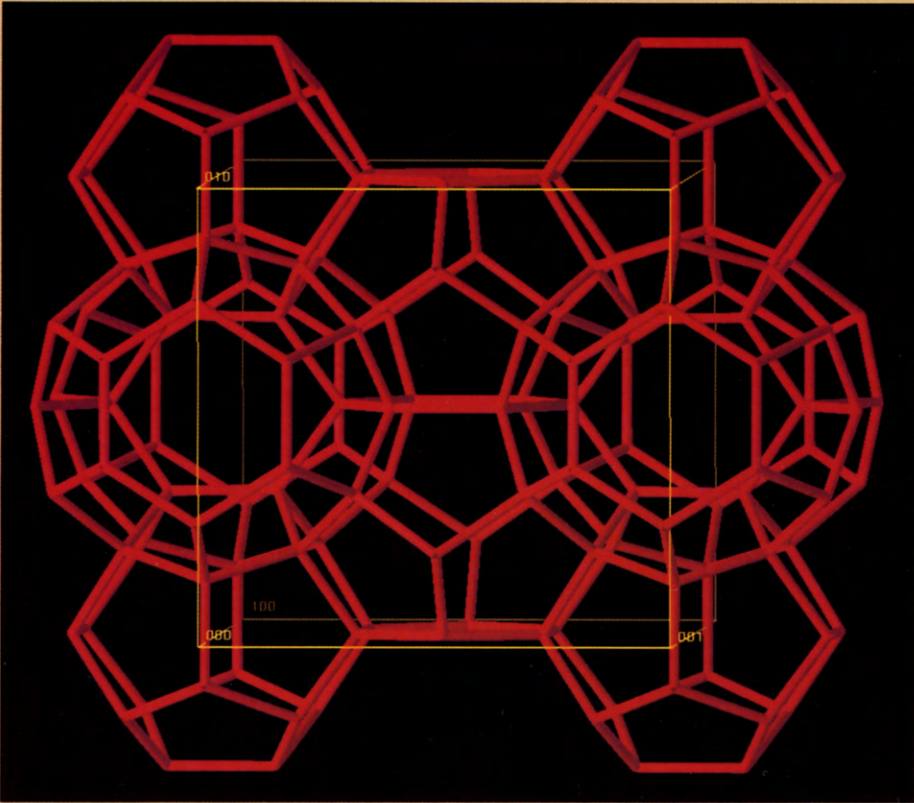
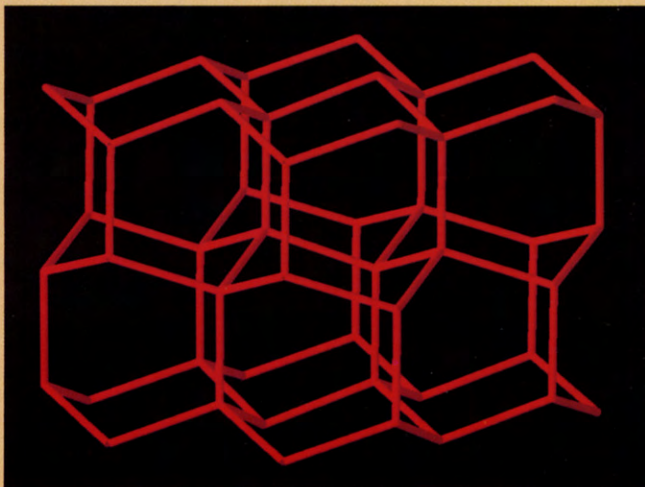


コンピュータ・シミュレーションによる メタンハイドレートの物性値推算

大阪ガス株式会社ではメタンハイドレートの資源化研究の一環として、メタンハイドレートの基礎物性値の測定を行っている。メタンハイドレートは常温常圧では不安定である上、高純度の合成結晶サンプルを得るのが難しいので、天然・合成サンプルによる測定値を補完し、ハイドレート中のメタンの充填率や、混合ガス組成によるハイドレートの物性値(応力-歪み線図、ヤング率等の力学的特性や比熱、膨張率の熱的特性)の変化を推定するために計算化学の手法を検討した。(詳しくは本文32-35頁参照) <大阪ガス(株)研究開発部基盤研究所 中村和夫>



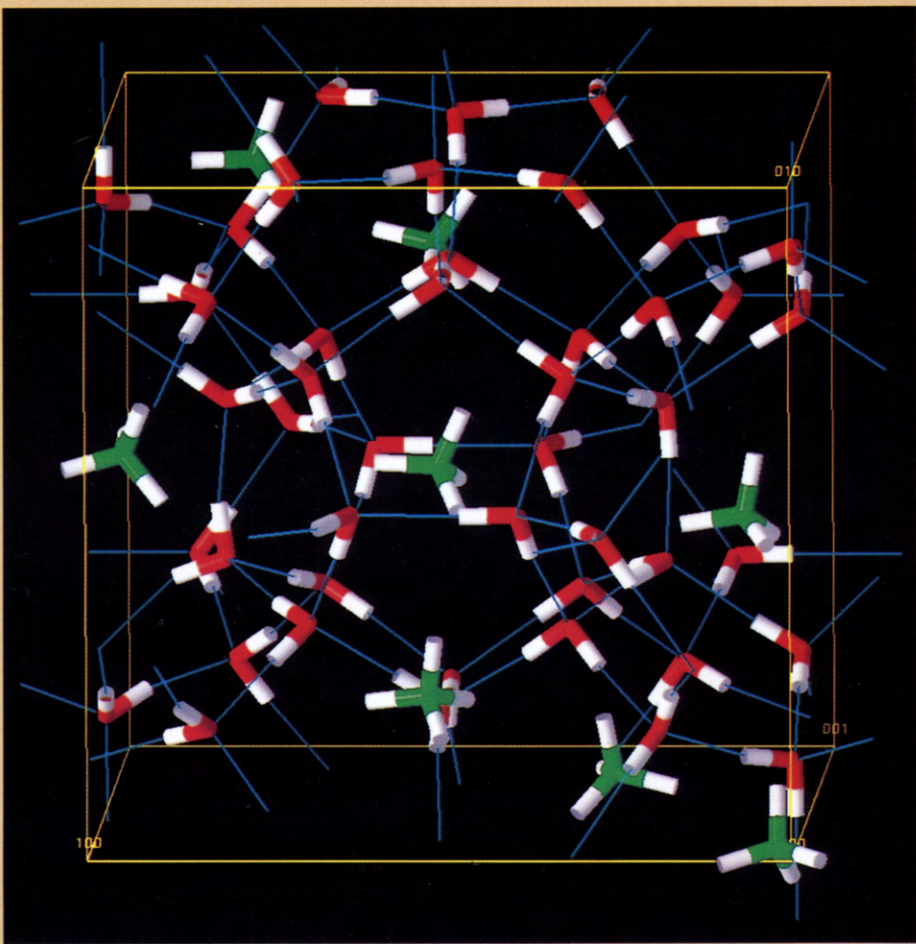
1.ハイドレートのI型構造



2.氷の結晶構造



3.単位格子モデル



4.メタンハイドレートの構造



5.メタンハイドレート(スペース・フィリングモデル)



6.正12面体ケージとエタン