

## СОРБЦИЯ МЕТАНА НА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НОСИТЕЛЯХ ПУТЁМ ПОСТРОЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОЙ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Гожикова И.О.,<sup>a,б</sup> Лермонтов С.А.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт физиологически активных веществ Российской Академии Наук,  
142432, Черноголовка, Северный проезд 1, e-mail: innagozhik@gmail.com

<sup>б</sup>Институт проблем химической физики Российской Академии Наук,  
142432, Черноголовка, проспект академика Семёнова, 1

Основной задачей работы является разработка углеродных наноструктурированных материалов, способных сорбировать метан. В перспективе рассматриваемые материалы смогут хранить природный газ без сверхнизких температур, тяжёлых металлических сосудов и высоких давлений<sup>1</sup>.

Для решения задачи был рассмотрен графеновый монослой, потенциально имеющий очень небольшой объём структурно-образующей матрицы. С помощью модельного гамильтониана<sup>2</sup> с использованием программного пакета ПРИРОДА проведён расчёт потенциалов взаимодействия молекулы метана с графеновым листом для 18 различных взаимных ориентаций. Эти потенциалы с достаточно высокой точностью могут быть аппроксимированы эффективными потенциалами Леннарда-Джонса.

С помощью построенных потенциалов можно в аналитическом виде исследовать зависимость энергии от расположения метана в системе из нескольких графеновых слоев с произвольными взаимными ориентациями. На основе этого вычислены термодинамические функции метана и рассчитана зависимость степени заполнения от температуры и давления для разных межплоскостных расстояний.

### Литература

1. А.Ю. Цивадзе, О.Е. Аксютин, А.Г. Ишков Адсорбционные системы аккумуляирования метана на основе углеродных пористых структур // Успехи химии. - 2018. - №87(10). - С. 950-983.

2. D. N. Laikov // J. Chem. Phys