

U004-09

会場: 302

時間: 5月24日13:45-14:15

鉱物粒界水の分子シミュレーション

Molecular simulation of confined water among mineral grains

河村 雄行^{1*}

Katsuyuki KAWAMURA^{1*}

¹東京工業大学地球惑星科学専攻

¹Dept. Earth and Planetary Sciences

地殻の鉱物は、主要造岩鉱物に加えて、浅部および表層環境に関して粘土鉱物やゼオライトが主要なものである。これらの鉱物は共存する水・水溶液とともに、岩石や土壌としての力学的性質を決定付け、水・水溶液は物質移動を支配している。

これらのナノ描像をえることは実験的には容易ではなくほとんど不可能であるといえる。分子シミュレーションは原子間相互作用が与えられれば、計算可能な規模の範囲で、有効なナノ描像を与えてくれる。我々は、有効かつ精密な原子間相互作用モデルと分子シミュレーション計算およびその解析手法を開発してきた。

水・水溶液、鉱物内および鉱物間の水の挙動の分子動力学手法をおこなった。バルクと局所の拡散、粘性などに加えて、鉱物表面の濡れ性などの本質が理解できつつある。

キーワード: 水と水溶液, 地殻流体, 鉱物粒界, 分子シミュレーション, 分子動力学法, 原子間相互作用モデル

Keywords: water and aquaous solution, crustal fluid, intermineral grain, molecular simulation, molecular dynamics method, interatomic potential model