

Współcześnie na arenie międzynarodowej zwraca się uwagę jest konieczność poważnego podejścia do tematyki energetyki, zarówno w aspekcie źródeł energii jak i sposobów jej magazynowania i konwertowania. W perspektywie najbliższej przyszłości jednym z najbardziej obiecujących, bezpośrednich źródeł energii elektrycznej konwertujących ją z energii chemicznej staną się ogniwa paliwowe, w szczególności te wykorzystujące wodór jako paliwo. W przypadku zastosowania zielonego źródła wodoru, ogniwo to staje się całkowicie neutralnym klimatycznie źródłem energii elektrycznej, z ciepłem i wodą jako jedynymi produktami ubocznymi jego pracy.

Sieci metalo-organiczne (MOFs) są hybrydowymi materiałami organiczno-nieorganicznymi o niezwykle dynamicznie rozwijającej się chemii. Ich nieomal nieograniczone możliwości konstrukcyjne oraz porowata natura predestynuje je jako kandydatów do wielu zastosowań w nauce i przemyśle, w tym przemyśle związanym z energetyką. Od kilku lat poszukiwane są materiały MOF, które byłyby w stanie sprostać wyzwaniom stawianym przez konstruktorów magazynów gazów (np. wodoru), elektrod ogniw paliwowych czy też membran protonoprzewodzących. W literaturze znanych jest już wiele doniesień, w których sieci metalo-organiczne pokazały właściwości tak pożądane w każdej z wymienionych części konstrukcyjnych wodorowych ogniw paliwowych.

W niniejszym projekcie, przedstawione zostanie kompleksowe studium nad zastosowaniem wybranej kategorii reakcji chemicznych: reakcji Dielsa-Aldera z odwróconym zapotrzebowaniem elektronowym (iEDDA) jako przykładzie bardzo łagodnej i wydajnej metodzie kowalencyjnej modyfikacji post-syntetycznej nowych sieci metalo-organicznych, w celu wprowadzenia lub poprawy ich własności protonoprzewodzących. Kluczowym problemem, z jakim zmierzają się naukowcy projektujący materiały MOF pod kątem zastosowania w konstrukcji membran protonoprzewodzących jest trudność we wprowadzeniu donorów i akceptorów protonów, które pełniłyby rolę odpowiednio źródła oraz nośnika dla ładunku przenoszonego w stałym elektrolicie. Pomimo potencjału syntetycznego i naturalnej porowatości, otrzymanie materiału z wolną grupą kwasową stanowi problem, w związku z jego koordynacyjną naturą wobec tworzących się węzłów metalicznych. Obejściem tego problemu jest zastosowanie modyfikacji post-syntetycznych, które wprowadzą donor lub nośnik protonu już po samoorganizacji szkieletu materiału MOF.

W ramach planowanego projektu przeprowadzone zostaną pionierskie badania nad selektywnym wprowadzaniem wybranych grup funkcyjnych za pomocą reakcji iEDDA. Należy zaznaczyć, iż jak dotychczas opublikowano bardzo niewiele przykładów zastosowania tej reakcji do modyfikacji sieci metalo-organicznych, nie istnieje natomiast ani jeden literaturowy przykład zastosowania jakiegokolwiek reakcji cykloaddycji (click) do wprowadzania/poprawy własności protonoprzewodzących (dla jakichkolwiek materiałów). Fakt ten dodatkowo wzmacnia motywację do podjęcia badań nad wskazanym tematem. Dodatkową motywacją jest fakt, że nieporównywalna selektywność tej reakcji umożliwić może precyzyjne wprowadzenie konkretnej ilości grup funkcyjnych w konkretne miejsca struktury krystalicznej, a łagodność tej reakcji może umożliwić monitorowanie tych modyfikacji za pomocą technik rentgenostrukturalnych.

Osiągnięcie zamierzonego celu badawczego planowane jest poprzez realizację sześciu zadań badawczych, w które wlicza się projektowanie i synteza ligandów (zadanie 1), materiałów MOF (zadanie 2) i dienofili (zadanie 3), przeprowadzanie kowalencyjnych modyfikacji post-syntetycznych (zadanie 4), podstawowa charakterystyka fizykochemiczna otrzymanych materiałów MOF (zadanie 5) oraz badania przewodnictwa protonowego za pomocą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej (zadanie 6). Planowane zadania badawcze w większości zrealizowane będą w profesjonalnie wyposażonych laboratoriach Zespołu Chemii Koordynacyjnej Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie, przez kierownika projektu.