

0.1. Гренев И.В. Методы *in silico* скрининга пористых материалов для задач газоразделения

В данной работе рассмотрены методы и подходы проведения *in silico* скрининга кристаллических пористых материалов для выделения легких компонент из газовых смесей. На примере широко-масштабного скрининга для более 10000 пористых металл-органических координационных полимеров (МОКП) с использованием методов Монте-Карло моделирования в большом каноническом ансамбле и молекулярной динамики продемонстрирован алгоритм поиска наиболее эффективных адсорбентов для задачи извлечения гелия из природного газа. Анализ взаимосвязей между химическим составом МОКП структур и их эффективностью в процессах газоразделения показал, что атомы металлов влияют на адсорбционные характеристики в первую очередь через формирование топологии пористой структуры, а не через вклад в межмолекулярное взаимодействие адсорбат-адсорбент. По этой причине алгоритм поиска эффективных МОКП для процесса адсорбционного извлечения гелия из природного газа должен, в первую очередь, строиться на подборе пористых материалов с оптимальными структурными параметрами. В работе предложен набор из 6 структурных параметров, характеризующих пористые материалы, и для каждого параметра определены оптимальные диапазоны значений. С помощью *in silico* скрининга удалось впервые продемонстрировать, что в случае мембранного разделения поиск МОКП одновременно селективных по отношению к азоту и метану более перспективен, чем поиск не-селективных материалов для извлечения гелия из природного газа. В работе исследовано влияние условий проведения процессов газоразделения, в том числе состава трехкомпонентной газовой смеси, давления и температуры системы, на взаимосвязь структурных характеристик с адсорбционными и мембранными свойствами МОКП. Полученные результаты были успешно применены при разработке отечественного сорбента для задачи тонкой очистки Не. Разработанный алгоритм скрининга может быть использован для поиска эффективных пористых материалов для выделения легких компонент из газовых смесей, в том числе и для получения чистого водорода из водород содержащих смесей.

Исследование выполнено за счет гранта
Российского научного фонда № 24-71-10096,
<https://rscf.ru/project/24-71-10096/>