力学所基于空间群和统计力学在页岩气脱附驱替研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/12701.html

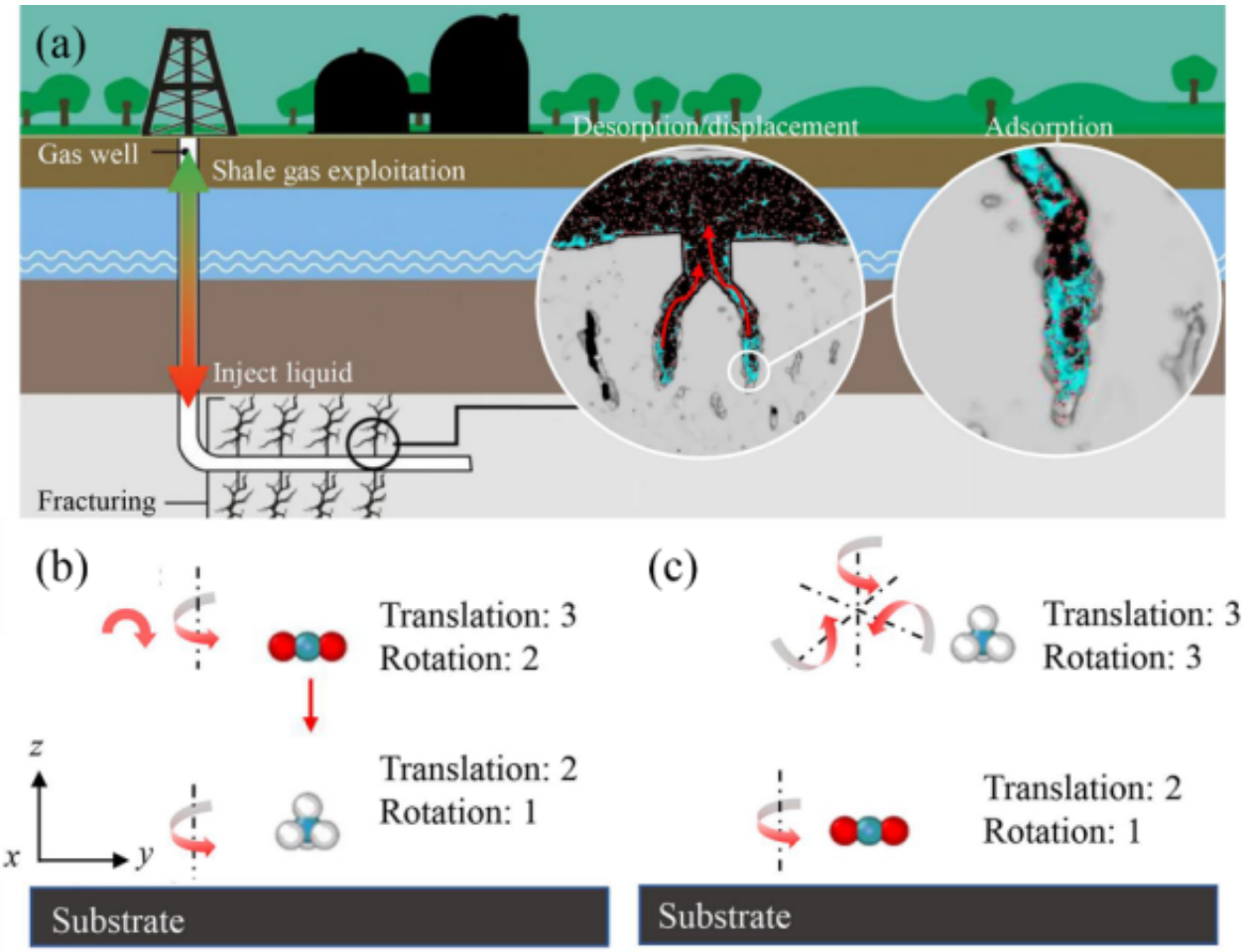
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

页岩气的主要成分CH_4所属点群为具有24阶的$T_d=\{E,3C_2,8C_3,6_{S4},6\sigma_d\}$群，其中包括3个两重轴$C_2$、4个三重轴$C_3$，可作8个$C_3$对称操作，绕立方体3个轴旋转π/2和3π/2接着做水平面镜像，共6个对称操作$6S_4$，对立方体对立面的对角线形成的截面做镜像，共6个对称操作$6\sigma_d$。对于CH_4在均质基底上吸附的对称性，由于C_2,C_3均为Td的子群，为了使吸附计算尽量保持高对称性，吸附后最高阶群为C_3，具有三重对称性，其吸附为自发对称性破缺过程，而脱附作为逆过程使系统对称性恢复。

近期，中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室赵亚溥团队在课题组开辟的深地物理力学研究方向上，基于分子吸附/脱附过程中空间群的变化，厘清了页岩气驱替过程中的分子空间构型变化。基于统计力学，研究人员从页岩气和多种驱替介质（CO_2, N_2, H_2O）对应的平动、转动配分函数分析出发，结合分子空间构型变化，得到了不同驱替介质驱替页岩气过程中的熵变。进一步结合分子动力学模拟获得相应驱替过程的焓变，由Gibbs自由能变化确定了不同介质驱替页岩气的自发性。研究发现，CO_2和N_2驱替CH_4过程可自发进行，其中CO_2驱替为焓、熵双驱动，N_2驱替为熵驱动，而H_2O驱替过程不是自发的。

该研究厘清了页岩气驱替过程中自发、放热和熵增的微观机制，为超临界流体驱替页岩气提供了理论指导。相关研究成果以*Entropy and enthalpy changes during adsorption and displacement of shale gas*为题，发表在*Energy*上。研究工作得到国家自然科学基金重点项目、中科院前沿重点研究计划等的支持。

论文链接



页岩气的吸附与驱替及空间自由度

研究团队单位：力学研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发