

1. はじめに

粘土中の不凍水の動的な挙動を知ることは凍上現象を解明するのに重要である。本研究は分子動力学法により不凍水の量と移動特性を解明することを目標としている。本発表では流体に対する壁面と温度の影響を見るために水分子の代わりにアルゴン原子を選び、理想的な固定壁に挟まれたアルゴン流体の挙動を計算した結果を報告する。

2. 方法

(1)分子動力学法 (MD法)

分子動力学法とは計算機の中に配置した分子の位置と速度の経時変化を計算し、その統計量から系の熱力学的性質や拡散挙動などを調べる方法である。

(2)系の設定

流体の初期配置として Fig.1 に示すような粘土層間水を想定した系を設定し、壁面間距離と温度に対する層間流体の性質を計算した。1つの計算に要する時間は486/33MHzのパソコンで平均6時間程度である。

3. 結果と考察

(1)壁面近傍の密度分布 (Fig.1)

壁面ごく近くでは密度が極端に小さい領域が現れ、中央付近では振幅が小さかった。これは流体原子が、固定された壁面個々の原子の影響を受けること示す。

(2)流体の拡散挙動 (Fig.2)

拡散挙動を平均2乗変位 (MSD) から求めた。

凡例の100および200は温度 (K) を、(数値) は MSD の傾きから求めた拡散係数 ($10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$) を示す。壁面がない場合 (N) と比較して壁面間の流体の方が拡散がおこりにくく、ことがわかる。これは壁面により系全体の運動が束縛されるためと考えられる。

(3)壁面間距離と温度の影響 (Fig.3)

ピリアル圧力は120K以上では壁面間距離に応じて増大するが、逆に100Kでは減少した。これは壁面の影響による凝固点降下に関係していると思われるが、詳細については現在のところ解らない。

4. おわりに

アルゴン原子についてのみの計算ではあったが、流体の挙動が壁面原子や温度の影響をうけることが確認できた。同じことは粘土表面近傍の不凍水についても言えそうである。分子動力学法を実際の粘土-水系に拡張することが今後の課題である。

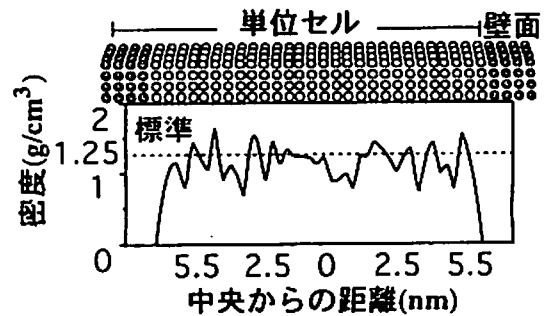


Fig.1: 壁面による密度分布への影響

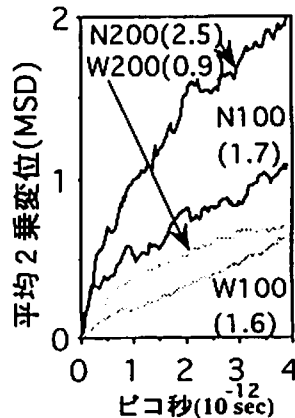


Fig.2: 平均2乗変位

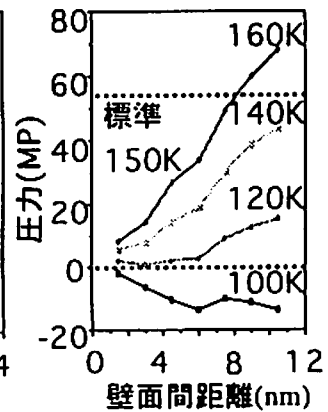


Fig.3: 圧力の温度変化と壁面の影響