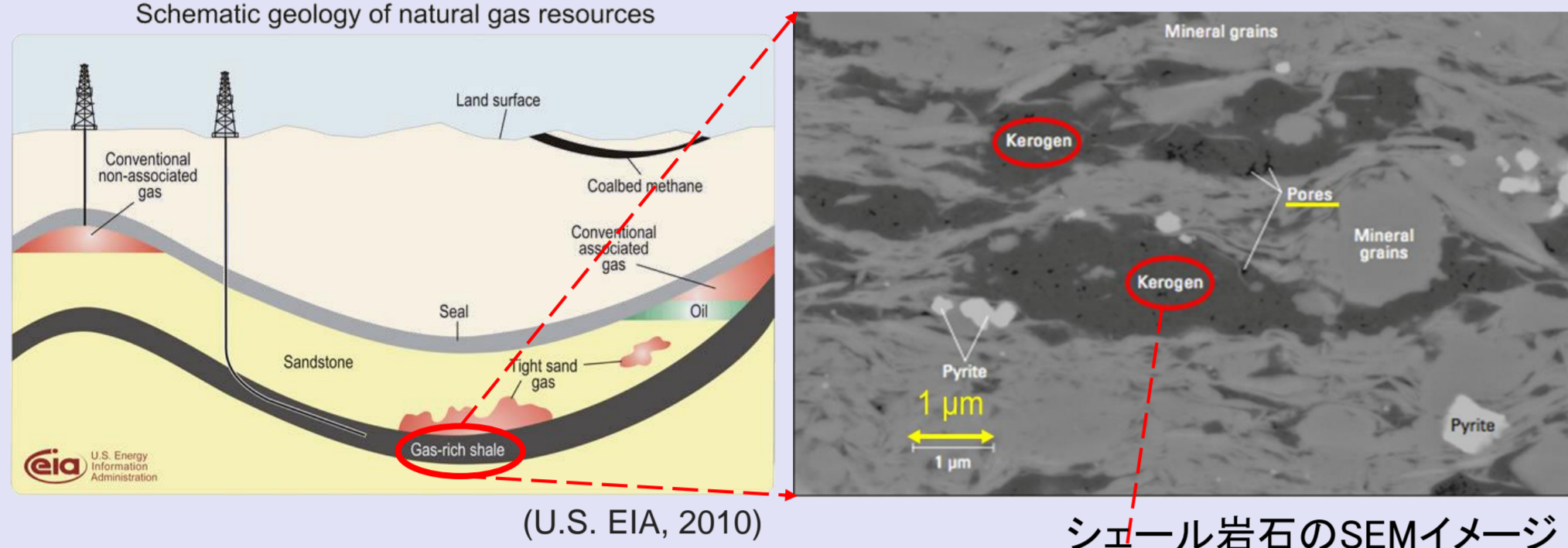


# シェールガス資源量評価を目的としたケロジェンナノ孔隙内のメタン吸着挙動に関する分子動力学シミュレーション

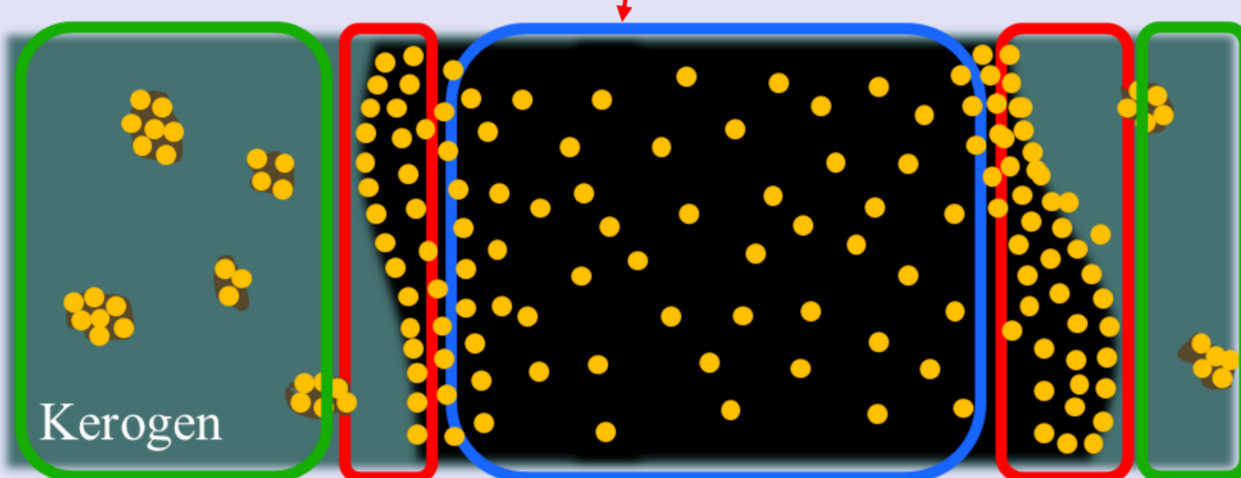


## 研究背景及び目的

シェール岩石内に存在するメタンガス:  
シェール岩石内の隙間とケロジェンの微細孔隙内に存在



シェールガスを含む頁岩層に水平にパイプを入れ、高水圧で人工的に割れ目をつくり、ガス採取

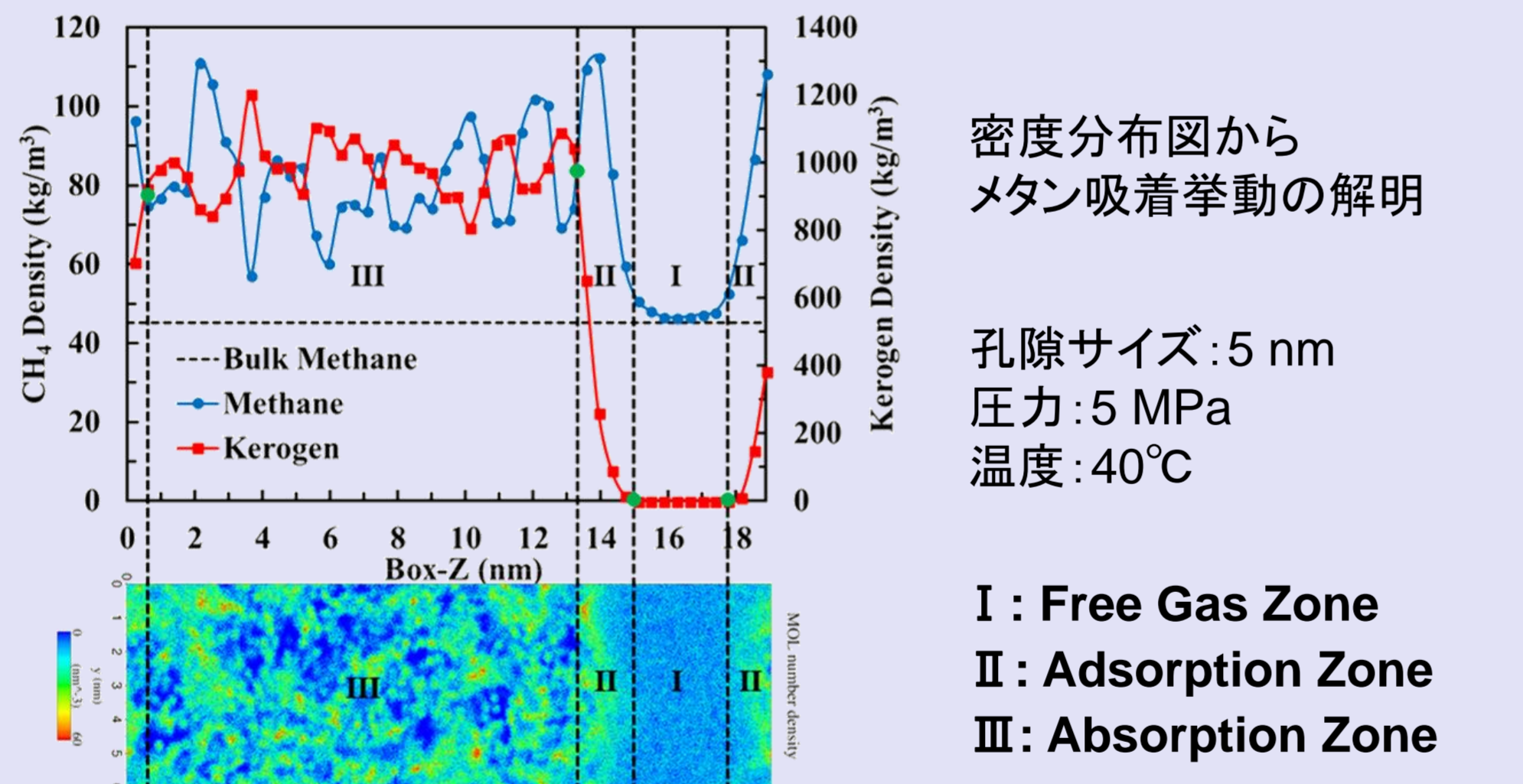
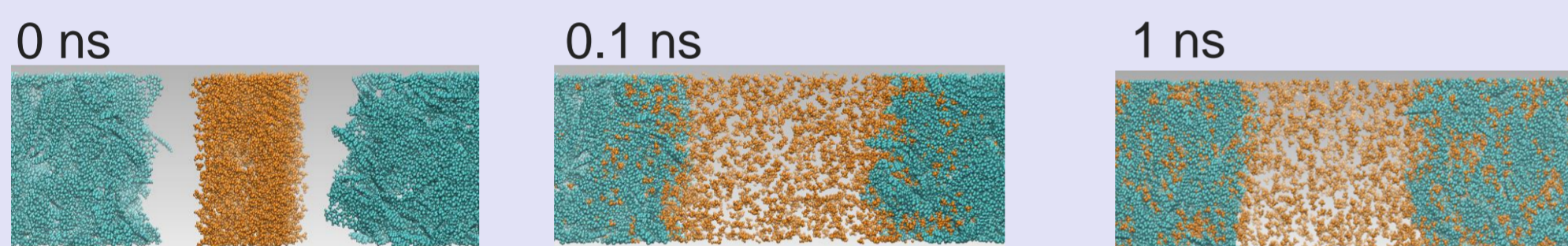


また、シェールのナノ孔隙はケロジェン内部に多く存在しており(緑色)、ケロジェン壁面が持つ壁面粗さが影響を及ぼす可能性あり

メタン吸着等温線の予測 → シェールガス資源量評価

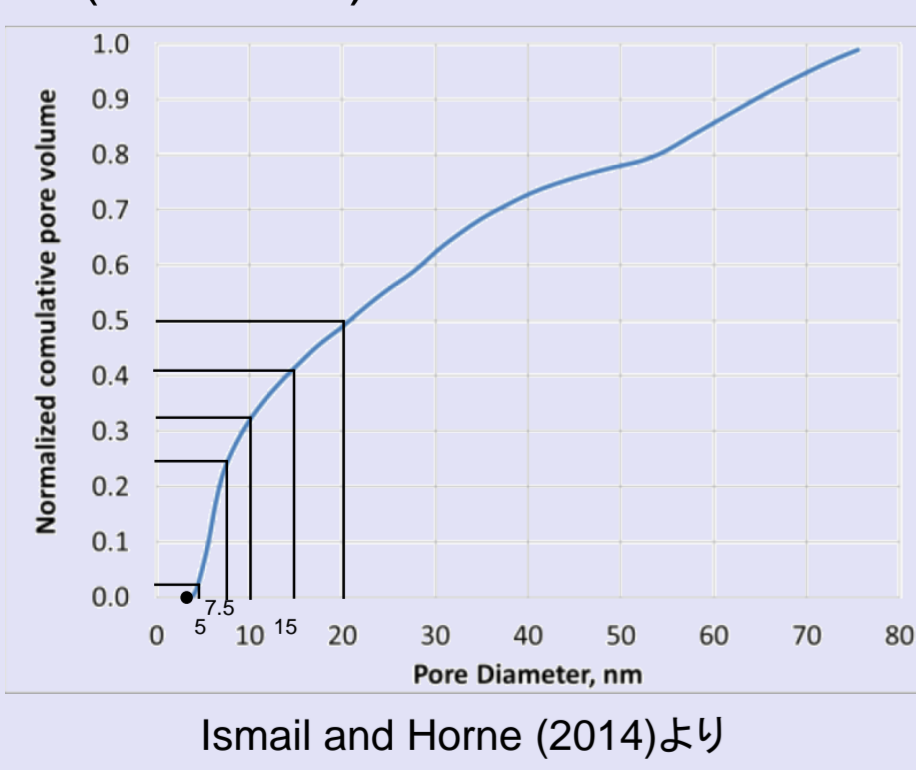
## 吸着等温線の予測方法と実例

シミュレーションのスナップショット



### Zone I および II

5 nm以上の孔隙サイズでの計算結果と孔隙径分布を用いて吸着量(SCF/Ton)を算出



### Zone III

Zone IIIについてはTotal Organic Carbon (TOC)を用いて吸着量を算出。TOCはHeller et al.(2014)に示されているMarcellusの1.2%を使用

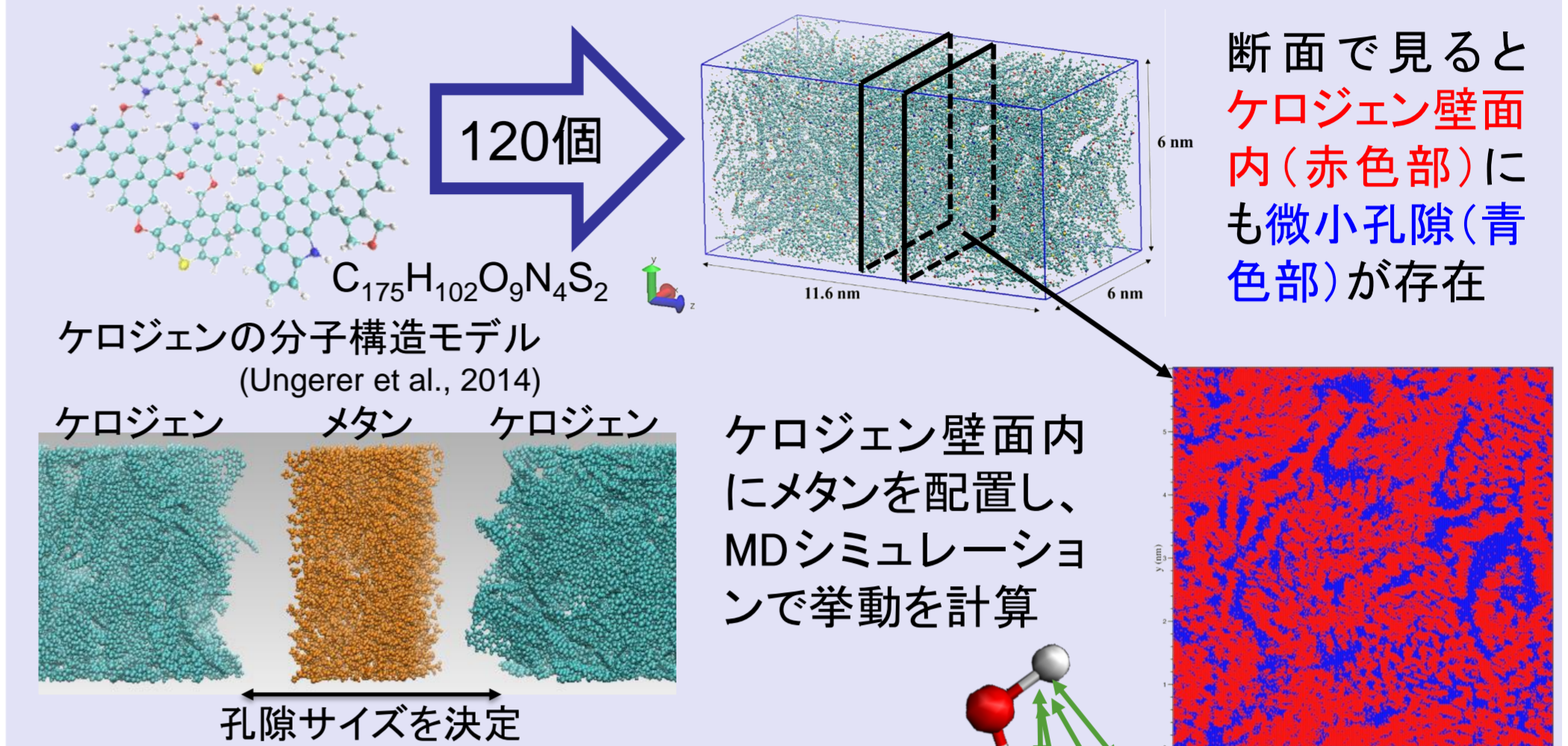
$$N_a(p) = \sum_i f_i n_{a,i(I+II)}(p) + TOC \times \bar{n}_{a,(III)}(p)$$

$N_a(p)$ : 総合吸着量  
 $f_i$ :  $i$ -nm孔隙の体積分率  
 $n_{a,i(I+II)}(p)$ :  $i$ -nm孔隙内の吸着量  
TOC: 有機物量の分数  
 $\bar{n}_{a,(III)}(p)$ : 有機物内の吸着量

※本計算では20nm以下の孔隙がすべてケロジェン内にあると仮定

## 研究手法

ケロジェンの分子モデル



## 分子動力学 (Molecular Dynamics) 法

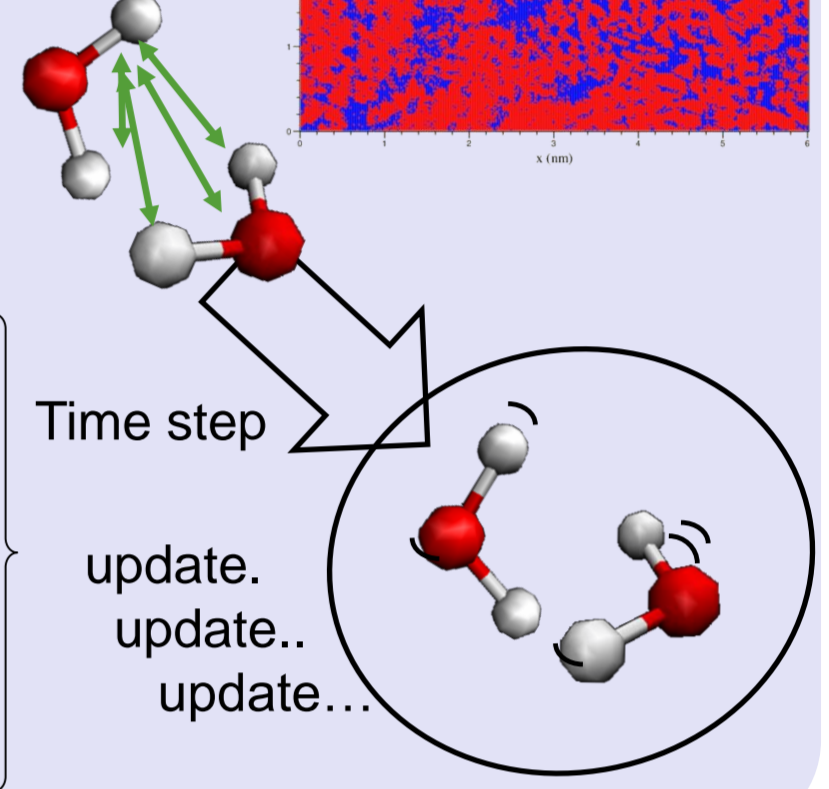
Following Newton's equation

$$m_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} = F_i = -\frac{\partial U(r)}{\partial r_i}$$

$$U = U_{LJ} + U_C + \Lambda$$

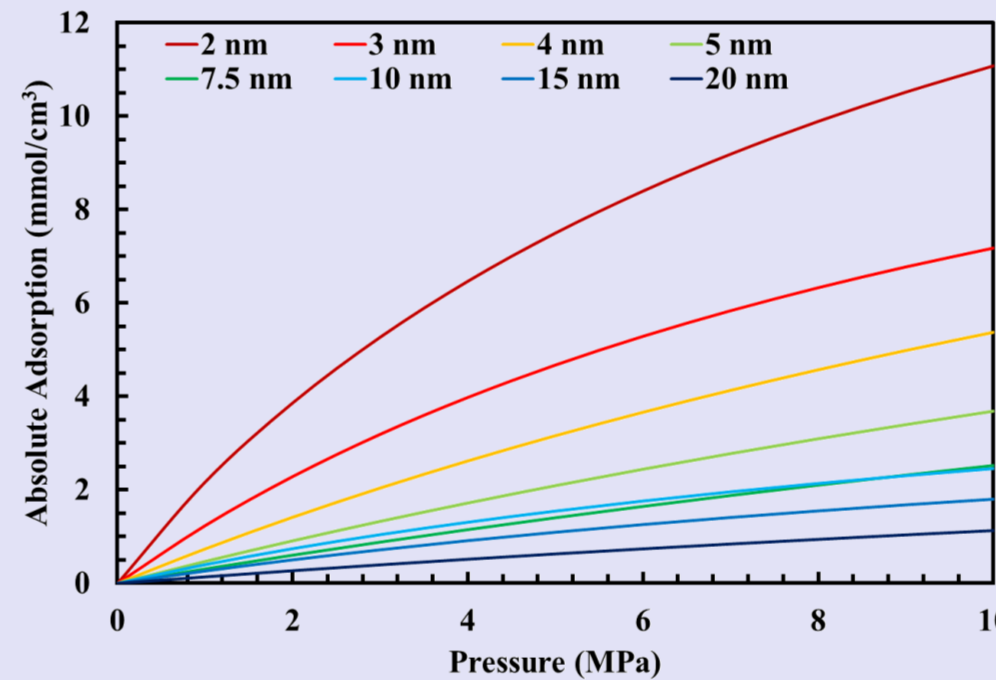
Coulomb interaction:  $U_C = \sum_{non-bonded} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$

Lennard-Jones interaction:  $U_{LJ} = \sum_{non-bonded} 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right]$

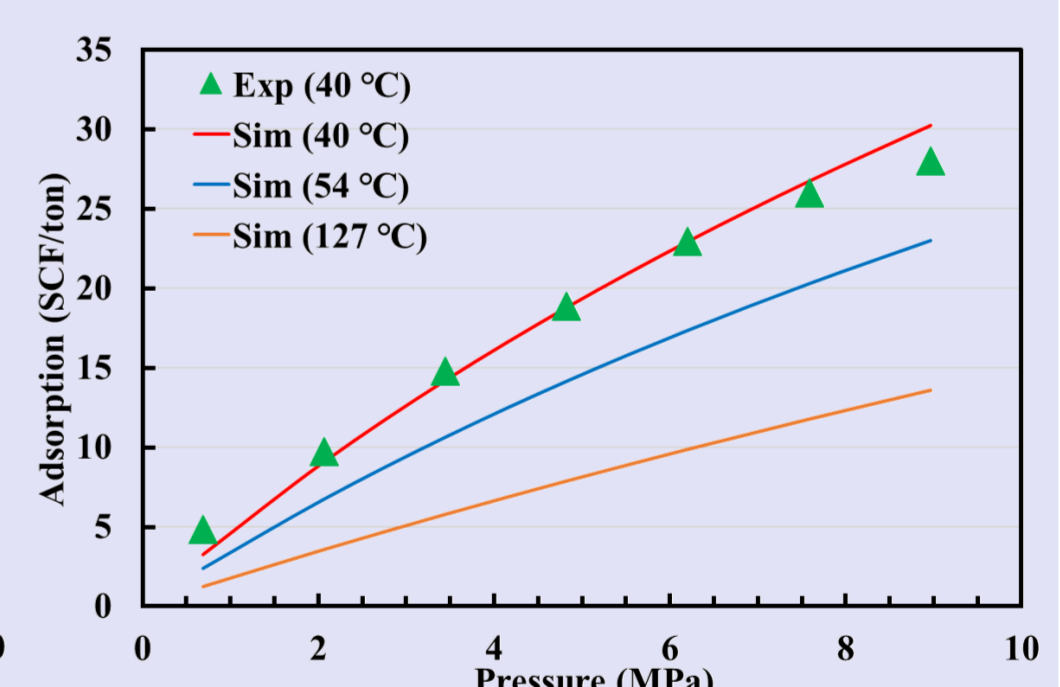
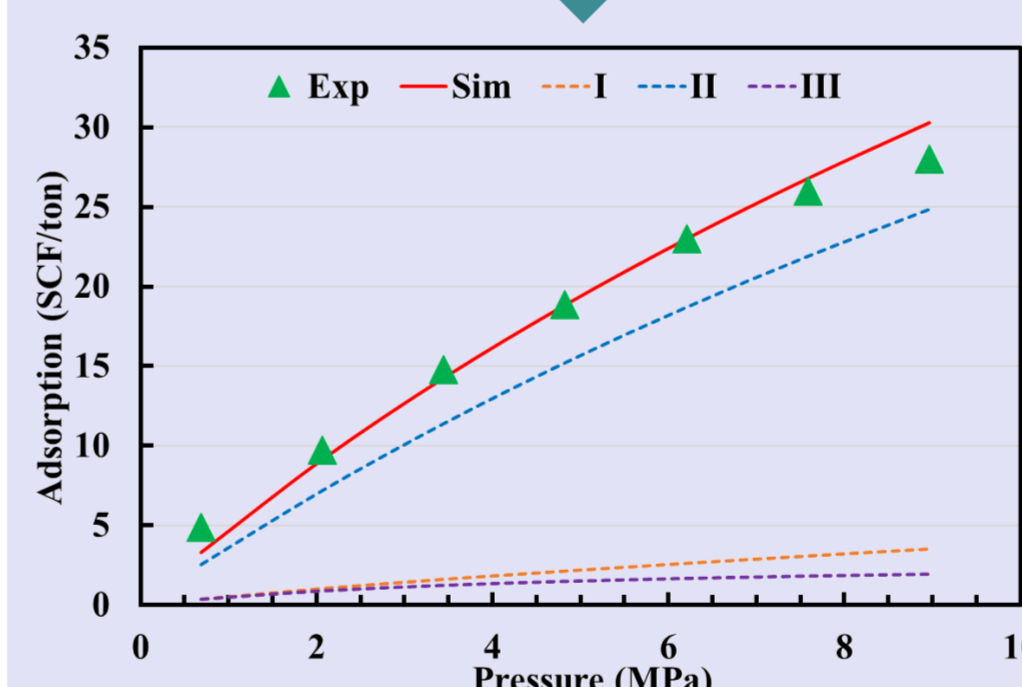


## シミュレーション結果と考察

2-20 nm 孔隙内の吸着等温線



孔隙サイズが小さいほど単位体積当たりの吸着量が大きくなる



## 結論

- ケロジェンモデルを用いたMDシミュレーションにより、2-20 nm幅のケロジェン孔隙内のメタンガス吸着量を計算できた。また、孔隙サイズが小さいほど単位体積当たりの吸着量が大きいことが確認された。
- 本シミュレーションで得られたメタン吸着量は、多くの仮定を設けた上で、Marcellusのシェールサンプルを用いた実験で得られた吸着値と非常に近い値となった。今後シェールガス資源量評価の為に、他のシェールサンプルを用いた、メタン吸着等温線の計算を行なう期待される。