

Zrozumienie zależności struktura-aktywność w siarczkoselenkach metali przejściowych jako materiałach elektrokatalitycznych dla reakcji wydzielania wodoru

Mateusz Szczerba

Streszczenie popularnonaukowe

Współczesna nauka stoi w obliczu rosnącego zapotrzebowania na wiedzę o procesach konwersji energii. Wśród wielu kierunków badań podstawowych, szczególnie aktywnym obszarem jest rozwój i zrozumienie nowych materiałów elektrokatalitycznych dla reakcji wydzielania wodoru (ang. hydrogen evolution reaction, HER), kluczowego etapu elektrolizy wody. Siarczkoselenki metali przejściowych – związki tworzone przez siarkę, selen oraz pierwiastki metaliczne – stają się obiecującą alternatywą dla metali szlachetnych w reakcji HER, ale wciąż pozostaje wiele pytań dotyczących tego, jak ich skład, struktura i historia syntezy wpływają na ich działanie.

Celem tego projektu jest zbadanie siarczkoselenków kobaltu (Co) i żelaza (Fe) jako układów modelowych do określenia, w jaki sposób skład chemiczny, mikro/nanostruktura i strategia syntetyczna wpływają na ich aktywność elektrochemiczną w HER w środowisku zasadowym. Materiały te są szczególnie interesujące ze względu na ich przestrajalną strukturę elektronową, wysoką teoretyczną aktywność i możliwość wykorzystania tanich metod produkcji. Poprzez systematyczną zmianę składu i drogi otrzymywania, projekt ma na celu zidentyfikowanie cech strukturalnych – takich jak morfologia, krystaliczność lub rozkład heteroatomów – które najsilniej wpływają na zachowanie katalityczne. Jest to projekt o charakterze badań podstawowych, który nie koncentruje się na produkcji materiałów komercyjnych, ale na głębszym zrozumieniu zależności między strukturą a aktywnością w złożonych katalizatorach opartych na metalach nieszlachetnych.

W pierwszym etapie badań kobalt zostanie osadzony elektrochemicznie na dwóch różnych podłożach przewodzących – piance węglowej i piance niklowej – a następnie zmodyfikowany poprzez obróbkę hydrotermalną przy użyciu prekursorów siarki i selenu, w celu utworzenia struktur siarczkoselenkowych. Na podstawie uzyskanych wyników jedno podłoże zostanie wybrane do dalszych badań. W następnej fazie żelazo zostanie wprowadzone poprzez domieszkowanie hydrotermalne lub bezpośrednie wykorzystanie elektroosadzanych stopów Co/Fe. Porównanie tych dwóch metod pomoże określić, w jaki sposób ścieżka inkorporacji Fe wpływa na skład fazowy, obecność defektów, morfologię i wydajność elektrokatalityczną materiału.

Projekt będzie obejmował obszerną charakterystykę materiałów przy użyciu skaningowej i transmisyjnej mikroskopii elektronowej, dyfrakcji rentgenowskiej, spektroskopii Ramana i XPS oraz różnych technik elektrochemicznych. Wydajność elektrokatalityczna zsyntetyzowanych elektrod zostanie oceniona za pomocą metod woltamperometrycznych i impedancyjnych, a także długoterminowych testów HER w roztworach zasadowych. Wybrane próbki zostaną również poddane ponownej charakterystyce po zakończeniu testów w celu oceny ich stabilności strukturalnej i trwałości.

Wyniki tego projektu zapewnią cenny wgląd w czynniki fizykochemiczne, które determinują wydajność siarczkoselenków metali przejściowych w HER i przyczynią się do bardziej racjonalnego projektowania materiałów katalitycznych dla technologii energetycznych związanych z wodorem. W szczególności, systematyczne porównanie dwóch strategii inkorporacji żelaza (poprzez domieszkowanie hydrotermalne i osadzanie stopu) rzuci światło na role strukturalne i środowisko chemiczne Fe w układach zawierających różne aniony. Wyniki pomogą wyjaśnić, w jaki sposób odmienne drogi syntezy prowadzą do różnych rozkładów miejsc aktywnych, składów fazowych lub struktur elektronowych. Co więcej, odkrycia przyczynią się do szerszego rozwoju w dziedzinie projektowania materiałów heteroanionowych, oferując wytyczne dotyczące kontrolowania relacji skład-struktura-aktywność w złożonych związkach metali przejściowych. Chociaż badania mają charakter podstawowy, zdobyta wiedza może wpłynąć na sposób projektowania przyszłych elektrokatalizatorów, zwłaszcza w kontekście skalowalnej i opłacalnej produkcji wodoru.