

Uporaba vodika kot nosilca energije je eno večjih področij znanstvenih raziskav, osredotočenih na zmanjšanje ogljičnega odtisa energetike. Med glavnimi težavami področja so materiali in sistemi za hranjenje vodika, saj ima ta kljub veliki masni energijski gostoti nizko volumsko gostoto.

Z namenom shranjevanja vodika sem v tem delu razvila kovinsko-organski material na osnovi derivata imidazola in borohidridnih enot. V prvem delu je predstavljena sinteza in karakterizacija materiala ZIF-8/LiBH₄, sestavljenega iz mikroporoznega zeolitnega imidazolatnega ogrodja ZIF-8 (spojine cinkovih kationov v vlogi kovinskih centrov ter 2-metilimidazolatnih anionov v vlogi ligandov) in v njem nanoomejenega gostujočega borohidrida LiBH₄. Pokazali smo, da material prične sproščati vodik pri relativno nizki temperaturi okrog 120 °C, veže CO₂ in ni stabilen na zraku. Na podlagi rezultatov računskih metod, osnovanih na periodični metodologiji DFT, smo sklepali tudi na možnosti urejanja gostujoče zvrsti v porah ogrodja.

Dodatno smo karakterizirali tudi [Mg₃{(Im)BH₂(Im)}₆(ImH)₆] · CH₃CN (v formuli Im⁻ predstavlja imidazolatni anion, ImH pa 1*H*-imidazol), kompleksno spojino, sestavljeno iz treh magnezijevih kationov, povezanih z mostički iz imidazola in borohidridnega aniona, ter jo poskusili uporabiti kot prekursor za nadaljnje sinteze. Pokazali smo, da je na zraku stabilna in določili temperaturo njenega razpada. Z računskimi metodami smo raziskali tudi obnašanje solvatnih molekul CH₃CN.

V okviru tega dela je za podporo raziskovalnemu delu nastalo več računalniških programov, med drugim program za indeksiranje praškovnih difraktogramov z metodo Monte Carlo in program za obdelavo kristalnih struktur. Predstavljeno je njihovo delovanje ter splošne izkušnje s pisanjem programov in njihovim deljenjem z javnostjo.

Ključne besede: ZIF, borohidridi, shranjevanje vodika, računalniški programi