

粘土鉱物の高圧下での水和挙動

○佐藤毅¹、河村雄行²¹東工大理工、²岡山大環境生命科学

【緒言】

粘土鉱物の中でもスメクタイトは土壌中や堆積岩中に広く分布し、特に断層で存在が確認されていることから地球科学でも重要な物質である。スメクタイトは水を含んで膨潤状態となるが、膨潤挙動の温度圧力依存性を調べることはこの鉱物の物性を理解する上で重要となる。非常に微細な粒子であるため、その構造—物性の理解のためには分子シミュレーションの援用が不可欠である。本研究ではスメクタイトの1つであるモンモリロナイト粘土鉱物について調べている。

【方法】

プログラムはMXDORTOを用いた。白雲母の結晶データを元に端面を有する層電荷 $e=0.33$ のモンモリロナイトを作成し、層間と粒界に H_2O 分子を挿入して水和したモンモリロナイトを作成した(図1)。系全体での含水量は25~50wt%の範囲である。モンモリロナイトには2体項の、水分子には加えて3体項のポテンシャルエネルギーモデルを使用している。NPT アンサンブルにて計算を行い、層間/粒界での相対的な水の存在度が温度圧力によってどのように変化するか観察する。層間水の量の変化は層間距離の値からわかる。

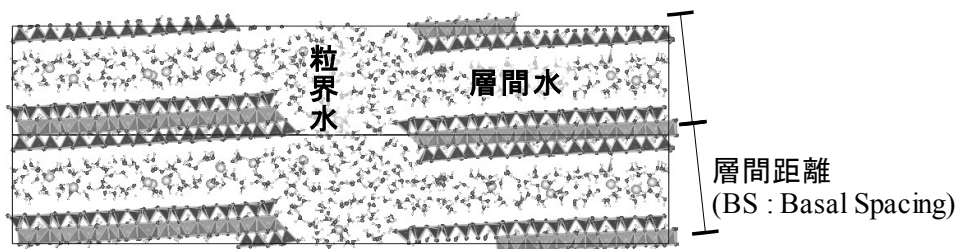


図1 作成したモンモリロナイト—水(28wt%)のスナップショット



【結果】

本研究では圧力 10~500 MPa、温度 298~500 K の範囲で計算を行なっている。これはバルク水が液体となる温度圧力条件の範囲内であり、また、この圧力範囲は地表付近から地球内部深さ十数 km までの圧力に相当する。

10 MPa と 100 MPa (298 K, 含水量 28wt%) での計算結果より、体積圧縮率がおよそ 0.25 GPa^{-1} であるのに対し、層間距離:BS の圧縮率が 0.30 GPa^{-1} となった。ここで体積圧縮率 κ と層間距離:BS の圧縮率 κ_{BS} は

$$\kappa = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T, \quad \kappa_{BS} = \frac{1}{BS} \left(\frac{\partial BS}{\partial P} \right)_T$$

であり、体積とは計算に用いている単位セルの体積である。 κ_{BS} が κ より大きな値となっており、このことから圧力上昇に伴い水は層間から粒界へ移動して層間距離が小さくなっているということがわかる。層間から粒界への水の移動があると、透水性や動粘性などの物性に影響するということが考えられ、現在そのメカニズムを検討中である。また、さらなる高圧力(500 MPa まで)や温度の影響について計算し、上と同様に考察する。

【参考文献】 河村雄行, 鉱物—水系の分子シミュレーション(2008) 地球化学, 42, 115-132