
地质地球所发现天然气水合物临界成核受控于客体分子自扩散

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/3677.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！

地质地球所发现天然气水合物临界成核受控于客体分子自扩散。气体水合物是一种由水分子(主体)和气体分子(如甲烷、乙烷、二氧化碳等客体)组成的笼形晶体化合物，广泛存在于大陆边缘的海底和永久冻土地带，是一种潜在的能源。当它在海底油气管道中形成，则会堵塞管道、影响生产，因此研究其形成机制有助于在天然气水合物开采过程中，为避免二次水合物形成从而保障海底油气管道的安全输运提供基础理论支撑。

前人研究表明，在相同的温压条件下(气体水合物和冰的稳定区)，气体水合物比冰更容易形成，而且不同气体分子对水合物结构的稳定性有显著影响。因此，不同气体分子在水合物形成过程中的作用值得深入研究。

中国科学院地质与地球物理研究所油气资源研究重点实验室博士后张正财与加拿大卡尔加里大学教授Peter G. Kusalik和中科院地球与行星物理重点实验室研究员郭光军合作，利用分子动力学模拟对7种气体水溶液的性质及其与水合物临界成核的关系进行了研究。模拟结果显示：随着溶液浓度的增大，气体分子水合壳(图1)变得越来越有序，系统总熵也随之降低，这些变化使得气体水溶液升高自由能，有利于择机跨越能垒而触发水合物成核结晶(图2)。更为重要的是：在相同的温压条件下，溶解于水中的不同气体分子具有共同的临界自扩散系数(图3)，只要低于这个临界值，水合物就会迅速形成。

该研究通过气体分子自扩散系数，将溶液性质与水合物成核联系了起来，为水合物成核研究的实验、模拟工作提供了一个合适的观测量和新的研究思路。

研究成果以快讯形式发表于Physical Chemistry Chemical Physics。

论文信息：Zhang Z C, Kusalik P G, Guo G J. Bridging solution properties to gas hydrate nucleation through guest dynamics[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2018, 20(38)：24535-24538)

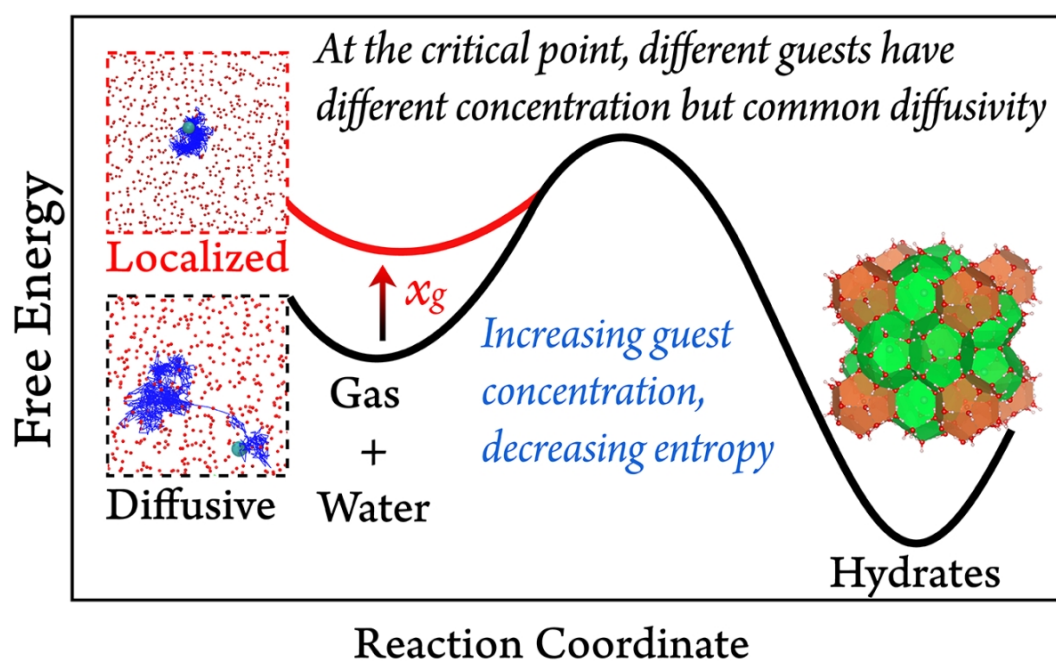
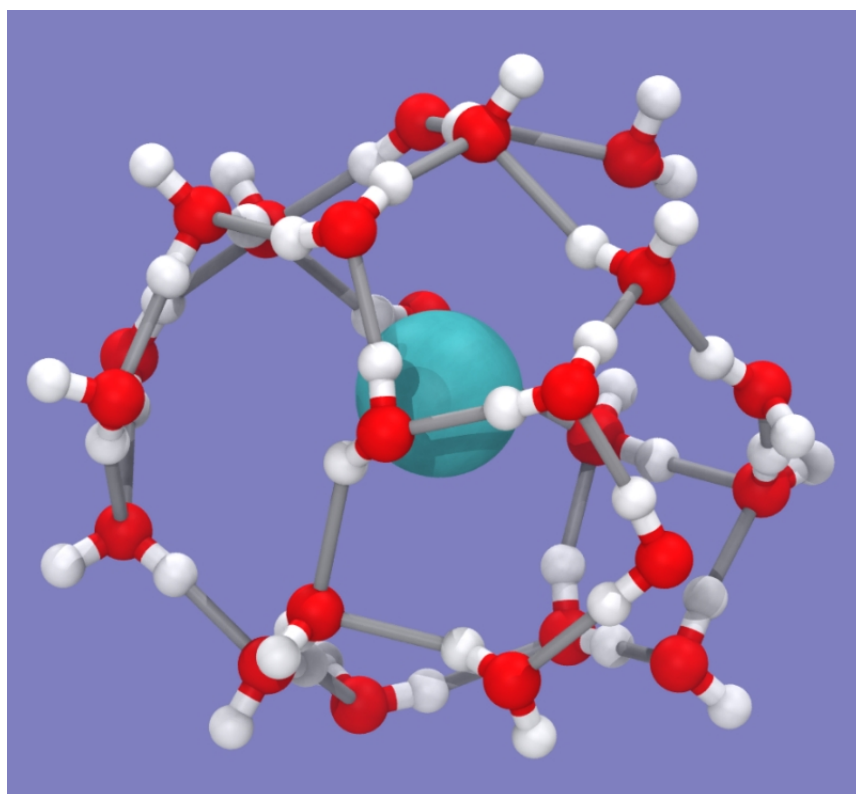


图2随着溶液中气体分子浓度(x_g)的增大，体系总熵降低，自由能增加，气体分子的扩散系数趋近于一个临界值

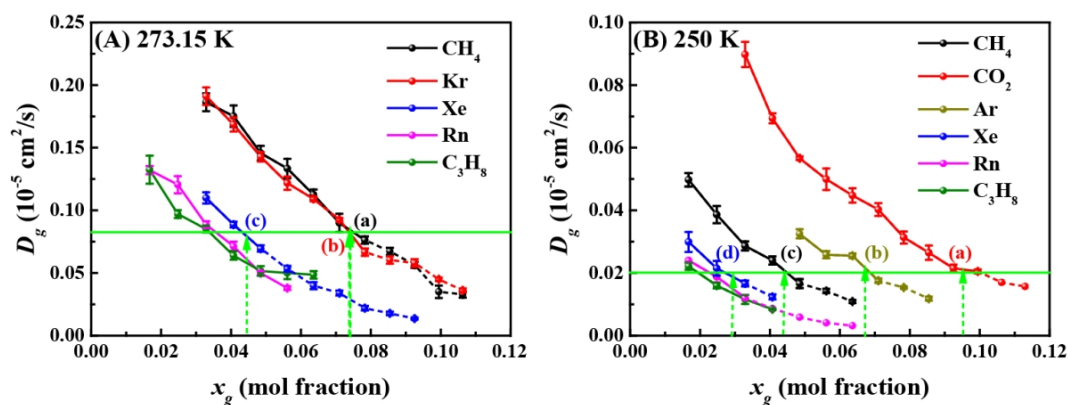


图3溶液中气体分子的扩散系数随溶液中气体分子浓度变化而变化。绿色虚线箭头是不同气体分子形成水合物的临界浓度，绿色实线是临界扩散系数

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](https://www.iikx.com)转发