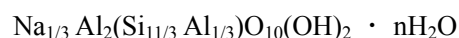


スメクタイトの層間水の分子振動スペクトルの分子動力学シミュレーション

○ 鈴木 覚¹、河村 雄行²¹独立行政法人産業技術総合研究所 深部地質環境研究センター (〒300-8567 つくば市東 1-1-1)²東京工業大学大学院 理学研究科 地球惑星科学専攻 (〒152-8551 目黒区大岡山 2-12-1)

【緒言】層状ケイ酸塩鉱物の1つであるスメクタイトを含むベントナイトは、高い止水性を持つことから、各種の廃棄物処分場等において、遮水ライナーや工学的なバリア材としての利用価値が高まっている。この高い止水性は、スメクタイトとその層間に存在する水分子の間の相互作用が主な要因であると考えられている。これまでも、スメクタイトの層間に存在する水の研究が、赤外分光法などにより盛んに行われてきたが、最近では分子シミュレーション法を用いた研究も増えつつある。本研究では、スメクタイトおよび水分子を構成する全粒子が全自由度で運動する原子間ポテンシャルモデルを用いて、スメクタイト水和物の分子動力学シミュレーションを行い、層間の水の分子内振動スペクトルを得た。さらに、スペクトルを実試料の赤外スペクトルと比較し、ピークと分子レベルの構造の対比を行った。

【方法】2:1 型粘土鉱物には、化学組成の異なる主に 6 種類の鉱物があるが、本研究では、以下の組成を持つバイデライト(*beidellite*)のシミュレーションを行った。



ここで、 n は水分子数を示す。計算は古典分子動力学法プログラム MXDTRICL を用いて NTV アンサンブルで行った。なお、シミュレーションの温度は 20°C、圧力は 0.1MPa でスケーリング法により制御した。原子間ポテンシャルモデルには、二体間中心力モデルを使用した。水分子に関しては、三体項モデルも加えた。分子振動スペクトルは、任意方向の水素の速度相関関数のフーリエ変換により計算した。

【結果および議論】計算によって得られた分子内偏光振動スペクトルを Fig. 1 に示す。全方向振動スペクトルは 3400 cm^{-1} と 3500 cm^{-1} に幅広いピークを持っている。偏光スペクトルと比較すると、前者は主として、バイデライトの c 軸に垂直な方向の振動の寄与により、一方、後者は c 軸に平行な方向の振動の寄与によることが分かった。また、この結果は、水分子の配向および水素結合距離の計算結果ともよい一致を示しており、また、層間水の赤外スペクトルの結果と調和的であった。

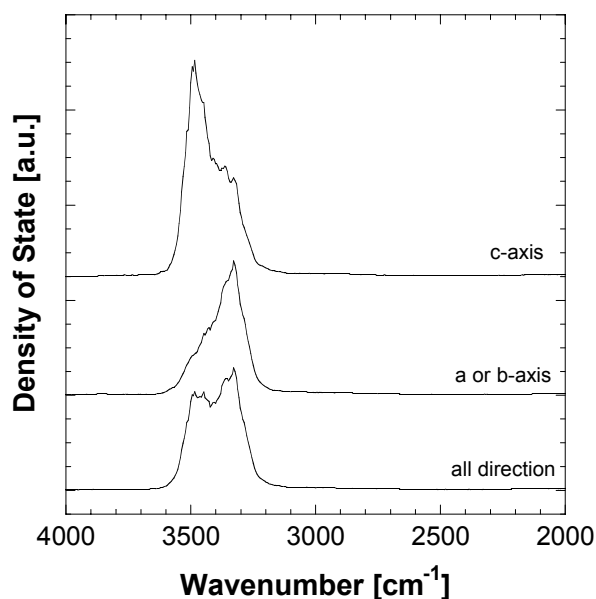


Fig. 1 Polarized vibrational spectra of interlayer water of sodium-beidellite ($n = 2.5$).