

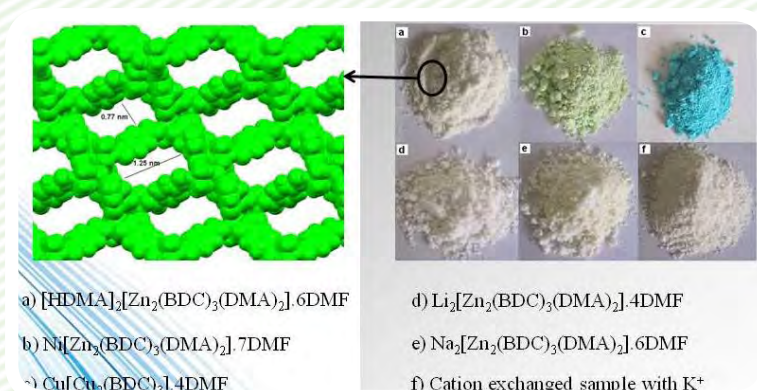


## رتبه دوم پژوهش‌های بنیادی

- پژوهشگر: دکتر کامران اخباری
- عنوان طرح: بهینه نمودن ذخیره ی گاز متان در چارچوب‌های فلز آلی نانو متخلخل آنیونی با استفاده از فرایند پاسانتزی تعویض کاتیون
- استاد راهنما: دکتر علی مرسلی
- موسسه همکار: دانشگاه تربیت مدرس

### چکیده طرح:

چارچوب‌های فلز-آلی (MOFs) دسته‌ای از ترکیبات متخلخل نوظهور هستند که یکی از پتانسیل‌های کاربردی آنها ذخیره و جداسازی گازها (مانند هیدروژن، متان، استیلن، دی اکسید کربن و اکسیژن) می باشد. هدف از این طرح دستیابی به دانش طراحی و سنتز چارچوب‌های فلز-آلی نانو متخلخل برای ذخیره گاز متان (که بیش از ۹۵ درصد حجم گاز طبیعی را تشکیل می دهد) در فشاری حدود ۳۵ بار و دمای محیط بوده که می تواند جایگزین مناسبی برای بنزین و CNG در باک خودروها باشد. کار انجام شده در این راستا شامل سنتز، شناسایی و آنالیز ساختاری یک چارچوب فلز-آلی آنیونی  $[Zn_2(BDC)_3(DMA)_2]_2 \cdot 6DMF$ ،  $[HDMA]_2$ ،  $[HDMA]^+$  = دی متیل آمونیوم،  $BDC^{2-}$  (۱ و ۴- بنزن دی کربوکسیلات،  $DMA$  = دی متیل آمین و  $DMF = N$  و  $N$ -دی متیل فرامید) بوده که شانزدهمین چارچوب فلز-آلی آنیونی سنتز شده در دنیا می باشد. چارچوب‌های فلز-آلی آنیونی خود زیر مجموعه‌ای از چارچوب‌های فلز-آلی می باشند که به دلیل ویژگی ساختاری آنها و حضور کاتیون آلی در حفرات آنها، تنها تعداد محدودی از آنها سنتز و گزارش شده است. حضور کاتیون‌های آلی  $HDMA^+$  در کانال‌های این چارچوب فلز-آلی با شبکه آنیونی، امکان تعویض پاسانتزی آن‌ها را با یون‌های فلزی چون  $Ni^{2+}$ ،  $Cu^{2+}$ ،  $Li^+$ ،  $Na^+$  و  $K^+$  فراهم می نماید. بدین ترتیب فرایند تعویض کاتیون این چارچوب فلز-آلی با یون‌های ذکر شده صورت گرفته و فرمول‌های مولکولی آنها توسط آنالیزهای  $CHN$ ،  $ICP$ ،  $XRD$  و  $^1H-NMR$  تعیین گردید. در مرحله بعد این شش ترکیب فعال گردیده و میزان ذخیره‌ی گاز متان در آنها مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان می دهد که نمونه تعویض کاتیون شده با  $Li^+$  بیشترین میزان ذخیره‌ی گاز متان را دارا می باشد.



طرح‌های برگزیده پانزدهمین جشنواره جوان خوارزمی - آذر ماه ۱۳۹۲