

## Teoretyczne projektowanie materiałów porowatych nowej generacji do zastosowań sensorycznych

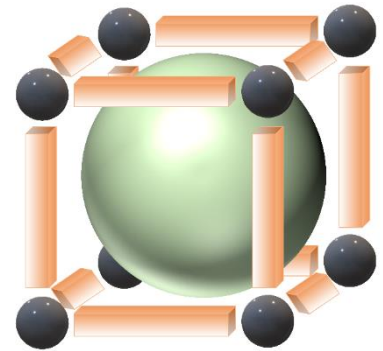
Szkielety Metallo-Organiczne, (ang.: „**Metal – Organic Frameworks (MOFs)**”), są nową klasą niezwykle interesującymi materiałów metaloorganicznych o szerokim zakresie zastosowań kluczowych dla rozwoju i dobrobytu społeczeństwa. W szczególności, MOF-y używane są do: sorpcji gazów – co ma istotne znaczenie w procesach efektywnego transportu paliw oraz do usuwania gazów cieplarnianych z atmosfery (ang.: „green house effect”). Pory MOF-ów mogą mieć wszelkiego rodzaju kształty i rozmiary i mogą działać jako efektywne sita molekularne pozwalając jednym cząsteczkom na wejście do środka i trzymając inne cząsteczki na zewnątrz porów. Takie zjawisko ma oczywiście zastosowanie do rozdzielania mieszanin gazów, oczyszczania wody i innych rozpuszczalników oraz w różnego rodzaju czujnikach służących do detekcji trucizn, materiałów wybuchowych i różnych innych niebezpiecznych substancji.

Co jest przyczyną tak różnorodnych zastosowań MOF-ów? Aby odpowiedzieć na to pytanie, musimy zrozumieć jaka jest struktura MOF-ów. Tak jak sugeruje nazwa, Szkielety Metallo-Organiczne (MOFy) są krystalicznymi, porowatymi, strukturami modularnymi (trójwymiarowymi polimerami koordynacyjnymi) zbudowanymi z nieorganicznych bloków budulcowych (węzłów) połączonych organicznymi mostkami.

Modularność MOFów jest kluczem do sukcesu MOF-ów jako materiałów porowatych nowej generacji. Jednakże modularność nie rozwiązuje nam podstawowego problemu jak wybrać najlepszą kombinację nieorganicznych bloków budulcowych (węzłów, metali zajmujących pozycje węzłów) oraz jakich użyć organicznymi mostków, aby uzyskać MOF z założonymi właściwościami? Takie zagadnienie jest przedmiotem inżynierii krystalicznej MOFów. Powszechnie stosowanym rozwiązaniem jest intensywna praca syntetyczna sprowadzająca się do otrzymywania wielu różnych MOFów o różnych architekturach, i eksperymentalnej weryfikacji użyteczności otrzymanych MOFów. Takie eksperymentalne poszukiwanie MOFów o założonych właściwościach jest czasochłonne, niezwykle kosztowne, generuje dużo odpadów chemicznych i, niestety, nie gwarantuje sukcesów. Ponieważ MOFy stają się materiałami napędzającymi ekologiczną „zieloną gospodarkę” wydaje się logiczne poszukiwanie różnych możliwości, które pozwoliłyby produkować MOFy o założonych właściwościach taniej, szybciej i skuteczniej.

**Realizując moją aplikację, chciałbym usprawnić efektywność i skuteczność projektowania MOFów** poprzez użycie nowych metod obliczeniowych. We współpracy z uczonymi z Wielkiej Brytanii oraz Kanady rozwijam nowy program pozwalający budować struktury MOFów startując z najprostszych bloków budulcowych czyli węzłowych atomów metali oraz organicznych łączników – mostków. Używając proponowanych przeze mnie procedur mogę znaleźć najbardziej prawdopodobne struktury MOFów oraz przewidywać ich właściwości. **Głównym celem mojej aplikacji jest stworzenie nowej metodologii, nowych narzędzi, które umożliwiłyby obliczeniowe zaprojektowanie MOF-ów z konkretnymi wcześniej założonymi funkcjonalnościami (na przykład, które mogłyby służyć jako sensory/czujniki do detekcji zanieczyszczeń w powietrzu i wodzie).** Zrealizowanie celów mojej aplikacji, czyli rozwój proponowanej nowej metodologii projektowania MOFów, pozwoli na uzyskanie najbardziej obiecujących MOFów do zastosowań sensorycznych PRZED ich eksperymentalną, syntetyczną weryfikacją, co zdecydowanie zwiększy efektywność poszukiwań nowych MOF-ów i pozwoli wyprodukować je szybciej i dużo taniej niż obecnie się to robi.

Metoda, którą proponuję w niniejszej aplikacji, może być nazwana losowe próbkowanie struktury przy pomocy metod *ab-initio* (ang.: „ab initio random structure sampling (AIRSS)”) i zawiera losowe pozycjonowanie bloków budulcowych w komórce elementarnej sieci krystalicznej MOF-ów. Następnie, startowe struktury są optymalizowane przy użyciu obliczeń wykorzystujących metody oparte o teorię funkcjonału gęstości (DFT). Pozwala to uzyskać dla badanego MOF-u rozkład energii sieci krystalicznej w funkcji ich struktur (ang.: „crystal energy landscape”), coś w rodzaju mapy energii w funkcji uzyskiwanych przewidywanych struktur. Te struktury teoretyczne, które mają niższe energie są bardziej prawdopodobne do uzyskania eksperymentalnego. Dla struktur o najniższej energii proponuję i przeprowadzam także inne obliczenia pozwalające oszacować ich stabilność mechaniczną oraz potencjalne właściwości sensoryczne. Końcowym etapem mojego projektu jest eksperymentalna synteza przewidzianych teoretycznie MOF-ów oraz analiza ich właściwości w celu walidacji i oceny stopnia dokładności przewidywań teoretycznych.



**Rys. 1.** Szkielety Metallo-Organiczne (MOFy) są krystalicznymi, porowatymi, strukturami modularnymi (trójwymiarowymi polimerami koordynacyjnymi) zbudowanymi z nieorganicznych bloków budulcowych (węzłów – szare sfery) połączonych organicznymi mostkami (różowe pręty).