

Mgr inż. Justyna Rogacka

Katedra Inżynierii Bioprocessowej, Mikro- i Nanoinżynierii

Wydział Chemiczny

Politechnika Wrocławska

Streszczenie pracy doktorskiej pt. „Modelowanie Własności Adsorpcyjnych Hybrydowych Materiałów Porowatych”

Niniejsza rozprawa stanowi przyczynek do zrozumienia mikroskopowego mechanizmu adsorpcji gazów w dwóch typach materiałów nanoporowatych : w węglach aktywowanych i w elastycznych strukturach metaloorganicznych (z *ang.* MOF). Zastosowana metodologia obejmuje zarówno symulacje molekularne (metodą Grand Canonical Monte Carlo) jak i pomiary eksperymentalne (odwrotna chromatografia gazowa). W przypadku węgla aktywowanego pokazano iż poniżej temperatury pokojowej aż do $T = 77$ K i przy ciśnieniu gazu aż do 400 barów ilość wodoru zaadsorbowanego w nanoporach jest niezależna od przyjętego modelu cząsteczki H_2 (typu *all atom* lub *united atom*). W przypadku adsorpcji CO_2 , CH_4 i C_6H_6 w elastycznych strukturach MOF zaproponowano i zaimplementowano prostą metodologię pozwalającą na identyfikację stanów przejściowych podczas transformacji strukturalnych wymuszonych przez adsorpcje. Przeprowadzono numeryczny przegląd bazy danych istniejących i hipotetycznych struktur MOF w celu wyszukiwania struktur o najwyższej selektywnej adsorpcji CO_2 z wilgotnej mieszaniny CO_2/CH_4 , i wyjaśnienia mechanizmu wysokiej adsorpcji CO_2 w obecności wody.