

表紙の図について

「メタンハイドレートの形成」

メタンハイドレート (MH) は、メタンを大量に含んだ氷で、地球上では深海底に存在し、日本近海にも確認されています。石油に代わる燃料資源として注目される一方、温暖化ガスの潜在的な発生源として警戒されています。

天然のMHは白いシャーベット状の氷のように見えますが、分子スケールで見ると、その構造は氷とはかなり違っています。水分子（図では赤色と水色の球が、それぞれ水分子の酸素原子と水素原子をあらわしています）が、水素結合（図中の青棒）で互につながりあってネットワークを作り、正12面体や14面体のカゴ状の構造をくみだして、その中にメタン分子（図では緑色の球）をひとつずつかかえることで、玉子のケースのようにして高密度のメタンを安定に保持しています。

このような複雑な構造も、メタンハイドレートが形成される条件のもとでは、自然に作られています。私たちは、このような構造がどういう機序で形成されるのかを、分子動力学法を用いて調べています。表紙図には、メタンと水を強制的に混合し、温度を0℃以下に下げた直後からのスナップショットを描きました。はじめのうちは、水とメタン分子は単にまざりあっているだけですが、徐々に水分子がメタン分子の周囲に整列しはじめ、ひとつのメタン分子をつつんだ多面体（図ではサイズによって青～緑色で表現）が形成されます。多面体を形成した水は凍りつくわけではなく、ゆっくりと結合の再構成を続け、徐々に多面体同士の再配列をひきおこします。こうして、長い複雑なプロセス（といっても実時間ではほんの一瞬ですが）を経て、徐々にきれいな結晶構造に変化していくと考えられます。

なお、この研究に必要な計算（分子動力学から作画まで）はすべて本研究室のOpenMosixクラスタで行っています。

（名古屋大学大学院理学研究科：松本正和 北岡勇樹）