

Nowe materiały półprzewodnikowe do fotokatalitycznego generowania wodoru: mechanizm formowania w obecności cieczy jonowych

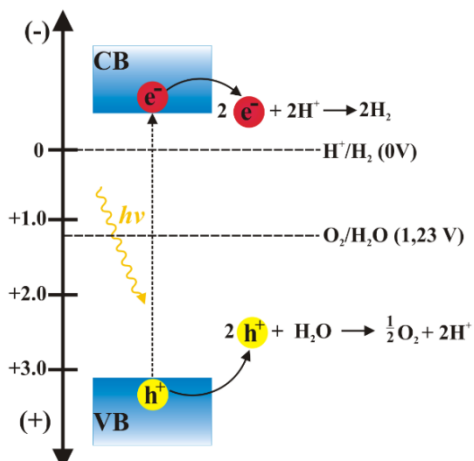
Uniwersytet Gdański

1. Cel projektu

Celem projektu jest: (1) **synteza nowych fotokatalizatorów** typu AgTaO_3 , AgNbO_3 , SrSnO_3 , SrTiO_3 , GaFeO_3 i FeVO_4 o **podwyższonej aktywności w procesie generowania wodoru otrzymanych** w procesie hydrotermalnej syntezy **w obecności cieczy jonowych (ILs)**, (2) wyjaśnienie relacji pomiędzy właściwościami powierzchniowymi nowych nanokompozytów a wydajnością generowania wodoru i (3) opracowanie modelu teoretycznego **opisującego zależności pomiędzy właściwościami nowych nanomateriałów z efektywnością generowania wodoru.**

2. Znaczenie projektu

Potencjał / V vs. NHE (pH = 0)



Rys.1 Schemat mechanizmu fotokatalitycznego rozszczepiania wody

Fotokataliza heterogeniczna w obecności nanocząstek półprzewodników jest przykładem technologii przyjaznej dla środowiska i pozwalającej na degradację zanieczyszczeń oraz inaktywację mikroorganizmów zarówno w fazie wodnej jak i w strumieniach powietrza. W ostatnim czasie dużym zainteresowaniem cieszy się metoda otrzymywania wodoru w procesie fotokatalitycznym w obecności nanocząstek półprzewodników oraz promieniowania UV-Vis lub słonecznego (Rys. 1). Nanomateriały stosowane do fotokatalitycznego rozkładu wody powinny cechować się (i) odpowiednim położeniem pasma walencyjnego i przewodnictwa, (ii) przerwą energetyczną niższą niż 3 eV, a także (iii) fotochemiczną stabilnością w reakcji fotokatalitycznej. Ponadto, położenie pasma walencyjnego fotokatalizatora musi być poniżej niż potencjału redoks $\text{O}_2/\text{H}_2\text{O}$, natomiast położenie pasma przewodnictwa - powyżej poziomu odpowiadającego redukcji H^+/H_2 .

Ciecze jonowe będące solami o temperaturze topnienia $< 100^\circ\text{C}$ wzbudziły zainteresowanie środowiska naukowego ze względu na nieznaczną prężność par, stabilność termiczną, zdolność do oddziaływania i tworzenia zróżnicowanych wiązań ze składnikami mieszaniny reakcyjnej, stanowiąc nowe indywidua chemiczne o właściwościach solwatujących oraz strukturotwórczych. Możliwość modyfikacji budowy kationu i wyboru anionu, a w konsekwencji możliwość udoskonalania ich właściwości fizycznych i chemicznych pozwala na projektowanie nowych, ukierunkowanych na określony cel mediów. Jednocześnie, ciecze jonowe posiadają zdolność oddziaływania z cząstkami półprzewodników, pełniąc tym samym funkcję czynnika strukturotwórczego. Zastosowanie cieczy jonowych o odpowiedniej strukturze może umożliwić otrzymywanie nowych struktur o pożądanych właściwościach (m.in. trójwymiarowa struktura, silnie rozwinięta powierzchnia właściwa, wysoka aktywność fotokatalityczna).

Proponowane rozwiązanie pozwoli na opracowanie **nowych efektywnych fotokatalizatorów** i tym samym pozwoli na wykorzystanie odnawialnego źródła energii (promieniowania słonecznego) do wytwarzania wodoru. Dodatkowo, w proponowanym projekcie **plan badań stanowi połączenie metod obliczeniowych z badaniami eksperymentalnymi**, co powinno pozwolić w przyszłości na nowoczesne projektowanie nowych nanomateriałów o zwiększonej funkcjonalności a także na zmniejszenie kosztów badań eksperymentalnych. Oczekuje się, że realizacja badań będących przedmiotem projektu **przyczyni się do rozwoju dyscyplin naukowych** związanych z materiałami funkcjonalnymi, cieczami jonowymi oraz fotokatalizacją.

3. Opis badań

W projekcie proponuje się badania podstawowe mające na celu opracowanie nowych nanomateriałów typu AgTaO_3 , AgNbO_3 , SrSnO_3 , SrTiO_3 , GaFeO_3 i FeVO_4 charakteryzujących się podwyższoną aktywnością w reakcji rozkładu wody do wodoru, pod wpływem promieniowania UV-Vis lub widzialnego. Fotokatalizatory otrzymane zostaną w procesie syntezy hydrotermalnej w obecności cieczy jonowych. Charakterystyka nanostruktur będzie obejmować: analizę powierzchni właściwej, dyfrakcji rentgenowskiej, spektroskopii fotoelektronów, badanie widm absorpcji UV-Vis, widm FT-IR oraz Ramana, właściwości fotoluminescencyjnych, analizę mikroskopową SEM/TEM. Zostanie opracowany model korelujący właściwości strukturalne otrzymanych nanostruktur z ich fotoaktywnością w procesie generowania wodoru.