

Molekylær modellering av oppsprekking i gasshydrater

Henrik Andersen Sveinsson

Fysisk institutt
Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet
Universitetet i Oslo

8. mai 2015

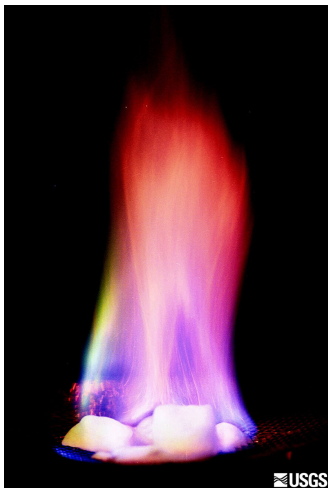
Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon

Oversikt

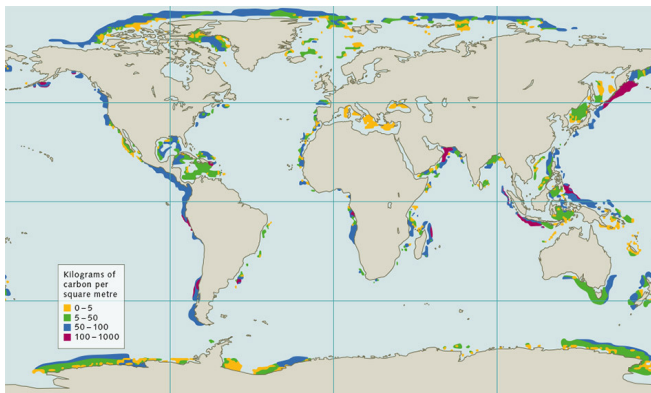
- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon

Hva er gasshydrater?



- Et isliknende stoff som inneholder molekyler av stoffer som opptrer som gass under vanlige forhold.

Hvor finnes gasshydrater?



Bruksområder

Risiko

- *the clathrate gun hypothesis*

Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering**
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon

Molekylærdynamikk

LAMMPS

- Oppsett
- Verifisering

TIP4P/ICE + UAM

Simulert system

Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering
- 3 Resultater**
- 4 Oppsummering og diskusjon

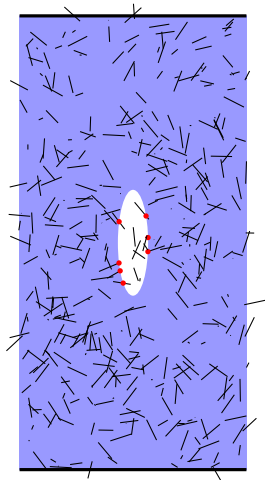
Mekaniske egenskaper

Måling av arealet til sprekkeoverflaten

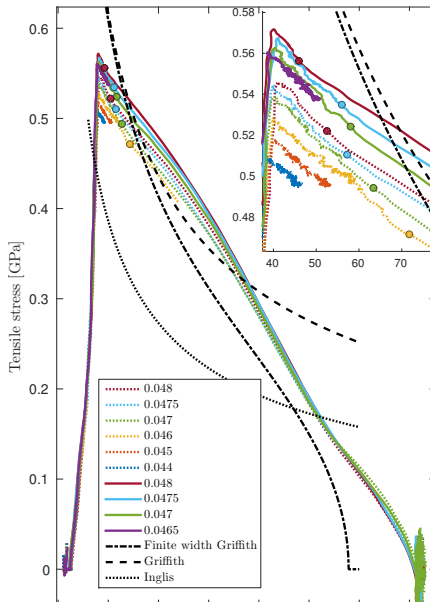
Jeg bruker en
Monte-Carlo-metode for å finne
tilgjengelig overflate:

$$A_{ss} = 2V \frac{n_s}{L}$$

- A_{ss} overflatearealet
 V volum av prøven
 n_s antall kryssninger vegg-tomrom
 L total lengde av trukne linjestykker



Hovedresultat



Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon