

نقش نانوصفحه‌های گرافن اکسید در تشکیل هیدرات‌های گازی متان

پرنیان یوسفی^{۱*}، محسن عباسپور^{۲*}، فاطمه موسوی^۳

۱- دانشجوی دکتری، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد (parnianyousefi@yahoo.com)

۲- استاد، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه حکیم سبزواری (m.abbaspour@hsu.ac.ir)

۳- دانشیار، شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد (moosavibaigi@um.ac.ir)

واژگان کلیدی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، هیدرات‌های گازی متان، گرافن اکسید

۱- مقدمه

هیدرات‌های گازی، ساختارهای جامد بلورین یخ ماندنی از مولکول‌های گاز (متان، اتان و کربن‌دی‌اکسید) به دام افتاده بین مولکول‌های آب هستند^۱. فناوری هیدرات‌های گازی چشم اندازهای زیادی برای کاربرد در بسیاری از زمینه‌ها از جمله ذخیره و انتقال گاز^۲، جذب و جداسازی کربن‌دی‌اکسید^۳ و فناوری نمک‌زدایی آب دریا^۴ نشان داده است. استفاده از هیدرات‌های گازی به عنوان یک فناوری پایدار برای ذخیره‌سازی و انتقال گاز، با چندین چالش از جمله میزان کم تشکیل هیدرات و قابلیت کم ذخیره‌سازی گاز مواجه است. مطالعه اخیر نشان می‌دهد^۵ نانوساختارهای کربنی برای فرایند تشکیل هیدرات‌های گازی کارآمد هستند. لازم به ذکر است، فرایند تشکیل هیدرات گرمازا است و گرمای تولید شده در طی فرایند، منجر به تخریب بلورهای هیدرات می‌شود و بر رشد هیدرات تأثیر منفی می‌گذارد. بنابراین، این محرک‌های تشکیل هیدرات با رسانش گرمایی زیاد می‌توانند گرما را از سیستم حذف کرده، دمای سیستم را پایین نگه داشته و هیدرات را پایدارتر نمایند. علاوه بر این، نانوساختارهای کربنی به دلیل سطح ویژه زیاد، جایگاه‌های فعال‌تری برای هسته‌زایی فراهم می‌کنند. در این میان، گرافن اکسید به دلیل وجود گروه‌های عاملی حاوی اکسیژن می‌تواند پراکندگی قابل قبول در آب ایجاد کند و موجب افزایش تشکیل هیدرات‌های گازی شود.

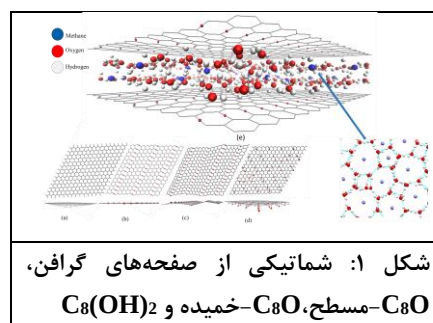
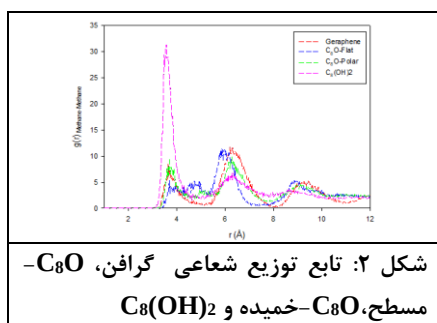
۲- جزئیات شبیه‌سازی

تشکیل هیدرات‌های گازی متان بین صفحه‌های مختلف گرافن، C_8O -مسطح، C_8O -خمیده و $C_8(OH)_2$ با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار می‌گیرد (شکل ۱). مولکول‌های آب و متان بین دو صفحه صلب و موازی به فاصله $8 \text{ \AA}$ توزیع و همه سیستم‌ها در دمای ۱۰۰۰ کلوین متعادل شدند. سپس، سیستم‌ها تحت سیکل‌های گرمایش و سرمایش از دمای ۲۳۰ K تا ۲۵۰ K با سرعت 5 K/ns قرار گرفتند. همه سیستم‌ها به مدت ۳۰ ns در دمای ۲۳۰ K در انسامل NVT متعادل و مجدد در معرض همان چرخه گرمایش و سرمایش قبل قرار گرفتند تا بلور پایدار ایجاد شود. در نهایت، شبیه‌سازی جمع‌آوری نتایج برای ۴۰ ns ادامه یافت. شبیه‌سازی‌های مولکولی با نرم‌افزار دی‌ال‌پالی کلاسیک نسخه ۱/۹^۶ انجام و الگوریتم جهشی ورتل برای حل معادلات حرکت نیوتن با گام زمانی ۱ fs به کار گرفته شد. پارامترهای میدان نیروی

صفحه‌های گرافن اکسید از مطالعه تانگ و همکارانش^۷ گرفته شد و برای مولکول‌های آب و متان به ترتیب از مدل TIP5P^۸ و مطالعه بای و همکارانش^۹ استفاده شد.

۳- بحث و نتیجه‌گیری

یافته‌ها نشان می‌دهند تشکیل هیدرات بین صفحه‌های C₈O-مسطح، C₈O-خمیده و گرافن رخ می‌دهد و در نتیجه ساختارهای هیدراتی منظم ایجاد می‌شود. علاوه بر این، C₈O-مسطح ساختار یکنواخت نسبت به سایر سیستم‌ها ایجاد می‌کند. تابع توزیع شعاعی متان-متان این سیستم در فواصل دورتر یک پیک با شدت کم (شکل ۲) نشان می‌دهد که با پارامتر نظم ساختاری چهار جسمی (F_{4φ})، که بیشترین مقدار (۰/۶) است، در توافق است. این نتایج نشان دهنده‌ی تشکیل موثر هیدرات متان بین صفحه‌ها و به دام افتادن موفقیت‌آمیز گاز متان است. این پدیده را می‌توان به مسطح بودن ساختار و وجود گروه عاملی اپوکسی نسبت داد. وجود گروه عاملی اپوکسی بر خلاف گروه عاملی هیدروکسیل منجر به عمل کرد بهتر فرایند تشکیل هیدرات می‌شود. در سیستم C₈(OH)₂، برهمکنش قوی بین OH سطح و مولکول‌های آب باعث تجمع آب شده و نشان می‌دهد این ساختار خصلت بازدارندگی در تشکیل هیدرات دارد. در این سیستم نشان می‌دهد هیدرات گازی متان بین صفحه‌های C₈(OH)₂ ایجاد نمی‌شود.



منابع و مراجع

- [1] Y. Lin, Y. Hao, Q. Shi, Y. Xu, Z. Song, Z. Zhou, Y. Fu, Z. Zhang & J. Wu, (2024), Enhanced formation of methane hydrates via graphene oxide: Machine learning insights from molecular dynamics simulations, Energy 289, 130080.
- [2] S.-D. Zhou, Y.-Y. Xiao, C.-Q. Xia, G.-X. Liu, X.-Y. Li, X.-Y. Ni, Y. Liu & X.-F. Lv, (2023), Enhanced the formation kinetics of CO₂ hydrate using graphene oxide and L-methionine, Journal of Cleaner Production 433, 139864.
- [3] J. Bian, H. Wang, K. Yang, J. Chen & X. Cao, (2022), Spatial differences in pressure and heat transfer characteristics of CO₂ hydrate with dissociation for geological CO₂ storage, Energy 240, 122508.
- [4] O. Bamaga, I. Ahmed, A. M. Wafiyah, M. Albeirutty, H. Abulkhair, A. Shaiban & P. Linga, (2022), Studies on methane gas hydrate formation kinetics enhanced by isopentane and sodium dodecyl sulfate promoters for seawater desalination, Energies 15(24), 9652.
- [5] E. Rezaei, M. Manteghian & M. Tamaddondar, (2016), Kinetic study of ethylene hydrate formation in presence of graphene oxide and sodium dodecyl sulfate, Journal of Petroleum Science and Engineering 147, 857-863.
- [6] W. Smith, C. Yong & P. Rodger, (2002), DL_POLY: Application to molecular simulation, Molecular Simulation 28(5), 385-471.
- [7] H. Tang, D. Liu, Y. Zhao, X. Yang, J. Lu & F. Cui, (2015), Molecular dynamics study of the aggregation process of graphene oxide in water, The Journal of Physical Chemistry C 119(47), 26712-26718.
- [8] M. Lısal, J. Kolafa & I. Nezbeda, (2002), An examination of the five-site potential (TIP5P) for water, The Journal of chemical physics 117(19), 8892-8897.
- [9] J. Bai & X. C. Zeng, (2012), Polymorphism and polyamorphism in bilayer water confined to slit nanopore under high pressure, Proceedings of the National Academy of Sciences 109(52), 21240-21245.