

Dwuetaapowe termochemiczne reakcje redoks zachodzące na tlenkach metali cieszą się w ostatnich latach coraz większym zainteresowaniem społeczności naukowej. **Często bada się je w kontekście konwersji ciepła (zwykle ze skoncentrowanej energii słonecznej) na energię chemiczną, która może być dalej wykorzystywana do następujących zastosowań: magazynowanie energii, produkcja paliw odnawialnych (proces rozdzielania wody i dwutlenku węgla do produkcji ciekłych paliw węglowodorowych), separacji powietrza i rozwijania technologii pomp tlenowych.**

Rozwój wszystkich wyżej wymienionych zastosowań zależy od doboru odpowiednich materiałów redoks do cyklu, który należy zoptymalizować pod kątem konkretnego zastosowania. Chociaż idealny wybór może się różnić w każdym przypadku, mają one podobieństwa pod względem termodynamiki redoks i korzystnych właściwości materiału. Dlatego dobór prawidłowego cyklu redoks w każdym przypadku podlega podobnym ograniczeniom.

Termodynamika odgrywa kluczową rolę i powinna być głównym czynnikiem brany pod uwagę przy próbach optymalizacji materiałów lub określania warunków dla dwuetaapowych termochemicznych cykli redoks. Jeśli termodynamika okaże się obiecująca, aplikacja może nadal napotkać problemy, takie jak ograniczenia kinetyczne lub pogorszenie jakości materiału. I odwrotnie, jeśli termodynamika nie jest korzystna, praktyczna realizacja będzie z pewnością ograniczona przez ten czynnik. Szeroka gama badań naukowych wskazuje również, że tlenki, które podczas redukcji wykazują pełne przejście fazowe, mają zdolność do magazynowania znacznie większej ilości energii właściwej w porównaniu z materiałami, które ulegają częściowej redukcji. Z drugiej strony materiały ulegające częściowej redukcji generalnie wykazują szybszą kinetykę i większą aktywność w niższych temperaturach. **Dlatego dobór materiałów do różnych zastosowań często wiąże się z kompromisem między znaczeniem magazynowania energii o dużej mocy właściwej a zaletami szybkiej kinetyki i pracy w niskich temperaturach.**

W tym kontekście naszym celem jest dostarczenie wszechstronnej wiedzy na temat ogólnego mechanizmu i czynników środowiskowych rządzących termochemicznymi cyklami redoks na przykładowych materiałach, tj. katalizatorach na bazie tlenku manganu. Projekt ma na celu kompleksowe wyjaśnienie roli i mechanizmu procesów redoks, ze szczególnym uwzględnieniem *(i) wywołanej temperaturą redukcji katalizatora, (ii) zachowania się katalizatora w zmiennych środowiskach redoks oraz (iii) zachowania się katalizatora w zmiennych środowiska redoks po domieszkowaniu katalizatora pierwiastkami modelującymi jego właściwości redoks.*

Pierwszy cel pozwoli na wstępne zrozumienie zachowania katalizatora podczas termochemicznych cykli redoks. Drugi cel wyjaśni rolę właściwości redoks katalizatora, struktury atomowej i morfologii, z naciskiem na rolę różnych form tlenu i wakancji, które mogą być zaangażowane w termochemiczne cykle redoks. Wreszcie cel trzeci, (iii), poprzez odpowiedni dobór domieszek, pozwoli na zaprojektowanie katalizatora na bazie tlenku manganu o właściwościach redoks dostrojonych w kierunku zwiększenia wydajności procesów magazynowania energii lub rozszczepiania wody i dwutlenku węgla. Sam projekt badawczy podzielony jest na cztery zadania. Zadania 1-3 koncentrują się na dogłębnej analizie właściwości morfologicznych, strukturalnych i elektronowych układów modelowych oraz opisie zachowania w różnych warunkach redoks modelowych układów katalitycznych. Zadanie 4 koncentruje się na zastosowaniu i rozszerzeniu tej wiedzy na domieszkowane układy katalityczne. Wybrane tlenki manganu spełniają wszystkie wymagania stawiane materiałom katalitycznym oraz wykazują wymaganą aktywność w termochemicznych procesach redoks. Ich wszechstronność strukturalna i redoksova, wraz z dobrze zdefiniowaną morfologią, zapewniają wyjątkowe możliwości badania zależności struktura-właściwości katalityczne w cyklach redoks na poziomie molekularnym.