

SUPERHRDINOVÉ VĚDY



DEIONIZACE VODY

Deionizace jako cesta k vyřešení globálního problému nedostatku pitné vody

Voda je jedním z nejvzácnějších zdrojů na naší planetě. Podle reportu UNESCO o stavu vody ve světě z roku 2006 se na mnoha místech planety zásoby vody tenčí a její kvalita se zhoršuje, zatímco spotřeba roste. V roce 2030 dosáhne světová populace podle předpovědi čísla 8,5 bilionu lidí, což odpovídá 30% nárůstu globální poptávky po vodě, přičemž pouze 60 % bude pokryto. Jelikož jsou období sucha stále častější, odsolování mořské vody již není jen momentálním řešením krizové situace, ale stává se dlouhodobým řešením, a tím pádem také předmětem výzkumu mnoha vědeckých center.

Kapacitní deionizace (CDI) je jednou z mnoha metod, pomocí které se dá z brakické vody odstranit rozpuštěné soli, a je tedy rovněž potenciální metodou pro odsolování pitné vody. Tato metoda je založena na akumulaci iontů na povrchu elektrod pod vlivem aplikovaného elektrického napětí. Tento jev se nazývá elektrosorpce. Ve srovnání s tradičními technologiemi, jako je tepelná destilace, reverzní osmóza a elektrodialýza, má CDI následující výhody: během cyklů odsolování a regenerace nejsou zapotřebí žádné chemikálie a aby se zabránilo elektrolýze vody, jsou aplikovaná napětí poměrně nízká. To činí danou metodu pro odsolování vody ekologickou, šetrnou k životnímu prostředí a energeticky i finančně efektivní.

V posledních letech došlo k rychlému vývoji celé řady různorodých uhlíkových nanomateriálů. Hlavní předností těchto adsorbentů je možnost řízené syntézy jejich různých forem, jako jsou nanotrubice, nanorohy, nanočáry, nanokony a další. Užitečnost zmíněných materiálů je primárně určena jejich vlastnostmi (a velkými možnostmi jejich modifikace), jako je vyvinutý vnitřní povrch, porézní struktura a chemická povaha povrchu.

Jelikož je nonosorpce proces probíhající na povrchu elektrody, patří mezi jednu ze žádoucích vlastností materiálu, ze kterého je vyrobena, velká povrchová plocha. Navíc musí být zvolený materiál dobrý elektrický vodič. Uhlíkové adsorbenty skvěle splňují oba tyto předpoklady. Vysvětlení a porozumění průběhu procesu deionizace v pórech uhlíkových materiálů jsou důležitá pro vývoj a optimalizaci metody CDI. Molekulární simulace jsou pak významným nástrojem potřebným pro získání znalostí v této problematice. Virtuální experimenty umožňují systematicky prozkoumat různé kombinace faktorů, jako jsou



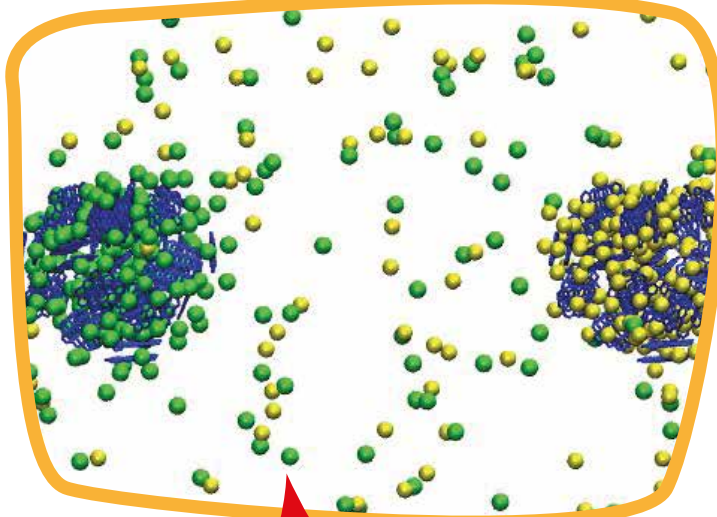


mikrostruktura, povrchová chemie a použité napětí, které procesy CDI ovlivňují. Navíc molekulární simulace dovolují prozkoumat i mechanismy probíhajících procesů na atomární úrovni, což u běžných experimentů není možné.

Skupina vědců zmíněná výše používá dynamické molekulární simulace k určení a vysvětlení základních pravidel, která popisují chování iontů na povrchu uhlíkových materiálů pod proudem i bez přívodu proudu. Zaměřili se mimo jiné i na chemické reakce probíhající na povrchu. Jejich vliv ještě nebyl dostatečně popsán, jelikož byl v mnoha jiných studiích přehlížen. Popsaný výzkum se realizoval díky superpočítači Eagle, který provozuje Poznaňské superpočítačové a síťové centrum. Aby byl získaný obraz studovaných uhlíkových materiálů komplexní, musí se provést řada simulací. Takové simulace jsou časově velmi náročné. Výzkum podobného typu není možné realizovat bez přístupu k výpočetním zdrojům, jaké poskytuje PSNC.

Dr. Piotr Gauden a Mgr. Wojciech P. Zieliński, Chemická fakulta, Univerzita Mikuláše Koperníka v Toruni, ul. Gagarinova 7, 87-100 Toruň, Polsko

Dr. Sylwester Furmaniak a Stanisław Staszic, Univerzita aplikovaných věd v Píle, ul. Podchorążych 10, 64-920, Píla, Polsko ve spolupráci s Poznaňským superpočítačovým a síťovým centrem, Polsko



Chcete se dozvědět více?

superheroes4science.eu
facebook.com/superheroes4science
instagram.com/superheroes4science

Projekt Superheroes 4 Science je podpořen
 Mezinárodním visehradským fondem.
www.visegradfund.org

Visegrad Fund