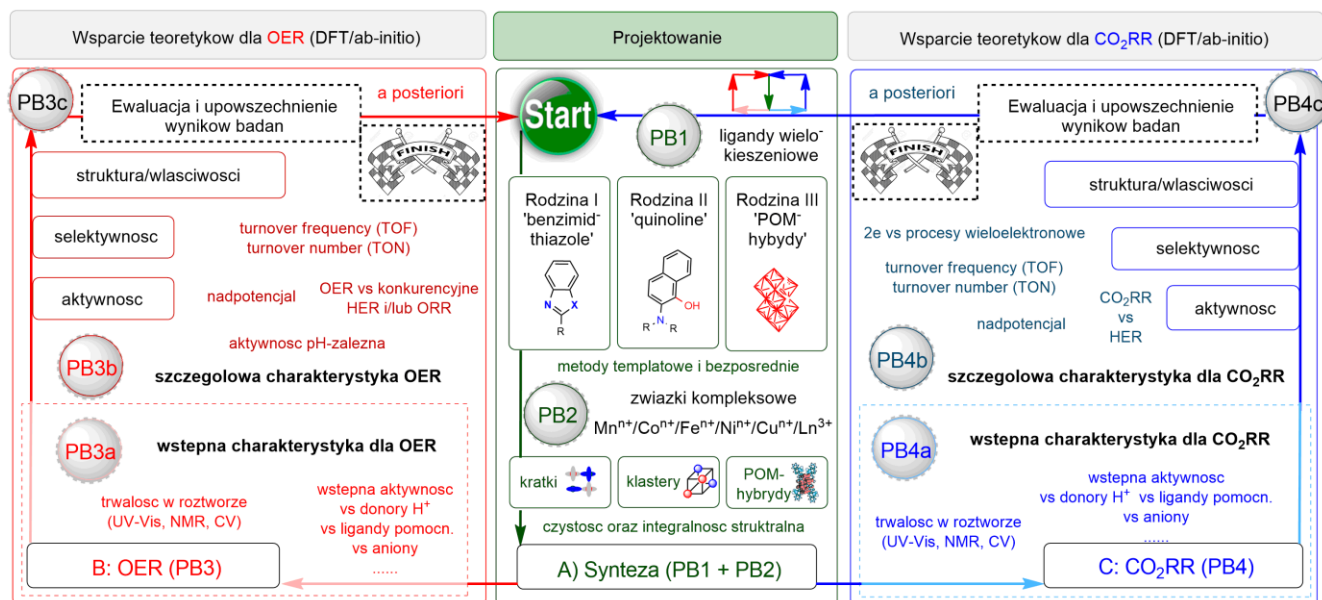


Cel projektu

Rosnąca liczba ludności, zmiany klimatyczne oraz wzrastający popyt energetyczny sprawiają, że zabezpieczenie naszej gospodarki energetycznej staje się nagłym problemem. Opracowanie zrównoważonych sposobów produkcji paliw i substancji chemicznych niewykorzystujących paliw kopalnych powinno odegrać ważną rolę w ograniczaniu emisji dwutlenku węgla, a jednocześnie zapewnić surowce niezbędne do wytwarzania produktów, których używamy na co dzień. Jednym z perspektywicznych celów jest opracowanie procesów konwersji elektrochemicznej, które mogą przekształcać cząsteczki pochodzące z atmosfery (H_2O , CO_2) w produkty o wyższej wartości (np. wodór, węglowodory, pochodne tlenowe). Elektrokatalizatory odgrywają kluczową rolę w owych technologiach konwersji energii, jednak ich zastosowanie w praktyce jest wciąż niewystarczające. Dlatego też w ramach projektu proponujemy syntezę serii homo- i hetero- wielometalicznych związków koordynacyjnych o potencjale poprawy kluczowych parametrów elektrokatalitycznych, takich jak zwiększenie szybkości, wydajności i selektywności przemian chemicznych małych cząsteczek CO_2 i H_2O .

Plan badań

Badania zostały podzielone na cztery pakiety (PB) badawcze, z których każdy określa konkretny cel projektu, ustrukturyzowane w trzy sekcje A-C. Część A dotyczy części syntetycznej ligandów oraz ich kompleksów, część B jest powiązana z badaniami dotyczącymi procesu utleniania wody, natomiast część C skupia się na badaniach dotyczących redukcji ditlenku węgla.



Racjonalne projektowanie odbędzie poprzez wprowadzenie koncepcji projektowania w formie ciągłej, które oszczędza czas oraz zasoby, lecz jednocześnie zwiększa nasze zrozumienie dotyczące wymagań strukturalnych niezbędnych do zaobserwowania zakładanych właściwości. W szczególności pozwoli to na *a posteriori* zaprojektowanie nowej cząsteczki **TM2**, bez wad cząsteczki **TM1**.

Spodziewane rezultaty projektu

Odpowiedni dobór, zaprojektowanie i funkcjonalizacja kompleksów bloków d-/f- elektronowych doprowadzi do otrzymania związków, które będą wykazywały działanie wzmacniające w procesach elektrochemicznych reagentów istotnych dla elektrochemicznej konwersji energii oraz wytwarzania paliw i chemikaliów użytkowych. W ten sposób zostanie zademonstrowany wielofunkcyjny charakter planowanych architektur, które w efekcie przyczynią się do rozwiązania niektórych globalnych wyzwań, zgodnych z polityką i programami Europejskiego Zielonego Ładu, zgodnymi z założeniami Światowego Forum Ekonomicznego w Davos w 2022 r.