|  |  |
| --- | --- |
| **DOKTORAND:** | Henrik Andersen Sveinsson |
| **GRAD:** | Philosophiae doctor |
| **FAKULTET:** | Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet |
| **INSTITUTT:** | Fysisk institutt |
| **FAGOMRÅDE:** | Kondenserte fasers fysikk (fysikken til faste stoffer og væsker) |
| **VEILEDERE:** | Anders Malthe-Sørenssen, Bjørn Jamtveit |
| **DISPUTASDATO:** | 1. oktober 2019
 |
|  |  |
| **AVHANDLINGENS TITTEL:** | *Molecular dynamics modeling of mechanical failure processes in methane hydrates* |
|  |  |
| **Når metangass lekker opp i elver og innsjøer ser vi den som bobler i vannet. Men om trykket blir høyt nok kan metanet gå inn spesielle is-liknende krystallstrukturer sammen med vann: gasshydrater. Gasshydrater dannes flere steder på jorda, og finnes under havbunnen utenfor kysten mange steder og under tundraen i Sibir. Der det finnes gasshydrater blandes de med sedimentene (sand, grus, leire, gjørme etc.) og selve gasshydratet bidrar da avgjørende til å holde sedimentet sammen. Dermed blir også gasshydratene viktige for hva som kan skje med sedimentet under ekstern påvirkning, slik som klimaendringer eller boring etter olje og gass.**  Vi har studert hva som skjer med gasshydratenes krystallstrukturer når de strekkes på ulike måter og sammenlignet deres oppførsel med hvordan krystallstrukturene til vanlig vann-is oppfører seg. Basert på molekylsimuleringer foreslår vi at gasshydratene ikke omdanner krystallstrukturen sin like mye som vann-is for å ta imot strekket. I naturen finnes både vann-is og gasshydrater som *polykrystaller,* det vil si flere enslige krystaller festet sammen*.* Enslige is- og gasshydrat-krystaller har atomer organisert i regelmessige gittere som holdes sammen av hydrogenbindinger. Hvis to slike gittere settes sammen slik at de ikke helt passer sammen, vil krystallstrukturen bli litt ødelagt akkurat der de to krystallene møtes, på *korngrensen*.  Når vi strekker og bøyer på gasshydratene i molekylsimuleringer ser vi at de er tilbøyelige til korngrense*glidning* – de enkelte krystallene glir i forhold til hverandre. Is derimot, er tilbøyelig til korngrense*migrasjon –*krystallene spiser hverandre opp, slik at noen blir større og andre blir borte.  Når krystallene i en klump med is spiser hverandre, blir det færre enkeltkrystaller i isklumpen, og gjennomsnittsstørrelsen på de enkelte krystallene går opp. Det er velkjent fra materialvitenskap at det gjør isklumpen svakere, og det blir mer sannsynlig at den sprekker helt opp når den strekkes på. Dessuten tar selve krystallstrukturen til is opp strekket ved å flytte på seg. I gasshydratene derimot, nekter de enkelte krystallene å spise hverandre, og tvinges da heller til å skli mot hverandre langs korngrensene. Når de har sklidd litt reparerer korngrensene seg, slik at polykrystallen som helhet er relativt uendret. Vi tror dette kan være grunnen til at gasshydrater er sterkere enn vann-is.  |
|  |