

Фазы гидратов водорода при высоких давлениях

Г.С. Смирнов^{1,2}, В.В. Стегайлов^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Объединенный институт высоких температур РАН

Газовые гидраты – кристаллические соединения включения, в которых молекулы газа заключены в полостях из молекул воды [1]. Существует несколько клатратных и льдоподобных структур, отличающихся структурой решётки, механическими и термодинамическими свойствами. Тип структуры определяется молекулами-гостями, температурой и давлением. Фазовая диаграмма системы H_2+H_2O представляет значительный интерес из-за возможности хранения и транспортировки водорода в гидратах. Чистые гидраты водорода формируются при высоких давлениях, хотя добавление ингибиторов, например, тетрагидрофурана или метана, позволяет значительно уменьшить давление.

В экспериментальных работах [2, 3] наблюдалась новая фаза в системе водород-вода при высоких давлениях. Однако структура данной фазы осталась неясной, были предложены три различные расшифровки данной структуры. В данной работе [4] методами молекулярной динамики подтверждена возможность её формирования, обсуждается тип её кристаллической структуры и степень заполнения молекулами водорода.

Работа поддержана грантами РФФИ 12-08-33140 and 13-08-01022-офи-м.

Литература

1. *Sloan E.D., Koh C.A.* Clathrate Hydrates of Natural Gases. – Boca Raton: CRC Press, 2008. – 752 с.
2. *Efimchenko V.S. [et al.]* New phase in the water–hydrogen system. – J. Alloy. Compd. – 2011. – Т. 509. – С. S860–S863.
3. *Strobel T.A., Somayazulu M., Hemley R.J.* Phase Behavior of $H_2 + H_2O$ at High Pressures and Low Temperatures. – J. Phys. Chem. C. – 2011. – Т. 115. – С. 4898–4903.
4. *Smirnov G.S., Stegailov V.V.* Toward Determination of the New Hydrogen Hydrate Clathrate Structures. – J. Phys. Chem. Lett. – 2013. – Т. 4. – С. 3560–3564.