

ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕТАНА С ДИМЕРОМ ОВАЛЕНА.

А.Ф. Дмитрук, О.М. Заречная, И.А. Опейда
ИнФОУ НАН Украины, Донецк

В данной работе исследована возможность внедрения молекулы метана между графитоподобными плоскостями. В качестве модели двух графеновых слоев использовали димер овалена ($C_{32}H_{14}$) (рис.).

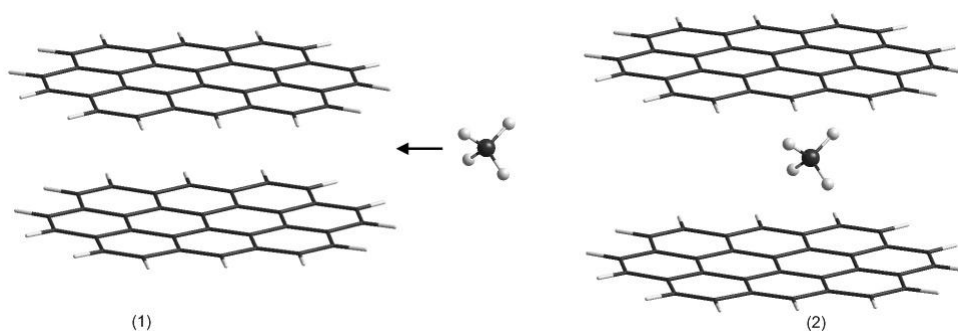


Рис. (1)- структура димера овалена; (2) - структура кластера димера овалена с метаном.

Ab initio-расчеты выполнялись в базисе 6-31G, энергия электронной корреляции учитывалась в рамках теории возмущений Möller-Plesset(MP2).

Полученная зависимость электронной энергии димера овалена от межплоскостного расстояния имеет вид классический ван-дер-ваальсовской кривой. Минимуму энергии соответствует расстояние 3,354 Å, что близко к экспериментальному значению межплоскостного расстояния в графите (3,35 Å). Рассчитанная энергия когезии составляет 0,94 ккал/атом, что укладывается в известный экспериментальный диапазон для графеновых слоев в графите 0,8-1,2 ккал/атом. Межплоскостное расстояние в оптимальной структуре кластера CH_4 - димер $C_{32}H_{14}$ – 7,1 Å, энергия стабилизации метана в системе димера овалена составляет 3,91 ккал/моль, что находится в известном интервале значений энергий адсорбции метана на поверхности графита (2,9 ккал/моль) и в углеродной нанотрубке (5,4 ккал/моль).

Полученные результаты свидетельствуют о том, что существование соединений включения метана в графитоподобных системах возможно; такие соединения эндотермичны, т.е. нестабильны. Этим можно объяснить факт аккумуляции метана в угольных пластах на больших глубинах залегания (1км и ниже).