

Die Löslichkeit von Methan in Wasser

O. Konrad, T. Lankau

Institut für Physikalische Chemie, Universität Hamburg,
Bundesstr. 45, 20146 Hamburg

Die $CH_4-(H_2O)_{20}$ Einheit ist von zentraler Bedeutung für die Wechselwirkungen zwischen Methan und Wasser. Sie ist der kleinste logische Baustein in der Struktur von Gashydraten und zugleich ein gutes Modell für ein Methan-Molekül mit seiner ersten Solvatationshülle.

178 words

Was bestimmt die Struktur der $CH_4-(H_2O)_{20}$ Einheit? Die Ergebnisse von quantenchemischen Rechnungen stimmen prinzipiell mit denen aus moleküldynamischen Simulationen überein, obwohl ein wesentlicher Unterschied zwischen beiden Methoden besteht. Bei moleküldynamischen Rechnungen wird in der Regel von schwachen attraktiven Wechselwirkungen ausgegangen, während quantenchemische Rechnungen mit dem $CH_4-(H_2O)_{20}$ Cluster vermuten lassen, dass die Wechselwirkungen zwischen Wasser und Methan abstossender Natur sind. Dieser grundlegende Unterschied kann zwei Gründe haben: Bei den moleküldynamischen Rechnungen wird entweder das Wechselwirkungspotenzial zwischen Wasser und Methan aus den attraktiven Potenzialen der reinen Stoffe durch Mischen gewonnen oder es wird aus quantenchemischen Rechnungen an kleinen $CH_4-(H_2O)_n$ Clustern entwickelt, bei denen n selten größer als 1 ist.

Unsere quantenchemischen Rechnungen zeigen deutlich, dass die Wechselwirkungen zwischen Methan und Wasser mit zunehmender Größe des Wasserclusters immer abstossender werden und dass folglich anti-kooperativen Kräfte in einem Modell der Methan-Löslichkeit in Wasser berücksichtigt werden sollten.