

## Streszczenie

W ramach niniejszej rozprawy doktorskiej modelowano hydrodynamikę i transport masy w obrębie nanopora adsorbentu w kolumnie chromatograficznej metodą dynamiki molekularnej. Zidentyfikowano wpływ obecności nanopora, jego szerokości, a także obecności ligandów C18 na rozmycie pików chromatograficznych dla różnych cząsteczek analitu.

Przeprowadzono symulację przepływów mieszaniny wody i analitu (fenol i n-octadecylbenzen) w obszarze wejścia do nanopora ziarna adsorbentu. Obszar przepływowy modelowano jako kanał z nanoporem. Kierunek przepływu był prostopadły do nanopora. Rozpatrywano dwa rodzaje materiału ścianek ograniczających przepływ (hydroksylowany alfa-kwarc oraz hydroksylowany alfa-kwarc z ligandami), co odpowiada rzeczywistej sytuacji, jaka ma miejsce w kolumnach chromatograficznych faz normalnych i faz odwróconych odpowiednio. Łącznie wykonano symulacje dla ośmiu sytuacji przepływowych, trwających od 15 000 000 do 30 000 000 kroków czasowych, co odpowiada 15-30 nanosekundom rzeczywistego przepływu.

Celem przeprowadzania symulacji MD skonstruowano metodami kwantowo-mechanicznymi komputerowe modele rzeczywistych materiałów (fenolu, n-octadecylbenzenu i ligandów C18) stosowanych w chromatografii. Utworzono osiem komórek obliczeniowych MD, oddzielnie dla każdej sytuacji przepływowej. Przeprowadzono cykl symulacji programem LAMMPS (na superkomputerach Halo2 i Nostromo w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego Uniwersytetu Warszawskiego). Przeprowadzono weryfikację utworzonych modeli molekularnych. Wyznaczono parametry makroskopowe w obszarze przepływu ( prędkość  $\vec{V}$ , gęstość  $\rho$ ), trajektorie analitu oraz wykresy obrazujące kształt pików chromatograficznych.

Analiza wyników dotyczących przepływu, w którym analitem były cząsteczki fenolu i n-octadecylbenzenu, pozwoliła na wyciągnięcie wniosku, że na transport analitu podczas przepływu mieszaniny ma wpływ jego budowa molekularna.

Na podstawie analizy porównawczej wyników można sformułować wniosek, że widoczny jest wyraźny wpływ materiału ścianki zarówno na przepływ mieszaniny wody, jak i cząsteczek analitu. Co więcej, wpływ ten jest zasadniczo różny dla wody, fenolu i n-octadecylbenzenu.

Zaobserwowano, że nawet nieznaczna zmiana szerokości nanopora może znacząco wpływać na transport cząsteczek analitu.

Analiza uzyskanych wyników opisujących transport cząsteczek analitu nie tylko pozwoliła potwierdzić hipotezę o wpływie zjawisk hydrodynamicznych spowodowanych obecnością nanopora na rozmycie pików chromatograficznych, ale i wskazała na silny wpływ materiału adsorbentu i analitu na hydrodynamikę przepływu.