

MIS027-P10

会場: コンベンションホール

時間: 5月22日 10:30-13:00

分子動力学シミュレーションを用いたケージ占有率と相境界の変化に関する研究 Study of Phase Boundary Change with Cage Occupancy by Molecular Dynamics Simulations

三上 陽平^{1*}, 松岡俊文¹, 梁 云峰¹

Yohei Mikami^{1*}, Toshifumi Matsuoka¹, Yunfeng Liang¹

¹ 京都大学大学院工学研究科

¹ Kyoto University, Faculty of Engineering

メタンハイドレート層にCO₂を圧入することで、リザーバー内でメタンハイドレート中のメタン(CH₄)とCO₂の置換反応を起こしてCO₂をハイドレートとして貯留し、CH₄を回収するという手法が提案されている。この手法ではCH₄の回収、CO₂貯留の双方の観点から、ハイドレートの状態図を知ることが重要になる。そこで、本研究では、分子動力学シミュレーションを用いて、CH₄/CO₂ハイドレートの相境界を推定し、ハイドレートの相変化に関する考察を行った。

その結果、ハイドレートが生成、崩壊する分子の挙動をシミュレーションで再現することに成功し、CH₄ハイドレートの相境界は実験値に非常に近い結果を得た。また、CO₂ハイドレートの相境界に関しては、実験値を再現するとともに、ハイドレート構造の水分子のケージにガス分子が取り込まれている割合が高いほど相境界はより高温なものに変化し、ハイドレートの安定領域が拡大した。つまり、ケージの占有率が上昇することでハイドレートの安定性が増し、より高温低圧の条件下でもハイドレートが安定化することが分かった。この傾向はCH₄ハイドレートでも同様であった。

キーワード: メタンハイドレート, CO₂ハイドレート, 分子動力学, 相境界, 占有率, ガスハイドレート

Keywords: methane hydrate, CO₂ hydrate, molecular dynamics, phase boundary, cage occupancy, gas hydrate