

分子シミュレーションによる地殻内塩水溶液の電気伝導度の予測

Prediction of electric conductivity of salt solutions in the earth's crust studied by a molecular simulation

佐久間 博^{1*}, 河村 雄行¹

Hiroshi Sakuma^{1*}, Katsuyuki KAWAMURA¹

¹東京工業大学 地球惑星科学専攻

¹Tokyo Tech. Depart. Earth Planet. Sci.

1. 研究背景と目的

地殻内に存在する流体は地震発生やマグマ火山活動に大きな影響を与えていると考えられており、その分布を知ることが地球科学で重要な課題である。これまで地殻内の流体分布の観測は地震波と電磁気観測を主体として行われており、それらの観測データを説明する物質科学を構築しなければならない。

岩石の電気伝導度は、塩水溶液（乾燥した岩石より6桁以上高い）の存在で大きく変化する。岩石の高電気伝導度を塩水溶液などの流体で説明する場合、岩石中での塩水溶液の濃度、温度・圧力依存性、連結度、鉱物表面の影響を考慮しなければならない。これまで高温高圧条件下での塩水溶液の電気伝導度は、低濃度（0.1 mol/kg）のみ実験データが存在し、高濃度のデータが存在しない。もし、理論計算から高濃度の電気伝導度を導出できれば、岩石の電気伝導度のモデル化に有用なデータを提供することになる。

本研究ではまず現在の原子間相互作用モデルが塩水溶液の電気伝導率と誘電率の実験値を再現するかどうかを確認し、原子間相互作用モデルの妥当性を検討する。

2. 研究方法

シミュレーションは古典分子動力学（MD）計算により行った。プログラムはMXDORTOを用い、原子間相互作用モデルにはKawamura model [1]を用いた。このモデルは、水・水溶液・氷や多くの鉱物の構造、物性をよく再現しており、固/液界面の原子分布についても信頼性の高い計算が可能である[1, 2]。当初はこの原子間相互作用モデルが、地殻内の高温・高圧条件下でどの程度信頼できるかを確認する。NaCl水溶液の粒子数を2222H₂O, 4NaClとし、実験で電気伝導度が計測されている最も高い塩濃度0.1 mol/kgで計算を行った。温度は298-1075 K, 圧力は1-4000 barを計算対象とし、実験結果[3]と電気伝導度を比較する。電気伝導度はグリーン・久保形式による電流の自己相関関数のアンサンブル平均を時間積分する方法と外部電場を与えた非平衡MD計算により導出する方法を採用し、計算精度・効率の比較を行った。

3. 結果

詳細な計算結果と原子間相互作用モデルの信頼性と開発の可能性について当日議論する。

4. 引用文献

[1]河村雄行,地球化学42, 115 (2008).

[2] Sakuma H. and Kawamura K., Geochim. Cosmochim. Acta, 73 (2009) 4100-4110.

[3] Quist A. S. and Marshall W. L., J. Phys. Chem. 72 (1968) 684-703.

キーワード: 水, 比抵抗, 分子動力学計算, 地殻流体, 固液界面, 電気伝導率

Keywords: Water, Specific resistance, MD, Geofluid, Solid-liquid interface, Electric conductivity