

CO₂ ハイ ドレートの構成する分子の拡散現象の解明に向けた 分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics study for the elucidation of the molecular diffusion behavior in the CO₂ hydrate

阿部豊

システム情報系

1. 研究目的

地球温暖化対策技術として火力発電所等から回収した CO₂ を地中および海洋に貯留する CCS 技術が注目を集めている。低温高圧条件を満たす深海では、貯留した CO₂ と海水との界面にハイドレートと呼ばれる膜状の包接水和物が生成する。このハイドレート膜により大量の CO₂ の安定かつ長期間の貯留が可能となると考えられている。しかしながら CO₂ ハイドレートの生成・成長過程については不明な点が多く残されており、ハイドレートを用いた CCS 技術の実用に至っていない。本研究グループの最終目標は、CO₂ ハイドレートの生成・成長メカニズムを解明し、その経時変化を予測可能なモデルを構築することである。

CO₂ ハイドレート中では、CO₂ 分子は H₂O 分子から成るケージと呼ばれる籠状の構造に収まるように配置されている。よって、CO₂ 分子がケージ間を移動することで拡散が生じられていると考えられている。したがって、ケージの数に対する CO₂ 分子の数の比率（占有率）が低いほど、拡散現象が大きくなると考えられるが、占有率は不明である。そこで、膜厚の予測を目指すにあたって、CO₂ 分子の占有率の変化が拡散係数にもたらす影響を見積もることには意義がある。

2. 研究成果の内容

計算は Small と Large の両種のケージにおける CO₂ 分子の占有率をパラメータとして、過去の研究によって予測されている最大値から、ハイドレートの構造が崩壊する手前の値を設定して実施した。図 3 と図 4 に結果を示す。両図の(a)に示している、272K における結果では、おおよそ 1 オーダーの範囲に収まっていることが確認できることから、CO₂ 分子のケージ種ごとの占有率とその自己拡散係数に及ぼす影響は限定的であると考えられる。また、より高温の 276 K の条件下でも大きな変化は見られなかった。したがって、分子拡散現象における CO₂ 分子の占有率の影響は限定的であり、昨年度の結果と合わせると、H₂O 分子の占有率の影響の方が支配的である。

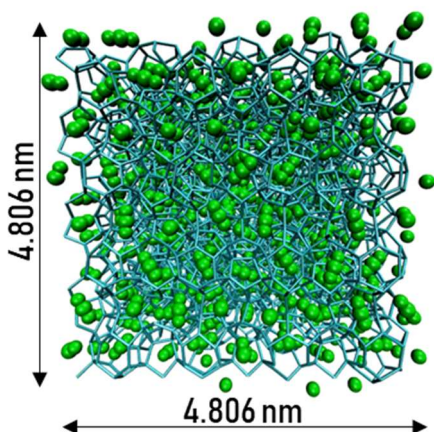


図 1 計算体系

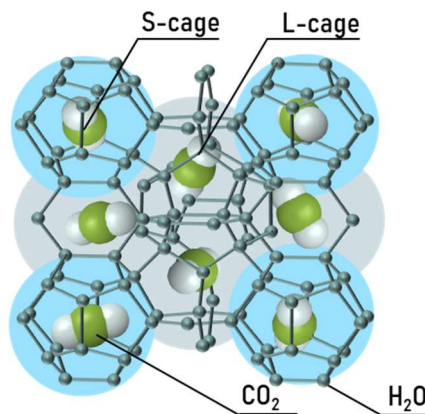
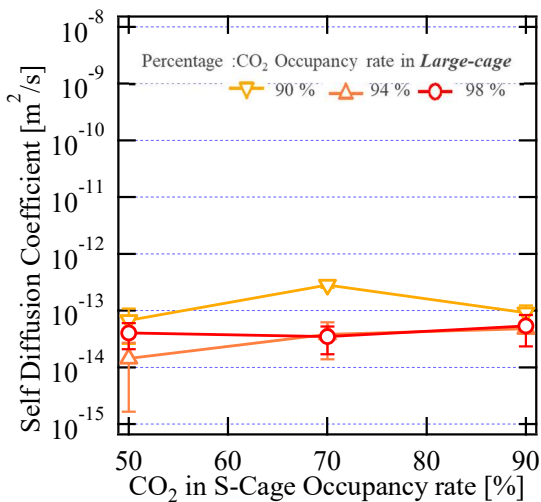
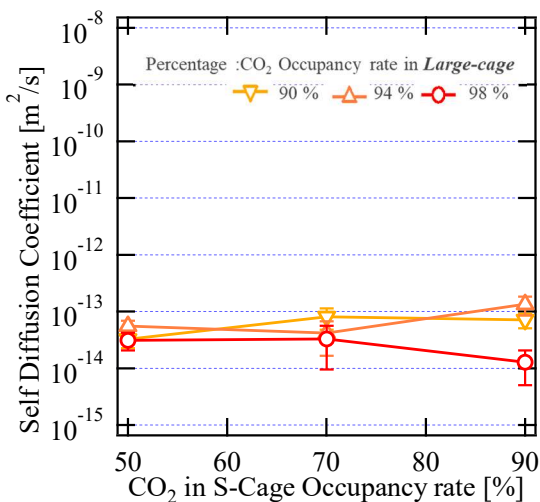


図 2 ハイドレートの単位結晶

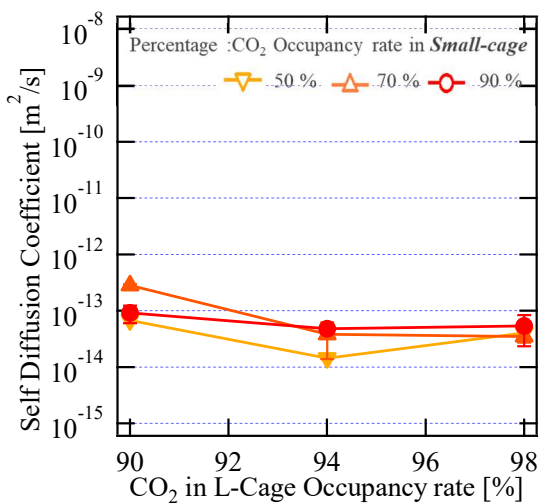


(a) 272 K

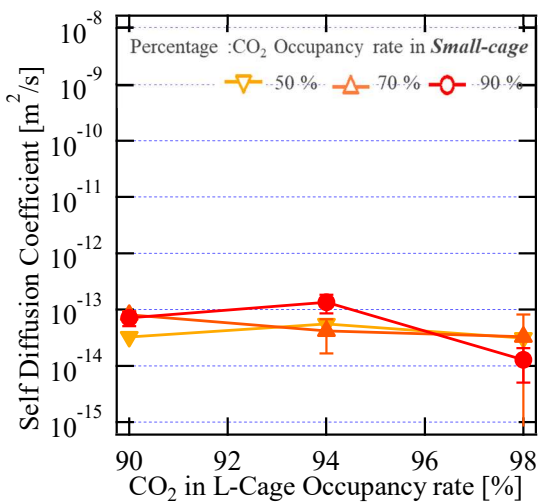


(b) 276 K

図 3 Small ケージの占有率に対する自己拡散係数の変化



(a) 272 K



(b) 276 K

図 4 Large ケージの占有率に対する自己拡散係数の変化

3. 学際共同利用として実施した意義

本研究グループで対象としている計算体系で数値計算を実施する場合、数十ノードを伴う並列計算ではなく、多数のCPUを実装する単一のノードで計算を実行することが望ましい。これらの理由から、単一ノード当たりのコア数が最多のスーパーコンピュータであるOakforest-PACSが最適であると判断した。本制度の利用により、分子拡散挙動と分子構造の相関を取得することに成功した。

4. 今後の展望

本研究グループではCO₂ハイドレートの成長過程を可視化する実験を平行して実施している。実験によって取得したCO₂ハイドレート膜を透過する物質質量とシミュレーションによって取得したハイドレート膜内の分子拡散係数より、CO₂ハイドレート膜の成長挙動を予測する物理モデルを構築する。

5. 成果発表

(1) 学会発表

本田 恒太, 金子 暁子, 阿部 豊, 「分子動力学法によるCO₂ハイドレート内部における分子拡散係数の算出」, 日本機械学会関東支部 第26期総会・講演会, 東京, 2020年3月

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
COMA			
Oakforest-PACS	○	172,000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			