

Adsorpcja jest zjawiskiem powszechnie stosowanym w wielu dziedzinach nauki i technologii. Jej szczególny przypadek, adsorpcji w materiałach porowatych, wykorzystuje się m.in. do składowania gazów, rozdzielania mieszanin gazowych i ciekłych, katalizy, detekcji w cienkich warstwach, transporcie protonów, dozowaniu leków i wielu innych.

Materiały typu MOF (ang. Metal Organic Framework) są nową grupą materiałów porowatych budzących wiele zainteresowania. Jedną z zalet MOFów, w porównaniu do aktywnych węgla, zeolitów czy krzemionek, jest możliwość kontrolowania ich składu poprzez wymianę centrów metalicznych i ligandów. Równocześnie kontrolowana wielkość porów pozwala na projektowanie w zależności od potrzebnych właściwości. Struktury MOF o powierzchniach właściwych przekraczających 6000 m²/g zostały już syntetyzowane i posiadają niezwykle właściwości adsorpcyjne.

Cząsteczki gazów dobrze adsorbują się w MOFach, ponieważ są silnie przyciągane przez ściany porów. Można na próbę jeszcze zwiększyć ilość adsorbowanej masy poprzez modyfikację oddziaływania między gazem a strukturą MOF. Jest to jeden z celów projektu: zmiana oddziaływania poprzez zmianę grup funkcyjnych, wymianę atomów metali lub w wyniku deformacji struktury porowatej. Można również zmiany struktury chemicznej razem z dużą ilością możliwości wariacji strukturalnych pozwala projektować MOF-y dla wymaganych zastosowań.

W projekcie proponuje się modelowanie numeryczne struktur MOF, które wykazują deformacje pod wpływem adsorpcji metanu, wodoru lub dwutlenku węgla. Metan jest gazem, który posiada bardzo dobre właściwości energetyczne i spalając się produkuje mniej dwutlenku węgla niż inne w gwałtownie. Jednak jego gęstość nie jest duża. Adsorpcja w materiałach porowatych pozwoli na zwiększenie tej gęstości. Celem jest osiągnięcie pojemności dla adsorbowanych gazów naturalnych powyżej 180 STP litrów metanu w litrze przyszłego zbiornika. Wodór jest kolejnym ważnym gazem magazynującym dużą ilość energii, który spalając się produkuje tylko wodę. Podobnie jak w przypadku metanu, adsorpcja jest metodą na zwiększenie gęstości magazynowania, która w tym przypadku powinna osiągnąć wartość 75 g wodoru na 1 kg zbiornika. Nie ma znanego materiału, który spełniałby te warunki. Obliczenia wykonane dla modeli MOF mają wskazać sposoby na syntezę nowych układów w celu takich zastosowań.

Molekularne modelowanie numeryczne jest niezbędnym narzędziem przy projektowaniu nowych materiałów MOF. Symulacje mogą dostarczyć informacji niedostępnych eksperymentalnie. Jednocześnie nie, prostsze jest zbudowanie próbnego modelu numerycznego niż modelu rzeczywistego w laboratorium. Numerycznie, można testować właściwości wielu modeli i modyfikacji strukturalnych, bez wykonywania kosztownych eksperymentów. Analiza wyników numerycznych pozwala wybrać struktury, które potencjalnie mogą być interesujące w zastosowaniach i skupić się w pracy laboratoryjnej na ograniczonej ilości materiałów. Symulacje numeryczne pozwalają także na bardzo dobre oszacowanie właściwości adsorpcyjnych, a także na określenie właściwości w warunkach trudnych lub wręcz niebezpiecznych eksperymentalnie (wysoka temperatura lub duże ciśnienia).

Dla najlepiej rokujących materiałów przeprowadzone zostaną eksperymenty weryfikacyjne. Najbardziej pożądanym jest efektywne zaadsorbowanie metanu lub dwutlenku węgla, które są głównymi składnikami biogazu. Ich selektywna adsorpcja umożliwiłaby nie tylko możliwość składowania danego gazu, ale równocześnie nie pozwoliłaby na oczyszczenie biogazu.

Materiały typu MOF są wciąż bardzo drogimi substancjami, ale ich cena będzie się obniżała w miarę zwiększania się ich produkcji. W ramach projektu właściwości MOF będą porównywane z węglami aktywnymi, które są aktualnie dużo łatwiej dostępne.