

ブルーサイト表面での水分子配置の電子状態計算

First-principles calculation of configurations of water molecule on the brucite surface

土屋 卓久[1], 河村 雄行[2]

Taku Tsuchiya[1], Katsuyuki Kawamura[2]

[1] 東工大院理工, [2] 東工大・理・地球惑星

[1] Earth and Planetary Sci., TITech, [2] Earth and Planetary Sci., Tokyo Inst. Technology

鉱物-水複合系の振る舞いを知るには、鉱物表面と流体分子との相互作用を明らかにすることが重要である。しかしその原子・分子レベルからの理解は、実験的困難さから未だあまり進展していない。我々は計算機シミュレーションにより鉱物-水系の挙動について研究を行っているが、今回、鉱物表面に対する水(H₂O)分子などの安定配置の詳細を調べるため電子状態まで取り入れた計算を行った。本研究では鉱物のモデル表面として、層状構造をもつブルーサイト(Mg(OH)₂)の(001)表面を採用した。ブルーサイトは層状含水鉱物の典型例の一つと考えられる構造であり、この表面はまた MgO の安定表面と考えられる水素終端された (111)面と等しい構造である。

本研究では密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算法に従い計算を行なった。この際電子間の交換相関ポテンシャルに対し密度勾配補正(GGA)を適用した。結合電子の感じるポテンシャルを有効ポテンシャル(Troullier-Martins 型ノルム保存擬ポテンシャル)で表し、結合電子密度を平面波の重ね合わせで表現して計算した。ブルーサイト 2×2×1 セルのスーパーセルを取り、層間を開いて表面のモデルを作成した。この際、c 軸方向の周期境界条件の影響の十分な減少を確認した上で、c 軸長を 22 と設定した。

ブルーサイト表面に対し H₂O-1 分子の安定配位構造を探索した結果、その一つとして、水分子が Mg 直上に位置し H を表面に向けて配置する構造が見出された。これは OH 基が並ぶ親水的な表面に対する水の配位構造としては、従来一般的に考えられているものとは異なるが、ブルーサイトの層間の結合構造と一致するものであり興味深い。発表では、他の初期配置からの結果などについても発表する予定。