

## 分子動力学法による石英粒界の水薄膜の複素誘電率

Molecular dynamics calculations on the complex dielectric constant of a water thin film embedded in 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.

### 1. はじめに

地殻中で結晶粒界に存在する流体は物質の溶解、析出、また電気伝導度に大きな役割を果たしている。物質の溶解、析出に果たす流体の役割と流体の分布状態は誘電率によって多くのことがわかる可能性がある。バルク水のように静的誘電率に異方性のない溶媒の場合、静的誘電率はイオンの溶解度と比例関係にある。すなわち何らかの原因で水の誘電率が変化すればイオンの溶解や析出に影響を及ぼすことになる。誘電率の周波数依存性は物質の分子構造を大きく反映する。たとえばバルク水の誘電分散領域は  $10^4$  Hz であるが、氷 Ih のそれは  $10^3$  Hz となる。これは水分子が構造化したことにより高周波の外部電場に応答できなくなることによる。もし結晶粒界の水が結晶表面の影響で構造化しているとすれば、水の誘電分散領域は低周波側に移動するはずである。この誘電分散領域が実際に測定できれば、地殻中に存在する水の状態を知る上で重要な指標となり得る。我々は結晶面の影響を強く受けているであろう厚さ数 nm の水に着目した。厚さ 1nm の水は約 3 分子層に相当する。このようなマイクロな領域の理解を実験で行うのは困難であり、分子動力学法を採用した。

### 2. 方法

分子動力学法を用いて、石英に挟まれた厚さ数 nm の水の構造、複素誘電率を計算した。計算には分子動力学プログラム“MXDORTO”を用いた。水分子は revised KKY water model を用いた。石英粒間の厚さ変化による水分子の構造、誘電率を調べるため、厚さを変えていくつかの計算を行った。

### 3. まとめ

厚さ 0.8 nm の水薄膜は水素を表面に向ける形で配向し、誘電率がバルク水の約 70% の値をとった。もし単純に水の誘電率とイオンの溶解度が比例関係にあるならば、応力の変化により厚さ数 nm の水が形成されると、誘電率が減少する効果によりイオンが晶出することになる。結果として電気伝導度が減少することも考えられる。Shubin and Kekicheff (1993) は雲母表面間ではあるが、厚さ数 nm 以下の水薄膜の表面間力を表面間力測定装置で計測した。その結果この領域での水の DLVO 理論は破綻し、この原因を水の誘電率減少に求めていた。今回の分子動力学計算結果はこの実験と調和的である。また水薄膜の誘電分散領域は低周波側に移動することがわかった。

0.8 nm の水薄膜は 2~3 分子層である。どの程度の厚さの水から誘電率が変化し始めるのかを知るために、厚さの異なる水薄膜の計算結果も発表する予定である。また地殻に存在する水には NaCl や二酸化炭素が溶け込んでいる。このとき、水溶液の誘電率がどのようになるかも考察する。

### 文献

Shubin and Kekicheff, J. Colloid and Interface Sci. 1993, 155, 108.