

粘土と粘土鉱物の分子シミュレーションと環境その場 X 線回折実験

Molecular simulations and in-situ environmental x-ray diffraction experiments of clays and clay minerals

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

分子シミュレーション（分子動力学法：MD）と環境その場 X 線回折実験を用いて、粘土と粘土鉱物の、水和、膨潤、拡散、粘性、圧密等の化学的性質・物性の詳細を検討した。

MD シミュレーションは、系に含まれる全ての原子を独立に運動するもので、mxdorto と mxdtricl（河村）を用いて行った。H₂O に関する原子間相互作用モデルは今回新たに作成したもので、水の誘電率を定量的に再現するものである。

単結晶スメクタイト（バイデライト）、その Cs 型および Ca 型、白雲母、パイロフィライトについて層間水和と膨潤挙動の詳細を MD により検討し比較した。

現実の粘土との比較のため、空気 - 水 - 粘土層状態の 3 相系の MD 計算を行った。

シミュレーション計算との比較のため、環境を制御したその場での X 線回折実験を行った。200 MPa、P(H₂O)=1 気圧までの環境での X 線回折実験の行える試料室を製作した。150 MPa までのスメクタイト（Kunigel V1）の回折実験を行い、膨潤挙動の精密測定を決めた。

1 軸圧密実験その場 X 線回折実験装置を製作し、測定を行った。

今後、分子シミュレーションはより大規模な系による現実系を模擬する計算を行ってゆく。その場 X 線回折実験では、200 MPa、15 気圧までの試料室を製作中であり、さらに水の臨界点までの試料室の製作を予定している。地殻での粘土と粘土鉱物の挙動が明らかにするためである。