

白雲母 水界面における水の構造とダイナミクス

Structure and Dynamics of Water on Muscovite Mica Surface

佐久間 博 [1]; 河村 雄行 [2]

Hiroshi Sakuma[1]; Katsuyuki Kawamura[2]

[1] 東工大地惑; [2] 東工大・理・地球惑星

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

<http://www.geo.titech.ac.jp/lab/kawamura/>

はじめに

鉱物表面近傍における水は、地殻内での物質移動や断層の摩擦強度に大きな影響を与えている。このような鉱物と接している水は、鉱物表面との相互作用やナノ空間への閉じ込めにより、その物性がバルク状態と大きく異なっていることが予想される。しかしながら、鉱物 水界面の物性を直接知るための実験・理論計算が困難であることが多く、まだよくわかっていない。最近、地殻に多く存在し、比較的实验が容易な白雲母 水界面での水の構造（密度分布）について、ナノメートルスケールの分解能を持つ X 線反射率測定で議論されている。しかしながら、X 線反射率測定からわかるのは電子密度分布であり、原子種ごとの分布を知ることが難しい。そこで我々は、白雲母 水界面の X 線反射率パターンを分子シミュレーションから導出する方法を確立し、実験結果と反射率パターンを直接比較することで、雲母 水界面における水の構造を高分解能で評価した。また水のダイナミクスに関しては、表面力測定装置（SFA）を利用した最近の結果と比較し、詳細な挙動を解析した。

結果と議論

分子シミュレーションから導出した X 線反射率パターンは実験結果とよく一致した。このことは計算で得られた雲母 水界面の構造が、実験で得られた X 線反射率をよく再現していることを示す。白雲母 (001) 表面に垂直方向の水の密度分布としては 5 つの顕著なピークが表面から 1nm 程度の距離までに観察でき、これらのピークが雲母表面に直接吸着した水、雲母表面の K イオンに水和した水、これらの水に水素結合で配列した水に対応することがわかった。水和 K イオンは雲母表面上で内圏錯体として安定に存在し、その水和数は 2.9 となった。表面から 1 nm の水の粘性率はバルクの水の約 2~3 倍程度増大している。この結果は SFA を利用した粘度測定の結果とよく一致している。以上のことから鉱物表面近傍の水は表面から 1 nm 程度以内で構造化し、バルクとは性質が異なることがわかった。さらに雲母の表面の K イオンを他の 1 価の陽イオンで置き換えた場合の水の挙動の変化について報告する。