

SUPERBOHATEROWIE DLA NAUKI



DEJONIZACJA WODY

Dejonizacja jako sposób rozwiązania globalnego problemu niedoboru wody pitnej

Woda jest jednym z najcenniejszych zasobów planety. Według Światowego Raportu UNESCO na temat Wody z 2006 r. zasoby wody kurczą się, a jej jakość pogarsza się w wielu częściach świata. Jednocześnie, zapotrzebowanie na wodę wciąż rośnie. Przewiduje się, że światowa populacja osiągnie 8,5 miliarda do 2030 r. co spowoduje 30% wzrost globalnego popytu na wodę, podczas gdy tylko 60% tych potrzeb zostanie zaspokojone. Wraz z coraz częstszymi suszami odsalanie wody morskiej staje się koniecznością i w konsekwencji jest przedmiotem badań w wielu ośrodkach naukowych.

Dejonizacja pojemnościowa (ang. capacitive deionization, CDI) jest jedną z metod usuwania rozpuszczonych soli z wody obecnie traktowaną jako perspektywiczna technika odsalania wody pitnej. U jej podstaw leży akumulacja jonów na powierzchni elektrod pod wpływem przyłożonego napięcia elektrycznego. Takie zjawisko określa się mianem elektrosorpcji. Wśród zalet metody CDI można wymienić brak konieczności stosowania chemikaliów podczas cykli odsalania i regeneracji oraz dość niskie napięcie robocze (aby uniknąć elektrolizy wody). Czyni to tę technologię przyjazną dla środowiska, energooszczędną i opłacalną w porównaniu z tradycyjnymi technologiami, takimi jak destylacja termiczna, odwrócona osmoza i elektrodializa.

W ostatnich latach obserwuje się gwałtowny wzrost zarówno skali wytwarzania, jak i różnorodności nanomateriałów węglowych. Główną zaletą tych adsorbentów jest możliwość kontrolowanej syntezy różnych form, takich jak nanorurki, nanorogi, nanoślimaki, nanostožki i inne. Ich użyteczność zależy przede wszystkim od właściwości, takich jak rozwinięta powierzchnia wewnętrzna, struktura porowata i chemiczny charakter powierzchni.

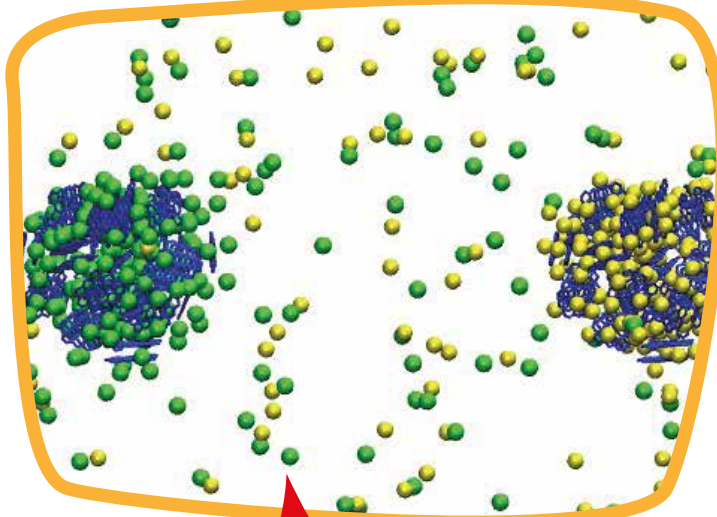
Ponieważ elektrosorpcja jest procesem powierzchniowym, jedną z pożądanych cech materiałów elektrodowych jest duże pole powierzchni. Dodatkowo powinny one dobrze przewodzić prąd elektryczny. Adsorbenty węglowe doskonale spełniają te oczekiwania. Dlatego też wyznaczenie, zrozumienie i wyjaśnienie prawidłowości dotyczących procesu dejonizacji zachodzących w porach materiałów węglowych mają zasadnicze znaczenie dla projektowania i optymalizacji metody CDI. Symulacje molekularne są ważnym narzędziem poszerzającym





naszą wiedzę. Wirtualne eksperymenty umożliwiają systematyczne badanie wpływu różnych kombinacji czynników wpływających na omawiany proces, tj. mikrostruktury, chemicznej natury powierzchni i przyłożonego napięcia. Ponadto symulacje komputerowe dają bezpośredni wgląd w mechanizm procesu na poziomie atomowym, co jest niemożliwe podczas typowych badań eksperymentalnych.

W celu określenia i wyjaśnienia ogólnych prawidłowości dotyczących zachowania jonów na naładowanych (i nienaładowanych) powierzchniach węglowych stosujemy symulacje metodami dynamiki molekularnej. Zajmujemy się między innymi wpływem chemicznej natury powierzchni, który to czynnik jest często zaniewany w innych badaniach, przez co jego efekty nie są dostatecznie poznane. Wykonanie naszych badań stało się możliwe dzięki dostępowi do superkomputerów składających się na klaster Eagle w Poznańskim Centrum Superkomputerowo-Sieciowym. Realistyczne odzwierciedlenie złożonej natury badanych materiałów węglowych wymaga konstrukcji odpowiednio dużych komórek symulacyjnych, co czyni takie modelowanie bardzo czasochłonnym. Fakt ten w połączeniu z koniecznością przeprowadzania symulacji dla wielu układów sprawia, że nasze badania byłyby niemożliwe bez dostępu do mocy obliczeniowej zapewnianej przez PCSS.



Dr hab. Piotr Gauden, Prof. UMK and mgr. Wojciech P. Zieliński, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń, Polska

Dr hab. Sylwester Furmaniak, Państwowa Wyższa Szkoła Zawodowa im. Stanisława Staszica w Pile, ul. Podchorążych 10, 64-920 Pila, Polska



Chcesz dowiedzieć się więcej?

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

Projekt Superbohaterowie dla Nauki jest wspierany przez Fundusz Wyszehradzki.
www.visegradfund.org

• Visegrad Fund
 • •