Projekt badawczy koncentruje się na modyfikacji sieci metaliczno-organicznych (MOF) na bazie cyrkonu za pomocą plazmy, co pozwala na precyzyjne dostosowanie ich właściwości strukturalnych i adsorpcyjnych. Sieci MOF to wysoce porowate materiały o dużej powierzchni właściwej, które dzięki funkcjonalizacji mogą znaleźć zastosowanie w separacji gazów, magazynowaniu substancji i katalizie. Kluczowym aspektem projektu jest wprowadzenie kontrolowanych defektów strukturalnych oraz grup funkcyjnych, które zmieniają właściwości hydrofilowe, hydrofobowe i chemiczne tych materiałów. Badania obejmują zarówno eksperymentalną syntezę i modyfikację materiałów, jak i zaawansowane symulacje komputerowe. W części eksperymentalnej planowana jest synteza stabilnych sieci opartych na cyrkonie, takich jak np. UiO-66, MOF-808 i PCN-222, znanych z wyjątkowej odporności chemicznej i termicznej. Następnie materiały te zostaną poddane działaniu różnych rodzajów plazmy (np. azotowej, tlenowej, argonowej), co pozwoli na selektywne wprowadzanie defektów i zmianę charakteru powierzchni. Powstałe próbki będą analizowane za pomocą szeregu technik fizykochemicznych, takich jak dyfrakcja rentgenowska proszków (PXRD), spektroskopia w podczerwieni z transformacją Fouriera (IR/ATR) oraz analiza termograwimetryczna (TGA). Równolegle przeprowadzone zostaną symulacje komputerowe w celu przewidywania wpływu defektów na strukturę i właściwości materiałów MOF. Wykorzystane zostaną metody takie jak teoria funkcjonału gęstości (DFT), służąca do modelowania stabilności defektów i zmian elektronowych w strukturze, Monte Carlo (MC) do symulacji procesu adsorpcji oraz dynamika molekularna (MD) do analizy transportu cząsteczek w porach. Dodatkowo zastosowanie pre-screeningu komputerowego pozwoli na wstępną selekcję najbardziej obiecujących struktur, co zminimalizuje liczbę wymaganych eksperymentów i ograniczy zużycie szkodliwych substancji, wpisując się w założenia zrównoważonej chemii. Uzyskane materiały zostaną przetestowane pod kątem zdolności adsorpcyjnych w odniesieniu do szerokiego zakresu cząsteczek, w tym wody, alkoholi, dwutlenku węgla, azotu, węglowodorów i argonu. Analiza ta pozwoli ocenić, w jaki sposób modyfikacje plazmowe wpływają na selektywność i efektywność adsorpcji substancji o różnej polarności. Projekt stanowi istotny krok w kierunku lepszego zrozumienia mechanizmów funkcjonalizacji materiałów MOF za pomocą plazmy i jej wpływu na ich właściwości. Zastosowanie synergii metod eksperymentalnych i teoretycznych umożliwi precyzyjne projektowanie materiałów o optymalnych parametrach użytkowych, co może mieć szerokie zastosowanie w obszarach takich jak kataliza heterogeniczna, magazynowanie gazów czy czujniki chemiczne. Wyniki badań pozwolą także na opracowanie bardziej efektywnych i zrównoważonych metod inżynierii materiałowej, otwierając nowe perspektywy w projektowaniu funkcjonalnych sieci MOF do zaawansowanych zastosowań technologicznych.