

Cel projektu

Nadrzędnym celem projektu jest wytworzenie nowej wiedzy pozwalającej na określenie zależności między budową przestrzenną i składem chemicznym nano-fotokatalizatorów typu rdzeń-powłoka a ich właściwościami optycznymi determinującymi możliwość wykorzystania zjawiska zlokalizowanego powierzchniowego rezonansu plazmonowego (ang. LSPR) do zwiększania ich fotoaktywności w reakcjach chemicznych indukowanych światłem widzialnym.

Opis badań

W proponowanych badaniach zostanie wykorzystana metodologia komputerowego projektowania nano-fotokatalizatorów typu rdzeń-powłoka oraz symulacji ich właściwości optycznych. Stworzone zostaną nowe narzędzia numeryczne pozwalające na parametryczne projektowanie przestrzennych, modelowych reprezentacji struktur takich nanocząstek z uwzględnieniem zmienności ich cech geometrycznych (wymiarów oraz rozkładu przestrzennego). Dla wielu różnych wariantów wygenerowanych struktur zostaną przeprowadzone symulacje metodą różnic skończonych w domenie czasu (ang. FDTD), które pozwolą na wyznaczenie przekrojów efektywnych dla absorpcji/rozpraszania fali świetlnej w zakresie widzialnym jak również mapy rozkładu natężenia bliskiego pola. Zostaną również przeprowadzone symulacje z wykorzystaniem teorii funkcjonału gęstości (ang. DFT) w celu opisu charakterystyki granic międzyfazowych w skali atomowej oraz wyznaczenie niezbędnych stałych dielektrycznych. Zastosowanie parametrycznej, wielowariantowej metodyki projektowania numerycznego pozwoli przewidzieć właściwości wielu morfologii nanomateriałów znacznie mniejszym nakładem oraz ograniczając liczbę kosztownych i długotrwałych eksperymentów.

Opis powodów podjęcia tematyki badawczej

Ze względu na rosnące zapotrzebowanie na energię w połączeniu ze stopniowym wyczerpywaniem się pokładów paliw kopalnych i zanieczyszczeniem powietrza obserwowany jest bardzo wyraźny trend poszukiwania wydajnych alternatyw wykorzystywania zasobów nieodnawialnych w procesach produkcji energii. Jednym z intensywnie eksploatowanych badawczo wątków jest wykorzystanie energii słonecznej jako siły napędowej reakcji chemicznych. Procesem o szczególnym znaczeniu przemysłowym i gospodarczym jest produkcja wodoru jako paliwa przyszłości. Pełne wykorzystanie potencjału energii słonecznej możliwe jest przez zastosowanie odpowiednich fotokatalizatorów w postaci nanocząstek aktywnych w tym zakresie spektrum promieniowania. Aktywność ta determinowana jest zarówno przez odpowiednio dobrany skład chemiczny jak również przez budowę przestrzenną (morfologię) nanocząstek – wielkość i sposób organizacji przestrzennej nanocząstek na powierzchni rdzenia. Odpowiednie kształtowanie cech geometrycznych nanocząstek kompozytowych pozwala bowiem na intensyfikację zjawisk fizycznych występujących podczas interakcji nanoobjektów z falą elektromagnetyczną (np. efekt antenowy). W ostatnich latach zaprezentowano wyniki otrzymane dla nano-fotokatalizatorów o budowie rdzeniowo-powłokowej (core@shell) z rdzeniem z SiO_2 dekorowanym nanocząstkami Pt, które dodatkowo były zanurzone w powłoce z TiO_2 . W ten sposób został zaprezentowany nowy model absorpcji światła oraz możliwość modulowania piku absorpcji nanocząstek Pt w zakresie widzialnym poprzez dostosowanie ich środowiska dielektrycznego zamiast zmiany ich wielkości. Absorbpcja światła rozproszonego przez nanocząstki Pt w bliskim polu przy powierzchni dielektrycznej sferycznego rdzenia SiO_2 jest intensyfikowana rezonansem plazmonowym (LSPR), a cząstki wykazują wyraźne piki absorpcji w szerszym zakresie widma światła widzialnego, dzięki czemu osiągają znacznie wyższą aktywność fotokatalityczną pod kątem reakcji redoks. To odkrycie otwiera obiecującą drogę do stosowania metalicznych nanocząstek (plazmonowych) jako absorberów fotonów światła widzialnego w procesach konwersji energii słonecznej.

Najważniejsze spodziewane efekty

Realizacja projektu dostarczy kompleksowej wiedzy z zakresu poznania zależności między morfologią, a także składem chemicznym nano-fotokatalizatorów o strukturze rdzeniowo-powłokowej a ich właściwościami optycznymi mającymi bezpośredni wpływ na ich wydajność w reakcjach chemicznych indukowanych światłem widzialnym. Stworzone zostaną dedykowane narzędzia numeryczne, które pozwolą na projektowanie nano-fotokatalizatorów z uwzględnieniem wysublimowanych różnic w morfologii na poziomie ich budowy przestrzennej. Dzięki temu poznany zostanie wpływ poszczególnych parametrów struktury badanych nanocząstek na intensyfikację LSPR oraz na kształtowanie właściwości optycznych decydujących o ich fotoaktywności. Zakłada się, że na podstawie przeprowadzonych analiz numerycznych zostanie stworzony zestaw wytycznych do udanego projektowania i wyłoniony optymalny wariant (lub warianty) nano-fotokatalizatora, który będzie mógł zostać wytworzony i scharakteryzowany eksperymentalnie w ramach dalszych prac.