

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 og simulering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon

Oversikt

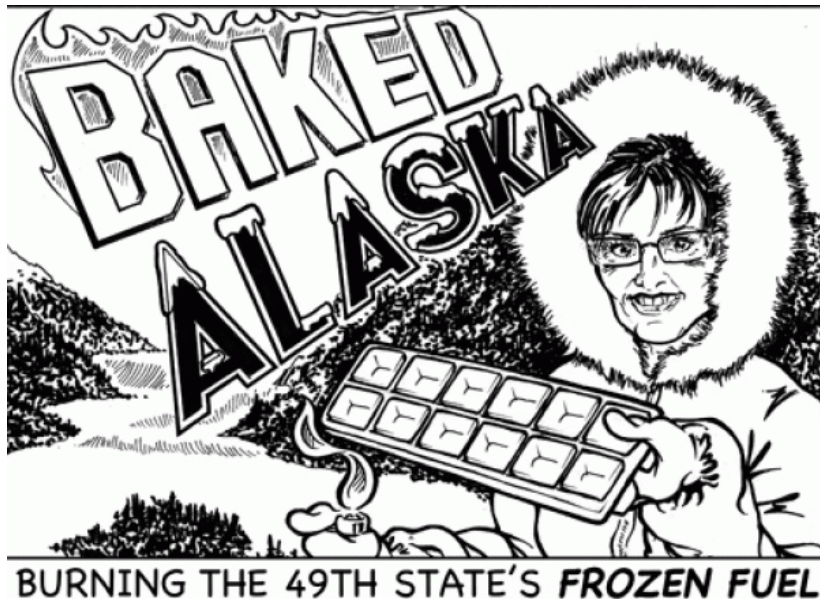
- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering og simulering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon

Hva er gasshydrater?

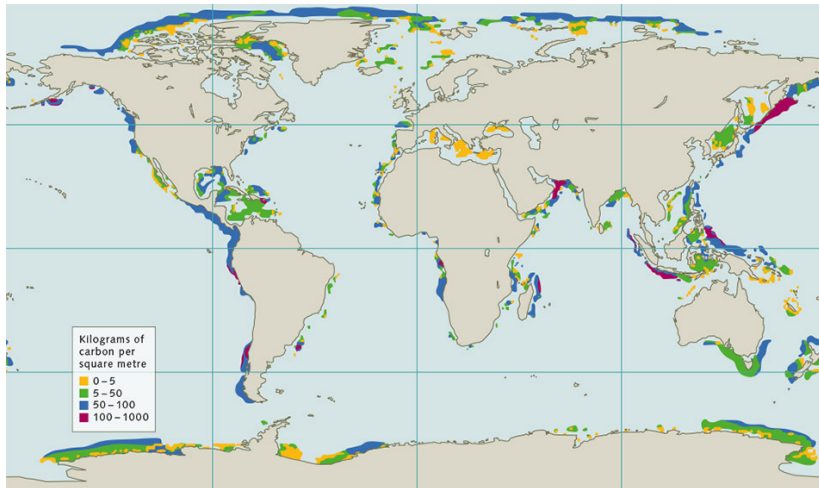


- Et isliknende stoff som inneholder molekyler av stoffer som opptrer som gasser under vanlige forhold.

Gasshydrater kan brukes som stormkjøkken



Det ligger masse gasshydrater i havet, men sannsynligvis ikke så mye som man ofte blir fortalt..



Figur: *The World Ocean Review, Marine Resources – Opportunities and Risks, 2014*

Bruksområder

- Energi (brenne metan)
- CO₂-lagring

Risiko

Operasjonelle

- Tette rør

Geologisk skala

- Sedimentskred
- *the clathrate gun hypothesis*

Oversikt

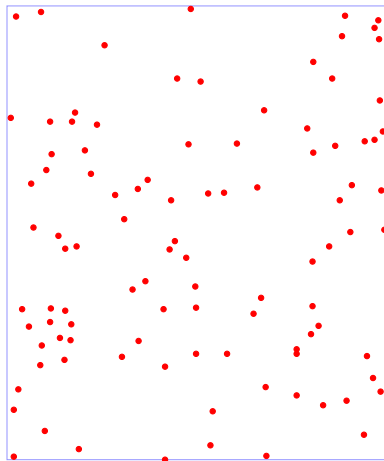
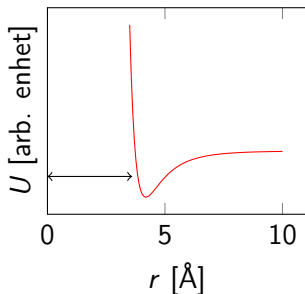
- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering og simulering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon

Molekylærdynamikk

Tidsutvikle et system av
punktpartikler som styres
av Newtons 2. lov,

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{x}}$$

Lennard–Jones potensial

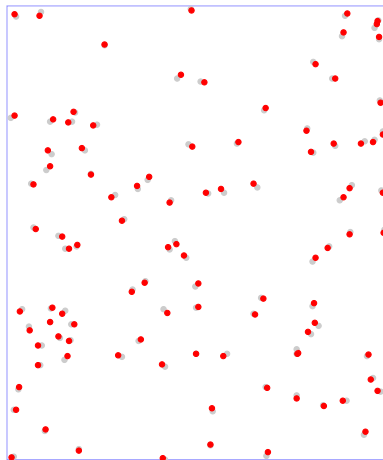
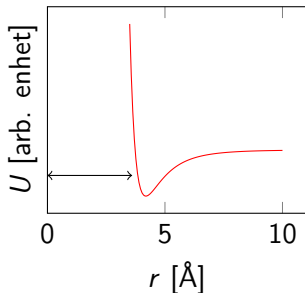


Molekylærdynamikk

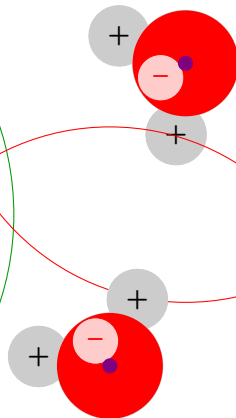
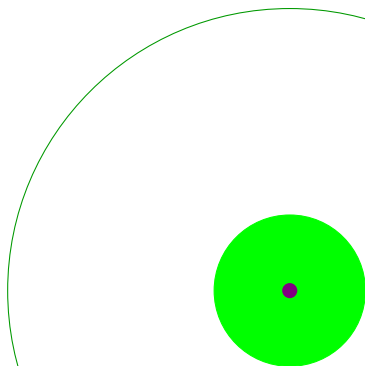
Tidsutvikle et system av
punktpartikler som styres
av Newtons 2. lov,

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{x}}$$

Lennard–Jones potensial



TIP4P/ICE + UAM



Simulert system

Oversikt

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

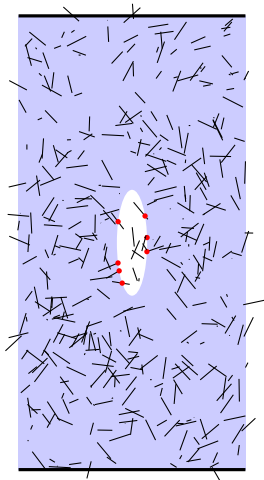
Mekaniske egenskaper

Måling av arealet til sprekkeoverflaten

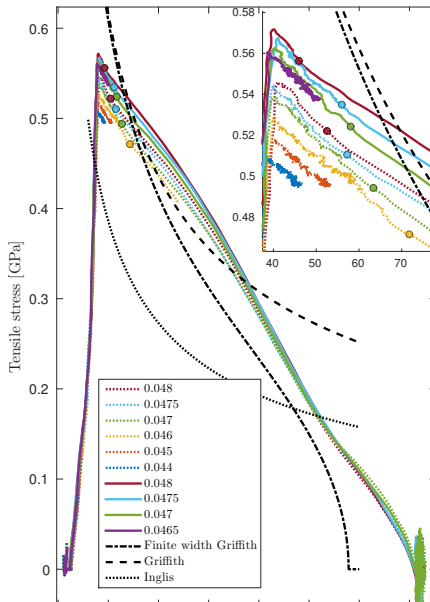
Jeg bruker en
Monte-Carlo-metode for å finne
tilgjengelig overflate:

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

- 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 og simulering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon