

## PEZHMAN ZARABADI POOR - Advanced carbon@MOF composites for gas storage and separation

Kvůli rostoucí poptávce po produkci nových pokročilých materiálů pro adsorpci a separaci plynů a současným nákladným metodám je zásadní hledat materiály, které usnadní uskladnění a separaci různých plynů jako jsou helium, metan a oxid uhličitý efektivním a užitným způsobem. Hlavním cílem projektu je kombinovat molekulární simulace a experimenty za účelem návržení, vývoje a zavedení nových materiálů pro extrakci hélia ze zemního plynu. Navrhovaný přístup povede nejen k návrhu pokročilých materiálů s uvedenou aplikací, ale může také vytvořit procesy využitelné k návrhu systémů pro adsorpci, separaci a skladování jiných významných látek jako je metan a oxid uhličitý. K dosažení těchto cílů se projekt COMPSTORE zaměří na uhlíkaté nanomateriály, metaloorganické materiály a jejich pokročilé kompozity. K dosažení celkového cíle projektu jsou navrženy následující kroky: *state-of-the-art počítačový výzkum interakcí adsorbát/adsorbent, pokročilý návrh a vývoj potenciálních adsorbentů pomocí simulací, syntéza a charakterizace požadovaných materiálů s využitím špičkových technik a nakonec výzkum vlastností syntetizovaných materiálů v realistických experimentech a podmínkách*. Tyto materiály mohou díky svým vlastnostem najít místo také v zařízeních pro skladování elektrické energie jako jsou superkondenzátory. Projekt tak vytváří znalosti užitečné pro jihomoravskou regionální specializační doménu A3: Investiční celky (firmy z oblasti energetiky a průmysl purifikace zemního plynu) a A1: energetické strojírenství (skladování energie).

