**Моделирование адсорбционных свойств микропористых материалов на примере KAUST-7**

***Никифорова П.К., Ромашин И.А., Пупеза А.К.***

*Студент, 4 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: npkonstantinovna@yandex.ru*

На сегодняшний день актуальной проблемой стали антропогенные выбросы CO2 в атмосферу, представляющие собой угрозу изменения глобального климата. В целях адсорбции CO2 активно изучаются материалы на основе MOF [1]. Среди физических адсорбентов на основе MOF лучшие результаты массового и объемного поглощения CO2 демонстрирует KAUST-7 (Рис.1) (1.3 ммоль/г и 51.4 см3/cм3, соответственно, при концентрации CO2 400 ppm и температуре 298 К). Высокие показатели адсорбции и гидротермальной стабильности, а также относительно мягкие условия для регенерации поверхности позволяют рассматривать KAUST-7 в качестве перспективного материала для улавливания CO2 при очень низкой концентрации [2,3].

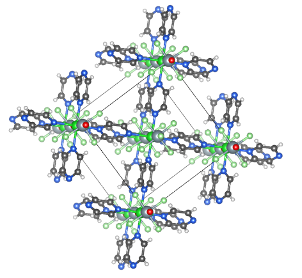
Основной проблемой опубликованных в кристаллографической базе данных Кембриджского центра (CCDC) структур KAUST-7 является неразрешенность позиций атомов фтора, а также вариативность в чередовании атомов фтора и кислорода в ячейке. Выбор корректной модели воды, наличие водородных связей и образование кластеров адсорбированной воды внутри ячейки MOF усложняют достижение равновесия в системе и расчёты энергии при молекулярном моделировании [4]. Актуальным подходом является разработка новых моделей адсорбции с использованием современных зарядовых схем.

Рис. 1. Структура элементарной ячейки KAUST-7

В работе выполнено конструирование ячеек KAUST-7 с последующей оптимизацией элементарной ячейки KAUST-7 различными методами в программных пакетах GULP, MOPAC, VASP. Для оптимизированных структур построены модели адсорбции, с использованием квантово-химических, полуэмпирических зарядовых схем, а также схем на основе машинного обучения. Изучено влияние выбора типа частичных атомных зарядов на моделирование адсорбции CO2 микропористым материалом KAUST-7.

**Литература**

1. Li X. et al. A review on anion-pillared metal–organic frameworks (APMOFs) and their composites with the balance of adsorption capacity and separation selectivity for efficient gas separation // Coord. Chem. Rev. 2022. Vol. 470. P. 214714.

2. Bhatt P.M. et al. A fine-tuned fluorinated MOF addresses the needs for trace CO2 removal and air capture using physisorption. // J. Am. Chem. Soc. 2016. Vol. 138, № 29. P. 9301-9307.

3. Cadiau A. et al. A metal-organic framework–based splitter for separating propylene from propane // Science. 2016. Vol. 353. P. 137-140.

4. Daglar H. et al. Exploring the Effect of Framework Flexibility on Water Adsorption in the Metal–Organic Framework NbOFFIVE-1-Ni Using Molecular Modeling // J. Phys. Chem. C. 2024. Vol. 128, № 44. P. 18913-18922.