

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 (med resultater)
- 3 Oppsummering

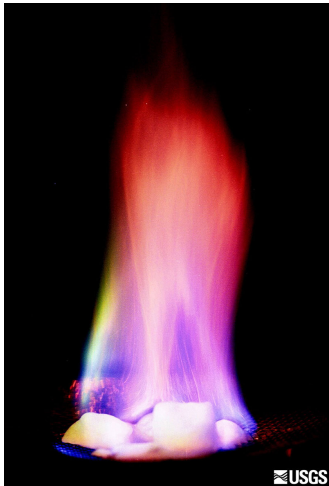
Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering og simulering (med resultater)
- 3 Oppsummering

Hva skjer i masteren min?

Jeg kombinerer 3 ting som ikke er så vanlig å kombinere:

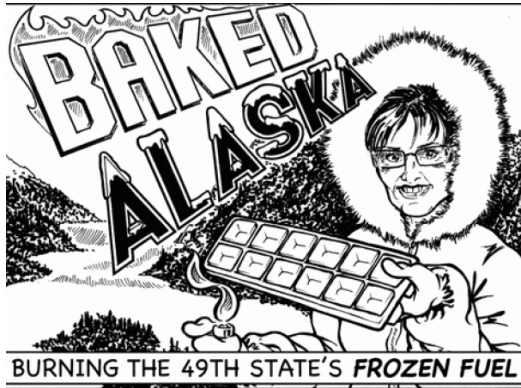
Hva er gasshydrater?



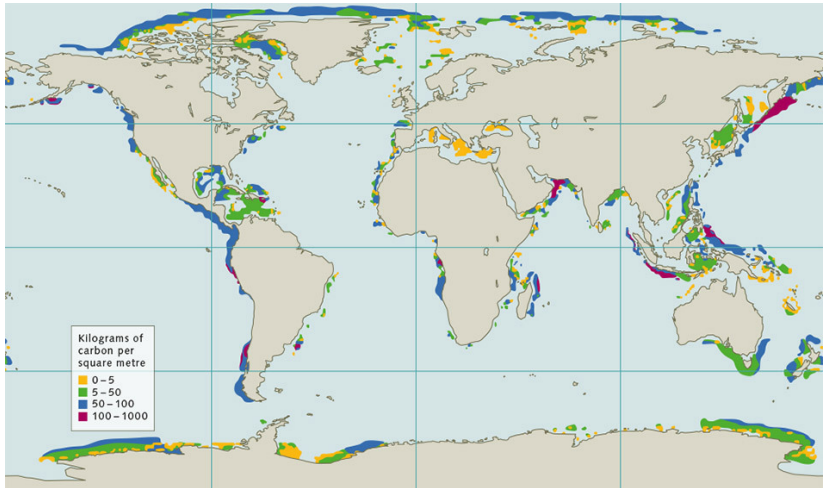
- Et isliknende stoff som inneholder molekyler av stoffer som opptre som gasser under vanlige forhold.
- Vanligvis mener man metanhydrater når man sier gasshydrater.

Bruksområder

- Energi (brenne metan)
- CO₂-lagring

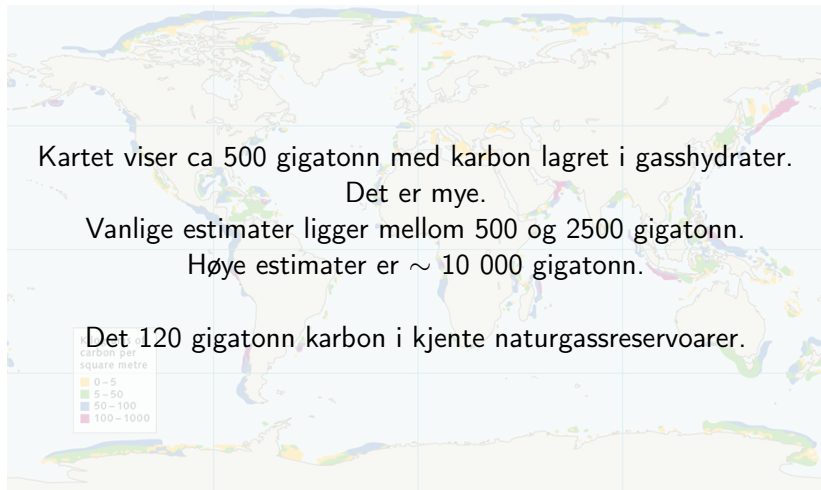


Det ligger masse gasshydrater i havet, men sannsynligvis ikke så mye som man ofte blir fortalt..

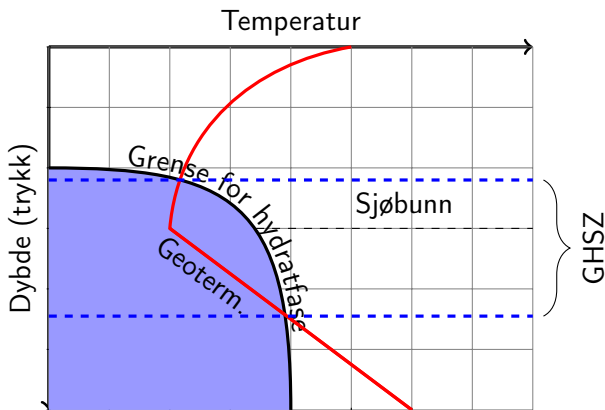


Figur: *The World Ocean Review, Marine Resources – Opportunities and Risks, 2014*

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



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



Risiko

Operasjonell

- Tette rør



Geologisk

- Sedimentskred
- *the clathrate gun hypothesis*

Overordnet mål: Utvinne metan fra gasshydrater, og lagre CO₂

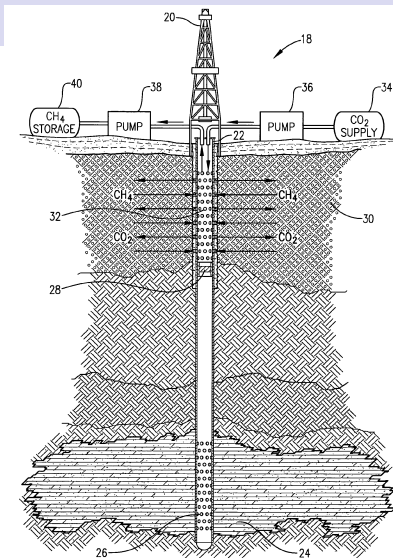


FIG. 2

Hva lurer vi på akkurat nå?

Hvordan sprekker i gasshydrater bidrar til å oppløse hydratet.

Materialeegenskaper

- Hva er bruddstyrken?
- Er gasshydratet spøtt eller duktilt?
- Hvor mye metan frigjøres ved oppsprekking?
- Hva er bruddmekanismen?

Simuleringsteknisk

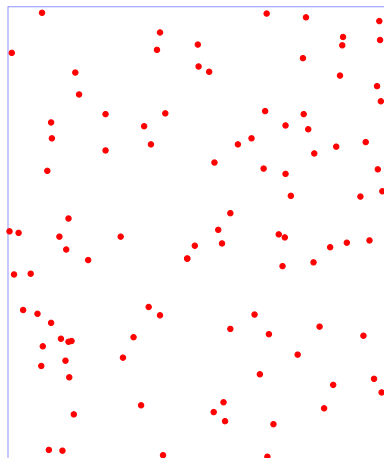
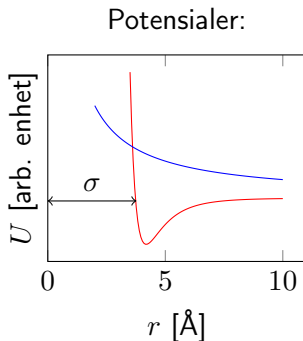
- Hvilke interaksjonspotensialer er best?
- Hvordan bør man utløse sprekker?

Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering og simulering (med resultater)
- 3 Oppsummering

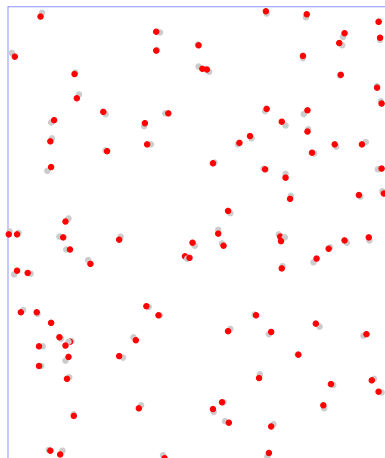
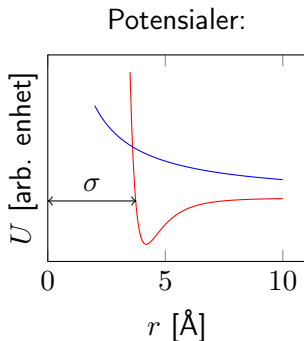
Molekylærdynamikk: Tidsutvikle et system av punktpartikler som styres av Newtons 2. lov, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$

Partikler med posisjoner og hastigheter



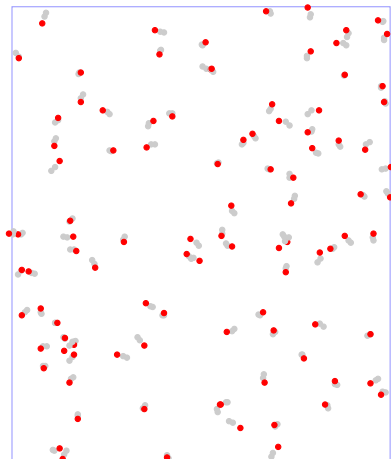
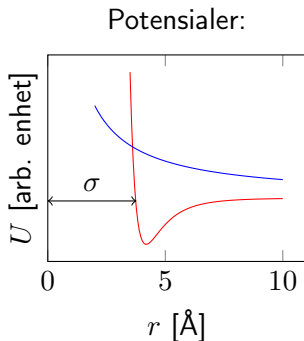
Molekylærdynamikk: Tidsutvikle et system av punktpartikler som styres av Newtons 2. lov, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$

Partikler med posisjoner og hastigheter



Molekylærdynamikk: Tidsutvikle et system av punktpartikler som styres av Newtons 2. lov, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$

Partikler med posisjoner og hastigheter



Molekylærdynamikk: Tidsutvikle et system av punktpartikler som styres av Newtons 2. lov, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$

Lennard–Jones-
potensialet

$$U = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

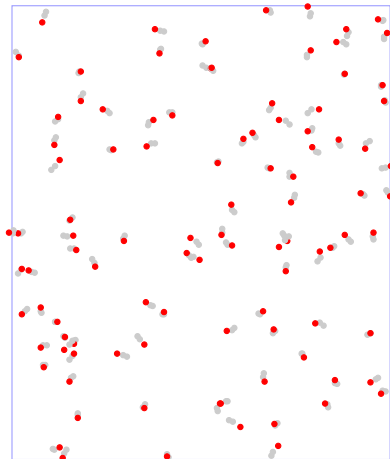
Coulomb-potensialet

$$U = k \frac{q_a q_b}{r}$$

Kraftberegning

$$\mathbf{F} = -\nabla U$$

Partikler med posisjoner og hastigheter

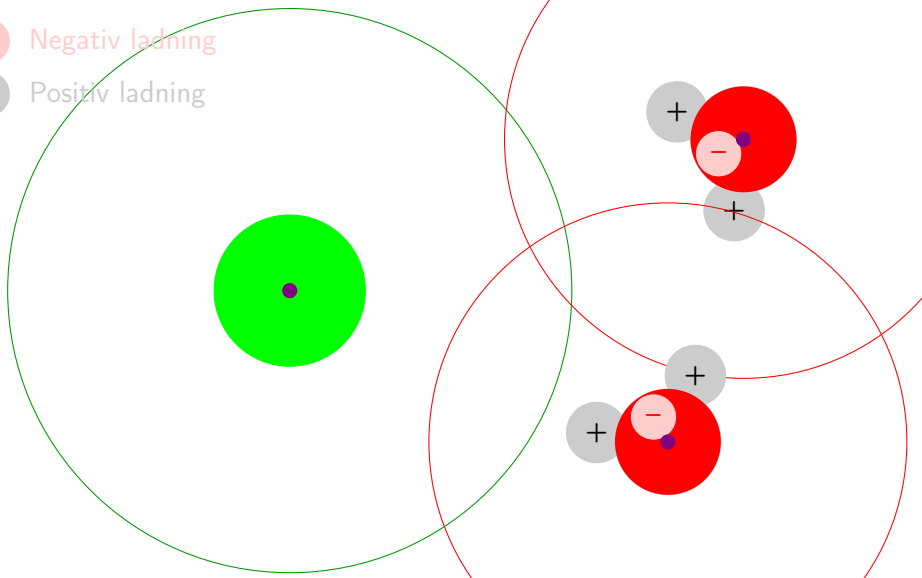


TIP4P/ICE + UAM (vann og metan)

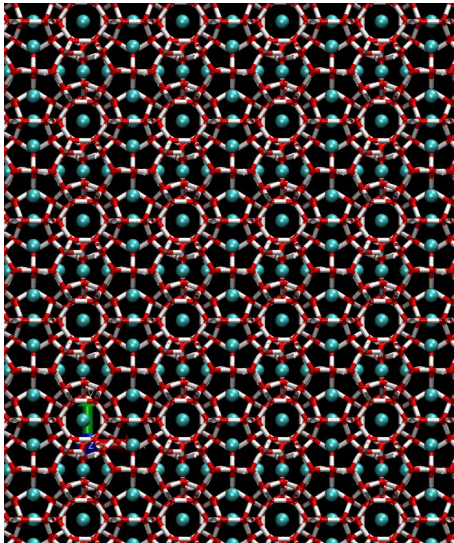
● Lennard-Jones-sentrum

— Negativ ladning

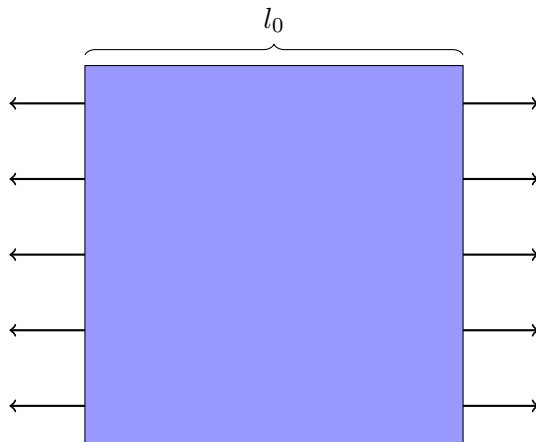
+ Positiv ladning



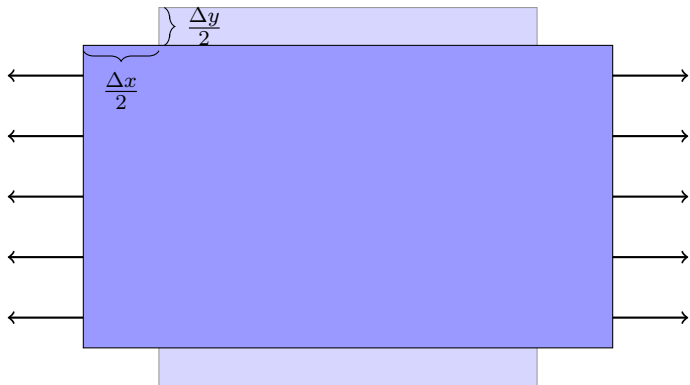
TIP4P/ICE + UAM (vann og metan)



Simulert system for mekaniske egenskaper



Simulert system for mekaniske egenskaper



Simulert system for mekaniske egenskaper

Beregner Youngs modul og Poissonforholdet basert på de forrige figurene:

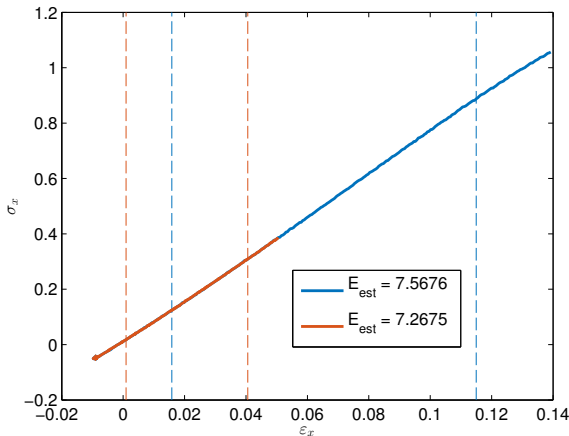
Youngs modul

$$E = \frac{\sigma_x l_0}{\Delta x} = \frac{\sigma_x}{\epsilon_x}$$

Poissonforholdet

$$\nu = -\frac{\Delta y}{\Delta x}$$

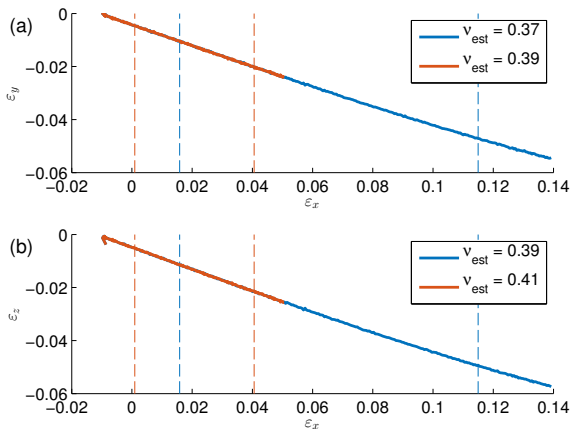
Mekaniske egenskaper



Youngs modul er omtrent 7.1 GPa.

Det ser bra ut.
(Exp ≈ 7.8 GPa).
Til sammenlikning:
PMMA har ≈ 3 GPa.

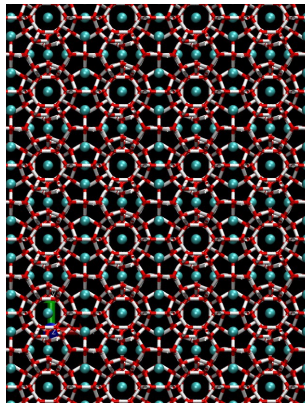
Mekaniske egenskaper



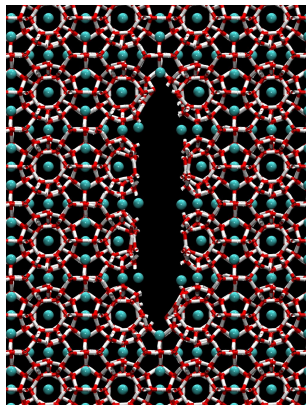
Poissonforholdet er omtrent 0.4.

Det er litt mye.
(Exp ≈ 0.32)

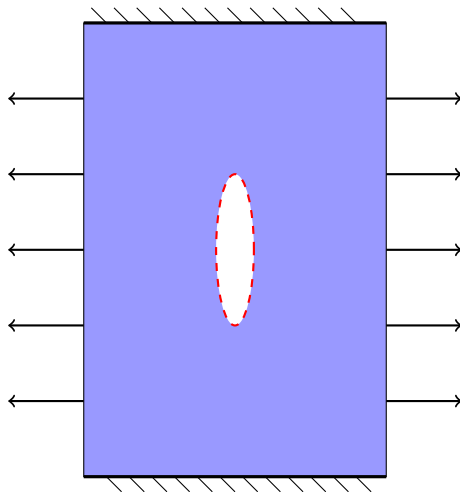
Simulert system for sprekker



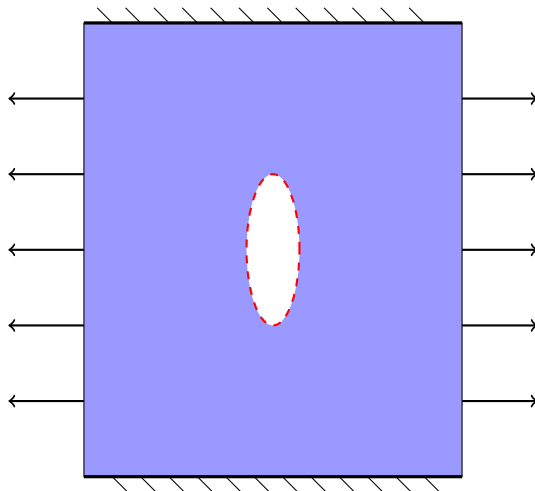
Simulert system for sprekker



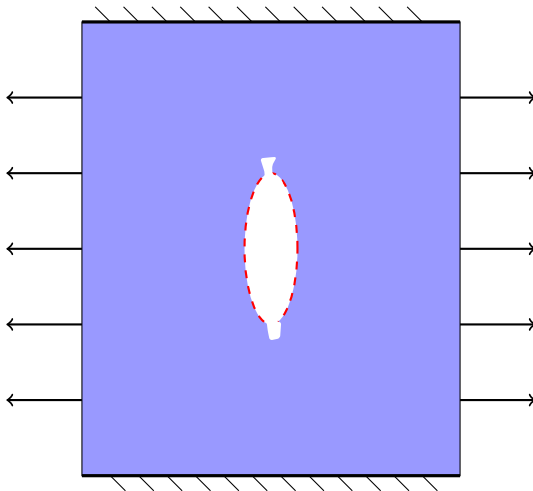
Simulert system for sprekker



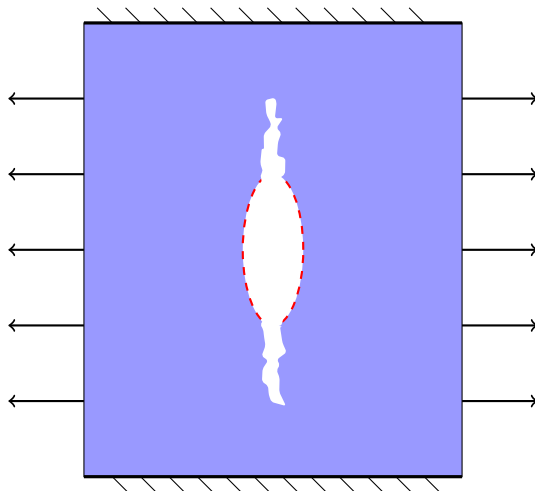
Simulert system for sprekker



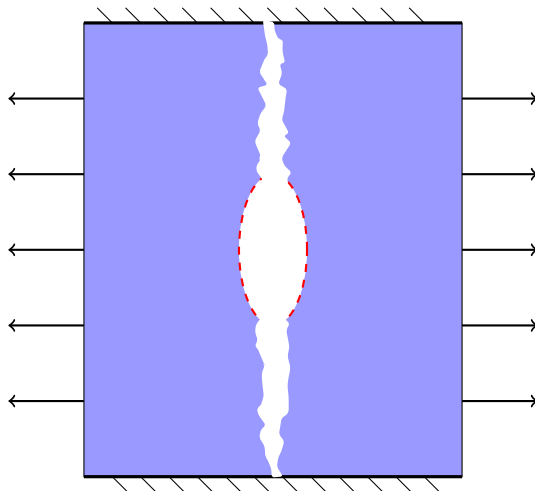
Simulert system for sprekker



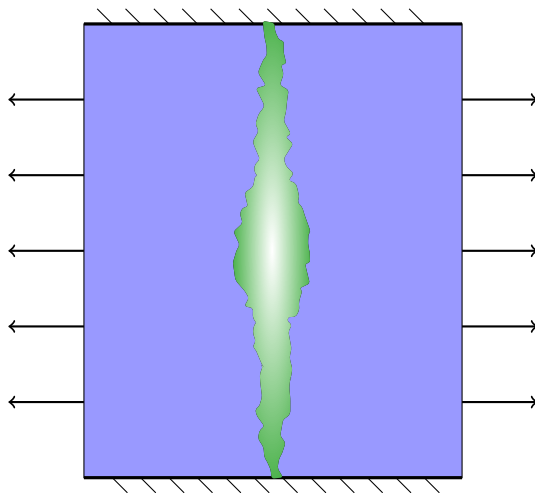
Simulert system for sprekker



Simulert system for sprekker



Simulert system for sprekker



Hva skal til for at det sprekker opp?

Griffith og Irwins energibalanse

$$\mathcal{G} > \mathcal{G}_c \stackrel{\text{sprøtt}}{=} 2\gamma_s$$

Dersom den *mekaniske* energien som frigjøres ved å åpne ny sprekkflate (\mathcal{G}) er større enn energien som kreves for å åpne sprekken (\mathcal{G}_c), vil sprekken vokse.

Bruddstyrken defineres vanligvis som den mekaniske energien som må tilføres med tensilt stress for å åpne sprekkareal. Tilført energi måles ved å integrere stresset over utvidelsen:

$$W = \int F \, dx = l_x l_y \int_{l_0}^{l_0 + \Delta x} \sigma_x \, dx \quad (1)$$

Hva var det vi lurte på?

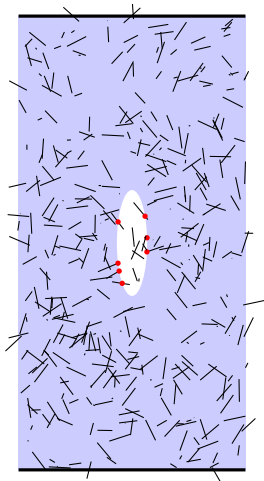
- Bruddstyrke
- Bruddmekanisme
- Frigjort metan

Måling av arealet til sprekkoverflaten

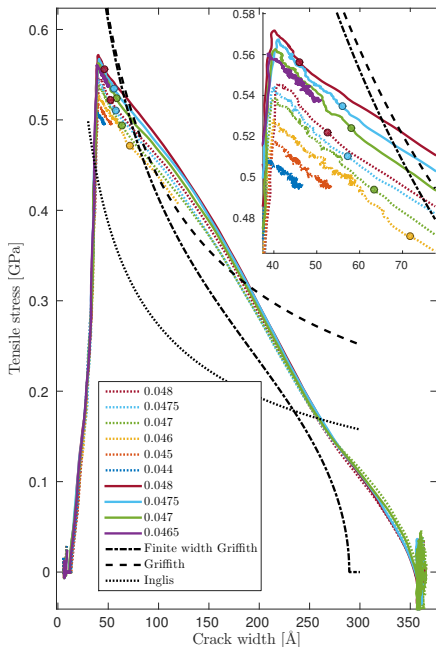
Jeg bruker en
Monte-Carlo-metode for å finne
tilgjengelig overflate:

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

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



- Hver fargede strek er en sprekksimulering.
- Oppsprekking skjer først sakte, ved smelting, deretter fort, ved brudd.



Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering og simulering (med resultater)
- 3 Oppsummering**