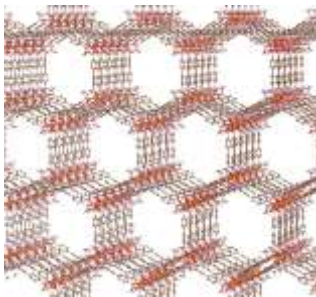


# Dynamika molekul plynu v mikroporézním prostředí metalo-organické sítě

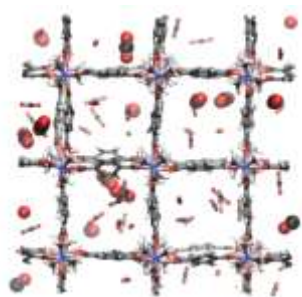
studentský projekt, který lze rozšířit na bakalářskou anebo diplomovou práci

vedoucí: doc. RNDr. Jan Lang, Ph.D., KFNT, MFF UK, Trója, Kryopavilón, C136, tel. 22191 2889, mail: Jan.Lang@mff.cuni.cz

Optimalizace skladování a separace plynů jako jsou methan a oxid uhličitý nabývá zvláštního významu s nutností ve zvýšené míře chránit životní prostředí. Je známo, že v mikroporézním prostředí dochází vyššímu uspořádání molekul plynu, takže při daném tlaku může být zásobní kapacita nádoby s adsorbentem i řádově vyšší nežli prázdné nádoby o stejném objemu. Aplikací může být např. náplň nádrže na CNG (methan) u automobilů. CO<sub>2</sub> je jeden z hlavních kontaminantů zemního plynu, který je nutné odstranit pro optimalizaci jeho spalování. Naopak, methan je jeden z hlavních kontaminantů CO<sub>2</sub>, coby odpadního plynu po spalování. To přináší potřebu vzájemné separace pro optimalizaci řady průmyslových procesů i v souvislosti s minimalizací jejich dopadů na životní prostředí.



Obr. 1: Kanály v krystalové struktuře ICR-6.



Obr. 2: Adsorbovaný CO<sub>2</sub> v DMOF-1.

Metalo-organické sítě (MOF) jsou moderním typem dobře definovaných krystalických nanoporézních materiálů. Skládají se z kovových center, které jsou pravidelně propojeny organickými spojkami. Spolupracující skupina chemiků (J. Demel, ÚACH AV ČR) vyvinula zcela novou třídu materiálů nazvanou ICR na bázi železa a hliníku s fosfinovými spojkami (obr. 1), které se vyznačují řadou mimořádných vlastností. Obsahují jednorozměrné kanály, jejichž průměr lze nastavovat délkou spojek (fenyl, bifenyl, ...). Vnitřní povrch kanálů je velmi hydrofobní, protože kovová centra jsou stíněna tzv. pendantními skupinami. Vnitřní povrch pórů lze významným způsobem modifikovat a cíleně na něj zavádět vazebná místa – např. aminoskupiny, které jsou atraktivní pro CO<sub>2</sub>. Na obr. 2 je pro ilustraci ukázán model struktury DMOF-1 s adsorbovaným plynem, kterou jsme studovali dříve.

Spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR) je extrémně variabilní experimentální metoda, která využívá běžná atomová jádra jako sondy do struktury a dynamiky látek. Unikátní je možnost charakterizovat na mikroskopické úrovni pohyb molekul plynu uvnitř pórů.

## Hlavní úkoly projektu:

1. Příprava vzorku, obsahujícího mikroporézní MOF z ICR rodiny a příslušný plyn (CH<sub>4</sub> anebo <sup>13</sup>CO<sub>2</sub>), ve speciální NMR kyvetě.
2. Proměření teplotní závislosti NMR spekter – základního spektra <sup>1</sup>H (CH<sub>4</sub>) anebo <sup>13</sup>C (CO<sub>2</sub>), podélné relaxace příslušného jádra (která souvisí s rotační dynamikou) a translační difúze.
3. Zpracování naměřených spekter a získání příslušných parametrů – počet a intenzita spektrálních komponent, podélná relaxační doba  $T_1$ , koeficient translační difúze.