

SUPERHRDINOVIA VEDY



DEIONIZÁCIA VODY

Deionizácia ako nástroj na riešenie globálneho problému s nedostatkom pitnej vody

Voda je jednou z najvzácnejších surovín na planéte. Podľa UNESCO 2006 UN svetovej správy o využívaní vody, vodné zdroje sa znižujú a kvalita vody sa v mnohých častiach sveta zhoršuje, zatiaľ čo dopyt sa stále zvyšuje. Predpokladá sa, že svetová populácia dosiahne 8,5 miliardy pred rokom 2030, čo spôsobí 30% nárast v spotrebe vody, zatiaľ čo bude pokrytých len 60% tohto dopytu. Keďže suchá sú stále častejšie, odsolovanie vody sa zmení z dočasného riešenia na dlhodobé a už teraz je hlavným predmetom výskumu v mnohých vedeckých centrách.

Kapacitná deionizácia (CDI) je jednou z metód odstraňovania rozpustených solí z poloslaných vôd, ktorá je potenciálnou metódou odsolovania pitnej vody. Táto metóda je založená na zhromažďovaní iónov na povrchu elektród pod vplyvom aplikovaného elektrického napätia. Tento jav sa volá elektro-vstrebávanie. Spomeňme nasledujúce výhody CDI: počas cyklov odsolovania a regenerácie nie sú potrebné žiadne chemikálie a použité napätia sú celkom slabé, aby sa predišlo elektrolyze vody. Vďaka tomu je táto technológia odsolovania vody neznečisťujúca, priateľská k životnému prostrediu a energeticky a ekonomicky efektívna v porovnaní s tradičnými technikami ako je tepelná destilácia, spätná osmóza a elektrodialýza.

Súčasnnosť priniesla rýchly rozvoj v oblasti rôznorodosti a použiteľnosti uhlíkových nanomateriálov. Hlavnou výhodou týchto pohlcovačov je možnosť kontrolovanej syntézy rôznych tvarov ako nanotrúbky, nanorohy, nanozvitky, nanokužely a iné. Užitočnosť týchto materiálov je určená hlavne ich vlastnosťami (a vynikajúcimi možnosťami upraviť ich), ako vnútorné steny, pórovitá štruktúra a chemické vlastnosti povrchu.

Keďže elektro-vstrebávanie je povrchový proces, jednou zo žiadaných vlastností elektródy je veľká plocha povrchu. Okrem toho by tento materiál mal byť dobrým elektrickým vodičom. Uhlíkové pohlcovače spĺňajú tieto očakávania veľmi dobre. Preto stanovenie, pochopenie a vysvetlenie zákonitostí týkajúcich sa procesu deionizácie, ktorý sa deje v póroch uhlíkových materiálov, je zásadné pre dizajn a optimalizáciu techniky CDI. Molekulárne simulácie sú dôležitým nástrojom rozširovania nášho poznania. Virtuálne experimenty umožňujú systematicky skúmať rôzne kombinácie faktorov, ktoré ovplyvňujú proces CDI, t.j. mikroštruktúru, povrchovú chémiu a pôsobiace napätie.



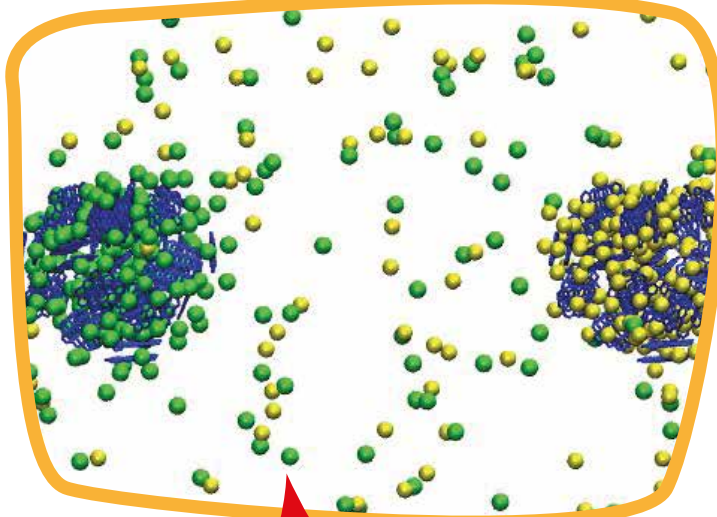


Molekulárne simulácie navyše ukazujú mechanizmy tohto procesu na úrovni atómov, čo je nemožné v rámci typických experimentálnych postupov.

Náš výskum pokrýva túto oblasť. Použili sme simuláciu molekulárnej dynamiky, aby sme určili a vysvetlili všeobecné pravidlá určujúce správanie iónov na nabitých (a nenabitých) uhlíkových povrchoch. Okrem iného sme sa zameriavali na vplyv chemických vlastností povrchu. Vplyv tejto zložky nie je známy, lebo bol často zanedbávaný v iných štúdiách. Náš výskum bol možný len vďaka prístupu k superpočítačom v klastri Eagle, dostupnom v Poznanskom superpočítačovom a sieťovom centre. Realistický obraz komplexných vlastností skúmaných uhlíkových materiálov si vyžaduje vytvorenie primerane veľkých simulovaných systémov. To spôsobuje, že si tieto simulácie vyžadujú veľmi veľa času. Tento fakt v kombinácii s potrebou opakovať tieto simulácie pre mnoho rôznych systémov znamená, že náš výskum by nebol možný bez prístupu k výpočtovému výkonu, ktorý poskytuje PSNC.

Dr hab. Piotr Gauden, Prof. NCU a mgr. Wojciech P. Zieliński,
Fakulta chémie, Univerzita Mikuláša Kopernika v Torune, Gagarin
7, 87-100 Torun, Poľsko

Dr hab. Sylwester Furmانيak, Univerzita Stanisław Staszic
aplikovaných vied v Pite, Podchorążych 10, 64-920, Piła, Poľsko
v spolupráci s Poznanským superpočítačovým a sieťovým
centrom, Poľsko



Chcete sa dozvedieť viac?

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

Projekt Superheroes 4 Science je podporo-
vaný Vyšehradským fondom
www.visegradfund.org

Visegrad Fund