W obliczu rosnącego zapotrzebowania na odnawialne źródła energii, takie jak światło słoneczne, dynamicznie rozwijają się technologie umożliwiające jego efektywne wykorzystanie. Jedną z najbardziej perspektywicznych metod jest fotokataliza heterogeniczna, polegająca na wzbudzabiu półprzewodników światłem w celu inicjowania reakcji chemicznych, często niemożliwych do przeprowadzenia innymi sposobami. Fotokatalizatory są stosowane w takich procesach jak rozkład wody do wodoru, degradacja zanieczyszczeń środowiskowych czy syntezy organiczne.

Skuteczność fotokatalizatora zależy od jego właściwości energetycznych, tj. od położenia pasma przewodnictwa i pasma walencyjnego, które wyznaczają możliwości przeprowadzania reakcji redoks. W rzeczywistych materiałach kluczową rolę odgrywają jednak defekty strukturalne i związane z nimi tzw. stany pułapkowe. Mogą one zarówno poprawiać separację nośników ładunku, jak i prowadzić do niekorzystnych rekombinacji, istotnie wpływając na aktywność fotokatalityczną. Zrozumienie natury tych stanów jest zatem niezbędne do opracowania nowoczesnych i wydajnych materiałów fotoaktywnych.

Celem projektu jest opracowanie nowatorskiego podejścia do analizy struktury elektronowej półprzewodników poprzez połączenie dwóch zaawansowanych metod: spektroelektrochemii oraz odwróconej dwuwiązkowej spektroskopii fotoakustycznej (RDB-PAS). Pierwsza z nich pozwala określić gęstość stanów elektronowych w funkcji potencjału, druga zaś umożliwia bezpośrednią detekcję stanów pułapkowych tworzonych przez fotogenerowane elektrony. Integracja wyników obu technik, z wykorzystaniem tzw. znaczników energetycznych (wybranych cząsteczek organicznych o znanych potencjałach redoks), pozwoli na precyzyjne określenie położenia energetycznego pułapek oraz ich wpływu na procesy fotoindukowane.

W badaniach wykorzystane zostaną dobrze scharakteryzowane półprzewodniki, takie jak dwutlenek tytanu (anataz i rutyl), tytanian strontu czy siarczek cynku, a także ich modyfikowane formy z celowo indukowanymi defektami. Pozwoli to na szczegółowe określenie zależności między strukturą materiału a jego aktywnością fotokatalityczną.

Rezultatem projektu będzie opracowanie kompleksowego narzędzia do analizy i projektowania nowoczesnych fotokatalizatorów, co umożliwi świadome modyfikowanie ich właściwości pod kątem konkretnych zastosowań, takich jak synteza związków organicznych czy procesy oczyszczania środowiska. Wyniki badań, w formie publikacji naukowych i prezentacji, będą publicznie udostępniane. Zastosowane techniki pomiarowe, w tym unikatowy w skali Europy system RDB-PAS, pozostaną dostępne w laboratorium jednostki realizującej projekt, wspierając dalsze badania i współpracę z innymi ośrodkami.