

1. はじめに

地盤の諸特性，特に力学的特性は土の構成物質の物性により著しい差が生じる．粘性・塑性・膨潤性など土特有の性質は，構成物質のうちの1つである粘土鉱物の特性を反映したものである．そこで本研究では，土の諸特性に対する理解を深めるために，粘土鉱物－水分子の相互作用について，原子・分子を対象として数値計算(分子軌道法 MO、分子動力学法 MD)により検討した。

2. 研究手順

計算モデルにはベントナイト主成分であるスメクタイトを想定し，2：1型結晶構造の粘土鉱物を利用した．さらに代表的な含有陽イオンとして Na^+ と Ca^{2+} を利用した．分子軌道法では，Grim(1968)による図を参考に図-1 の粘土鉱物ユニットモデルを作成した．粘土鉱物は酸素・水素・ケイ素・アルミニウムからできており，表面にはケイ素による六員環状の穴が開いている．分子動力学法では，図-1 のモデルを12個 (3×4) 連結させて図-2 の並列粘土鉱物を作成した．周期境界条件により，水平方向に無限に広がるケイ素面を形成している．これらの粘土鉱物モデルに対し，水分子がどのような特性を示すか解析した。

3. 数値計算

a) 分子軌道法

分子に属する電子が入る分子軌道を求めて分子の状態や性質を明らかにする方法のことであり，量子力学の基本法則からポテンシャルエネルギー・分子の安定構造等を予測することができる．本研究では，数ある分子軌道計算プログラムのなかから Gaussian03 を利用した．この計算プログラムは理論的には最も正確な予測が可能とされる非経験法に属するプログラムであり、安定種はもとより，短寿命中間体や遷移構造のような実験的に観測が困難であったり不可能であったりする化合物まで，広範な状態の下における分子の研究やその反応の研究に利用できる．そのため，量子化学の専門家のみならず実験系研究者にも広く利用されている。

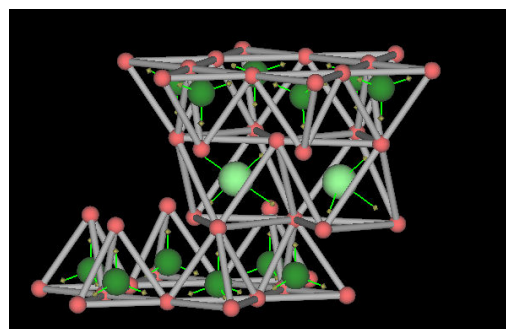


図-1 ユニットモデル

b) 分子動力学法

原子間に相互作用する力をポテンシャル関数等により決定することで，原子の動きを予測する方法であり，古典力学の基本法則から，原子・分子集合体の熱力学的平衡状態・ダイナミクスを予測することができる．本研究では，分子動力学計算プログラムとして Materials Explorer 5.0 を利用した．このプログラムは，有機物から無機物・金属まで幅広い材料に対して固相・液相など様々な状態をシミュレートすることができ，多種多様なジャンルの研究者に広く利用されている。

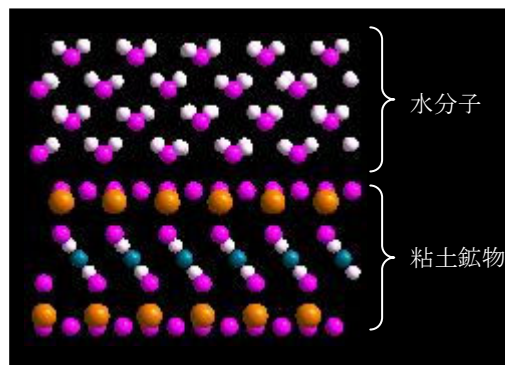


図-2 粘土鉱物と水分子

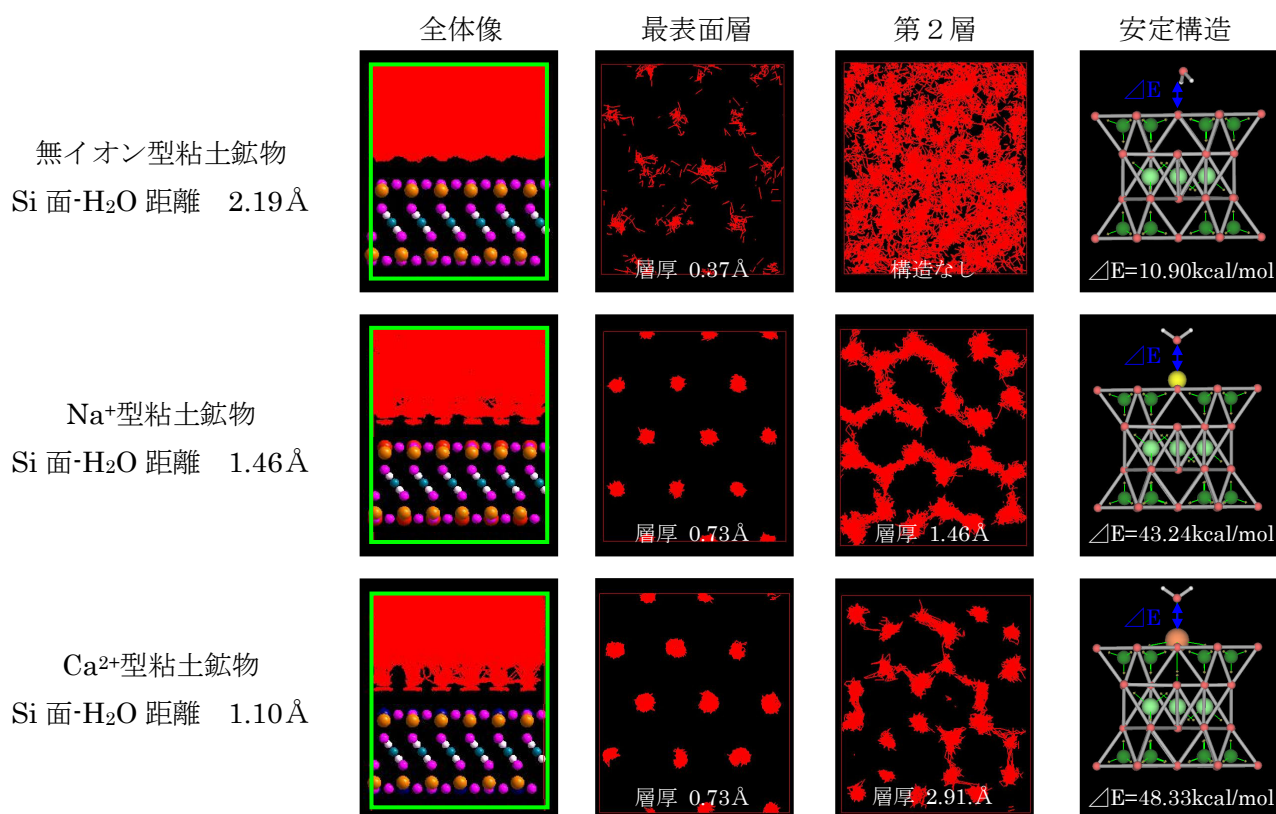
4. 計算結果と考察

分子軌道力学法により算出した水分子（酸素原子）の軌跡，ケイ素面から近接水分子までの距離，最表面層と第2層の層厚，分子軌道法により算出した粘土鉱物と水分子の最安定構造および結合エネルギーを下図に示す．構造を成している層を粘土鉱物から近い順に「最表面層」「第2層」として，赤い軌跡を層ごとに上から観察した．

無イオン型粘土鉱物では，最表面層の水分子は六員環中心部の真上にうっすらと分布しており，それ以外の水分子は構造を持たない．結合エネルギーは 10.90kcal/mol であり水素結合並みである．

Na⁺型および Ca²⁺型粘土鉱物では，最表面層の水分子は陽イオン真上に明確に点状に分布しており，第2層の水分子は粘土鉱物の六員環に沿って分布している．結合エネルギーはそれぞれ 43.24kcal/mol と 48.33kcal/mol であり，共有結合および金属結合のオーダーである．また，第2層において Na⁺型よりも Ca²⁺型のほうが層厚が厚い．

以上の結果より，弱吸着水と強吸着水に分類される粘土粒子表面の吸着水について考察した．極性を持つ水分子が負に帯電している酸素原子を陽イオンに向け吸着したために，Na⁺型および Ca²⁺型粘土鉱物において最表面層で点状構造をとると考えられる．さらに，最表面層の水分子が強く吸着しているために，点状構造に影響された第2層の水分子は粘土鉱物の六員環に沿って分布すると考えられる．つまり，粘土鉱物は陽イオンを介することによって吸着水を形成すると考えられる．また，陽イオンの価数が大きいほど弱吸着水を多く形成すると考えられる．



5. 今後の展望

せん断時の水分子の振る舞いなど，実験では求めることの出来ない領域を分子シミュレーションにより解析する．さらに，本研究の研究結果は実験による検証が必要であるため，様々な試験方法により検証実験を行う予定である．