

Influence of lattice dynamics on structural transformations and adsorption in hybrid nanoporous materials

Wpływ dynamiki sieci na transformacje strukturalne oraz adsorpcję w hybrydowych materiałach nanoporowatych

Filip Formalik

Streszczenie

Rozprawa jest poświęcona analizie numerycznej mechanizmów transformacji strukturalnych w materiałach typu metal-organic framework (MOF). Zastosowana metodologia obliczeniowa opiera się na symulacjach atomistycznych wykorzystujących teorię funkcjonału gęstości oraz metodę Grand Canonical Monte Carlo. Pokazano, że dynamika sieci krystalicznej, w szczególności drgania (fonony) o niskiej częstotliwości, są prekursorami deformacji sieci i mogą być użyte jako ich wskaźniki. W celu ustalenia korelacji między wewnętrzną dynamiką sieci a odkształceniami wywołanymi adsorpcją molekuł w porach MOFa, przy użyciu potencjału osmotycznego obliczono profile energetyczne wybranych struktur w funkcji deformacji. Zaproponowany opis pozwolił na spójny opis zmian strukturalnych w materiałach typu MOF w funkcji parametrów termodynamicznych (temperatura, ciśnienie), oraz wpływu adsorpcji gazów na deformacje. Zaproponowana metodologia, jest całkowicie niezależna od informacji eksperymentalnej, dzięki czemu może być używana do szacowania oraz interpretacji wyników eksperymentalnych.