

ポリエチレンという最も汎用のプラスチック材料は、分子軸を力の方向に揃えることができれば鋼鉄より強い材料になるといわれているが、現実には高々300kg/cm<sup>2</sup>の降伏応力でしかない。このことも計算機上で分子軸に平行な方向と垂直な方向で引っ張り試験をしてやれば簡単に判ることであるが、実験室では確かめようがない。

実験すれば済むことを計算機で行うと何倍もの時間と金が要るが、手にすることのできないものについて使うと、十分な戦力として考えることができる。

NAKAMURA Kazuo (1997): Evaluation of physical properties of methan hydrate by computer simulation.

<受付: 1996年12月4日>

## メタンハイドレートの結晶構造

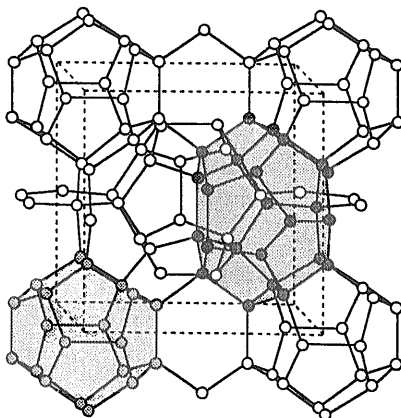
メタンハイドレートはメタンと水から成る氷状の物質であり、クラスレート(包接化合物)の一種である。その結晶は水分子の作る籠状の結晶格子の中にメタン分子が取り込まれた構造をしている。ガス分子の大きさと種類によりハイドレートは構造I、構造IIの2種類の結晶構造をとることが知られている。両者とも結晶構造は等軸晶系に属し、含有されるガス分子の大きさが5.2オングストロームより小さいと構造Iを、5.9から6.9オングストロームでは構造IIを作る。

ガス分子がメタンであるメタンハイドレートの場合は構造Iの結晶構造をとる。メタン分子は水分子の構成する2個の12面体(空隙径7.88オングストローム)および6個の14面体(空隙径8.6オングストローム)の籠状格子に含まれている。構造Iは全体で46

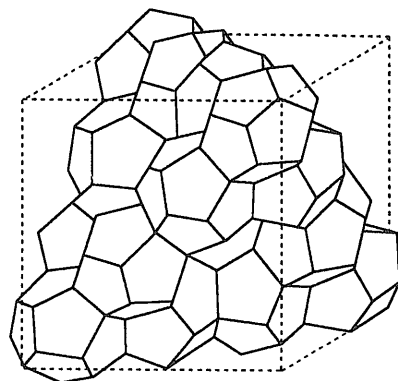
個の水分子と8個のメタン分子から構成され、理論化学式はCH<sub>4</sub>・5.75H<sub>2</sub>Oと表される。すなわち水1リットルにメタンガスが216リットル取り込まれる。

ガス分子がプロパンなどのように大きくなるとハイドレートは構造IIとなる。構造IIは空隙径7.82オングストロームの五角12面体16個と、空隙径9.46オングストロームの16面体8個から構成される。この場合8個の16面体のみがガス分子で充填される。全体として136個の水分子と8個のガス分子から構成され水和数は17となる。従って、ガス含有量は水1リットルに対してガス73リットルである。

最近ではこの他に、より大きな構造を持った構造Hと呼ばれるハイドレートも存在するとされ、盛んに研究が行われている。(今井 登)



構造 I



構造 II