

Celem głównym proponowanego projektu jest zaprojektowanie i wykonanie syntezy nowych materiałów, tak zwanych sieci metalo-organicznych MOF (ang. metal-organic framework) wykazujących przewodność protonową (tzw. sieci PCMOF), w oparciu o innowacyjne, ekologiczne i ekonomiczne podejście mechanochemiczne. Cel ten obejmuje także określenie budowy oraz właściwości fizykochemicznych otrzymanych materiałów, jak również określenie zależności pomiędzy budową a strukturą otrzymanych materiałów PCMOF.

Sieci metalo-organiczne (MOFy) należą do najbardziej ekscytujących osiągnięć nanotechnologii, jakie pojawiły się w ostatnich latach. Konstruowanie sieci MOF przez chemików można porównać do układania zabawek-klocków, złożonych z kulek i patyczków, przez dzieci. Używając "chemicznych" kulek i patyczków można stworzyć MOF o strukturze krystalicznej, który przypomina molekularne rusztowanie (lub gąbkę) i zbudowany jest z jonów metali (kulek) połączonych ze sobą cząsteczkami organicznymi (patyczkami). Połączenie takich składników prowadzi do materiałów o rozmaitych, połączonych właściwościach takich, jak np. nanoporowatość, duża powierzchnia wewnętrzna i stabilność termiczna. Nanoporowatość tych materiałów oznacza, że posiadają one otwarte przestrzenie, które mogą być wypełnione innymi cząsteczkami, zwanymi gośćmi. Jednym z pomysłów niniejszego projektu jest budowanie MOFów, których pory mogą być w taki sposób wypełnione, aby uczyniły je elektrycznie przewodzącymi. Przewodzące układy MOF są obecnie wschodzącą dziedziną badań. Przewodzenie oznacza transport ładunku przez MOFy oznacza i w tym projekcie jest rozumiane jako przewodzenie protonowe (ładunku dodatniego). Można to sobie przykładowo wyobrazić jako przeskakiwanie protonu po cząsteczkach rusztowania molekularnego. Taka właściwość przewodzenia protonowego może mieć ogromny wpływ na przyszłość związanej z budową różnorodnych czujników, jak również przetwarzanie i magazynowanie energii. W szczególności, protono-przewodzące sieci MOF (PCMOFy) mogą zostać wykorzystane jako istotne części ogniw paliwowych, które generują elektryczność kosztem reakcji chemicznej, w której powstaje nieszkodliwa woda. Oprócz interesujących materiałów MOF i ich właściwości, w niniejszym projekcie planuje się również wykorzystanie przyjaznych dla środowiska i ekonomicznych metod mechanochemicznych, aby zsyntezować wspomniane wyżej sieci PCMOF. Metody te polegają na wywieraniu siły na cząsteczki. W szczególności oczekuje się, że docelowe innowacyjne materiały zostaną otrzymane na drodze ucierania stałych reagentów. Oprócz korzyści ekologicznych, metoda ta przynosi niski koszt i łatwość wytwarzania, co ma kluczowe znaczenie w wielu technologiach.

Proponowany projekt zawiera cztery główne zadania badawcze. Pierwszym głównym zadaniem badawczym jest zaprojektowanie i synteza materiałów typu PCMOF z zastosowaniem innowacyjnego podejścia mechanochemicznego. Realizacja tego zadania obejmuje dwie równoległe strategie: i) dwuetapową post-syntetyczną mechanochemiczną modyfikację tak zwanych dynamicznych układów MOF oraz ii) bezpośrednią jednoetapową mechanosyntezę. Drugim zadaniem badawczym jest selekcja wszystkich otrzymanych ciał stałych bezpośrednio po ucieraniu. Planuje się tu głównie wykorzystanie technik dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego, jak również spektroskopii w podczerwieni. Pozwoli to na identyfikację i selekcję czystych produktów nadających się do dalszych badań strukturalnych oraz elektrochemicznych. Trzecie zadanie badawcze stanowi określenie składu i struktury otrzymanych nowych układów MOF. Planuje się tu głównie wykorzystanie technik dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego, jak również wybranych technik analitycznych i spektroskopowych. Określenie składu i budowy otrzymanych powłok jest niezbędne w celu poznania jej korelacji z właściwościami fizykochemicznymi, w tym z przewodnictwem protonowym. Czwartym zadaniem badawczym jest określenie właściwości fizykochemicznych uzyskanych układów MOF. Planuje się tu głównie przeprowadzenie pomiarów elektrochemicznych. Pomiarów te dostarczą informacji o wartościach przewodności protonowej, jej zależności od wybranych parametrów, i mechanizmie przewodzenia. Dla materiałów PCMOF z określonych struktur przewiduje się także identyfikację kluczowych cząsteczek tworzących łańcuch przewodzenia. Materiały MOF, do których zalicza się również proponowane w niniejszym projekcie, mają ogromne możliwości zastosowań praktycznych, a tym samym wpływ na rozwój cywilizacji. W szczególności, obiecująca jest od niedawna badana nowa podklasa przewodników protonowych MOF (PCMOF), stanowi ona cel projektu, która ma szansę na zastosowanie w technologii ogniw paliwowych. Powstałe rozwiązanie (opracowanie szlaków syntezy materiałów typu PCMOF) lub produkt (otrzymane związki i wyniki badań dla związków o odpowiednich właściwościach przewodzących) mogą zostać przeniesione do przemysłu chemicznego, np. do sektora paliwowo-energetycznego, co z kolei przeloży się na rozwój cywilizacji i społeczeństwa. W podsumowaniu, przedstawiony innowacyjny projekt łączy jednocześnie nie trzy niezwykle ważne i aktualne obszary nowoczesnej chemii (trzy-w-jednym):

- 1) Materiały MOF, które można porównać do rusztowań zbudowanych z cząsteczek;
- 2) Mechanochemiczne metody syntezy tzn. poprzez wywieranie siły na rusztowania molekularne; i
- 3) Właściwości protono-przewodzące, które są użyteczne w budowie czujników, jak również przetwarzaniu i magazynowaniu energii.