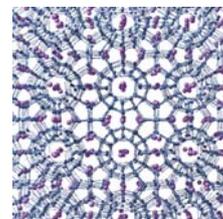


水中のメタンハイドレートの分解機構

概要

クラスレートハイドレートは、水と疎水物質からなる結晶であり、エネルギーの貯蔵・輸送手段として注目を集めている。また、日本近海の海底にはハイドレートの形でメタンが多量に存在しており、未来のエネルギー資源として期待されている。計算機シミュレーションにより、実験的に調べるのが難しいハイドレートの分子レベルの振る舞いを明らかにすることで、今後のハイドレートの産業利用に貢献する。



京でなにができるようになったのか

Before

相転移は系が大規模に変化する非常に遅い過程

↓ にもかわらず

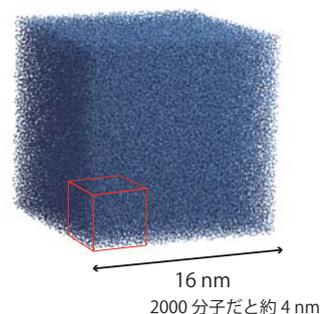
- ・小さな系 (数千分子)
- ・短い (1 ナノ秒程度) 計算



After

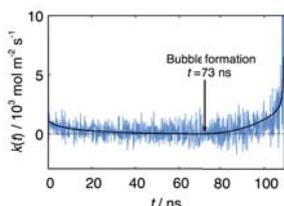
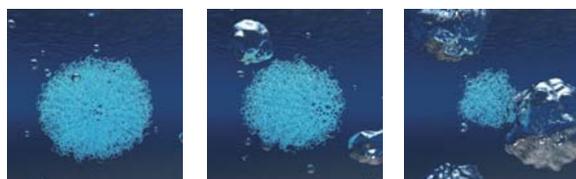
現実に近い、穏やかな条件での分解を再現

- ・MODYLAS を使用
- ・10 万分子以上の巨大な系
- ・100 ナノ秒を超える長時間計



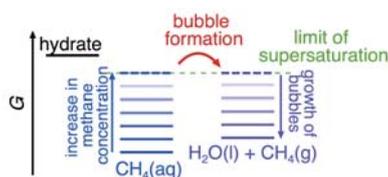
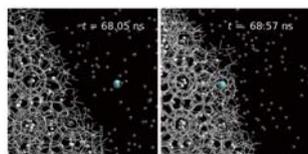
シミュレーションで分かったこと

純水中の分解



メタンの泡ができることで、ハイドレート分解が促進される!

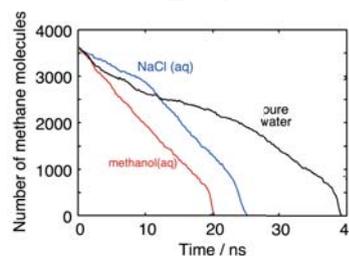
ケージ再構成による分解の遅延化



・ T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, and H. Tanaka, J. Phys. Chem. B 118, 1900 (2014).

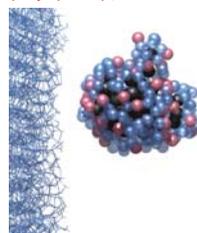
添加物の効果

- ・海水中には NaCl が存在
 - ・石油産業ではメタノールが使われている
- ハイドレート生成によりパイプラインが詰まることを防ぐため

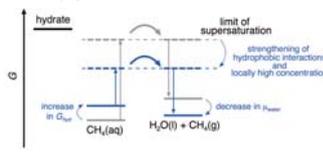


NaCl
分解初期は遅くなるが
その後は速くなる
メタノール
分解が促進される

メタノール



NaCl



・ T. Yagasaki, M. Matsumoto, Y. Andoh, S. Okazaki, and H. Tanaka, J. Phys. Chem. B 118, 11797 (2014).
・ T. Yagasaki, M. Matsumoto, and H. Tanaka, Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 32347 (2015).

今後の展望

実用的な観点から

- ・海底からのハイドレート採掘や、ガスの貯蔵・輸送過程におけるハイドレート分解の巨視的なモデル作成の助けに
- ・泡生成を活用した効率のよい分解プロセスの可能性

シミュレーションの立場から

- ・より巨大なシミュレーションを行い、熱伝導、分子拡散、濃度揺らぎなどを、さらに現実に近い
- ・結晶化過程の解明