

分子動力学シミュレーションによる白雲母 | NaCl 水溶液界面での油滴の濡れ性の検討

Molecular dynamics simulations of oil wettability of muscovite-NaCl solution interface

小林 和弥^{1*}; Liang Yunfeng¹; 松岡 俊文¹; 西 直哉¹; 作花 哲夫¹

KOBAYASHI, Kazuya^{1*}; LIANG, Yunfeng¹; MATSUOKA, Toshifumi¹; NISHI, Naoya¹; SAKKA, Tetsuo¹

¹ 京都大学大学院工学研究科

¹ Graduate School of Engineering, Kyoto University

鉱物 | 電解質水溶液 | 油三相界面の界面物理化学現象の解明は、地下流体資源の開発・有害廃棄物の地下処分等において重要である。電気二重層の形成などの鉱物 | 電解質水溶液界面での電解質の挙動は界面の性質を変化させる。また鉱物表面での油滴の濡れ性は、電解質の濃度に依存することが知られているが、電解質濃度の変化による濡れ性の変化の基礎原理は明らかになっていない。そこで本研究では、鉱物 | 電解質水溶液 | 油三相界面の微視的な界面構造と濡れ性の関係性を明らかにするため、分子動力学シミュレーションを適用し、接触角と界面構造の解析を行った。本研究では鉱物基板として白雲母、電解質水溶液として 3.0mol/kg NaCl 水溶液、油滴にはヘプタン・トルエンのそれぞれを用いた。本研究によって、負の表面電荷を持った白雲母に対する Na⁺ の吸着による鉱物 | 電解質水溶液界面張力の減少と、油 | NaCl 水溶液界面での、NaCl の負の吸着による油 | 水界面張力の増加が油滴への濡れ性を変化させることが明らかとなった。今回の結果は石油の増進回収技術の開発において重要な基礎情報となる。

キーワード: 白雲母, 鉱物 | 地下流体界面, 濡れ性, 分子動力学法

Keywords: Muscovite, Mineral-underground fluid interface, Wettability, Molecular dynamics