ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ МЕТОДОМ AB-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЯ

М.Б. Юнусов1,\*), Р.М. Хуснутдинов1,2), А.В. Мокшин1,2)

1)Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

2)Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

\*) e-mail: mukhammadbek@mail.ru

Газовые гидраты - это кристаллические соединения, состоящие из каркаса, образованного молекулами воды и молекул-гостей, включенных в полости каркаса. В настоящее время существует перспектива использования гидратов природного газа в качестве источника топлива, к тому же в газовой отрасли остро стоит проблема гидратообразования в газопроводах. В рамках данного исследования проведены крупномасштабные ab initio молекулярно динамические расчеты гидратов метана sI и sH. В рамках метода функционала плотности для расчета электрон-электронного взаимодействия использовалось обобщенно-градиентное приближение GGA с обменно-корреляционной поправкой PBE. Электрон-ионное взаимодействие осуществлялось с PAW-потенциала.

В диапазоне температур T = [180; 260] K для гидратов метана пустых молекулярных каркасов sI и sH, рассчитана средняя теплоемкость при постоянном объеме. Полученные значения теплоемкости имеют хорошее согласие с экспериментальными данными. Для структуры sI c пустыми молекулярными полостями были рассчитаны плотность электронных состояний *N*(*E*) и энергетическая зонная структура, которая представляет собой зависимость энергий электронов от волнового вектора *E*(**k**). Также, в диапазоне температур T = [180; 260] для гидратов метана с кубической структурой sI и гексагональной структурой sH, а также для каркаса sH c пустыми молекулярными полостями были рассчитаны плотности электронных состояний *N*(*E*).