

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI FIRENZE

Abstract

Scuola di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali
Dipartimento di Chimica “Ugo Schiff”
Laurea Triennale in Chimica

Studio *ab initio* del clatrato idrato di metano
***Ab initio* study of methane clathrate hydrate**

Tesi di Laurea Triennale in Chimica
di Chiara Caratelli

Lo scopo di questo lavoro di tesi è stato lo studio del clatrato idrato di metano, una specie chimica supramolecolare di tipo host-guest in cui l'intero reticolo di H_2O accoglie le molecole discrete di CH_4 nelle cavità intermolecolari. È stata costruita una cella di tipo sI, costituita da 8 celle elementari, e ne sono state studiate le proprietà strutturali e dinamiche tramite una simulazione di dinamica molecolare *ab initio* nell'insieme NVE con il metodo Car-Parrinello. Il funzionale di scambio adottato è quello proposto da Becke mentre la parte di correlazione è descritta dal funzionale proposto da Lee, Yang e Parr (BLYP), che è stato scelto in quanto in molti studi si è dimostrato capace di riprodurre con buona accuratezza il legame ad idrogeno dell'acqua. Le analisi condotte comprendono: funzioni di distribuzione radiale a coppie, calcolo dei polinomi di Legendre e rispettiva funzione di autocorrelazione, densità spettrale degli stati fononici della cella, spettro di potenza dell'autocorrelazione delle velocità atomiche dei metani, spettro di potenza delle variazioni di angoli e distanze di legame. È stato mostrato come la struttura sia stabile a 20K e a 100K per tutto il tempo di simulazione (2ps) e che il funzionale usato descrive bene il legame a idrogeno anche in questo caso. Si ritiene quindi che questo modello possa essere usato in futuro per uno studio sulla reattività del metano nell'idrato ad alte pressioni.

Relatore: Prof. Gianni Cardini - gianni.cardini@unifi.it

Correlatore: Prof. Vincenzo Schettino - vincenzo.schettino@unifi.it