

IZVLEČEK

Kovinsko-organski mikroporozni materiali (ang. metal–organic frameworks ali MOF) sodijo med najbolj obetavne adsorbente za zajem CO₂. V doktorskem delu sem podrobno preučila tri strukturne tipe za ta namen, in sicer HKUST-1, ZnBDC in MOF-74.

V prvem delu doktorskega dela sem se posvetila študiju vpliva modifikacije ogrodja HKUST-1 z etilendiaminom (ED) na jakost interakcije molekule CO₂ z ogrodjem, selektivnost ogrodja za CO₂ iz binarne mešanice plinov CO₂/N₂ ter kinetiko adsorpcije. Ugotovila sem, da modifikacija izboljša jakosti interakcije molekule CO₂ z ogrodjem in selektivnosti ogrodja za adsorpcijo CO₂ za 85 %, pri čemer sta oba parametra tesno povezana s poroznostjo materiala in dostopnostjo por. Večanje količine dodanega ED vpliva na nastanek t.i. hierarhičnega sistema por, kar nadalje izboljša tudi difuzijo in hitrost adsorpcije molekul CO₂ v ogrodje modificiranih materialov.

V drugem delu sem preučevala strukturo ZnBDC z negativno nabitim ogrodjem, katerega naboj kompenzirajo v porah prisotni di- in trimetilamonijevi kationi. Z namenom, da bi izboljšala tako sorpcijske kot tudi katalitske lastnosti izhodiščnega vzorca, sem izvedla ionsko izmenjavo v ogrodju ujetih kationov s kationi natrija, kalija, litija in magnezija. Glede na izhodiščni material, imajo ionsko izmenjani vzorci višjo adsorpcijsko kapaciteto za CO₂, sorpcijske lastnosti pa se izboljšujejo z manjšanjem radija izmenjanih kationov. Ionska izmenjava vpliva tudi na povečanje katalitske aktivnosti, saj je osnovni ZnBDC katalitsko skoraj neaktiven, medtem ko Mg-ZnBDC brez uporabe ko-katalizatorja, ob prisotnosti CO₂, uspešno pretvori približno 40 % propilen oksida v propilen karbonat.

V tretjem sklopu doktorskega dela sem, z namenom lažjega rokovanja, M-MOF-74 (M=Zn, Co, Mg) pripravila v polimerni matrici poliHIPE s pomočjo sekundarne prekrystalizacije iz kovinskih oksidov. Ugotovila sem, da vrsta kovinskih kationov v ogrodni strukturi, ne vpliva na uspešnost kristalizacije MOF-74 v polimerni matrici. Nadalje sem preučila dostopnost vgrajenega MOF-74 za adsorpcijo molekul CO₂, ta je v primeru Mg-MOF-74@poliHIPE 98.6 %. Rezultati sorpcije CO₂ so pokazali, da imajo prekrystalizirani vzorci glede na delež vgrajenega MOF-a višje adsorpcijske kapacitete za CO₂ ter da je kinetika adsorpcije in desorpcije v polimernih kompozitih boljša kot v praškastih vzorcih. Poleg kinetike sem z vgradnjo MOF-74 v polimerno matrico izboljšala tudi regeneracijo adsorbentov – *pri temperaturi 150 °C se v primeru vzorca Zn-MOF-74@polyHIPE uspešno desorbira do 95 % CO₂.*

KLJUČNE BESEDE: kovinsko-organski mikroporozni materiali, sintezna modifikacija, ionska izmenjava, adsorpcija in pretvorba CO₂, sekundarna prekrystalizacija, poliHIPE