

气体分子对甲烷水合物稳定性的影响

耿春宇; 丁丽颖; 韩清珍; 温浩

中国科学院过程工程研究所, 多相反应重点实验室, 北京 100080; 中国科学院研究生院, 北京 100049

摘要:

通过B3LYP方法, 在6-31G(d,p)水平下, 分别优化了结构I型甲烷水合物十二面体和十四面体晶穴结构. 结果表明, CH₄分子使晶穴的相互作用能降低, 增强了晶穴的稳定性. 计算了晶穴中甲烷分子C—H键的对称伸缩振动频率, 计算结果与实验值相符合. 研究发现CH₄分子影响晶穴中氧原子的电荷分布, 从而增强了氢键的稳定性. 通过分子动力学方法研究水合物晶胞中气体分子的占有率对水合物稳定性的影响, 进一步说明气体分子对水合物晶穴稳定性的重要作用.

关键词: 甲烷水合物 量子化学 C—H伸缩振动频率 分子动力学 气体水合物稳定性

收稿日期 2007-11-21 修回日期 2007-12-14 网络版发布日期 2008-01-21

通讯作者: 温浩 Email: hwen@home.ipe.ac.cn

本刊中的类似文章

1. 万丽华 颜克凤 李小森 樊栓狮. 热力学抑制剂作用下甲烷水合物分解过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 486-494

扩展功能

本文信息

PDF(760KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友
加入我的书架
加入引用管理器
引用本文
Email Alert
文章反馈
浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 甲烷水合物
▶ 量子化学
▶ C—H伸缩振动频率
▶ 分子动力学
▶ 气体水合物稳定性

本文作者相关文章

▶ 耿春宇
▶ 丁丽颖
▶ 韩清珍
▶ 温浩