

## **Zastosowanie symulacji molekularnych adsorpcji do modelowania przebiegu quasi-równowagowej termodesorpcji węglowodorów z materiałów mikroporowatych.**

Tematyka mojej pracy naukowej obejmuje doświadczalne badania materiałów mikroporowatych metodą quasi-równowagowej temperaturowo-programowanej desorpcji i adsorpcji (QE-TPDA) oraz odpowiadające im symulacje molekularne mające na celu zaawansowaną interpretację wyników eksperymentalnych.

Adsorpcja jest niezwykle istotnym zjawiskiem, dzięki któremu możliwe jest m.in. usuwanie szkodliwych substancji z wody i powietrza, rozdział i oczyszczanie gazów, neutralizowanie zapachów czy pochłanianie toksyn z organizmu. Adsorpcja ma także kluczowe znaczenie w funkcjonowaniu wielu katalizatorów heterogenicznych wykorzystywanych m.in. w przemyśle petrochemicznym.

W pracy doświadczalnej korzystam z nowatorskiej metody doświadczalnej badania adsorpcji – quasi-równowagowej termodesorpcji (QE-TPDA) – która została opracowana w 2006 roku na Uniwersytecie Jagiellońskim przez dr. hab. Wacława Makowskiego. Technika QE-TPDA służy do badania adsorpcji lotnych substancji w adsorbentach porowatych i została ona z powodzeniem zastosowana w badaniach zeolitów i mezoporowatych krzemionek. Główną przewagą metody QE-TPDA nad technikami standardowymi jest szeroki wybór cząsteczek-sond, które mogą być dobierane do badanych materiałów oraz ich potencjalnych zastosowań. Adsorpcję z reguły bada się w ujęciu izotermicznym, czyli przy zmiennym ciśnieniu i ustalonej temperaturze. W QE-TPDA natomiast równowagą adsorpcyjno-desorpcyjną steruje się poprzez precyzyjne zmiany temperatury badanej próbki dla ustalonej wartości ciśnienia. Takie podejście do adsorpcji jest rzadko stosowane, lecz równie interesujące, co podejście izotermiczne.

Gwałtowny rozwój w dziedzinie komputeryzacji obserwowany w ostatnich latach dostarczył naukowcom nowych narzędzi badawczych. Obliczenia komputerowe służą obecnie do badania różnorodnych procesów w skali nanometrycznej. Do badania adsorpcji korzysta się przede wszystkim z symulacji molekularnych metodami dynamiki molekularnej oraz Monte Carlo. **Głównym celem** moich badań jest wykorzystanie obliczeń komputerowych do modelowania przebiegu eksperymentów QE-TPDA, co pozwoli na lepsze zrozumienie wyników eksperymentów oraz wyjaśnienie zachodzących zjawisk na poziomie molekularnym.

Sieci metaloorganiczne, inaczej materiały typu MOF (*ang. metal-organic framework*), stanowią stosunkowo nową i intensywnie badaną grupę materiałów mikroporowatych. Materiały te są niezwykle interesujące ze względu na szerokie możliwości syntezy nowych struktur oraz dostosowywania ich pod względem funkcjonalności. Wśród potencjalnych zastosowań sieci metaloorganicznych można wymienić magazynowanie wodoru, usuwanie dwutlenku węgla z atmosfery, przenoszenie leków, katalizę czy rozdział gazów. Większość z tych zastosowań jest oparta na unikalnych właściwościach adsorpcyjnych sieci metaloorganicznych. Z tego powodu istotny jest rozwój technik eksperymentalnych oraz obliczeniowych, dzięki którym możliwe jest dokładniejsze zbadanie właściwości adsorpcyjnych tych materiałów.

W ramach projektu planowane są syntezy kilku sieci metaloorganicznych oraz ich pełna charakterystyka fizykochemiczna mająca na celu potwierdzenie czystości otrzymanych produktów. Planuje się także badania stabilności materiałów poddanych działaniu wysokiej temperatury oraz cyklicznie adsorbujących i desorbujących cząsteczek-gości. Równoległe do eksperymentów QE-TPDA przewidziane są także symulacje molekularne mające na celu zbadanie mechanizmu adsorpcji oraz dyfuzji cząsteczek w mikroporach badanych materiałów. Badania te pozwolą na poszerzenie stanu wiedzy na temat zjawisk zachodzących podczas adsorpcji w materiałach typu MOF w skali mikroskopowej, które mają bezpośrednie przełożenie na rezultaty obserwowane w makroświecie.