

ΜΟΡΙΑΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΦΥΣΙΚΟΥ ΑΕΡΙΟΥ ΚΑΙ ΥΓΡΩΝ ΡΗΓΜΑΤΩΣΗΣ ΣΕ ΠΟΡΩΔΗ ΣΤΕΡΕΑ ΣΧΙΣΤΟΛΙΘΙΚΩΝ ΣΧΗΜΑΤΙΣΜΩΝ

Α. Δ. Περιστεράς^{1,*}, Κ. Δ. Παπαβασιλείου¹, Β. Κ. Μιχάλης¹, Μ. Βασιλειάδης¹, Ι. Γ. Οικονόμου^{1,2}

¹ Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης & Νανοτεχνολογίας, Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών «Δημόκριτος», Αθήνα, Ελλάδα

² Texas A&M University at Qatar, Chemical Engineering Program, Doha, Qatar

(*I.peristeras@inn.demokritos.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σχιστολιθικό **αέριο** είναι το φυσικό αέριο που εντοπίζεται παγιδευμένο σε σχιστολιθικούς σχηματισμούς. Η τεχνική εξόρυξης του είναι η ρηγμάτωση (fracturing) των πετρωμάτων στους γεωλογικούς σχηματισμούς που τα φιλοξενούν με την βοήθεια υγρών (fracturing fluids) τα οποία διοχετεύονται στις υπάρχουσες γεωτρήσεις υπό υψηλή πίεση. Τα υγρά ρηγμάτωσης είναι κατά βάση υδατικά διαλύματα με πλήθος πρόσθετων διαφορετικής λειτουργικότητας (υποβοήθηση της έναρξης των ρωγμών, έλεγχος του ιξώδους, αποφυγή δημιουργίας εναποθέσεων, αντιβιοτικά κ.α.). Παράλληλά με το μεγάλο ενδιαφέρον για την εκμετάλλευσή του, υπάρχουν αρκετές ανησυχίες σχετικά με το περιβαλλοντολογικό αποτύπωμα της διεργασίας εξόρυξής του. Σε αυτό το πλαίσιο, παρουσιάζονται αποτελέσματα των εργασιών μας^[1,2,3] που αφορούν στην μελέτη των κύριων συστατικών των σχιστολιθικών σχηματισμών και της συμπεριφοράς του φυσικού αερίου και απλοποιημένων μοντέλων υγρών ρηγμάτωσης στους πόρους των υλικών αυτών με μεθόδους μοριακής προσομοίωσης. Ο στόχος είναι η καλύτερη κατανόηση της διεργασίας εξόρυξης με σκοπό την συνεισφορά στην προσπάθεια βελτιστοποίηση της παραγωγής και την εκτίμηση των περιβαλλοντολογικών επιπτώσεων της.

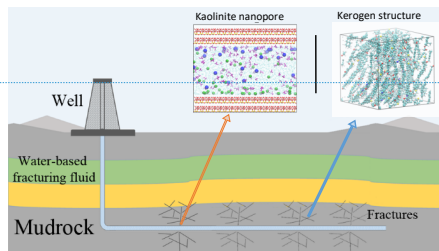
Η μελέτη μας επικεντρώθηκε στα ακόλουθα συστήματα:

α) **κηρογόνο (kerogen)**: Αποτελεί το σύνολο του ολικού οργανικού περιεχομένου το οποίο σχετίζεται με την δημιουργία του αερίου και την δυνατότητα εκμετάλλευσης του σχιστολιθικού. Αν και η χημική σύσταση των κηρογόνων μπορεί να αναλυθεί, εντούτοις η ακριβής δομή τους είναι άγνωστη. Χρησιμοποιώντας αντιπροσωπευτικά μόρια για ώριμα κηρογόνα τύπου II^[4], αναπτύξαμε μεθοδολογία για τη δημιουργία χαρακτηριστικών μικροπορώδων δομών και την λεπτομερή ανάλυση του πορώδους τους. Με βάση αυτή τη μεθοδολογία, δημιουργήθηκε ένα σύνολο δομών το οποίο μπορεί να αναπαράγει στατιστικά τα χαρακτηριστικά πορώδους πραγματικών δειγμάτων. Σε αυτές τις δομές εξετάστηκε η ρόφηση και η διάχυση σχιστολιθικών αερίων και μιγμάτων τους.

β) **καολινίτης (kaolinite)**: Είναι ένα από τα κυριότερα αργιλοπηριτικά ορυκτά των πετρωμάτων των σχιστολιθικών σχηματισμών. Μελετήθηκε η συμπεριφορά απλών προτύπων υγρών ρηγμάτωσης σε μεσοπόρους καολινίτη. Τα υγρά ρηγμάτωσης προσεγγίζονται σαν υδατικά διαλύματα αλάτων, με πρόσθετα μεθανόλη ή κιτρικό οξύ. Με χρήση προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής, αναλύθηκε η κινητικότητα των συστατικών σε συνάρτηση με την απόστασή τους από την επιφάνεια των πόρων, η δημιουργία συσσωματωμάτων των συστατικών τους και ο μηχανισμός ρόφησης αυτών στις επιφάνειες του πόρου.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Papavasileiou, K. D.; Michalis, V. K.; Peristeras, L. D.; Vasileiadis, M.; Striolo, A.; Economou, I. G. (2018) The Journal of Physical Chemistry C, 122 (30), 17170–17183.
- [2] Vasileiadis, M.; Peristeras, L. D.; Papavasileiou, K. D.; Economou, I. G. 2018, The Journal of Physical Chemistry C.
- [3] Vasileiadis, M.; Peristeras, L. D.; Papavasileiou, K. D.; Economou, I. G. (2017) Energy & Fuels, 31 (6), 6004–6018.
- [4] Ungerer, P.; Collell, J.; Yiannourakou (2015), Energy & Fuels 2015, 29 (1), 91–105.



Εικόνα 1: Σχηματική αναπαράσταση γεώτρησης σε πεδίο παραγωγής σχιστολιθικού αερίου.

Deleted: ύ

Deleted: α

Deleted: 1

Deleted: ε