



DOFINANSOWANO ZE ŚRODKÓW BUDŻETU PAŃSTWA



Porowate materiały węglowe z mononuklearnymi centrami koordynacyjnymi typu Fe-N₄: uniwersalne (elektro)katalizatory reakcji elektroprotycznych

Celem projektu jest opracowanie syntezy porowatych materiałów węglowych zawierających jednoatomowe centra koordynacyjne typu Fe-N₄ i ich zastosowanie w roli heterogenicznych (elektro)katalizatorów reakcji sprzężonego przeniesienia elektronu i protonu. Mononuklearne centrum katalityczne plasuje takie katalizatory na pograniczu homo- i heterokatalizy. Katalizatory tego typu to porowate węgle domieszkowane substytucyjnie azotem gdzie faza węglowa pełni jednocześnie rolę nośnika ale i aktywnej części katalizatora. Jony Fe związane są koordynacyjnie z matrycą węglową poprzez atomy azotu.

Opis projektu: Projekt zakłada opracowanie syntezy nieorganicznych katalizatorów typu metal-N-C analogicznych do metaloenzymów zawierających jednoatomowe centra koordynacyjne typu Fe-N₄. W materiałach typu Fe-N_x-C żelazo może występować w wielu formach, celem projektu jest synteza materiału w którym jon Fe(II) znajduje się w diwakansie z czterema atomami azotu w formie pirydynowej, które chelatują żelazo w planarnej strukturze Fe-N₄. Różnica między nieorganicznymi katalizatorami Fe-N₄-C jest taka, że Fe jest chelatowany azotem związanym w strukturze pirydynowej podczas gdy w metaloenzymach Fe chelatowany jest azotem w 5-członowych pierścieniach pirolowych. Struktura azotu koordynującego jon Fe (pirydynowy czy pirolowy) decyduje o aktywności i trwałości mononuklearnych katalizatorów typu Fe-N₄-C. Ze względu na podobieństwo do metaloenzymów mononuklearne katalizatory Fe-N₄-C nazywane są również syntetycznymi enzymami. Wielostopniowa synteza, gdzie każdy etap tworzenia Fe(II)-N₄ realizowany jest w bardzo specyficznych warunkach, powinna być najlepszym podejściem do maksymalizacji ich ilości w matrycy węglowej. Katalizatory takie uważane są za uniwersalne ponieważ katalizują wiele procesów elektroprotycznych, w tym elektroredukcję CO₂ i N₂. Modelową reakcją analizowaną w niniejszym projekcie będzie redukcja O₂, gdyż determinuje ona wydajność wodorowych ogniw paliwowych a monoatomowe katalizatory Fe-N₄-C stanowią ekonomiczną alternatywę do katalizatorów na bazie metali szlachetnych.

Źródło finansowania:

Narodowe Centrum Nauki – program OPUS

Okres realizacji projektu:

15.01.2021–14.01.2025

Całkowity koszt realizacji projektu:

1 697 400,00 PLN

Dofinansowanie projektu w WAT:

1 697 400,00 PLN