

Гусев Егор Глебович

**Вуз:**

Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии

**Кафедра:**

Физической химии

**Научная группа:**

Группа компьютерного моделирования

**Научный руководитель:**

к.х.н., старший преподаватель Сизова Анастасия Андреевна

**Название выпускной квалификационной работы:**

Компьютерное моделирование смешанных газовых гидратов  $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{N}_2$

**Краткое описание научной работы:**

Во время обучения по программе бакалавриата “Химия” моя работа состояла в исследовании смешанных газовых гидратов двумя методами молекулярного моделирования: методом Монте-Карло и методом молекулярной динамики. Методом Монте-Карло исследовалось заполнение гидратов структур SI и SII тройной смесью  $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{N}_2$  в соотношениях 1:1:1 и 50:7:43 (соответствующее равным частям метана и простейшей модели топочного газа), получив в качестве результатов изотермы заполнения и относительные коэффициенты селективности, показывающие, во сколько раз гидратная структура селективна к одному компоненту по отношению к другому. На основании этих данных были сделаны выводы, подтверждающие основные закономерности в заполнении гидратных структур. Методом молекулярной динамики исследовалась термическая стабильность сферического нанокластера тройного газового гидрата. С помощью полученных в результате этих исследований температурных зависимостей функций радиального распределения, коэффициентов самодиффузии и внутренней энергии взаимодействия газов был сделан вывод о значении температуры плавления нанокластера гидрата. Дальнейшая работа, планируемая во время обучения в магистратуре, скорее всего будет посвящена исследованию других объектов интереса моей научной группы, таких как углеродные адсорбенты, изученными мной методами компьютерного моделирования.