

鉱物表面近傍の水と水溶液の分子シミュレーション

Molecular Simulation of water and aqueous solution in the vicinity of mineral surfaces

河村 雄行[1]

Katsuyuki Kawamura[1]

[1] 東工大・理・地球惑星

[1] Earth and Planetary Sci., Tokyo Inst. Technology

いくつかの鉱物について、その表面近傍における構造と物性を、分子シミュレーションを用いて調べた。鉱物はスメクタイト、石英、ペリクレーズ、岩塩などである。構造は、表面からの距離の関数として、水分子の配向性を統計的に調べた。物性として、同様に、表面からの距離の関数として、拡散係数、粘性係数、および密度を調べた。

いくつかの鉱物について、その表面近傍における構造と物性を、分子シミュレーションを用いて調べた。用いた手法は主として分子動力学法である。

分子シミュレーションで用いた原子・分子間相互作用モデルはわれわれが開発した、2体および3体関数からなる汎用のものである。

鉱物はスメクタイト（パイデライト、分子表面と端面）、石英（柱面、Si-O-H修飾）、ペリクレーズ（(100)面）、岩塩（(100)面）などである。

水および水溶液構造としては、表面からの距離の関数として、水分子の配向性を統計的に調べた。また水溶液については溶質の溶存形態も調べた。

物性としては、同様に距離の関数として、表面からの距離の関数として、拡散係数、粘性係数、および密度を調べた。

結果は、スメクタイト分子表面では水は強く構造化され、水分子1層(0.3nm程度)の電気2重層と、1nm程度の拡散層を形成した。

ペリクレーズおよび岩塩では弱く構造化され、石英ではまったく構造化されなかった。

粘土分子端面やその他の鉱物表面についても触れる。