

分子動力学法による粘土鉱物のせん断力計算

岩手大学	学生会員	○山崎聡樹
岩手大学		NAVCHMAA MISHEEL
岩手大学	学生会員	中西正樹
岩手大学	正会員	大河原 正文

1. はじめに

土が破壊に至る条件を示す式として、クーロンの破壊基準 $\tau = c + \sigma \tan \phi$ が広く用いられている。この式は、せん断面に働く垂直応力 σ とせん断応力 τ との関係を示しているが、粘着力 c がなぜ発生するのか厳密には分かっていない。そこで本研究では、粘着力の発生のメカニズムを解明するための一助として、粘土層間の水分子層の枚数や同形置換の割合など、様々な条件下における粘土鉱物のせん断応力を分子動力学法により測定した。

2. 粘土鉱物

本研究では粘土鉱物のうち、スメクタイトを計算対象とした。スメクタイトは図1のように、Al-Oで構成される八面体とSi-Oで構成される四面体がそれぞれシート状に連結し、このシートが層状に重なるような構造をしている。四面体シート構造内には六員環と呼ばれる穴があり、ここには負に帯電している粘土鉱物を電気的に中和するための交換性陽イオンが吸着している。水分子は、この陽イオンを介して吸着することが知られているため、本研究では、NaとCaを交換性陽イオンに持つスメクタイトを対象とした。以上のことから、図2のような粘土鉱物と水分子層のユニットモデルを作成し計算に用いた。計算の際の水分子の層数は0、1、2、3、4、5、10、15層とした。

また、結晶中の原子が基本的な結晶構造を変えずに他の原子に置き換わることを「同形置換」と呼ぶ。このとき、元の原子よりも電荷の低い原子に置き換わると、構造に過剰な負電荷が生じる。この現象は多くの粘土鉱物にみられるため、本研究では構造中の1原子を置換する場合、2原子を置換する場合、3原子を置換する場合の3ケースについて解析した。

3. 分子動力学法

複数の原子間ポテンシャルの下に、古典力学におけるニュートン方程式を数値解析的に解くことで粒子の軌跡を求め、得られた結果を統計処理することで系の構造情報や物性値などを与えるシミュレーション技法である。本研究では、分子動力学計算プログラムとして、Materials Explorer ver.5.0 を利用した。これは、半導体・金属・薬剤などのナノ材料にかかわる分野において、研究開発の手法のひとつとして広く用いられている。

キーワード：分子動力学法、スメクタイト、せん断応力、同形置換
岩手大学 山崎聡樹

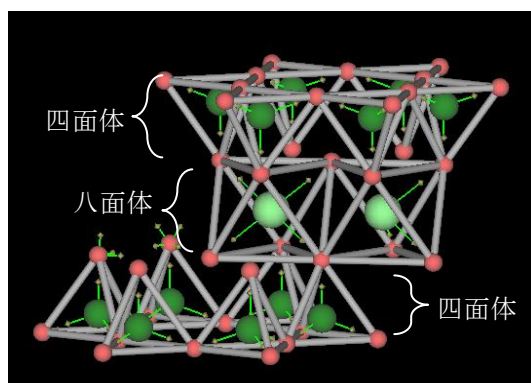


図1：スメクタイトの構造

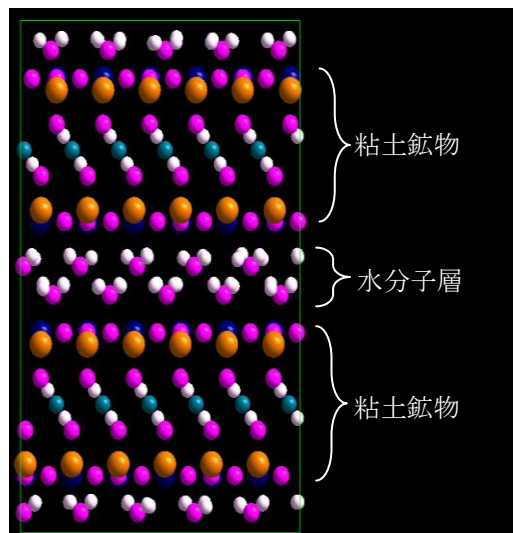


図2：粘土鉱物と水分子層

4. せん断応力の計算方法

本研究では、粘土鉱物がせん断しているかを判断する指標として「平均二乗変位」を用いた。これは、ある一定の時間幅での運動の始点と終点の距離の二乗（運動の方向性を無視する）の総和量で表される解析因子であり、これが時間に対してどのような挙動を示すかにより系の状態が分かる。この指標は、各時間内ではランダムな運動をするような、その総和的な解析でその特徴が現れる物理現象を取り扱う際に使われる。本研究では Materials Explorer ver. 5.0 内で与えた条件ごとに平均二乗変位(A**2)を算出し、その結果をせん断応力(kPa)に変換した。

5. 計算結果

図3に分子動力学法による計算結果を示す。これより、水分子が0層の時はせん断応力が最も小さく、1層の時に最もせん断応力が大きくなるのが分かった。また、水分子層数が増えていくとせん断応力は次第に小さくなり、5層のあたりからほとんど変わらなくなるという傾向がみられた。交換性陽イオンごとに比較すると、Na型とCa型ではCa型の方が大きく、また、同形置換の割合別には、割合が多いほどせん断応力は大きくなることが確認できた。

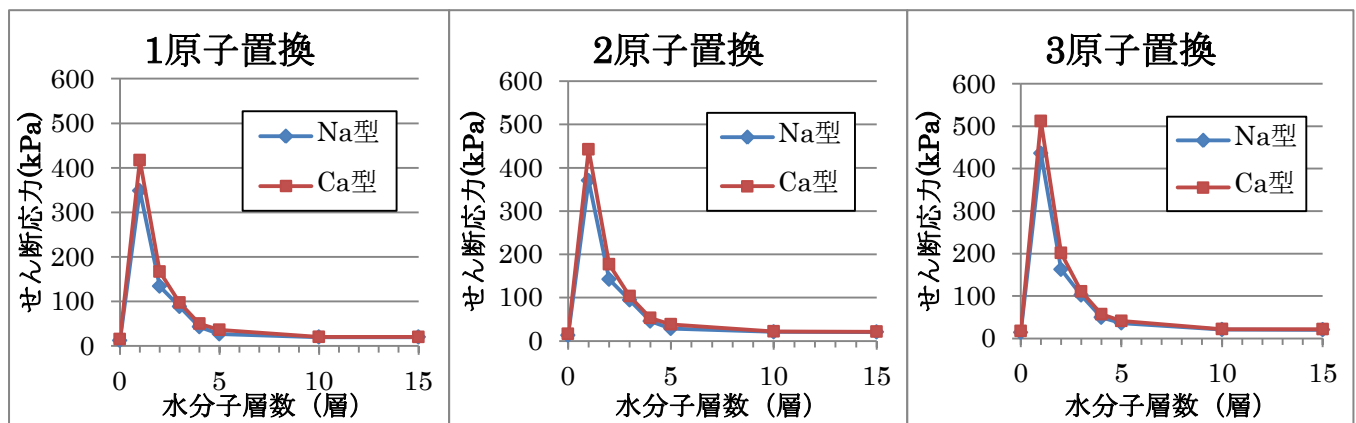


図3：計算結果

6. まとめ

今回の研究から、粘土鉱物のせん断応力は水分子の存在が大きな影響を与えるものであると考えられる。同形置換の割合が大きいほどせん断応力が大きくなるのは、粘土鉱物に帯電している負電荷が大きくなり、水分子を強く吸着するためと考えられる。また、Na型とCa型では、吸着陽イオンであるCaの方がNaよりも電荷が大きいため水分子を強く吸着し、せん断応力が強くなったと思われる。

今後の課題としては、水分子が存在することで、なぜせん断応力が大きくなるのかを解明していきたいと考えている。

参考文献

- 1) 白水晴夫 (1998) 『粘土鉱物学 第3章』 朝倉書店 185pp
- 2) 太田征志・大河原正文・鈴木映一 (2008) 『平成19年度土木学会東北支部技術研究発表会講演概要集 3-1』 社団法人土木学会東北支部
- 3) 太田征志・大河原正文 (2010) 『平成21年度土木学会東北支部技術研究発表会講演概要集 3-56』 社団法人土木学会東北支部
- 4) 太田征志・大河原正文・鈴木映一・三田地利之 (2010) 『第45回地盤工学研究発表会 E-13』 社団法人地盤工学会
- 5) 川添良幸・三上益弘・大野かおる (1996) 『物質科学 分子動力学とモンテカルロ法』 共立出版 205pp
- 6) 中西正樹・大河原正文・三田地利之・張海華 (2011) 『第47回地盤工学研究発表会』 社団法人地盤工学会