

Projektowanie materiałów sterowane danymi: sztuczna inteligencja jako narzędzie wspomagające syntezę nanokompozytów o hierarchicznej porowatości do zastosowań elektrokatalitycznych

Zapotrzebowanie na zaawansowane materiały do „wytwarzania czystej energii” stale rośnie i wiąże się z poszukiwaniem bezpieczniejszych, tańszych i bardziej ekologicznych rozwiązań. Wśród tych materiałów znajdują się związki, które są stosowane do podstawowych procesów technologii przyszłości, w tym takie, które posiadają właściwości katalityczne. Właściwości katalityczne są tu rozumiane jako te przyspieszające reakcje chemiczne, między innymi, poprzez obniżenie jej bariery energetycznej, czyli bariery, którą należy pokonać, aby zapoczątkować przebieg reakcji. **W szczególności badaczy i praktyków przemysłu interesują materiały, które mogą być wykorzystywane do reakcji elektrokatalitycznych, to jest takich, które zachodzą w układach elektrochemicznych na granicy faz elektroda/roztwór. Jedną z takich reakcji elektrokatalitycznych jest reakcja redukcji tlenu (w skrócie ORR),** która jest wykorzystywana jako źródło energii, w takich urządzeniach jak ogniwa paliwowe, mikrobiologiczne ogniwa paliwowe, czy baterie metalowo-powietrzne. Obecnie w tych urządzeniach stosuje się materiały na bazie metali szlachetnych, przykładowo platynę i pallad. Charakteryzują się one jednak niską trwałością, podatnością na zatrucie gazowe, niską aktywnością i selektywnością. Drugą grupą materiałów rozpowszechnioną w elektrokatalizie są materiały węglowe o dużej ilości porów, w których głównymi ograniczeniami w osiąganiu wysokiej wydajności użytkowej są między innymi niejednorodna budowa ich powierzchni, duża zawartość zanieczyszczeń, niska odporność na utlenianie oraz nieefektywny transport elektronów i ciepła.

Zmotywowani tymi wyzwaniami, w ramach projektu, **planujemy otrzymywać materiały nanokompozytowe zawierające cykliczne szkielety zawierające w swojej budowie atomy azotu oraz sferyczne nanostruktury węglowe (wielowarstwowe fulereny).** Dzięki takiej budowie powinny one charakteryzować się **wysoką aktywnością elektrokatalityczną.** Pomysł ten jest wyjątkowy, ponieważ nanokompozyty tego typu, nie zostały jeszcze wykorzystane w reakcjach elektrokatalitycznych. Nasze badania wskazują, że materiały nanokompozytowe posiadają właściwości takie jak: wysoka przewodność elektronowa, duża liczba i zwiększona dostępność miejsc aktywnych dla reagentów, wysoka porowatość, która umożliwi łatwy transport elektronów oraz wysoką trwałość chemiczną i elektrochemiczną. W ramach projektu planujemy zaprojektować wysoce wydajne katalizatory nanokompozytowe ze szczególnym uwzględnieniem korelacji między porowatą strukturą materiałów i wydajnością reakcji elektrokatalitycznej oraz zaprojektować zaawansowane materiały do elektrokatalizy przy użyciu opartego na sztucznej inteligencji (AI) podejściu „laboratorium w pętli”. **Naszym głównym celem jest zrewolucjonizowanie metodologii syntezy poprzez opracowanie podejścia opartego na AI do projektowania katalizatorów w celu poprawy wydajności elektrokatalitycznej materiałów i osiągnięcia bardzo dobrych parametrów użytkowych.**

Stosowanie jedynie syntetycznej metodologii prowadzącej do osiągnięcia celów postawionych w tym projekcie jest procesem bardzo czasochłonnym, kosztownym i żmudnym. Wykorzystanie narzędzi syntezy organicznej do otrzymania wielu grup nowych materiałów nanokompozytowych wymaga wielokrotnego powtarzania procedur (od kilkuset do nawet kilku tysięcy różnych kombinacji), w których trzeba wprowadzić wiele zmiennych parametrów, począwszy od różnych warunków syntezy. Możliwość kombinacji jest nieskończona, ponieważ powinniśmy każdorazowo zmieniać jeden parametr w procesie syntezy, aby sprawdzić, która z nich decyduje o uzyskaniu materiału o pożądanych właściwościach elektrokatalitycznych. Dodatkowo, otrzymane nanokompozyty należy dokładnie scharakteryzować, określając ich parametry fizyczne i chemiczne, co w konsekwencji, przełoży się na pożądane właściwości elektrokatalityczne, które zamierzamy osiągnąć.

W ramach tego projektu, **zamierzamy połączyć prace eksperymentalne w pozyskiwaniu materiałów do elektrokatalizy z AI w postaci algorytmów uczenia maszynowego (ML).** Wykorzystanie ML do znalezienia związku między parametrami strukturalnymi substratu, produktu i wydajnością elektrokatalityczną może sprzyjać projektowaniu nowych systemów o zaawansowanych właściwościach. Nasze podejście nazywamy projektowaniem materiałów opartym na danych. **To połączenie ML oraz syntezy jest całkowicie oryginalne i według naszej wiedzy nigdy nie było stosowane w chemii materiałowej w kontekście substratów do reakcji elektrokatalitycznych. Stosując innowacyjne podejście „laboratorium w pętli”, możemy skutecznie projektować zaawansowane materiały do elektrokatalizy.**

Efekt naukowy projektu: 1. Zyskanie wiarygodności naukowej dzięki zastosowaniu otwartej nauki. 2. Zachęcanie społeczności do nowych rozwiązań technologicznych wspieranych przez cyfryzację. 3. Doskonalenie metod lub danych do elektrokatalizy. 4. Stworzenie nowych modeli opartych na ML, które łączą strukturę materiału i strategię syntetyczną z wydajnością elektrokatalityczną porowatych nanokompozytów (projektowanie materiałów oparte na danych). 5. Stworzenie nowych modeli, które wskażą korelację między parametrami strukturalnymi substratów a wydajnością elektrokatalityczną.