

شبیه‌سازی مولکولی تشکیل هیدرات هیدروژن در شرایط دما و فشار مناسب در حضور هیدرات نیتروژن

مجتبی حقیقت لاری^{۱*}، وحید تقی خانی^۲

^۱ دانشجوی کارشناسی مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی و نفت، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، ایران
^۲ استاد دانشکده مهندسی شیمی و نفت، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله به بررسی تشکیل هیدرات هیدروژن توسط تزریق گاز هیدروژن به مخزن نگهداری هیدرات نیتروژن در دمای ثابت پرداخته شده است. به منظور بررسی تاثیر حضور هیدرات نیتروژن، از تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شد که دید بسیار مناسبی از مکانیسم‌های مولکولی فرآیندهای مختلف از جمله رشد و تجزیه‌ی بلور هیدرات، در اختیار قرار می‌دهد. در جعبه‌ی شبیه‌سازی ۸ سلول واحد ساختار II هیدرات نیتروژن که در راستای محور X با مولکول‌های هیدروژن احاطه شده است، قرار داده شد و شبیه‌سازی در دما و فشار مشخص و برای مدت زمان معینی انجام شد. نتیجه‌ی شبیه‌سازی با هنگرد NPT این بود که گاز نیتروژن با افزایش حجم هیدرات از آن خارج شده و به وسیله‌ی گاز هیدروژن جایگزین می‌شود. با بررسی توابع توزیع شعاعی مشخص شد که مولکول‌های هیدروژن در ابتدا حفره‌های بزرگ‌تر را پر می‌کنند و ساختار حفره‌ها در جابجایی گازها تقریباً ثابت می‌ماند. همچنین با بررسی داده‌های ترمودینامیکی، دیدیم که فشار تشکیل به کمتر از ۳۰۰ bar کاهش یافت.

کلمات کلیدی

هیدرات هیدروژن، هیدرات نیتروژن، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تابع توزیع شعاعی

نکات برجسته پژوهش

- تقلیل فشار تشکیل هیدرات هیدروژن از ۲۵۰۰ bar به کمتر از ۳۰۰ bar.
- استفاده از هیدرات نیتروژن که پایداری ترمودینامیکی بیشتر و شرایط تشکیل مناسبی دارد.
- استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به عنوان روشی کم هزینه و دقیق در بررسی مکانیسم تشکیل.