Жоба туралы қысқаша ақпарат

|  |  |
| --- | --- |
| Жоба аты | AP27511091 «Терең эвтектикалық еріткіштерден биметаллдық катализаторды электротұндырудағы жетілдірілген механизмдер» |
| Жоба өзектілігі | Экологиялық таза және әмбебап электролит ретінде терең эвтектикалық еріткіштерге деген қызығушылықтың артуына қарамастан, бұл жүйелердегі биметалл қорытпалардың электрхимиялық тұну механизмдері толық зерттелмеген. Бұл жоба катализаторлардың электрхимиялық тұну кинетикасы мен тұнба морфологиясы арасындағы корреляцияны жүйелі түрде зерттеу арқылы осы шектеулерді жоюға бағытталған. Бұл механизмдерді түсіну катализатор құрылымын оңтайландыру және көміртегі қостотығын электрхимиялық тотықсыздандыруда (eCO2RR) жоғары өнімділікке қол жеткізуге мүмкіндік береді. |
| Жоба мақсаты | Терең эвтектикалық еріткіштерден Сu-In катализаторларының электрхимиялық тұндыру кинетикасы мен механизмдердін кешенді зерттеу арқылы eCO2RR үшін түрлендірілген мыс катализаторларының селективтілігі мен тұрақтылығын арттыру. Терең эвтектикалық еріткіштердің ерекшеліктерін ескере отырып, қолданыстағы электрхимиялық нуклеация модельдерін бейімдеу және нақтылау. |
| Жоба міндеттері | 1. Холинхлорид-этиленгликольдің терең эвтектикалық еріткішінен Сu-In биметалдық катализаторларының электрхимиялық тотықсыздану кинетикасын талдау. Наноқұрылымның өлшемі мен пішінін нақты реттеуге мүмкіндік беретін электрхимиялық нуклеация механизмін және оның кинетикалық параметрлерін анықтау.  2. Электрхимиялық нуклеация параметрлері мен өзек-қабық түрдегі катализаторлардың өлшемі арасындағы негізгі заңдылықты анықтау.  3. Электрхимиялық синтез әдісімен алынған түрлендірілген мыс катализаторларының электрхимиялық белсенді бетінің ауданын бағалау. eCO2RR кезінде Сu-Іn катализаторының C2 өнімдеріне қатысты сезімталдығы мен селективтілігін зерттеу. |
| Күтілетін нәтижелер | 1. Терең эвтектикалық еріткіштерден синтезделген Сu-In биметалдық катализаторларының электрхимиялық нуклеация механизмі нақтыланады және кинетикалық параметрлер анықталады. Бұл нәтижелер электртұндыру процесінде наноқұрылымдардың өлшемін, конфигурациясын және фазалық түзілуін нақты реттеуге мүмкіндік береді деп күтілуде.  2. Өзек-қабық түрдегі катализаторлардың нуклеация кинетикасы мен катализатор өлшемі арасында корреляция орнатылады.  3. Cu-In катализаторларының электрхимиялық белсенді бетінің ауданы бағаланады және олардың eCO2RR тиімділігі зерттеледі. C2 өнімдеріне жоғары селективтілік күтілуде.  Келесі жарияланымдар күтілуде:  - жобаның ғылыми бағыты бойынша рецензияланған ғылыми басылымдарда кемінде **2 (екі) мақала** және (немесе) шолулар Science Citation Index Expanded индекстелген және Web of Science дерекқорындағы импакт-фактор бойынша 1-ші (бірінші), 2-ші (екінші) немесе 3-ші ( үшінші) квартильге және/немесе **Scopus** дерекқорында CiteScore **процентилі кемінде 50 (елу) болатын журналда** жарияланады;  - ҚР ҒжЖБМ ҒЖБСҚЕК ұсынылған рецензияланған шетелдік немесе отандық басылымда кемінде **2 (екі) мақала** немесе шолу жарияланады. |
| Зерттеу тобы мүшелерінің аты-жөні, идентификаторлары  (Scopus Author ID, Researcher ID, ORCID) және сәйкес профильдегі сілтемелер | 1. Авчукир Хайса – жоба жетекшісі, PhD, жетекші ғылыми қызметкер.   Web of Science Researcher ID: P-5738-2017,  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/P-5738-2017>  Scopus ID: 57207207777,  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57207207777>  ORCID: 0000-0001-6612-0775  <https://orcid.org/0000-0001-6612-0775>   1. Рахымбай Гүлмира – PhD, қаумд. профессор.   Web of Science Researcher ID: A-5356-2016,  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/825115>  Scopus ID: 56436642400,  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56436642400>  ORCID ID 0000-0002-8814-9752.  <https://orcid.org/0000-0002-8814-9752>   1. Бекей Ақбаян – PhD студент, ғылыми қызметкер.   Web of Science Researcher ID: JCV-9290-2023  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48777556>  Scopus ID: 58538083500  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=58538083500>  ORCID: 0009-0002-2333-1761   1. Манарбек Мағрифе – кіші ғылыми қызметкер.   ORCID: 0009-0004-5169-4994   1. Құдайберген Олжас – кіші ғылыми қызметкер. |

Краткая информация о проекте

|  |  |
| --- | --- |
| Название проекта | AP27511091 «Усовершенствованные механизмы электроосаждения биметаллических катализаторов из глубоких эвтектических растворителей» |
| Актуальность проекта | Несмотря на растущий интерес к ГЭР как к экологически чистым и универсальным электролитам, исследования механизмов зарождения биметаллических сплавов в этих системах ограничены. Данный проект направлен на устранение этого пробела в знаниях путем систематического изучения корреляции между кинетикой электрохимической нуклеации и морфологией осадка. Понимание этих механизмов имеет решающее значение для оптимизации структуры катализатора и достижения превосходных характеристик в eCO2RR. Решая проблемы подавления HER, повышения долговечности катализатора и улучшения селективности, эта работа направлена на создание надежной основы для разработки катализаторов eCO2RR следующего поколения. |
| Цель проекта | Повышение селективности и стабильности медных катализаторов, модифицированных индием, для электрохимического восстановления диоксида углерода (eCO2RR) путем комплексного исследования кинетики и механизмов стадии электрохимического фазообразования биметаллических катализаторов Cu-In из глубоких эвтектических растворителей (ГЭР). Адаптация и уточнение существующих моделей электрохимической нуклеации с учетом особенностей глубоких эвтектических растворителей. |
| Задачи проекта | 1. Анализ кинетики электрохимического восстановления биметаллических катализаторов Cu-In, полученных из ГЭР холинхлорид-этиленгликоль. Определение механизма электрохимической нуклеации и его кинетических параметров, позволяющих регулировать размер и конфигурацию наноструктуры.  2. Установление ключевых корреляций между параметрами электрохимической нуклеации и радиусом зерен в катализаторах типа «ядро-оболочка».  3. Оценка электрохимической активной площади поверхности медных катализаторов, модифицированных индием, полученных методом электрохимического синтеза. Исследование чувствительности и селективности катализатора Cu-In по отношению к продуктам C2 в ходе реакции eCO2RR. |
| Ожидаемые результаты | 1. Будет определен механизм электрохимической нуклеации биметаллических катализаторов Cu-In, синтезированных из глубоких эвтектических растворителей, и определены кинетические параметры. Ожидается, что эти результаты позволят регулировать размер, конфигурацию и фазообразование наноструктур в процессе электроосаждения.  2. Будет установлена корреляция между кинетикой нуклеации и радиусом зерен в катализаторах типа «ядро-оболочка».  3. Будет проведена оценка электрохимической активной площади поверхности катализаторов Cu-In и исследована их эффективность в eCO2RR). Ожидается высокая чувствительность и селективность по отношению к продуктам C2, что позволит получить критическое представление о влиянии состава и структуры на эффективность катализа.  Также ожидается публикация следующих статей:  - не менее **2 (двух) статей**и (или) обзоров в рецензируемых научных изданиях по научному направлению проекта, индексируемых в Science Citation Index Expanded и входящих в 1 (первый), 2 (второй) либо 3 (третий) квартиль по импакт-фактору в базе Web of Science и (или) имеющих **процентиль по CiteScore в базе Scopus не менее 50 (пятидесяти);**  - не менее **2 (двух) статей** или обзора в рецензируемом зарубежном или отечественном издании, рекомендованном из списков 1 и 2 **КОКНВО.** |
| ФИО и идентификаторы членов исследовательской группы  (Scopus Author ID, Researcher ID, ORCID) и соответствующие ссылки | 1. Авчукир Хайса – руководитель проекта, PhD, ведущий научный сотрудник.   Web of Science Researcher ID: P-5738-2017,  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/P-5738-2017>  Scopus ID: 57207207777,  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57207207777>  ORCID: 0000-0001-6612-0775  <https://orcid.org/0000-0001-6612-0775>   1. Рахымбай Гүлмира – PhD, ассоц. профессор.   Web of Science Researcher ID: A-5356-2016,  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/825115>  Scopus ID: 56436642400,  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56436642400>  ORCID ID 0000-0002-8814-9752.  <https://orcid.org/0000-0002-8814-9752>   1. Бекей Ақбаян – PhD студент, научный сотрудник.   Web of Science Researcher ID: JCV-9290-2023  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48777556>  Scopus ID: 58538083500  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=58538083500>  ORCID: 0009-0002-2333-1761   1. Манарбек Мағрифе – младший научный сотрудник.   ORCID: 0009-0004-5169-4994   1. Құдайберген Олжас – младший научный сотрудник. |

Brief information about the project

|  |  |
| --- | --- |
| Project title | AP27511091 «Advanced mechanisms in bimetallic catalyst electrodeposition from deep eutectic solvents» |
| Relevance of the project | Despite growing interest in DES as environmentally friendly and versatile electrolytes, there is limited research on the nucleation mechanisms of bimetallic deposition in these systems. This project aims to address this knowledge gap by systematically investigating the correlation between nucleation kinetics and deposit morphology. Understanding these mechanisms is crucial for optimising catalyst structure and achieving superior performance in eCO2RR. By addressing HER suppression, enhancing catalyst durability, and improving selectivity, this work seeks to establish a robust framework for designing next-generation eCO2RR catalysts. |
| Project goal | Enhancement of selectivity and stability of copper catalysts modified with indium for electrochemical reduction of carbon dioxide (eCO2RR) through comprehensive investigation of kinetics and mechanisms during the electrochemical nucleation stage of Cu-In bimetallic catalysts from deep eutectic solvents (DESs). Adaptation and refinement of existing models of electrochemical nucleation, taking into account the characteristics of deep eutectic solvents. |
| Project objectives | 1. Analysis of the electrochemical reduction kinetics for Cu-In bimetallic catalysts obtained from a choline chloride ethylene glycol deep eutectic solvent. Determination of the electrochemical nucleation mechanism and its kinetic parameters to enable precise regulation of nanostructure size and configuration.  2. Establishment of pivotal correlations between electrochemical nucleation parameters and grain radius in core-shell type catalysts.  3. Evaluation of the electrochemical surface area of copper catalysts modified with indium, produced via electrochemical synthesis. Investigation of Cu-In catalyst sensitivity and selectivity towards C2 products during the eCO2RR. |
| Expected results | 1. The electrochemical nucleation mechanism for Cu-In bimetallic catalysts synthesised from deep eutectic solvents will be elucidated, and the kinetic parameters will be determined. These findings are anticipated to facilitate precise regulation of nanostructure size, configuration, and phase formation during electrodeposition.  2. Correlations between nucleation kinetics and grain radius in core-shell type catalysts will be established.  3. The electrochemical active surface area (EACSA) of Cu-In catalysts will be evaluated, and their performance in eCO2RR will be investigated. High sensitivity and selectivity towards C2 products are anticipated, providing critical insights into the influence of composition and structure on catalytic efficiency.  Also, publication of following articles are expected:  - at least **2 (two) articles** and (or) reviews in peer-reviewed scientific publications in the scientific direction of the project, indexed in Science Citation Index Expanded and included in the 1st (first), 2nd (second) or 3rd (third) quartile of the impact factor in the Web of Science database and (or) having a CiteScore **percentile of at least 50** (fifty) in the **Scopus** database;  - at least **2 (two) articles** or review in a peer-reviewed foreign or domestic publication recommended from lists 1 and 2 of the **KOKNVO.** |
| Names and IDs of research group members (Scopus Author ID, Researcher ID, ORCID) and relevant links | 1. Avchukir Khaisa – the project leader-supervisor, PhD, leading scientist.   Web of Science Researcher ID: P-5738-2017,  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/P-5738-2017>  Scopus ID: 57207207777,  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57207207777>  ORCID: 0000-0001-6612-0775  <https://orcid.org/0000-0001-6612-0775>   1. Rakhymbay Gulmira – PhD, associate professor.   Web of Science Researcher ID: A-5356-2016,  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/825115>  Scopus ID: 56436642400,  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56436642400>  ORCID ID 0000-0002-8814-9752.  <https://orcid.org/0000-0002-8814-9752>   1. Bekey Akbayan – PhD student, researcher.   Web of Science Researcher ID: JCV-9290-2023  <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48777556>  Scopus ID: 58538083500  <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=58538083500>  ORCID: 0009-0002-2333-1761   1. Manarbek Magrife – junior researcher.   ORCID: 0009-0004-5169-4994   1. Kudaibergen Olzhas – junior researcher. |