

Symulacje molekularne adsorpcji lekkich węglowodorów na materiałach mikroporowatych w odniesieniu do termodesorpcyjnych badań doświadczalnych

Materiały porowate są to ciała stałe, których wewnętrzna struktura poprzecinana jest siecią kanałów i komór, do których mogą wnikać (tj. ulegać adsorpcji) cząsteczki-goście. Kanały o średnicy mniejszej od 2 nm, które wielkością odpowiadają rozmiarom niewielkich cząsteczek (np. węglowodorów) nazywamy mikroporami. Materiały mikroporowate znajdują liczne zastosowania technologiczne np. jako katalizatory do produkcji paliw płynnych lub adsorbenty do oczyszczania lub rozdziału gazów i cieczy. Z tego względu istotne jest dokładne poznanie struktury porów materiałów tego typu.

Głównym celem projektu jest zastosowanie obliczeń komputerowych Monte Carlo do modelowania adsorpcji lekkich węglowodorów na wybranych adsorbentach mikroporowatych w odniesieniu do danych doświadczalnych uzyskanych innowacyjną metodą eksperymentalną QE-TPDA (*Quasi-Equilibrated Temperature Programmed Desorption and Adsorption*). Dostarczą one szczegółowej wiedzy o adsorpcji na poziomie molekularnym i pozwolą na lepsze zrozumienie zachodzących zjawisk. Z danych doświadczalnych QE-TPDA można otrzymać wysokiej jakości izobary adsorpcji, tj. zależności ilości zaadsorbowanej substancji od temperatury, dla ustalonego ciśnienia. Takie podejście do adsorpcji jest rzadko stosowane, lecz równie interesujące, co podejście izotermiczne.

Do badań wybrano dwie klasy materiałów mikroporowatych, których synteza jest **celem dodatkowym projektu**. Krzemionki o strukturach zeolitów, ze względu na swoje szczególne właściwości, takie jak wysoka stabilność termiczna, różnorodność strukturalna, chemiczna prostota i bezpośredni związek z zeolitami są doskonałymi kandydatami zarówno do badań eksperymentalnych jak i symulacji molekularnych. Porowate polimery koordynacyjne typu MOF są niezwykle interesujące ze względu na możliwość dostosowywania ich pod względem struktury oraz funkcjonalności, a także przez wzgląd na potencjalne zastosowania jako adsorbenty do przechowywania wodoru oraz metanu i usuwania dwutlenku węgla oraz jako katalizatory. Rozwój metody eksperymentalnej odpowiedniej do badań porowatości tych materiałów wydaje się zatem istotny.