

В 2016 году я закончила обучение по программе бакалавриата СПбГУ по направлению «Химия». За время обучения в университете мною был освоен теоретический материал и практический инструментарий, необходимый для подготовки выпускной квалификационной работы на тему «Диффузия CO_2 в цеолите LTA», которая была выполнена на кафедре «Физической химии» под руководством доцента, к. х.н. Сизова В.В..

Изучение транспорта газов с помощью компьютерного моделирования, проводившееся в этой работе, является актуальной задачей в контексте разработки адсорбционных технологий улавливания парниковых газов из техногенных источников. В рамках ВКР молекулярно-динамическое моделирование диффузии CO_2 осуществлялось при $T = 400\text{--}1000\text{ K}$, что позволило определить не только сами коэффициенты диффузии, но и энергии активации диффузии как адсорбированного CO_2 (18-24 кДж/моль), так и внеячейчатых катионов Na^+ (от 28 кДж/моль в отсутствие CO_2 до 50-80 кДж/моль с адсорбированным газом). Это позволило изучить зависимость подвижности адсорбированных молекул от глубины их проникновения в пористый материал. Расчеты показали, что уже на расстоянии около 2 нм от поверхности адсорбента ее влияние на диффузию газа практически затухает.