

Dekodowanie transformacji atomowych i aktywnych miejsc dla elektrokatalizatorów nowej generacji

Globalna transformacja w kierunku **zrównoważonych źródeł energii** uwypukla potrzebę efektywnej produkcji wodoru, w której **elektroliza wody** odgrywa kluczową rolę. Proces ten polega na rozkładzie wody na tlen i wodór, który jest pożądanym, *czystym nośnikiem energii* zdolnym do zastąpienia innych źródeł energii emitujących gazy cieplarniane. Jednym z największych wyzwań w tym procesie jest reakcja wydzielania tlenu (ang. Oxygen Evolution Reaction, OER), kluczowy etap **rozkładu wody**, który charakteryzuje się powolną kinetyką i wysokim zapotrzebowaniem na energię. **Tlenki metali przejściowych** (ang. Transition Metal Oxides, TMOs), takie jak tlenki żelaza, kobaltu i niklu, są obiecującymi katalizatorami OER ze względu na swoją *dostępność, stabilność i aktywność katalityczną*. Ich wydajność katalityczna jest ściśle powiązana z ich **właściwościami elektronowymi i strukturą powierzchniową**, która podczas OER przechodzi złożone transformacje, takie jak *rekonstrukcje powierzchniowe, przemiany fazowe czy zmiany stanów utlenienia*. Aktualnie dynamiczne zmiany strukturalne i elektronowe badanych materiałów w rzeczywistych warunkach pracy OER są słabo poznane ze względu na ograniczenia istniejących technik eksperymentalnych, uniemożliwiające obserwacje tych procesów na **poziomie atomowym w czasie rzeczywistym**. Ta luka w wiedzy i ograniczenia badawcze utrudniają projektowanie wydajnych i trwałych katalizatorów.

Przedłożony projekt ma na celu rozwiązanie zarysowanych powyżej problemów naukowych i przezwyciężenie technologicznych wyzwań poprzez **innowacyjne, interdyscyplinarne** podejście. Charakteryzuje je wykorzystanie zaawansowanej aparatury badawczej, selektywnej syntezy materiałów oraz realizacja badań na **poziomie atomowym w czasie rzeczywistym**. Do osiągnięcia postawionych celów zostaną wykorzystane nowoczesne techniki *in situ* i *operando*, między innymi **elektrochemiczny skaningowy mikroskop tunelowy** (ang. Electrochemical Scanning Tunneling Microscope, EC-STM) wraz z komorą do syntezy materiałów w **ultrawysokiej próżni (UHV)**, które umożliwią obserwację **transformacji strukturalnych i elektronowych** w TMOs podczas OER. Specjalnie zaprojektowany system EC-STM wyposażony zostanie między innymi w komórkę przepływową pozwalającą na efektywne usuwanie wydzielanych gazów z obszaru roboczego, szybkie układy elektronicznego sterowania i akwizycji danych pozwalające na obrazowanie z prędkością wideo oraz w **zautomatyzowany izolator sond mikroskopowych (ATC)** gwarantujący wysoką powtarzalność sond i stabilność podczas ich pracy.

Precyzyjnie zdefiniowane systemy modelowe TMOs, syntetyzowane w warunkach UHV ze ścisłą kontrolą **składu, struktury i morfologii**. Materiały te zostaną kompleksowo scharakteryzowane za pomocą technik takich jak **rentgenowska spektroskopia fotoelektronów (XPS)**, **dyfrakcja elektronów o niskiej energii (LEED)** oraz **spektroskopia fotoelektronów ultrafioletowych (UPS)**, co umożliwi kompleksową charakterystykę materiałów przed i po testach elektrochemicznych. Zaawansowana analiza danych, w tym zaawansowane algorytmy statystyczne, zostaną wykorzystane do przetwarzania dużych zbiorów danych (**Video-EC-STM**) i korelowania zmian *strukturalnych i elektronowych z aktywnością katalityczną*, wypełniając lukę **między obserwacjami na poziomie atomowym a makroskopowymi metrykami wydajności**.

W ramach projektu poszukiwane będą odpowiedzi na cztery fundamentalne pytania z zakresu elektrokatalizy: **(1) Jakie fazy są stabilne i aktywne podczas OER? (2) Jak zmiany struktury powierzchni, w tym defekty i domieszkowanie, wpływają na aktywność katalityczną? (3) Jak zmiany stanów utlenienia wpływają na struktury elektronowe i ich katalityczne zachowanie? (4) Jak zebrane informacje mogą pomóc w racjonalnym projektowaniu efektywnych i tanich katalizatorów?** Odpowiedzi na powyższe pytania pozwolą na zrozumienie mechanizmów napędzających **wydajność katalityczną TMOs** oraz do ustalenia zależności pomiędzy **strukturą a aktywnością badanych materiałów**, które będą stanowić podstawę dla projektowania katalizatorów nowej generacji.

Nowatorskie podejście projektu polega na kompleksowym badaniu w **czasie rzeczywistym dynamicznego zachowania TMOs podczas OER**. Łącząc obrazowanie na **poziomie atomowym z zaawansowaną analizą danych**, wykraczamy poza tradycyjne metody empiryczne w rozwoju katalizatorów. Oczekiwane wyniki obejmują przełomowe odkrycia dotyczące zachowania katalizatorów, umożliwiające rozwój katalizatorów opartych na TMOs o zwiększonej **wydajności, stabilności i skalowalności**. Poprzez zmniejszenie zależności od metali szlachetnych oraz wykorzystanie powszechnie dostępnych TMOs, rezultaty wpisują się w cele globalnej polityki wspierającej przejście na **technologie czystej energii**.

Oprócz bezpośredniego wkładu w badania nad OER, projekt wprowadzi przełomowe innowacje metodologiczne w dziedzinie **elektrochemicznej nauki o powierzchni**. Wyniki znajdą zastosowanie w innych systemach katalitycznych, takich jak redukcja dwutlenku węgla czy ogniwa paliwowe, tworząc nowe ścieżki dla technologii czystej energii.