

## REZUMAT

### PN-III-P2-2.1-PED2021-1980 (HyPEM-EHC)

În **Etapa 2** s-a reușit punerea la punct a procesului de dopare *in situ* cu bor a grafenelor poroase crescute prin CVD utilizând acidul boric în concentrații diferite. De asemenea, au fost prezentate rezultatele referitoare la analiza structurală, morfologică și electrochimică a materialelor grafenice poroase dopate cu bor pentru reacția de evoluție a hidrogenului (HER).

Aceste activități sunt prezentate pe parcursul a 2 capitole.

În **capitolul 1** este prezentat un studiu teoretic privind procesele de dopare cu bor și avantajele utilizării acestui procedeu pentru îmbunătățirea activității catalitice a grafenelor în vederea utilizării în aplicații de tipul pile de combustibil, electrolizoare, compresoare electrochimice de hidrogen, baterii, etc. În prima parte a capitolului 1 au fost arătate principalele metode de dopare a grafenelor cum sunt (i) dopare *in situ* prin metoda creșterii prin depunere chimică din faza de vapori (CVD); (ii) descarcare în arc electric; (iii) metoda hidrotermală. Toate aceste metode au ca scop substituția carbonului cu bor și obținerea de defecte în structura grafenei care duc la modificarea proprietăților electrochimice a grafenei în scopul utilizării în aplicații ce vizează obținerea de sisteme electrochimice de producere și stocare a energiei. În continuare a fost prezentat procesul experimental de dopare *in situ* cu acid boric prin metoda creșterii prin depunere chimică din faza de vapori (CVD) a grafenelor poroase. Procesul de dopare s-a realizat la timp de 60 minute prin introducerea simultană de etilenă și acid boric la 1000 °C cu un raport diferit dintre C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>/NH<sub>3</sub> (700sccm/25 sccm, 700sccm/50 sccm și 700sccm/75 sccm). De asemenea, s-a realizat transferul și procesul de purificare a grafenei poroase dopate cu bor utilizând acid clorhidric (37%, Merck), și apă distilată (18.2 MΩ), astfel încât să se obțină materiale grafenice poroase cu activitate catalitică pentru reacția de evoluție a hidrogenului (HER).

Din analiza Raman prezentată în **capitolul 2** se observă că raportul dintre I<sub>2D</sub> și I<sub>G</sub> scade odată cu creșterea gradului de dopare ceea ce sugerează o creștere a numărului de straturi cu timpul de sinteză. De asemenea, forma picului 2D se schimbă, picul devenind mai puțin ascuțit și având numeroase picuri suplimentare datorate proceselor de împrăștiere a radiației laser formate de straturile multiple. Se observă de asemenea că apare picul D' care crește odată cu concentrația de acid boric, ceea ce reprezintă o dovadă clară a introducerii de defecte în rețeaua cristalină a grafenei și formarea de defecte ca urmare a legăturilor C-B formate în timpul procesului de dopare *in situ*. Pentru calculul concentrației în procente atomice (at%) a borului în structura grafenei poroase s-a folosit spectroscopia de fotoelectroni (XPS) în urma căreia s-a demonstrat că s-a obținut o concentrație de bor de 2,04%; 3,15%; 4,25%. Activitatea electrocatalitică a grafenelor poroase dopate cu bor a fost studiată utilizând metodele -a. Din curbele KL a fost calculat numărul de electroni schimbați în timpul reacției de evoluție a hidrogenului, aceste valori fiind între 1.55 - 1.95.

**Diseminare informatii si rezultate** sumarizeaza livrabilele realizate pe parcursul etapei I a proiectului: 2 comunicare știintifice la manifestări știintifice naționale și internaționale, 1 articol stiintific publicat intr-un jurnal cu quartila Q1 si raportul știintific.

Activitatea desfasurata in Etapa 2 va continua si in etapa 3/2024 prin dezvoltarea unei metode de finctionalize a grafenelor porose cu platina si se va proiecta, realiza si testa un compresoer electrochimic de hidrogen utilizand membranele si catalizatorii dezvoltati in cadrul proiectului.

Director proiect,  
Daniela Ion-Ebrasu