

Zusammenfassung der Doktorarbeit – von Moyassar Meshhal

zum Thema

“Computational Perspectives on Environmental Applications of Two-dimensional Materials”

Die zunehmenden Umweltherausforderungen unserer Zeit erfordern innovative Lösungen und 2D-Materialien erweisen sich als vielversprechende Kandidaten mit bemerkenswerten und einstellbaren Eigenschaften für verschiedene Anwendungen. Diese Arbeit untersucht das Potenzial der Nutzung von 2D-Materialien für die Bindung von Schadstoffen anhand von drei Fallstudien.

Die erste Untersuchung befasst sich mit den Details der Wasserdiffusion zwischen Graphenoxidschichten (GO) unter Verwendung erweiterter Molekulardynamik-Simulationen auf der Basis eines Tight-Binding Zugangs(xTB). Der Schwerpunkt liegt auf der Auswirkung von H-Brücken zwischen den Schichten und es werden neue Erkenntnisse zur Verlangsamung der Wasserdiffusion liefern. Diese Erkenntnisse haben nicht nur Auswirkungen auf die Membrantechnologie, sondern bieten auch eine neue Perspektive für Anwendungen in selektiven Trennprozessen.

Die zweite Fallstudie untersucht das Verhalten von Polymeren, einschließlich Polyethylen (PE), Polyethylenoxid (PEO) und Polystyrol (PS), an der Grenzfläche zwischen Graphen und Wasser. Die Analyse der Polymerdynamik deckt die Fähigkeit von Graphen auf, Polymere zu adsorbieren und weist auf eine wirksame Entfernung von Nanoplastik aus wässrigen Umgebungen hin. Diese Studie legt nicht nur eine weitere Erforschung der Dynamik von Polymeren und Wasser in unmittelbarer Nähe von Graphen und anderen 2D-Materialien nahe, sondern liefert auch wertvolle Erkenntnisse zum Verständnis der Adsorptionskapazitäten von Graphen und graphenbasierten 2D-Materialien.

In der dritten Fallstudie verlagert sich der Fokus auf das Potenzial von Antimonen, das hochgiftige organische Molekül 2,3,7,8-Tetrachlordibenzo-p-dioxin (TCDD) zu binden. Dichtefunktionaltheorie-Berechnungen belegen die vielversprechende Fähigkeit von Antimonen zur Adsorption von TCDD, wobei die Untersuchung verschiedener Dotierungen eine verbesserte Leistung ergab. Diese Erkenntnisse eröffnen nicht nur Möglichkeiten zur Optimierung der Antimoneneigenschaften, sondern unterstreichen auch die differenzierten Auswirkungen der Dotierung auf die Adsorptionseigenschaften an diesem Material.

Zusammengenommen tragen diese Fallstudien zum Verständnis von 2D-Materialien in umweltrelevanten Anwendungen bei und liefern neue Einblicke in die Wasserdiffusion, Polymeradsorption und das Einfangen toxischer Moleküle. Die Resultate unterstreichen mögliche Einsatzszenarien in der Membrantechnologie, der Umweltsanierung und dem maßgeschneiderten Materialdesign für Adsorptionszwecke. Diese Arbeit markiert einen ersten Schritt in Richtung praktischer Anwendungen und betont die Bedeutung interdisziplinärer Zusammenarbeit.