

型石英結晶粒間超薄膜水の電気的物性の数値シミュレーション

Molecular dynamics calculation on the electric properties of the ultra-thin water film between low quartz surfaces.

佐久間 博[1], 河村 雄行[2], 大槻 憲四郎[1]

Hiroshi Sakuma[1], Katsuyuki Kawamura[2], Kenshiro Otsuki[3]

[1] 東北大・理・地球科学, [2] 東工大・理・地球惑星

[1] Earth Sci. Tohoku Univ, [2] Earth and Planetary Sci., Tokyo Inst. Technology, [3] Earth Sci., Tohoku Univ.

現在までに短期的地震予知のターゲットとなっている電磁気現象の発生メカニズムに関して、いくつかのモデルが提唱されている。ここで我々はバルク水と結晶粒間超薄膜水の相転移に着目した電磁気異常の発生メカニズムを提案する。超薄膜水の電気的物性を計算するために分子動力学法を用いた。その結果、型石英結晶表面間の超薄膜水の電気双極子モーメントに異方性が生じ、静的誘電率がバルク水に比べて減少した。この結果は我々のモデルを支持するものである。今後は純粋な水だけでなく、NaCl や不純物が溶け込んだ水を仮定して計算しなければならない。

地震発生の前兆現象として電磁氣的異常が発生することは良く知られたことであり、現在、短期的地震予知実現に向けて、多くの研究者が電磁波や電位差（van 法）などを広い周波数帯域で観測している。電磁氣的異常の発生メカニズムに関しては圧電補償電荷説、界面導電現象、圧力刺激電流、帯電結晶転位モデルなどの諸説がある。地震の電磁氣的異常はこれらのメカニズムが相互に関連しあって発生しているものと考えられる。我々は、結晶粒界でのバルクの水と超薄膜水との間での相転移に伴う誘電率変化に着目した新たなモデルを提案する。分子動力学の研究から結晶粒間の水は厚さが約1nm以下になると構造化された水に相転移することが知られている。一般に極性液体は固化に際し、静的誘電率が急激に低下し、屈折率の2乗に近い値となる。しかし水の場合は固化時に静的誘電率は上昇し、-70℃まで上昇し続けた後に下降する。ただしこれは氷Ⅰ相の場合の現象であり、氷Ⅱ相などでは誘電率が急激に減少する。この事実は構造化された結晶粒間水の静的誘電率がバルク水の誘電率と比べて激減する可能性があることを意味している。そこで我々は、地殻応力の変化などによって結晶粒間の超薄膜水の厚さが臨界値を横切ってわずかでも変化すれば、急激に変位電流が発生して電磁気異常の原因となるというモデルを提案する。超薄膜水はいわば大変鋭敏な歪計ともいえるべきもので、このわずかな歪を誘電率の変化でモニターすることによって地震予知の道具にしようとするものである。また構造化した水の誘電分散領域はバルク水と比較して低周波側に移動することが予想され、このモデルの妥当性を誘電率の誘電分散領域で検証できるという利点もある。

我々はこのモデルの妥当性を検討するため、分子動力学法を用いて原子レベルで水分子の挙動を計算し、水の誘電率を計算した。結晶表面には地殻の主要な鉱物の1つである型石英を採用した。

型石英結晶粒間超薄膜水（厚さ1nm）の配向性に構造化が見られないが、結晶表面に平行な方向に3分子層の構造化がみられた。水の静的誘電率はバルク水と比べておよそ半減した。この結果は我々のモデルを支持するものである。今後は、上部地殻に普遍的な長石類の結晶粒間超薄膜水の誘電率を計算し、周波数依存性についても考慮していかなければならない。また、これまでは純粋な水を計算してきたが、上部地殻内の水にはNaClや二酸化炭素を含め、様々な不純物やイオンが溶け込んでいるはずであり、それらが水の誘電率に大きな影響をもたらしていると思われる。これら不純物を考慮して誘電率を計算することも必要である。