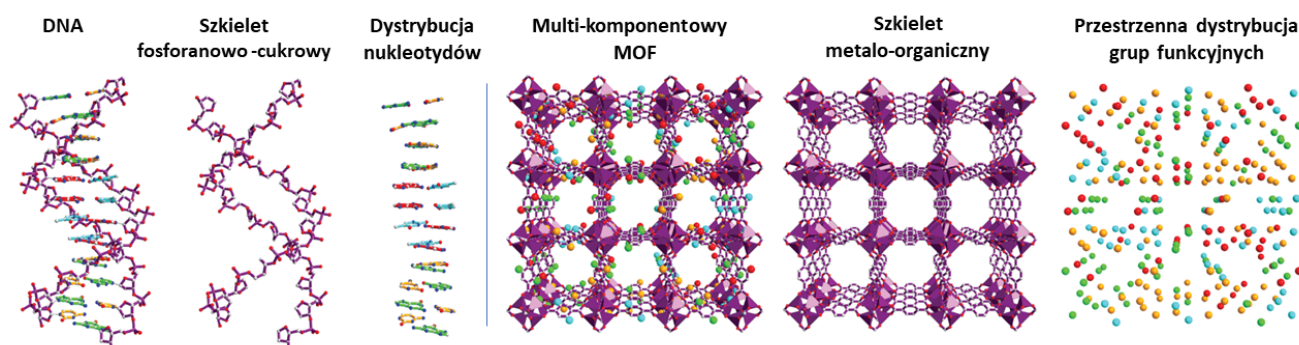


Nanoinżynieria multifunkcyjnych dynamicznych sieci metalo-organicznych (flexMOFs) do procesów separacji: podejście eksperymentalne i teoretyczne

1. Wstęp

W 1944 Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger w zbiorze fenomenalnych wykładów zebranych i wydanych w postaci krótkiej książki „Czym jest życie?” podkreślił zasadniczą różnicę w złożoności struktur, które są przedmiotem badań chemików a tych które występują w żywych organizmach: „Dystrybucja przestrzenna atomów w kluczowych częściach organizmów różni się w sposób fundamentalny od przestrzennej dystrybucji atomów w strukturach nieożywionych będących przedmiotem badań eksperymentalnych i teoretycznych chemików i fizyków”. Godnym podkreślenia jest fakt, że dzięki rozwojowi metod manipulacji materią w przyszłości będzie możliwe wprowadzenie tej złożoności w nieożywione materiały funkcjonalne, na przykład dynamiczne sieci metalo-organiczne (MOF).

Poprzez precyzyjne wbudowanie wielu łączników posiadających różne grupy funkcyjne do dynamicznej sieci metalo-organicznej teoretycznie jest możliwe naśladowanie złożonych, „aperiodycznych” struktur biologicznych takich jak DNA czy białka (Rysunek 1). Realizacja tego celu wymaga opracowania i zrozumienia protokołu syntetycznego do wprowadzenia przestrzennej dystrybucji ligandów w materiałach MOF oraz metod badawczych pozwalających na wyznaczeniu położenia grup funkcyjnych w przestrzeni.



Rysunek 1 Porównanie struktury DNA (lewa strona) z multi-komponentowym szkieletem metalo-organicznym (prawa strona). Rysunek został zaadaptowany z *Accounts of Chemical Research* za zgodą wydawcy, American Chemistry Society.

2. Cel projektu

Głównym celem projektu jest opracowanie eksperymentalnego oraz teoretycznego protokołu w celu sterowania i wyznaczania przestrzennej dystrybucji ligandów w dynamicznych multi-komponentowym szkieletach metalo-organicznych (MTV-flexMOFs).

Kolejny cel projektu to zrozumienie nietypowych właściwości dynamicznych sieci MOF za pomocą wielu technik doświadczalnych, taki jak wysokociśnieniowa i temperaturowo zależna krystalografia, adsorpcja oraz NMR, PXRD i IR *in-situ* podczas adsorpcji.

Opracowanie protokołu pozwalającego na wprowadzenie przestrzennej dystrybucji ligandów oraz fundamentalne zrozumienie nietypowych właściwości układów MOF jest podstawą najbardziej praktycznego celu projektu: wbudowanie dynamicznych sieci MOF oraz układów MTV do membran półprzepuszczalnych i zastosowanie ich w procesach separacji.

3. Powód podjęcia tematyki badawczej

Separacja małych cząsteczek jest jednym z najbardziej energochłonnych procesów przemysłowych, który wytwarza globalnie od 10 do 15 % CO₂. Wzrost ilości dwutlenku węgla w atmosferze powoduje zmiany klimatyczne pociągające za sobą susze, pożary naturalnych ekosystemów, fale upałów czy powodzie. Dynamiczne MTV-MOFy z zaprogramowanymi wolnymi przestrzeniami i dynamiką strukturalną mogą odegrać kluczową rolę w procesach separacji. Poprzez użycie wielu grup funkcyjnych w jednym szkielecie oraz wbudowanie tak powstałego materiału w półprzepuszczalną membranę jest możliwe stworzenie specyficznych oddziaływań, które posłużą do efektywnej separacji podobnych cząsteczek lub wylapywania CO₂ z gazów wylotowych.