

分子動力学を用いた地熱流体の電気伝導度に対する温度・圧力・NaCl濃度の影響

Effects of temperature, pressure and NaCl concentration on electrical conductivity of geothermal fluid using molecular dynamics

*榎丸 眞¹、Cannon James²、澤山 和貴³、北村 圭吾⁴、藤光 康宏⁵

*Makoto Enokimaru¹, James Cannon², Kazuki Sawayama³, Keigo Kitamura⁴, Yasuhiro Fujimitsu⁵

1. 九州大学大学院工学府共同資源工学専攻、2. 九州大学大学院工学研究院機械工学部門、3. 九州大学大学院工学府地球資源システム工学専攻、4. 九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所、5. 九州大学大学院工学研究院地球資源システム工学部門

1. Graduate school of engineering, Cooperative Program for Resources Engineering, Kyushu University, 2. Faculty of Engineering, Department of Mechanical Engineering, Kyushu University, 3. Graduate school of engineering, Department of Earth Resources Engineering, Kyushu University, 4. International Institute of Carbon Neutral Energy Research, Kyushu University, 5. Faculty of Engineering, Department of Earth Resource Engineering, Kyushu University

地熱流体の挙動を把握することは、持続的な地熱資源開発を実現する上で極めて重要である。地熱流体の挙動は、一般的に物理探査によって評価されることが多く、中でも地下の比抵抗構造から地下構造を推定する電磁探査は、地熱流体の比抵抗値が低いことからその分布把握によく用いられる。ここで、流体の電気的特性は温度・圧力・イオン濃度によって変化するため、MT法をはじめとした電磁探査によって地下構造をより定量的に解釈するためには、これらの条件が流体の電気的特性にどのような影響を与えるか調べる必要がある。しかし、現在存在するデータは地熱流体の電気的特性の温度・圧力・イオン濃度依存性を評価するには十分でない。そのため、本研究では地熱流体、中でもNaCl流体の電気的特性の温度・圧力・NaCl濃度条件に対する依存性を調べることを目的とした。地熱地域の条件下における電気伝導度の測定は困難であるため、本研究では分子動力学シミュレーションを用いることで、NaCl流体の電気伝導度を算出した。分子動力学シミュレーションソフトウェアとしてLAMMPS(ver.2017)を用い、電気伝導度算出にはGreen-Kuboの公式を使用している。さらに、本研究で算出した結果は既存のデータからの外挿部分にあたることから、本研究が算出したデータの妥当性を考慮する必要があるため、先行研究の実験結果と本研究の結果を比較し、その妥当性を検討した。本研究が対象とする温度・圧力・NaCl濃度条件(温度400-600K、圧力5-30MPa、NaCl濃度0.3-2.0mol/L)でNaCl流体の電気伝導度を算出し、それらの条件に対する電気伝導度の依存性を確認した。本研究の結果からNaCl流体の電気伝導度に温度依存性が認められ、温度上昇に比例して電気伝導度は増加するが、温度約550Kで電気伝導度はピークを示したち減少するという先行研究の実験結果と同様の傾向がみられた。NaCl濃度1.0mol/L、圧力30MPa条件下において、温度400Kとピーク温度550Kを比較すると、電気伝導度は9.2S/m増加し、ピーク後の600Kでは電気伝導度に0.8S/mの減少が認められた。これらの傾向は先行研究の結果と一致している。また、電気伝導度の圧力依存性に関しては、本研究が対象とする条件範囲内ではほとんどみられなかった(最大1.4%)。さらに、電気伝導度はNaCl濃度の上昇に比例して増加し、温度500K、圧力30MPa、濃度0.3-2.0mol/Lの条件下において、電気伝導度は約31S/m増加した。これらの結果から、地熱地域の条件下におけるNaCl流体の電気伝導度は、イオン濃度による影響が最も支配的であることが示された。本研究によって作成した地熱地域の条件下におけるNaCl流体の電気伝導度データベースは、MT法をはじめとした電磁探査の解釈精度の向上に寄与することが期待される。

キーワード：電気伝導度、分子動力学、地熱流体、MT法

Keywords: electrical conductivity, molecular dynamics, geothermal fluid, magnetotelluric