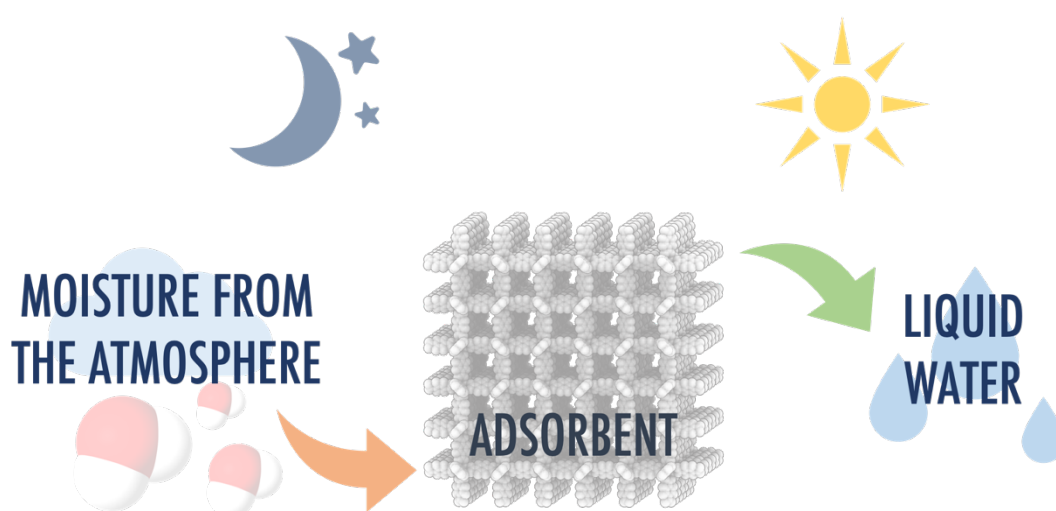


Zaawansowane metody modelowania numerycznego wspomagane narzędziami uczenia maszynowego do przewidywania adsorpcji wody w materiałach typu MOF

Pozyskiwanie wody atmosferycznej (z ang. *atmospheric water harvesting*) w sposób pasywny, oparty na adsorpcji (Rysunek 1), ma ogromny potencjał w decentralizacji zaopatrzenia w wodę pitną w wielu suchych regionach świata. Metoda ta polega na adsorpcji cząsteczek wody z atmosfery na materiale porowatym, a następnie, poprzez zmianę warunków otoczenia (np. poprzez podgrzanie), jej desorpcję i skroplenie, dzięki czemu otrzymuje się wodę w stanie ciekłym. W tym celu potrzebne są odpowiednie adsorbenty (czyli materiały, na powierzchni których dochodzi do adsorpcji), które mogą być dostosowane do osiągnięcia maksymalnych wartości pojemności operacyjnej, oczekiwanego kształtu izotermy lub wartości ciśnienia względnego, przy których zachodzi adsorpcja i desorpcja. Biorąc pod uwagę te czynniki, materiały z grupy związków metaloorganicznych (MOFy) są bardzo obiecujące, głównie ze względu na ich różnorodność strukturalną, a także możliwości ich projektowania i funkcjonalizacji. Całkowita liczba zsyntetyzowanych struktur MOF jest trudna do oszacowania – przykładowo baza CSD MOF zawiera imponującą liczbę ~100 000 struktur. Biorąc pod uwagę taką liczbę struktur, badania obliczeniowe, wykorzystujące najbardziej wydajne techniki symulacyjne, odgrywają kluczową rolę w poszukiwaniu i odkrywaniu nowych materiałów.

Celem tego projektu jest **scharakteryzowanie, opracowanie i wykorzystanie wydajnego i precyzyjnego algorytmu modelowania molekularnego, wspomaganego narzędziami uczenia maszynowego, do badań przesiewowych adsorpcji wody w dostępnych strukturach metaloorganicznych (MOFach) o potencjalnym zastosowaniu jako adsorbenty w systemach zbierania wody atmosferycznej.**

Najważniejszym spodziewanym rezultatem tego projektu będzie wskazanie kilku potencjalnych struktur MOFów, które mają najlepsze cechy do zastosowania w adsorpcyjnym pozyskiwaniu wody atmosferycznej. Struktury te zostaną zsyntezowane i ich zdolności adsorpcyjne zostaną zweryfikowane eksperymentalnie. Ponadto, należy wskazać rezultaty poboczne, które są kluczowe dla rozwoju nanoinżynierii, takie jak rozwój metod modelowania molekularnego adsorpcji wody, stworzenie modelu idealnego adsorbentu wody, który może zostać wykorzystany do projektowania nowych materiałów czy też lepsze zrozumienie procesu adsorpcji wody w materiałach porowatych.



Rysunek 1. Schematyczne przedstawienie urządzenia do adsorpcyjnego pozyskiwania wody z atmosfery.