

УДК 537.7.541.1

**В.И. Недоступ, О.В. Недоступ**

Физико-химический институт им. А.В. Богатского Национальной академии наук Украины, Люстдорфская дорога, 86, г. Одесса, Украина, 65080  
 e-mail: physchem@paco.net

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГАЗОВЫХ ГИДРАТОВ

*В последние годы растёт интерес к газовым гидратам. Поэтому необходима разработка надёжных расчётно-теоретических методов определения их свойств. Описывается термодинамическая модель газовых гидратов, в которой центральное место занимает поведение гостевой молекулы в ячейке. Получены уравнения взаимодействия молекулы гидратообразующего газа с ячейкой, а также определены энтальпии и энергии выхода молекулы из ячейки. Разработано уравнение для расчёта термодинамических характеристик гидрата на кривой гидратообразования.*

**Ключевые слова:** Газовые гидраты. Редкие газы. Метан. Вода. Потенциальная функция. Энтальпия. Энергия. Теплота. Фазовый переход.

**V.I. Nedostup, O.V. Nedostup**

## THERMODYNAMIC MODEL OF GAS HYDRATES

*The interest to gas hydrates grows last years. Therefore working out of reliable settlement-theoretical methods of definition of their properties is necessary. The thermodynamic model of gas hydrates in which the central place occupies a behaviour of guest molecule in cell is described. The equations of interaction of molecule hydrate formative gas with cell are received, and also an enthalpy and energy of output of molecule from a cell are determined. The equation for calculation of thermodynamic characteristics of hydrate on curve of hydrate formative is developed.*

**Keywords:** Gas hydrates. Rare gases. Methane. Water. Potential function. Enthalpy. Energy. Heat. Phase transition.

### ОБОЗНАЧЕНИЯ:

$k$  — постоянная Больцмана;  
 $M$  — условное обозначение гидратообразующего газа;  
 $n$  — число молекул воды в элементарной ячейке на 1 моль газа;  
 $P$  — давление;  
 $R$  — универсальная газовая постоянная;  
 $r$  — расстояние от молекулы до ячейки;  
 $r_e$  — равновесное расстояние в потенциале;  
 $V$  — удельный объём;  
 $V_f$  — свободный объём;  
 $v$  — объём ячейки.

$T$  — температура;  
 $Z$  — сжимаемость;  
 $\Delta H$  — изменение энтальпии при фазовом переходе;  
 $\Delta U$  — изменение внутренней энергии;  
 $\Phi(r)$  — потенциальная энергия взаимодействия гостевой молекулы с ячейкой.  
 $\alpha$  — показатель крутизны отталкивания.

### ИНДЕКСЫ:

$M$  — гидратообразующий газ;  
 $\beta$  — пустая гидратная решётка;  
 $0$  — нижняя квадрупольная точка.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Газовые гидраты в последние годы стали объектом пристального внимания. В первую очередь это связано с тем, что шельфы и донные отложения морей и океанов содержат гигантские количества природного газа в виде гидратов. Это представляет интерес как возможный энергетический ресурс, но и вызывает озабоченность как источник глобального загрязнения атмосферы Земли.

Кроме этого, гидраты различных газов могут быть использованы в холодильной технике и кондиционировании, газовой промышленности и др.

К настоящему времени накоплен значительный объём экспериментальных данных об условиях образования гидратов, разработаны теоретические модели, вполне адекватно описывающие эти процессы [1]. Однако расчётно-теоретические методы, которые нашли применение, имеют ряд существенных недос-