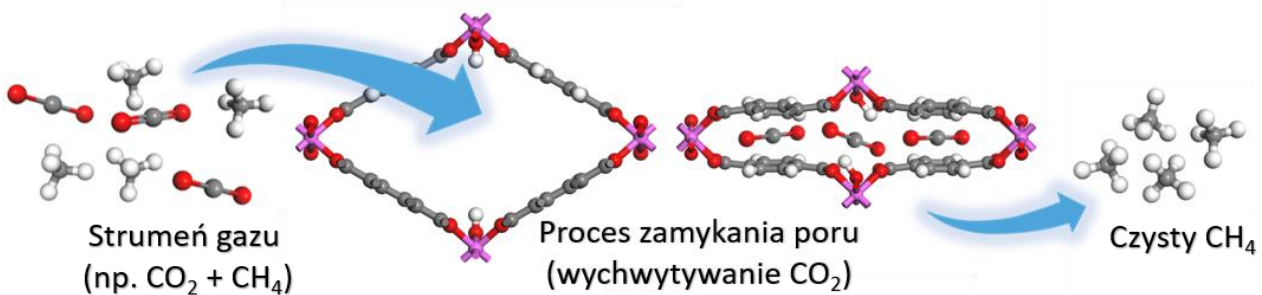


Wpływ dynamiki fononów na przemiany strukturalne i adsorpcję w hybrydowych materiałach nanoporowatych

Zanieczyszczenie środowiska naturalnego osiągnęło poziom zmuszający do podjęcia natychmiastowych działań mających na celu ograniczenie emisji toksycznych związków do atmosfery, zwłaszcza tych powodujących efekt cieplarniany i globalne ocieplenie. Najistotniejszymi gazami odpowiedzialnymi za to zjawisko są dwutlenek węgla i metan. Oba gazy, mimo iż są *przezroczyste* dla światła widzialnego, pochłaniają promieniowanie podczerwone. Emisja wtórna zaabsorbowanego promieniowania odbywa się we wszystkich kierunkach (również w kierunku Ziemi). Ciepło jest więc zatrzymywane w atmosferze ziemskiej, zamiast zostać wypromieniowane w przestrzeń kosmiczną. Powoduje to wzrost średniej temperatury przy powierzchni Ziemi. Prowadzi to do nieodwracalnych zmian klimatycznych mających katastrofalne skutki dla ekosystemu, takie jak m.in. katastrofy naturalne czy topnienie lodowców powodujące wzrost poziomu oceanów.



Rysunek 1. Proces wychwytywania CO₂ przez odkształcalny materiał typu MOF.

Jedną z metod ograniczenia stężenia dwutlenku węgla i metanu w atmosferze jest ich selektywne wychwytywanie z atmosfery i pułapkowanie w materiałach porowatych. Metoda ta jest obecnie rozwijana w wielu ośrodkach naukowych, ponieważ jest ona szczególnie atrakcyjna dla przemysłu: ze względu na potencjalnie niskie koszty proces może być prowadzony na szeroką skalę. Obiecującą grupą materiałów mogących posłużyć za sита molekularne w procesie wyłapywania gazów cieplarnianych z mieszaniny wielu gazów (atmosfery) są materiały z grupy MOF (*ang. metal-organic framework*). Materiały te łączą w sobie cechy zarówno związków organicznych jak i nieorganicznych. Ich struktura ma charakter modułarny, oparty o dwa typy elementów konstrukcyjnych: nieorganiczne centra (ligandy) zawierające jony metali oraz łączące je organiczne łączniki (linkery), najczęściej pochodne kwasów aromatycznych. Dzięki takiej koncepcji architektonicznej można skonstruować bardzo wiele materiałów, o podobnej strukturze, lecz zbudowanych z różnych ligandów i/lub centrów metalicznych. Pozwala to na sterowanie takimi parametrami jak wielkość porów, ich topologia oraz obecność miejsc szczególnie podatnych na adsorpcję, a co za tym idzie, selektywnością adsorpcji cząsteczek gazów o różnej wielkości i własnościach fizykochemicznych. Niektóre struktury MOF są deformowalne i ulegają odkształceniom pod wpływem czynników zewnętrznych takich jak temperatura, ciśnienie, obecność adsorbowanego gazu czy pole elektryczne. Jednym z przykładów tego typu związków są materiały MIL-53, w których deformacja struktury powoduje zmianę rozmiarów porów (jest to tzw. zdolność oddychania, czyli otwierania i zamykania porów pod wpływem adsorpcji). Materiały te selektywnie adsorbują cząsteczki CO₂, z mieszaniny gazów (Rys. 1.). Efekt ten może znaleźć zastosowanie nie tylko w wychwytywaniu dwutlenku węgla z atmosfery, ale również w wielu procesach przemysłowych, np. w procesie oczyszczania biogazu.

Celem projektu jest wyjaśnienie mechanizmu deformacji materiałów MOF (m. in. typu MIL-53) w oparciu o podstawowe prawa fizyki i chemii. Badania prowadzone są przy użyciu metod modelowania molekularnego. Głównym analizowanym zjawiskiem są skorelowane drgania sieci krystalicznej (tzw. fonony), odpowiedzialne za wszelkie odkształcenia strukturalne badanych materiałów. Prowadzone prace mają na celu znaczące obniżenie kosztów procesu projektowania materiałów o zadanych własnościach, niezbędnych w konkretnych procesach separacji.