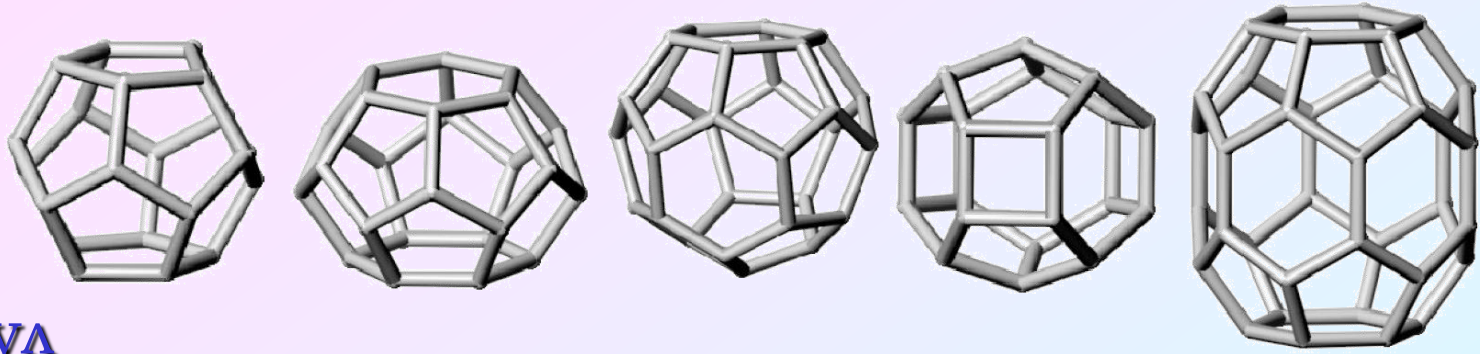


Новая фаза высокого давления в системе вода-водород

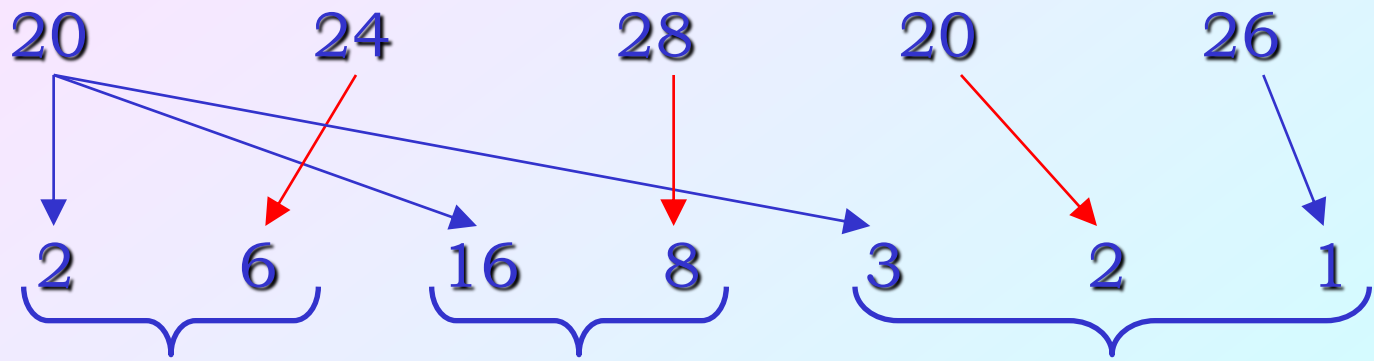
Докладчик:

Кузовников Михаил Александрович

ИФТТ РАН, сентябрь 2010



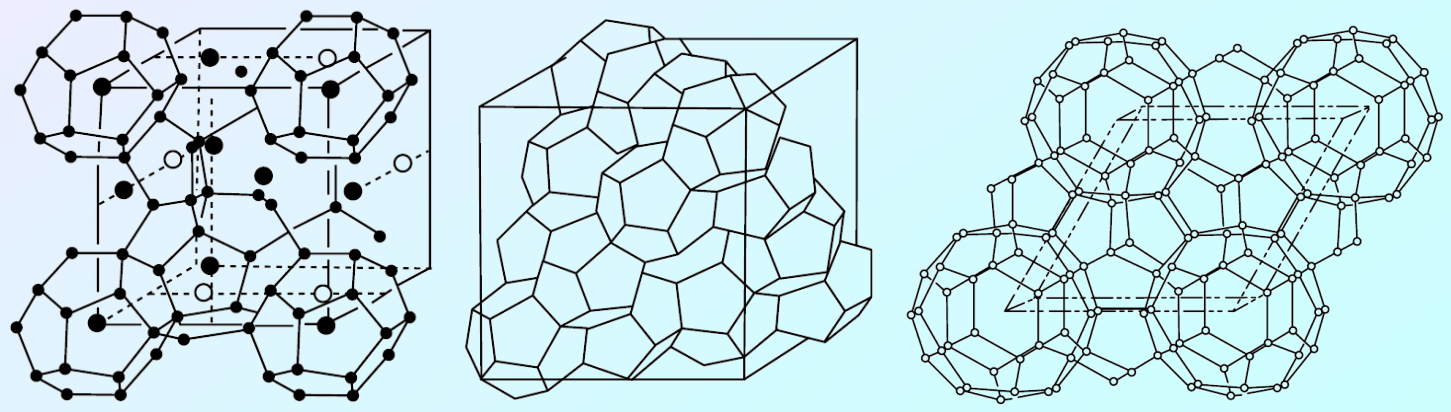
Число молекул
воды на
полость



Число
полостей

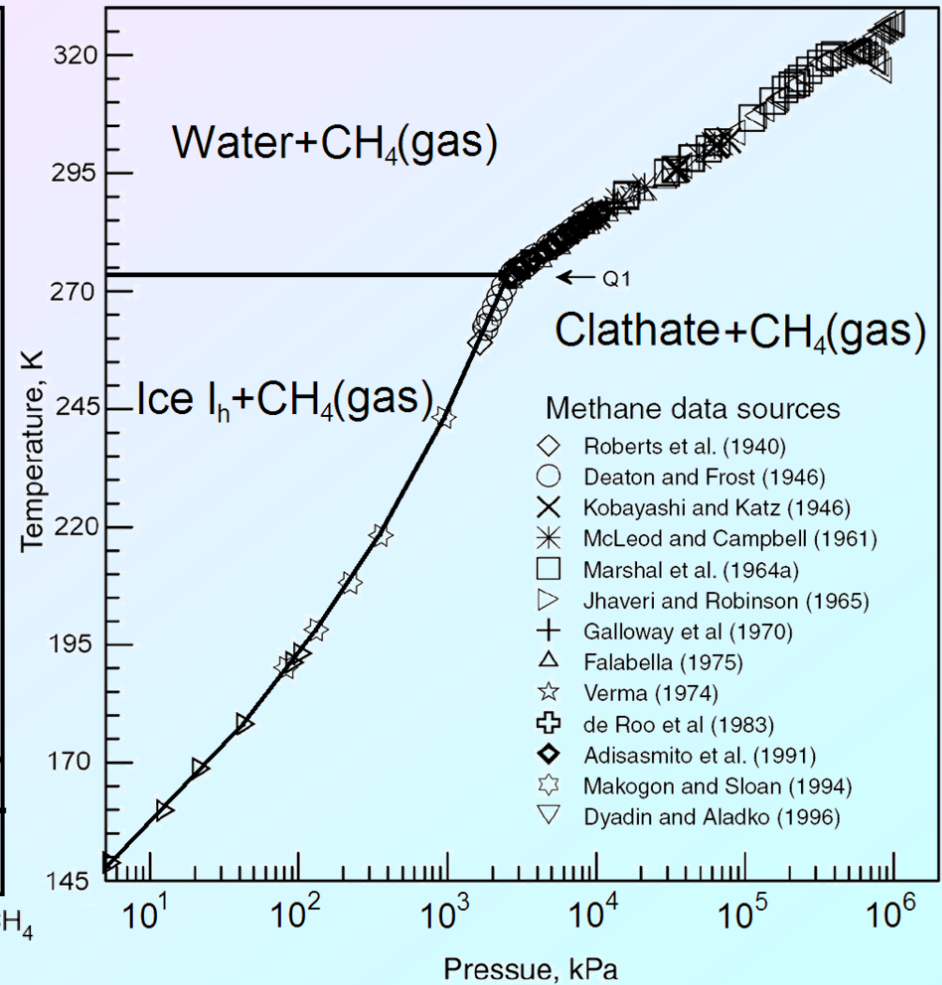
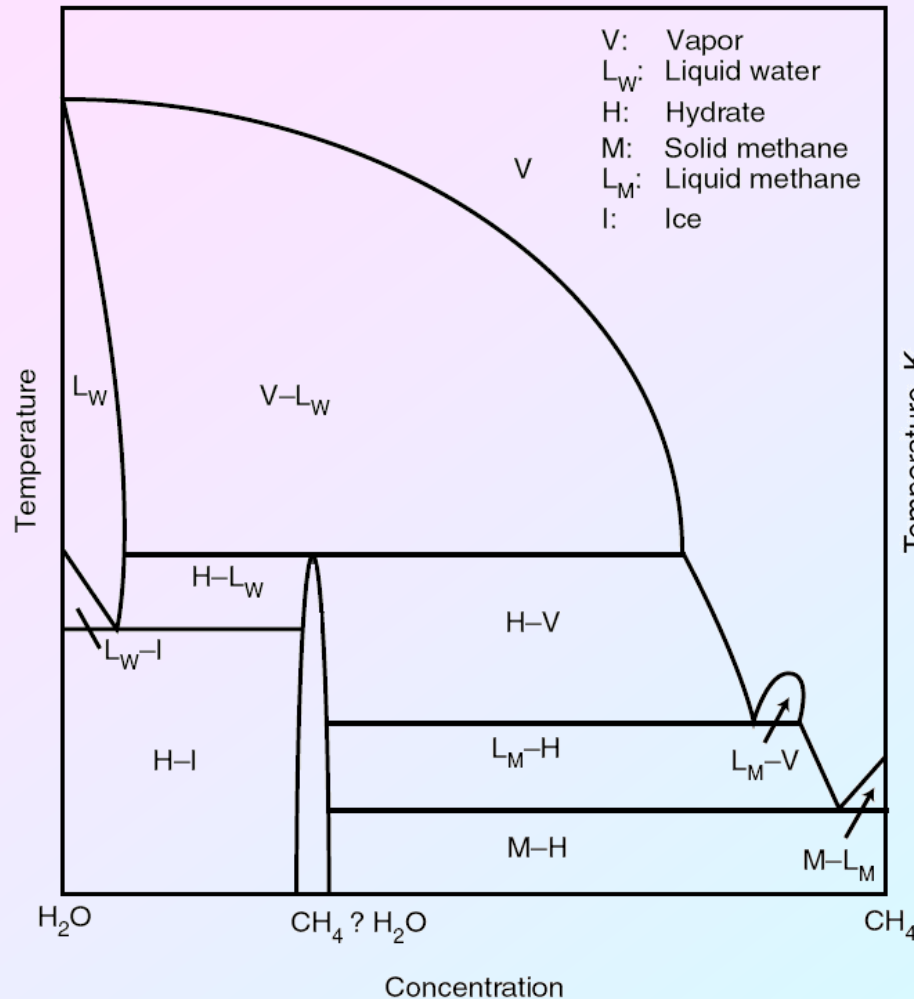
Тип структуры
Space group

sI sII sH
Pm $\bar{3}$ n Fd $\bar{3}$ m P6/mmm



Clathrate
hydrates of natural gases, 3rd ed., CRC Press, 2007

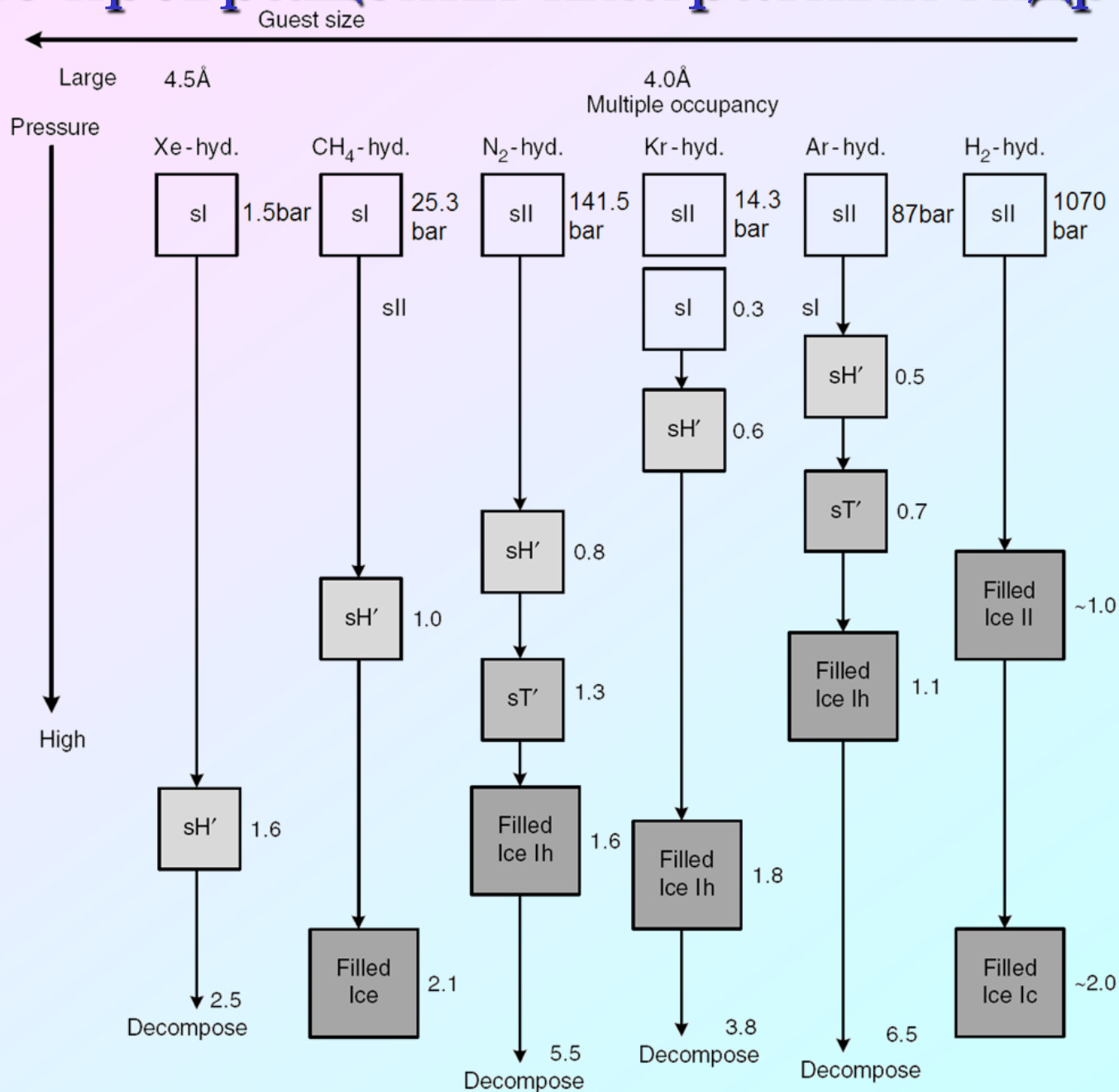
Устройство фазовых диаграмм клатратных гидратов



Вода-метан, 48бар

ТР-диаграмма

Фазовые превращения клатратных гидратов



Структуры клатратных гидратов водорода

sII

$Fd\bar{3}m$

17.08Å

C1

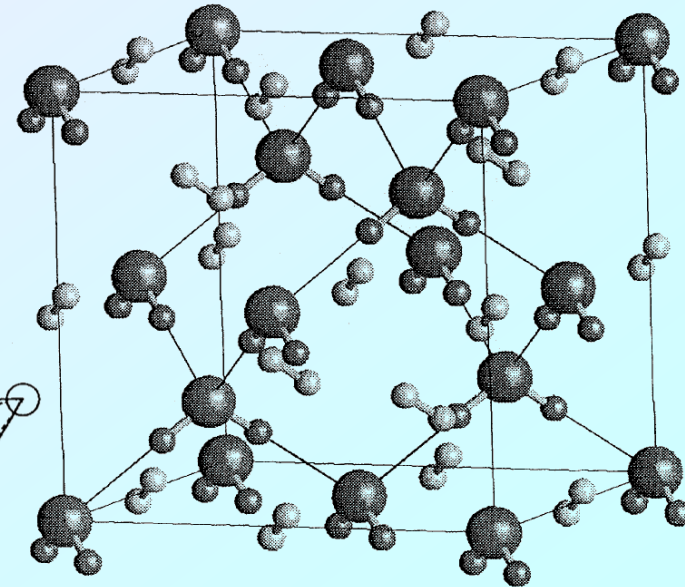
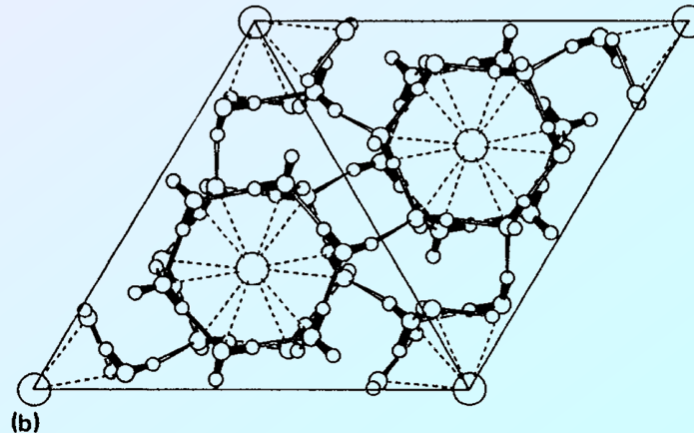
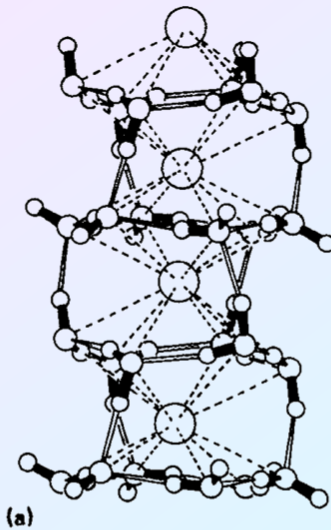
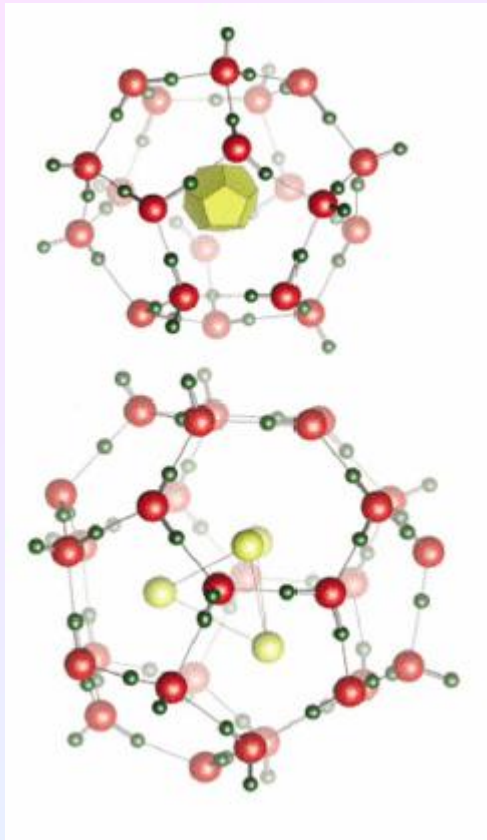
$R\bar{3}c$

$a=12.74\text{Å}$ $c=5.97\text{Å}$

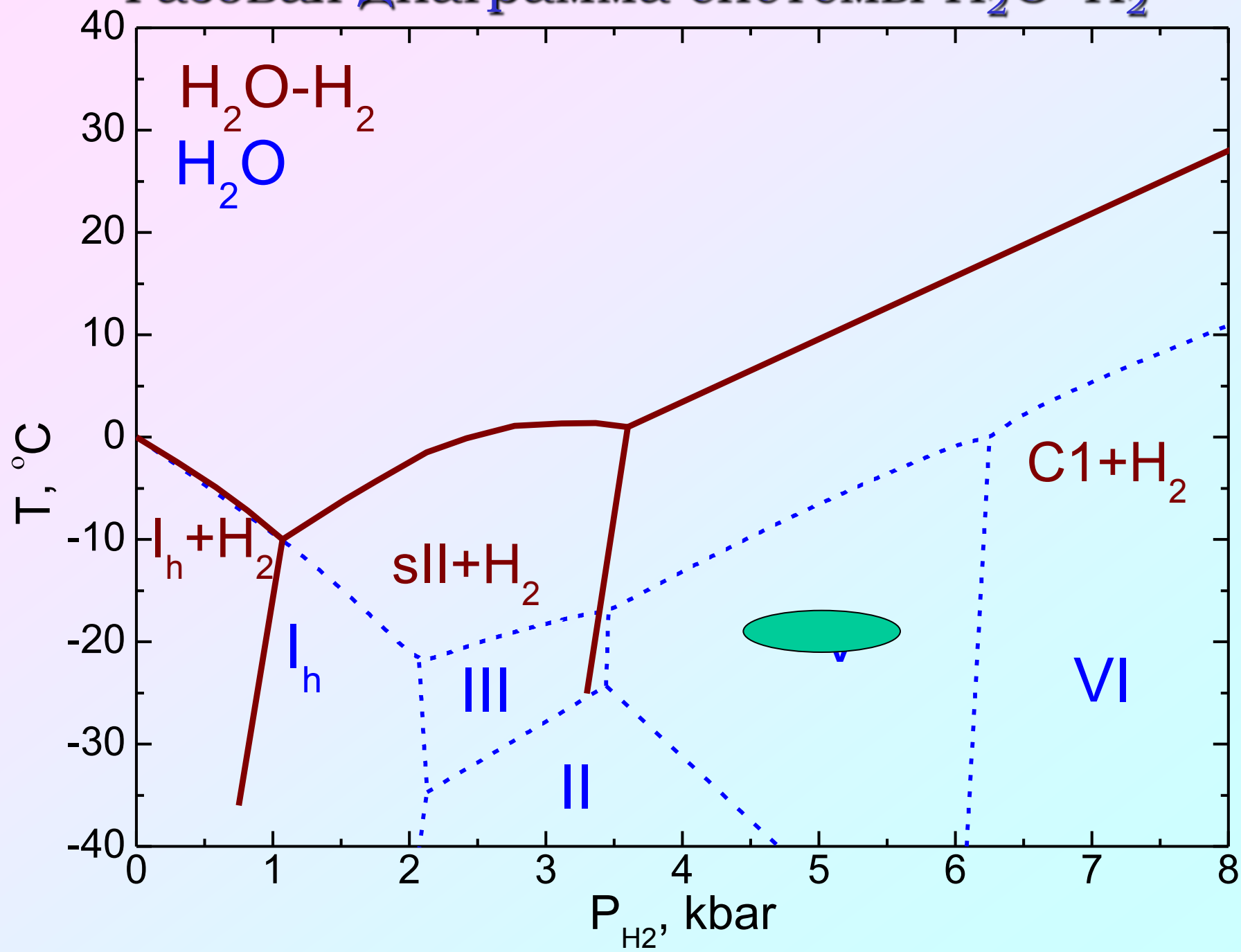
C2

$Fd\bar{3}m$

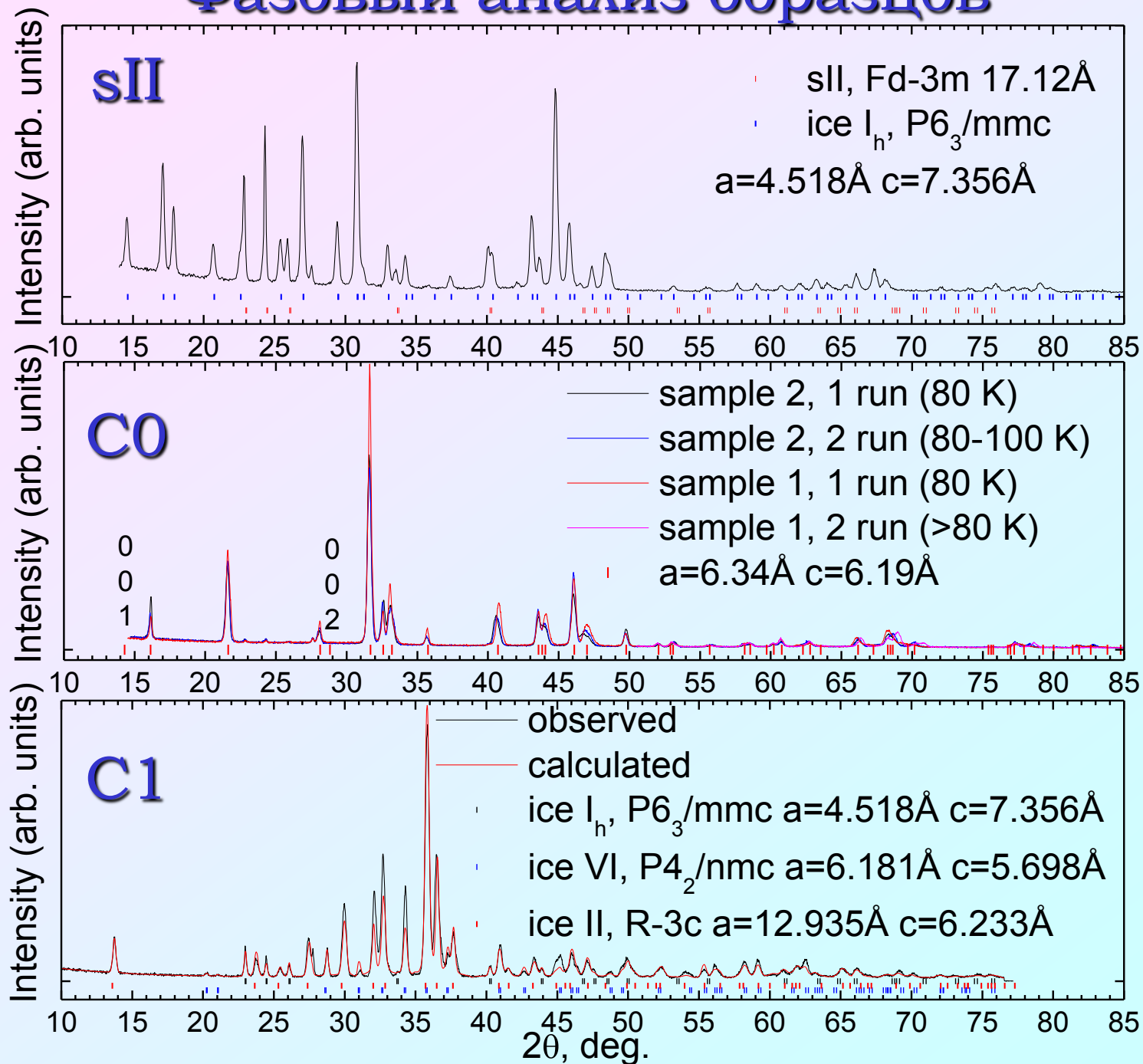
6.43Å



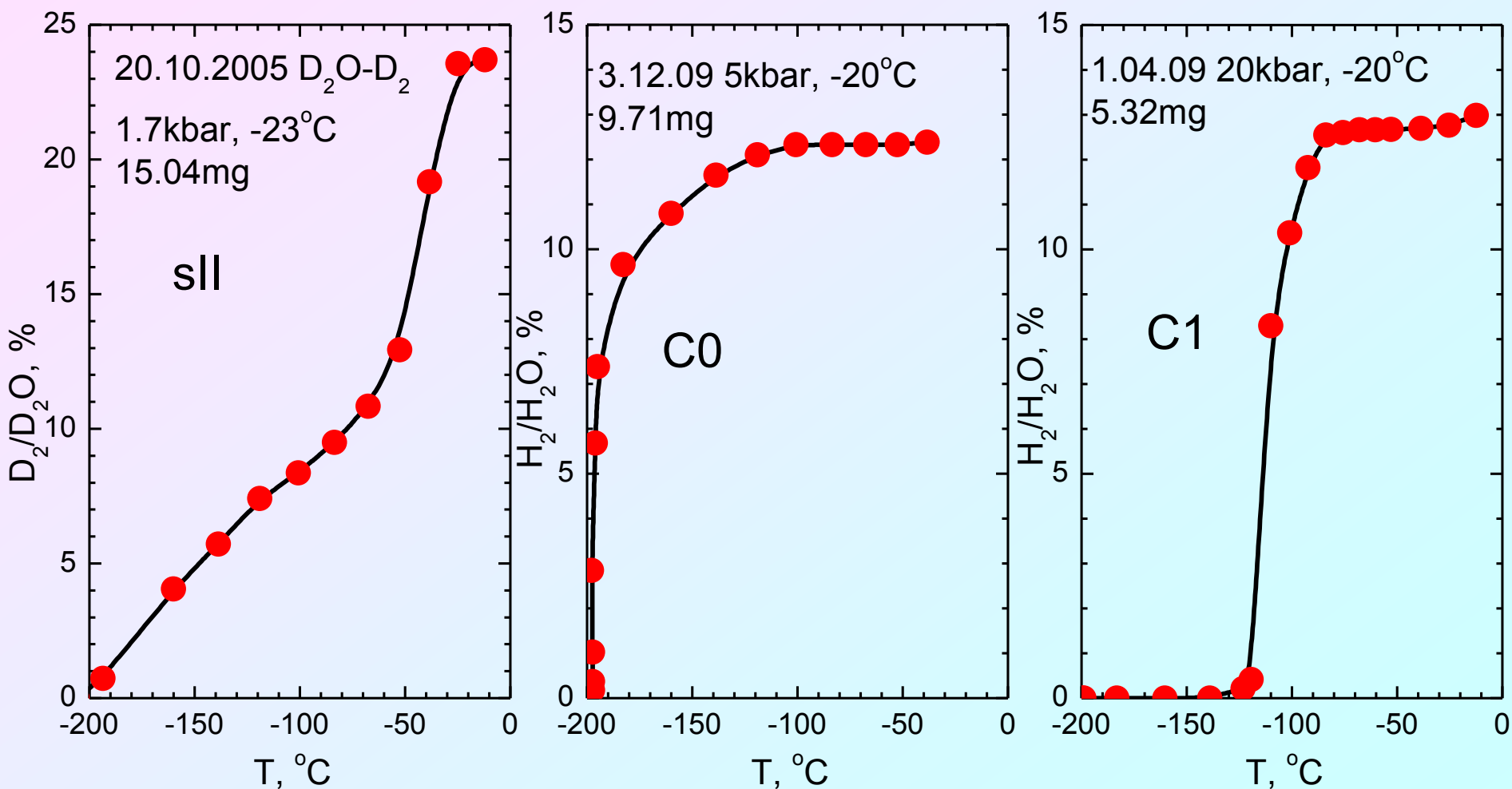
Фазовая диаграмма системы $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2$



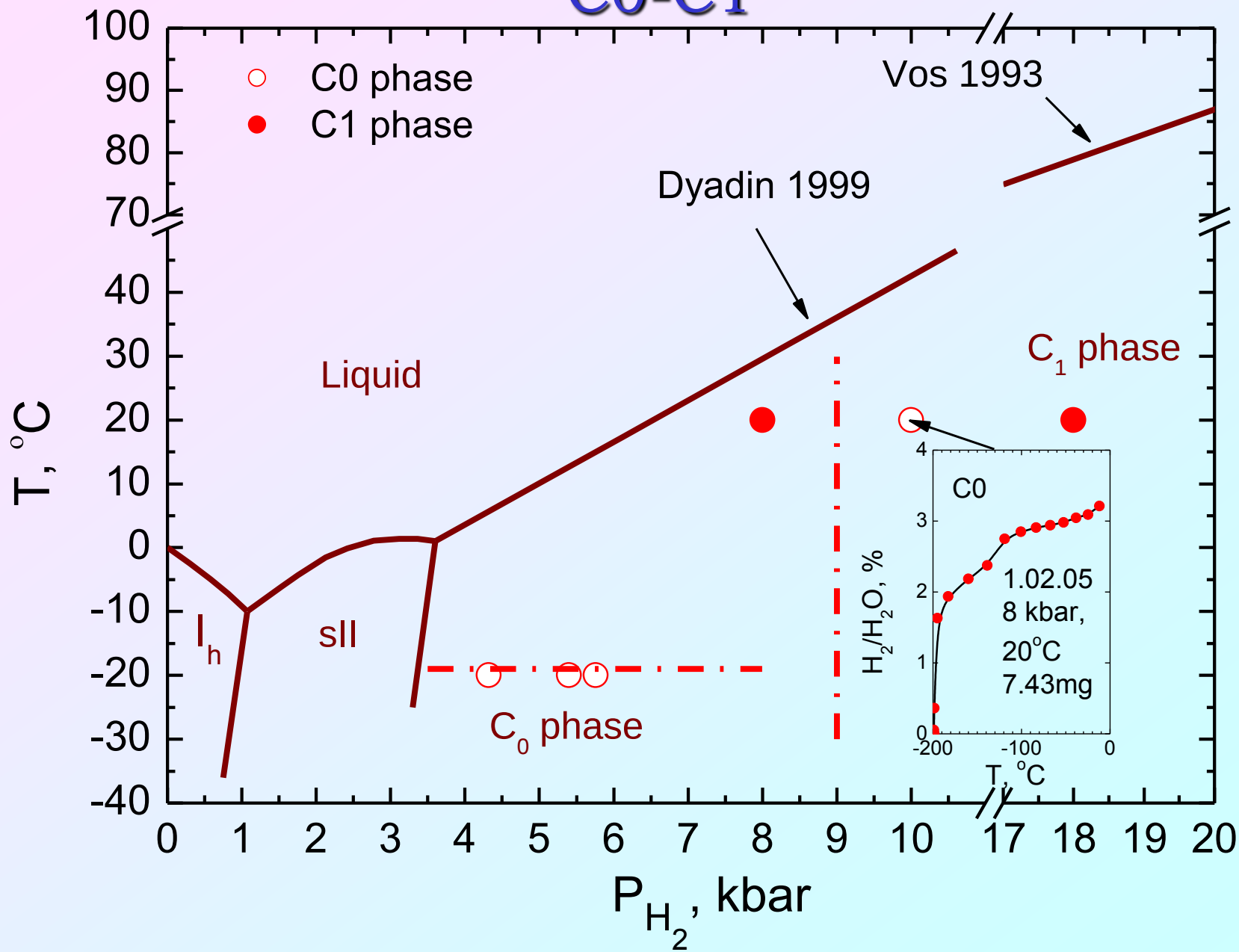
Фазовый анализ образцов



Термодесорбционные характеристики образцов



Возможное расположение линии равновесия C0-C1



Выводы:

- получена новая кристаллическая фаза в системе вода–водород
- фаза не имеет структурных аналогов среди известных газовых клатратов и льдов высокого давления
- рентгенограмма новой фазы проиндцирована в гексагональной ячейке с параметрами $a=6.34\text{\AA}$ и $c=6.19\text{\AA}$
- эта фаза имеет состав по водороду не менее $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}=0.12$ (1.4 вес % H)