

Kovino-organski materiali s prilagojenimi adsorpcijskimi mesti za uporabo v izredno občutljivih elektronskih nosovih (ADSITE)

Oznaka in naziv projekta

J2-70077 Kovino-organski materiali s prilagojenimi adsorpcijskimi mesti za uporabo v izredno občutljivih elektronskih nosovih

J2-70077 Adsorption-site engineered metal-organic frameworks for ultra-sensitive electronic noses

Logotipi ARIS in drugih sofinancerjev



Projektna skupina

Vodja projekta: dr. Aleksander Matavž

Sodelujoče raziskovalne organizacije: [Povezava na SICRIS](#)

Sestava projektne skupine: [Povezava na SICRIS](#)

Vsebinski opis projekta

Selektivno in natančno zaznavanje hlapnih organskih spojin v realnem času s prenosno in cenovno ugodno napravo, bi drastično vplivalo na okoljski monitoring, kmetijstvo in tudi diagnostiko bolezni. Na primer, hlapne organske spojine nastanejo kot produkt metaboličnih procesov v rastlinah in živalih. Vzorec njihovih koncentracij nam lahko pove marsikaj o zdravju tega organizma. Pokazano je bilo, recimo, da povišane koncentracije toluene in izoprena v izdihanem zraku nakazujejo na rakavo obolenje pljuč ali zgornjih dihalnih poti. Spojine, ki so produkt antropogene dejavnosti, pa so pogosto povezane z onesnaženjem, zato je spremljanje njihove koncentracije ključno pri zagotavljanju varnega okolja. Vsem tem aplikacijam je skupno, da potrebujejo selektivno zaznavanje izredno majhnih koncentracij hlapnih organskih spojin (v ppb-ppm območju) ob prisotnosti večjih koncentracij interferentov (npr. vodna para), kar je velik izziv.

Koncentracijo hlapnih organskih spojin lahko izmerimo s senzorji plina. Popolnoma selektivni senzorji plina praktično ne obstajajo, kar pomeni, da poleg tarčnih spojin izmerijo tudi ostale. Da bi izboljšali selektivnost zaznave, so raziskovalci že v osemdesetih letih iznašli koncept tako imenovanega elektronskega nosu. Podobno kot biološki voh, elektronski nos uporablja niz senzorjev (receptorjev), ki so delno selektivni. Unikaten odziv celotnega niza senzorjev deluje kot prstni odtis, ki omogoči prepoznavo tipa molekule. Vendar imajo trenutni elektronski nosovi še vedno velike težave pri

selektivni zaznavi spojin v kompleksnem ozadju zaradi slabe selektivnosti in občutljivosti obstoječih senzorjev plina.

Kovino-organski materiali (ang. MOFs) so bili nedavno predlagani za senzorje hlapnih organskih spojin z izboljšano selektivnostjo. Ti urejeni nanoporozni materiali izkazujejo rekordno velike interne površine in dobro definirano kemijsko okolje v porah, zato adsorbirajo spojine že pri nizkih koncentracijah in so odlični kandidati za senzorje plina. Vendar se je kljub intenzivnemu raziskovanju izkazalo, da je izredno težko pripraviti tanke plasti teh materialov, kar izkazujejo dva objavljena članka na temo kapacitivnih MOF senzorjev. Zato do sedaj opisani obstajajo le elektronski nosovi, ki uporabljajo gravimetrično zaznavo adsorbirane faze v MOFih. Zaradi izredno velike poroznosti MOFov je mogoče material funkcionalizirati z delno okupacijo por s specifičnimi molekulami. Pri tem se celokupna kapaciteta adsorpcije zmanjša, vendar se lahko afiniteta pri nizkih koncentracijah dejansko poveča, če je interakcija med molekulami gosta in plina ugodna. Primer zanimivih specifičnih molekul so ionske tekočine, ki so bile v preteklosti že raziskovane kot okolju prijazna topila. Ker je mogoče fizikalno kemijske lastnosti ionske tekočine zlahka spreminjati z izbiro kationa in aniona (obstaja kar 1018 različnih kombinacij), so idealna izbira za funkcionalizacijo MOFov. Tako se je mogoče osredotočiti na MOF material z znanim protokolom za nanos visoko-kakovostne tanke plasti in njegove adsorpcijske lastnosti spremeniti z vgraditvijo specifičnih ionskih tekočin. Ta koncept se je nedavno uporabil za izdelavo elektronskega nosu z gravimetričnim zaznavanjem, vendar še nikoli za kapacitivne senzorje, ki imajo superiorno občutljivost napram gravimetričnim napravam.

Projekt ADSITE bo preučeval odziv kondenzatorjev na osnovi kovino-organskih materialov z vgrajenimi ionskimi tekočinami. Osnova za ta projekt so naši preliminarni rezultati, ki kažejo, da vgradnja ionske tekočine v mrežo nanopor poveča občutljivost senzorja na metanol za dva velikostna razreda. Meritve nakazujejo, da povečan odziv ni samo posledica povečane adsorpcije kompozita, temveč gre tudi za pojav novih elektronskih procesov. Pojav le teh ni čisto presenečenje, saj je znano, da je mogoče električne lastnosti ionskih tekočin modulirati s prisotnostjo topil. Vendar ta koncept še ni bil nikoli uporabljen v senzorjih hlapnih organskih spojin, zato so točne lastnosti in mehanizmi, ki vodijo do povečanega odziva, neraziskani.

Zato v projektu predlagamo multidisciplinarno raziskavo, ki povezuje organsko sintezo, nanoporozne materiale, mikroelektroniko in podatkovne znanosti. V prvem delu projekta se bomo osredotočili na vgraditev ionskih tekočin z različnimi kationi in anioni v tanke plasti MOFa. Kot prototipen primer MOFa bo uporabljen ZIF-8, saj imamo z omenjenim materialom že večletne izkušnje. Sistematična variacija kationov in anionov bo služila za diverzifikacijo afinitete kapacitivnih senzorjev, hkrati pa bo omogočila poglobljen študij interakcij med ionsko tekočino, nanoporami in hlapnimi organskimi molekulami. Pripravljene plasti kompozitov bomo preučili z naborom analitičnih metod (SEM, AFM, EDX, FTIR, ToF-SIMS, XRD), da bomo določili njihove strukturne in kemijske lastnosti. V drugem delu bomo IL-MOF kompozite vgradili v senzorje, kjer bomo uporabili vertikalno konfiguracijo elektrod v tankoplastnih kondenzatorjev, kar bo omogočilo direktno določitev dielektričnih in električnih lastnosti kompozita. Hkrati bomo s spektroskopsko elipsometrijo sočasno merili količino adsorbiranih organskih spojin, kar bo omogočilo direktno povezavo z električnim odzivom senzorjev. V kombinaciji s podrobno karakterizacijo adsorpcijskih mest in njihovih termodinamičnih lastnosti, bodo izsledki teh meritev omogočili razumevanje sinergijskih učinkov med ionsko tekočino in MOFi ter posledično odziva kapacitivnih senzorjev. V tretjem delu projekta bomo izbrane kompozite uporabili za izdelavo elektronskega nosu. Izbor kandidatov bo temeljil na odzivu njihovih senzorjev na modelne hlapne organske spojine, pri čemer bomo izbrali 15 do 20 senzorjev z najbolj nekoreliranim (različnim) odzivom. Odziv niza izbranih senzorjev bo nadalje preučevan za zaznavanje skupno 19 različnih hlapnih spojin. Pričakujemo, da bo odziv senzorjev v mešanici plinov enak vsoti odziva na posamezne

komponente (upoštevajoč Henryjev zakon), kar bomo preverili na dvo-komponentnih in tro-komponentnih mešanicah. Nato bomo zmogljivost elektronskega nosa preverili še na večkomponentnih mešanicah, pri katerih bodo tarčne molekule prisotne v ppb-ppm območju, interferenčne pa v območju med 1-100%. Pri obdelavi podatkov bomo uporabili različne klasifikacijske in regresivne modele. Za najbolj realistično oceno zmogljivosti elektronskega nosu bo služila analiza vzorcev zraka v laboratorijskem in pisarniškem okolju v realnem času.

Osnovni podatki sofinanciranja so dostopni na spletni strani [SICRIS](#).

Faze projekta in opis njihove realizacije

1. Faza

2. Faza

3. Faza

Bibliografske reference

- [Reference - SICRIS](#)
- [Referenca 1](#)
- [Referenca 2](#)
- [Referenca - Revija](#)