

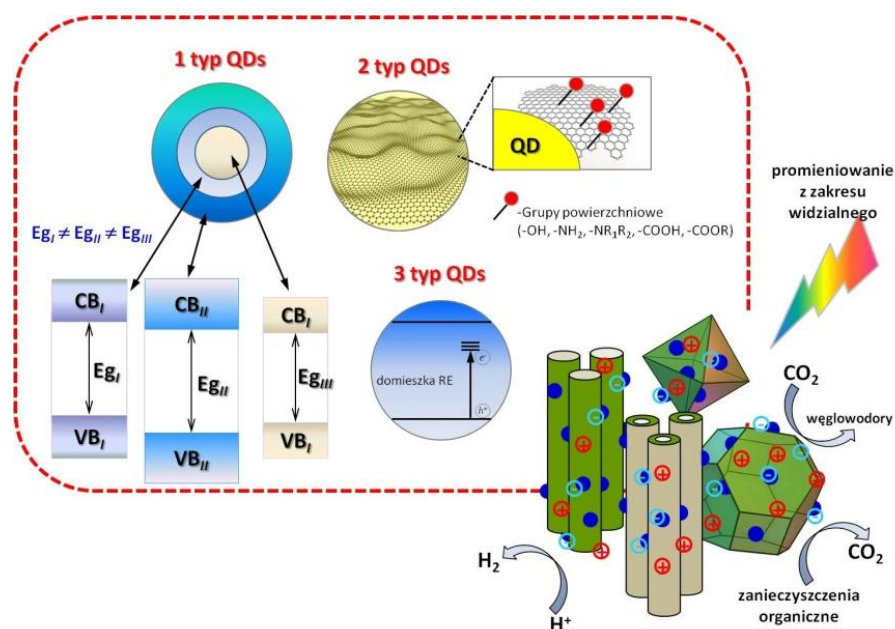
# Mechanizm wzbudzenia kropek kwantowych w reakcjach fotokatalitycznych

## Cel naukowy badań/Hipoteza

Celem projektu jest: (1) opracowanie nowej grupy materiałów bazujących na kropkach kwantowych (QDs) (*domieszkowanych QDs, domieszkowanych wielowarstwowych QDs, kropkach kwantowych na bazie materiałów węglowych oraz kompozytach zbudowanych z półprzewodnikowej matrycy (przestrzennie zorientowane struktury 3D) dekorowanej QDs*) i wykazujących podwyższoną aktywność w procesach konwersji energii słonecznej do energii wiązań chemicznych (*generowanie  $H_2$  oraz fotokonwersja  $CO_2$* ) oraz degradacji zanieczyszczeń organicznych; (2) zbadanie mechanizmu ich wzbudzenia pod wpływem promieniowania z zakresu UV oraz Vis i mechanizmu procesów fotokatalitycznych zachodzących w ich obecności, a także (3) opracowanie modelu opisującego zależność pomiędzy właściwościami strukturalnymi a aktywnością dla wybranych typów reakcji.

Główne założenia projektu opierają się na następujących hipotezach:

- Półprzewodniki w postaci kropek kwantowych pozwolą na lepsze wykorzystanie padającego promieniowania w reakcjach fotokatalitycznych wykorzystywanych zarówno w ochronie środowiska (degradacja zanieczyszczeń) jak w konwersji energii (rozkład wody i sztuczna fotosynteza) niż półprzewodniki w większych rozmiarach;
- Efektywność reakcji pod wpływem promieniowania z zakresu widzialnego może zostać zwiększona poprzez: (i) połączenie QDs z matrycą wykonaną z przestrzennie zorientowanego półprzewodnika, (ii) domieszkowanie QDs pierwiastkami ziem rzadkich (RE) (które efektywnie podnoszą aktywność półprzewodników o rozmiarach makrometrycznych); (iii) zastosowanie QDs wielowarstwowych i jednocześnie domieszkowanych (domieszkowany rdzeń i/lub otoczka), oraz (iv) zastosowanie węglowych kropek kwantowych (w tym kropki kwantowe grafenowe, pasywowane węglowe QDs, QDs wielowarstwowe zbudowane z warstwy półprzewodnikowej oraz węglowej);
- Opracowanie modelu opisującego ilościowo zależność struktury od aktywności pozwoli w przyszłości na projektowanie nowych nanomateriałów o zwiększonej funkcjonalności oraz powinno pozwolić na zmniejszenie kosztów badań eksperymentalnych.



**Rysunek 1.** Proponowane typy kropek kwantowych oraz kompozytów półprzewodnik-QDs do reakcji fotodegradacji zanieczyszczeń, fotorozkładu wody oraz fotokonwersji  $CO_2$  (I) kropki kwantowe wielowarstwowe (w tym domieszkowane QDs); (II) węglowe kropki kwantowe, oraz (III) kropki kwantowe domieszkowane pierwiastkami ziem rzadkich (RE)

## Metodyka badawcza

W pierwszym etapie projektu zostanie wyselekcjonowany skład kropek kwantowych oraz kompozytów (półprzewodniki połączone z kropkami kwantowymi) do trzech systemów fotokatalitycznych (degradacja zanieczyszczeń, generowanie  $H_2$  oraz fotokonwersja  $CO_2$ ) bazując

na przesłankach teoretycznych (szerokość przerwy energetycznej, położenie krawędzi pasma walencyjnego oraz przewodzenia, etc) oraz wykorzystując metody chemoinformatyczne. W zależności od struktury oraz składu kropki kwantowej i matrycy półprzewodnikowej, do otrzymywania kompozytów zostaną wykorzystane następujące metody: (i) bezpośredniej adsorpcji, (ii) metoda z wykorzystaniem linkera, (iii) synteza *in-situ* półprzewodnika i kropki kwantowej z ich prekursorów; (iv) synteza QDs z prekursora w obecności wcześniej wytworzonej matrycy półprzewodnikowej, oraz (v) synteza matrycy półprzewodnikowej z prekursora w obecności wcześniej wytworzonej kropki kwantowej. Wszystkie otrzymane nanostruktury zostaną scharakteryzowane pod kątem struktury krystalicznej, wielkości krystalitów i naprężeń sieciowych (techniką XRD), defektów powierzchniowych i charakteru chemicznego pierwiastków w warstwie powierzchniowej (techniką XPS), morfologii powierzchni (mikroskopia SEM i TEM), oraz właściwości optycznych (spektroskopia UV-Vis oraz fotoluminescencja). Mechanizm wzbudzenia otrzymanych materiałów oraz mechanizm reakcji fotokatalitycznych w obecności fotokatalizatorów bazujących na QDs zostanie zbadany m.in. poprzez zbadanie wpływu długości fali wzbudzającej na wydajność kwantową w trzech reakcjach modelowych: (1) degradacja zanieczyszczeń, (2) generowanie H<sub>2</sub>, oraz (3) fotokonwersja CO<sub>2</sub>.

### **Wpływ spodziewanych rezultatów na rozwój nauki, cywilizacji, społeczeństwa**

Fotokataliza heterogeniczna w obecności nanocząstek półprzewodników jest przykładem technologii przyjaznej dla środowiska i pozwalającej na degradację zanieczyszczeń oraz konwersję energii słonecznej. Dane literaturowe jak i badania własne wskazują, że fotokatalizatory oparte na kropkach kwantowych mogą być efektywnie wykorzystywane w układach do degradacji zanieczyszczeń w strumieniach powietrza i wody, w układach generowania wodoru (jako czystego nośnika energii) podczas rozkładu wody, w procesie sztucznej fotosyntezy (konwersja CO<sub>2</sub> do użytecznych węglowodorów) czy w ogniwach słonecznych. Co więcej, spodziewane jest, że lepsze zrozumienie mechanizmu wzbudzenia oraz mechanizmu reakcji fotokatalitycznych zachodzących w obecności QDs, a także opracowanie modelu opisującego zależność pomiędzy właściwościami strukturalnymi a aktywnością dla wybranych typów reakcji, pozwoli na stworzenie nowej metody projektowania nanomateriałów o właściwościach fotokatalitycznych.