

管理番号

2024 年度「深田研究助成」研究報告書概要

（深田地質研究所のホームページで公開します）

研究課題名 （和文）	効率的な水素地下貯蔵を目指した水素の相対浸透率改善法の研究		
研究課題名 （英文）	Investigation of the Improvement of Hydrogen Relative Permeability for Efficient Underground Hydrogen Storage		
研究代表者	氏名	（漢字）	小林 和弥
		（カタカナ）	コバヤシ カズヤ
		（英文）	Kazuya Kobayashi
	所属機関・職名		京都大学大学院工学研究科・助教

概要（600 字～800 字程度にまとめてください。図表、写真添付の場合は 1 ページ以内 2 枚まで）

本研究は効率的な水素地下貯蔵の実現を背景として、多孔質媒体中の水素挙動を把握するため、水素と岩石表面の相互作用を支配する濡れ性の改善に着目した。濡れ性の変化は水素-水系の相対浸透率を変化させる。水素に対して溶解性を有する新規薬剤で濡れ性変化を引き起こす最終目標とし、第一段階として、水素を含む系における濡れ性の基礎的理解を目的とし、水溶性の濡れ性変化剤の効果を接触角測定により検証した。加えて分子シミュレーションによるアルカンの水素に対する溶解度を予測した。アルカンは濡れ性変化剤の基本骨格と考えられる。

接触角測定では、高耐圧セル内に白雲母基盤を設置し、純水と CTAB 水溶液の 2 種類の水滴を用いて、二酸化炭素（10 MPa, 250 kPa）と水素（250 kPa）雰囲気下で測定を行った。分子シミュレーションでは、Gibbs Ensemble Monte Carlo(GEMC)法を用いて水素-炭化水素系の二相平衡状態における相互溶解度を計算した。

結果として、接触角測定実験では、水素と二酸化炭素の白雲母表面での接触角に大きな違いは見出されなかった。二酸化炭素を用いた系では 10 MPa と 250 kPa で濡れ性変化剤の効果が反転し、250 kPa では接触角を低下させる（水濡れ性を促進する）のに対し、10 MPa では接触角を増加させる（水濡れ性を抑制する）ことが明らかになった。この結果は、貯留層の圧力変化が濡れ性変化剤の効果に影響を与える可能性を示唆しており、圧入・引き出し圧力範囲と濡れ性変化剤の効果に関するさらなる検証の必要性が指摘された。

分子シミュレーションによる水素溶解度予測では、水素-炭化水素系において、相互作用パラメータの補正係数を導入することで、実験値を再現することができた。さらに、炭化水素の構造異性体を用いたシミュレーションで、メチル基数の増加に伴い水素溶解量が大きく増加する傾向が確認された。MD シミュレーションの解析から、メチル基が水素分子との相互作用を高める一因であることが示唆され、枝分かれ構造が高溶解性を示すという水素溶解性薬剤の設計指針が提案された。

本研究によって、接触角測定と分子シミュレーションを通じて、水素環境下での界面活性剤の挙動解明と、高溶解性を示す水素溶解性薬剤の設計指針を提案し、効率的な水素地下貯蔵の実用化に向けた基礎的知見を提供することができた。

発表文献等（この研究を発表した雑誌・図書・学会等について記入してください。印刷中は in press と記入してください。著者名は省略せず、全てを記入し、自分の名前に下線を引いてください。欄が足りない場合は、増やして記入してください。）

雑誌	論文標題					
	著者名					
	雑誌名					
	ページ	～	発行年		巻号	
雑誌	論文標題					
	著者名					
	雑誌名					
	ページ	～	発行年		巻号	
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ページ	
学会等	演題	分子シミュレーションによる水素－炭化水素系における水素親和性向上メカニズムの解明				
	発表者名	喜多涼介、 <u>小林和弥</u> 、村田澄彦				
	学会名	石油技術協会春季講演会			発表年	2025

英文抄録（100 語～200 語程度にまとめてください。）

This study aims to optimize underground hydrogen storage, a key technology for climate change mitigation. The research focuses on improving the wettability to control hydrogen behavior, which affects the relative permeability of the hydrogen-water system. The ultimate goal is to develop novel hydrogen-soluble agents for wettability alteration. Initial steps involved experimentally assessing the effect of water-soluble wettability modifiers on contact angles in hydrogen-containing systems. Additionally, molecular simulations predicted hydrogen solubility in alkanes, considered as the basic structure of wettability modifiers.

Contact angle measurements were performed in a high-pressure cell with muscovite substrates, using ultrapure water and surfactant solutions under CO₂ (10 MPa, 250 kPa) and H₂ (250 kPa) atmospheres. Gibbs Ensemble Monte Carlo (GEMC) simulations calculated mutual solubility in hydrogen-hydrocarbon two-phase equilibrium.

Results showed no significant contact angle difference between H₂ and CO₂ on muscovite surfaces. However, for CO₂ systems, CTAB's effect reversed with pressure: it promoted hydrophilicity at 250 kPa but inhibited it at 10 MPa. This suggests that reservoir pressure changes influence wettability modifiers, indicating a need for further research on injection/withdrawal pressure ranges. Molecular simulations accurately reproduced experimental hydrogen solubility. Simulations with hydrocarbon isomers revealed increased hydrogen dissolution with more methyl groups. Molecular dynamics analysis indicated methyl groups enhance interactions with hydrogen, proposing a design guideline for high-solubility hydrogen agents with branched structures. This research provides fundamental insights for efficient underground hydrogen storage.