

沈み込み帯におけるベントナイト吸水・固化域の役割

— 地震発生に関して、原子レベルからの物質過程の理解のために —

河 村 雄 行*

Roll of Absorption of Water and Solidification in Subduction Zone: In Relation to
Earthquake Generation and for Understanding from Atom Scale Process

Katsuyuki KAWAMURA *

I. はじめに

地質現象に関わるマクロな力学過程は、多成分多相系における、各相と相間の微視的な力学に支配されている。ここで相は、鉱物、水・水溶液などの液体、空隙としての気体などである。微視的な力学を実験により観察・計測することは容易ではなく、しばしば不可能である。ミクロとマクロのすべての力学の根源は原子間相互作用であり、それに支配された原子・分子の集団系の挙動である。

精密な原子間相互作用モデルを用いた分子シミュレーションの発展によりナノスケールの力学に関する定量的な「実験観測」が可能となっている。これにはナノメーターとナノ秒という実際の限界があるが、ミクロ-マクロの解析手法である均質化解析と組み合わせることにより、ナノ-ミクロ-マクロの統合的な解析が可能である。

また適切にデザインされた実験により物質過程の本質が詳細に明らかとなる。

ここでは、地震発生の際における物質過程として、粘土鉱物と粘土の力学の本質を見ようとする試みを解説する。

II. 粘土鉱物の結晶化学と物性

粘土鉱物と粘土のマクロで長期の挙動を予測するためには精密な物質モデルをコンピュータ内に構築することが不可欠である。そのためには、結晶構造の詳細を理解し、結晶化学や化学結合論の観点から合理的な構造、すなわち原子・分子配置を構築しなければならない。

1) スメクタイトの結晶化学

スメクタイトの結晶構造の単位は、1枚の8面体層を2枚の4面体層でサンドイッチした構造（層状体、2:1型層）である。この層状体が層間の分子間力、交換性陽イオンを介した静電相互作用、あるいは水和した層間水による水素結合などで積層する（積層体）。

スメクタイトの中で、バイデライト ($E_{0.33}Al_2(OH)_2(Si_{3.67}Al_{0.33})O_{10}$) とサポナイト ($E_{0.33}Mg_3(OH)_2(Si_{3.67}Al_{0.33})O_{10}$) の場合、4面体層のSiの一部がAlで置換され負の層電荷を担っている。モンモリロナイト ($E_{0.33}(Al_{1.67}Mg_{0.33})(OH)_2Si_4O_{10}$) では8面体層の8面体席の2/3を占めているAlの一部がMgで置換され負の層電荷を生じている。しかし実際の粘土鉱物では、8面体層で (Al_x, Mg_y)

* 東京工業大学大学院理工学研究科地球惑星科学専攻

* Earth and Planetary Sciences, Tokyo Institute of Technology

本稿は2002年1月18日に行われた講演をまとめたものである。

として $x + y$ が 2 を超える (3 まで) ような置換が起こり、8 面体席の 2/3 以上を占めることもでき、また 4 面体層でも $\text{Si} \leftrightarrow \text{Al}$ などの置換と再配置が起こる。さらに、交換性陽イオン数にも自由度がある。そのような場合の層電荷の担い手は複雑なものとなっている。

構造のデザインは 4 面体層と 8 面体層における Si 、 Al 、 Mg などの原子の個数と配置を、結晶化学的な考察に基づいて行う必要がある。4 面体層においては、 Al 排他律 (4 面体配位同志で Al-O-Al 結合を作らない) を考慮した Si-Al 配置を考えるべきであろう。8 面体層内では 8 面体席の 2/3 を Al が占めた規則構造を基本に、 Mg による置換・付加による電荷分布のバランスを考慮しなければならない。さらに、8 面体層と 4 面体層の全体としての原子分布について、この 2:1 型層全体の静電エネルギーを最小化するような原子配置が優先されるべきであると考えられる。

2) 分子としてのスメクタイト

粘土鉱物、特にスメクタイトは極めて小さな微粒子として存在している。厚さ 1 nm (2:1 型 1 分子層の厚さ) で、数 10 ないし数 100 nm 程度の 2 次元の広がりを持つ“平板状高分子”と見るほうが適切であるかもしれない。このような分子は水分子層を介して互いに吸着し、数層から数 10 層の「積層体」を形成していると考えられる。したがって、粘土表面としては 4 面体層の表面とともに、分子端面も粘土としての様々な挙動に重大な関わりを持っているだろう。

このような粘土結晶微粒子あるいは粘土分子について、その端面構造を実験的に決めることはほとんど不可能であるので、結晶化学的かつ化学結合論的に適切にデザインする必要がある。スメクタイトでは結晶粒子が小さすぎて観察できないが、より結晶性の良い粘土鉱物において 6 角板状の形態が観察されている (Sutheimer, 1999)。平面分子における端面の場所 (ヘキ開面あるいは成長形) の推定には、 Si-O などの構造の骨格を形成している結合の切断をなるべく少なくすることを基本とする。そのような場所で結晶構造を切断し、その端面に現れた結合が不足な部分は取り除いたり原

子を付加したりする。この際、 Si-O-Si 架橋結合が切断されて、 Si-O- となった個所は Si-OH とする。また端面に現れる 4 配位席において 4 配位 Al が存在すると、 O 原子へ集まる結合原子価が非常に不足することになり、そのようなことは基本的には起こらないと考えられる。このようにして我々が作成した端面構造は後に (図 4) 示す。

3) 種々の物性

粘土鉱物の水和挙動 (膨潤性) は水の吸脱着や透水の本質である。主として分子平面の表面への H_2O 分子の吸着の強さにより、スメクタイトの場合数 10 kg/cm^2 から数 100 kg/cm^2 の膨潤圧力となっている。粘土分子表面と H_2O 分子間の水素結合の幾何学的配置と、交換性陽イオンの水和構造が膨潤挙動を決めている。

交換性陽イオン吸着挙動については、吸着点、吸着種の構造、水和錯体の構造などが要因である。吸着点については、分子平面表面 か 端面かで大きく吸着挙動が変わることが考えられる。端面の構造のデザインがこれを左右することになる。また、陽イオン種と吸着点により、単原子イオンとして直接吸着するか 水和錯体として吸着するかが異なってくるであろう。

地震発生に関し、断層粘土は主として粘土鉱物、造岩鉱物、水・水溶液、および空隙の複合体である。その全体としての物性は、これら要素間の界面物性 (局所物性) により支配されているであろう。粘土分子表面近傍での水や水溶液の粘性は透水係数や交換性陽イオンの拡散挙動に大きく影響する。電気 2 重層と拡散層の原子・分子レベルでの実態を定量的に調べる必要がある。

III. スメクタイトの分子動力学計算

分子動力学法は分子シミュレーションの 1 種で、原子間相互作用を用いて、分子集団系の力学をコンピュータによるシミュレーションで記述するものである。もう 1 種の主要な手法としてメトロポリス・モンテ・カルロ法がある。ここでは分子動力学法の詳細は省略する (平尾・河村, 1994)。主として膨潤挙動と粘土鉱物-水間の界面物性についての計算を紹介する。

そこで我々が用いているモデル（新たに開発したもの）では、 H_2O を含むすべての原子・分子間相互作用は、原子-原子間相互作用で表す。これらは 2 体項 $u_{ij}(r_{ij})$ と 3 体項 $u_{ijk}(\theta_{jik}, r_{ij}, r_{ik})$ よりなる。

$$\begin{aligned}
 u_{ij}(r_{ij}) = & z_i z_j e^2 / 4 \pi \epsilon_0 r \dots\dots\dots [\text{静電相互作用}] \\
 & - c_i c_j / r^6 \dots\dots\dots [\text{分子間力}] \\
 & + f_0 (b_i + b_j) \exp [(a_i + a_j - r_{ij}) (b_i + b_j)] \\
 & \dots\dots\dots [\text{近接反発}] \\
 & + D_{1ij} \exp (- \beta_{1ij} r_{ij}) + D_{2ij} \exp (- \beta_{2ij} r_{ij}) \\
 & + D_{3ij} \exp [- \beta_{3ij} (r_{ij} - r_{3ij})] \\
 & \dots\dots\dots [\text{共有結合 (動径部分)}] \\
 u_{ijk}(\theta_{jik}, r_{ij}, r_{ik}) = & - f [\cos \{ \chi (\theta_{jik} - \theta_0) \} - 1] \sqrt{(k_1 k_2)} \\
 & k_1 (r_{ij}) = 1 [\exp \{ g (r_{ij} - r_m) \} + 1] \\
 & \dots\dots\dots [\text{共有結合 (角度部分)}]
 \end{aligned}$$

このモデルはすべての原子間相互作用を記述するもので、分子内、分子間の区別はない。 H_2O 系の場合、この式のパラメータ ($z, a, b, c, D_1, D_2, D_3, \beta_1, \beta_2, \beta_3, f_0, \theta_0, r_m$) は酸化物結晶や水の構造と物性を再現するように、かつ化学結合の知見に基づいて経験的に決めている。このようなモデルを用いることにより様々な複雑な系の分子シミュレーション計算が容易に実現できる。

1) 膨潤性

スメクタイトの膨潤挙動を調べるため、水和バイデライトの分子動力学計算を行った (Kawamura *et al.*, 1999)。スメクタイトの結晶構造データは測定されていないので、基本構造として白ウンモ (muscovite, $\text{KAl}_2[\text{Si}_3\text{Al}]_2\text{O}_{10}(\text{OH})$) の結晶構造データを用いた (単斜晶系 $C2/c$, $a = 5.20\text{\AA}$, $b = 9.02\text{\AA}$, $c = 20.07\text{\AA}$, $\beta = 95.7^\circ$)。白雲母結晶構造からスメクタイト結晶構造を作り、分子シミュレーションの出発構造を作成する手順は大きく分けて次の 2 つのプロセスで表すことができる: 1) 白ウンモの単位格子 a, b, c をそれぞれ適当な数で積み重ねたものを MD 計算のための基本セルとした。基本格子はおよそ, $a = 30\text{\AA}$, $b = 27\text{\AA}$, $c = 20\text{\AA}$ となる。2) K + イオンを Na + イオンに置き換え, その数を 1/3 に減らし, 系全体の電荷が中性となるように 4 面体層の Al 原子の一部

を Si 原子に変更した。4 面体層における Si と Al の分布は Al-O-Al 結合を作らないように規制をした上で、乱数により決定した。これらのプロセスにより “無水バイデライト” の結晶構造が MD 計算の初期構造としてできあがる。この基本セルには、4 面体層-8 面体層-4 面体層からなる層状体が 2 層含まれる。3 次元周期境界条件を適用することにより、MD 計算の系全体が粘土の単結晶の内部のものとなる (結晶表面・端面は含まれない: 無限に続く結晶)。各層状体の間に適当な個数の水分子を挿入することにより、任意の吸着水量 (n) の粘土鉱物水和物が構成できる。 n 分子の水を層間に持つスメクタイト (バイデライト) 水和物の分子式を $\text{Na}_{1/3}\text{Al}[\text{Si}_{11/3}\text{Al}_{1/3}]_2\text{O}_{10}(\text{OH}) \cdot n\text{H}_2\text{O}$ と表す。このような化学組成を持つ系を温度圧力一定の MD 法で計算し、十分に平衡に達した後のアンサンブル平均から格子定数を求め、底面間隔を導く。

計算は (NPT)- MD で温度 293K, 圧力 0.1MPa (1 気圧) の下に実行した。計算結果の構造を図 1 に示す。この図は種々の水和数における瞬間の原子配列 (瞬間構造) を表している。図より層間水の量 n に応じて層間距離と層間水の構造が変化することが見て取れる。 $n = 0.417$ では 1 層水和を形成できず、これを 0.5 層水和と呼んでいる。 $n = 0.5$ と 2 では 1 層からなる層間水層を形成しており、Na + イオンは 4 面体層の外側表面と層間水の間に位置している。 $n = 2.5$ では、1 層水和と 2 層水和が共存している。 $n = 4$ と 5 では 2 分子層構造が形成されている。 $n = 7$ と 8 では 3 分子層あるいは不明瞭な層構造になっている。

これらの計算結果を基にスメクタイト (バイデライト) の膨潤特性を調べたのが図 2 である。縦軸はアンサンブル平均としての格子定数の c^* 軸の逆数の 1/2, すなわち底面間隔, 横軸は水分子の量 n の値を示している。図中には Wyoming モンモリロナイトの実験結果も同時に示してあるが、計算結果と良く一致している。通常の膨潤曲線の実験値 (後述, 図 6) では横軸が水蒸気圧になっており、この計算に比べより明確な段階的变化を示している。この差は図 2 の層間水の内部エネルギーのグラフが折れ線ないいくつかの上に凸の

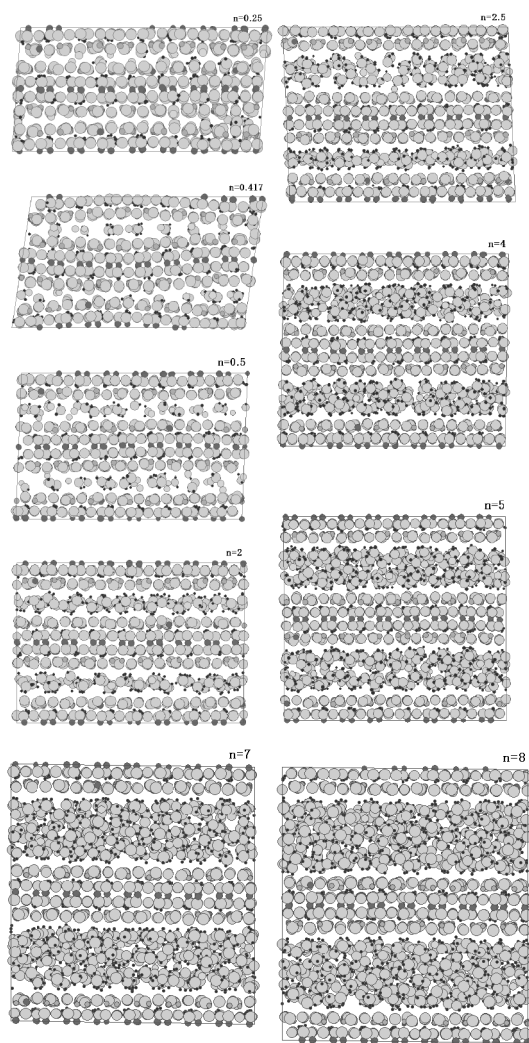


図 1 分子動力学法計算による、水和粘土鉱物の構造のスナップショット。いずれも 293 K, 0.1 MPa。

Fig. 1 Structural snap shots of hydrate beidelite with hydration numbers by mean of molecular dynamics simulation at 293 K and 0.1 MPa.

曲線の連結になっていることから理解できる。すなわちその折れ曲がり点近傍の層間距離が、水蒸気圧を横軸に採ったときの各階段の上面に広がることになる(図 6)。

2) 結晶・分子表面近傍での、水・水溶液の挙動

粘土鉱物-水複合体における局所物性を調べるため、粘土結晶表面(4 面体層の表面)近傍の水について、分子表面からの距離の関数として、水の分子配向性、自己拡散係数、および粘性係数を分子動力学法計算を用いて求めた。

細長い直方体基本セルの中に、1 層の粘土分子を長い辺に垂直に置き、その両側に 5000 個の水分子を置いた。温度は 293 K(20℃)、常圧(0.1 MPa)とし、十分に平衡化した後の数 50 万ステップ(200 ピコ秒)の結果の時系列原子座標データを用いて、構造と物性の解析を行った。

局所構造の解析は、水・水溶液構造として、水分子の配向性の空間的統計を調べた。すなわち、水分子の方位を特徴づける 2 種のベクトル(分子内の 2 個の OH ベクトルの和ベクトルと外積ベクトル)について、それらのベクトルと z 軸とのなす角の余弦を結晶表面からの距離としてサンプリングし、そのアンサンブル平均を求めることにより、水分子の配向性の位置依存性を求めた。また水の密度の結晶表面からの位置依存性も調べた。構造のスナップショット、水分子の配向性、および拡散係数と粘性係数の位置依存性を図 3 に示す。粘土分子表面に存在する強く構造化された水分子層は 1 分子層のみであった。分子表面に接する水層において、z 軸に対する分子軸の角度の余弦の分布において 2 つの山が見られ、また、分子面に垂直なベクトルが主として粘土分子表面に平行な方向を向いている。このことから水素結合が粘土分子側に向いているものとその反対側のものが卓越しており、それは氷の構造と類似していることを示している(Single ice sheet 構造と呼ぶ)。表面近傍における水の密度が沖合いの水のそれに比べて小さくなっていることも、この氷様構造の形成と調和的である。Na⁺イオンの分布については、粘土分子の負電荷を中和する正電荷イオンとして粘土表面に強くクーロン相互作用で吸着している。

粘土分子表面では、純水の水の自己拡散係数は表面から数 nm 程度でバルク水の自己拡散係数とほぼ同じとなる(図 3(下)の 1 点は約 0.4 nm を代表している)。この間は拡散係数が沖に向かって単調増加している。系の大きさが足らず、十分な

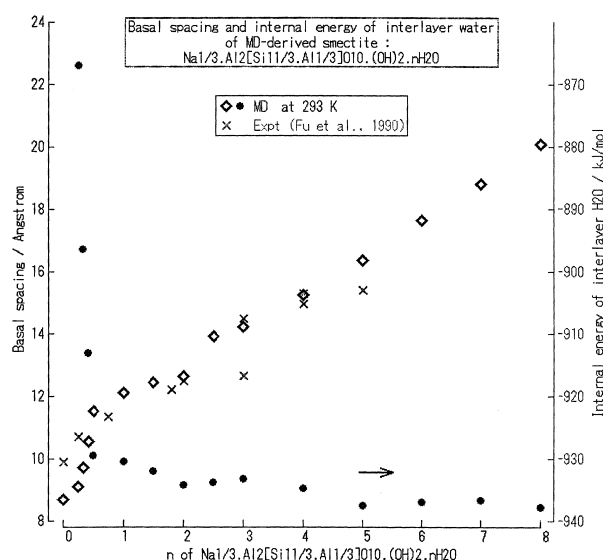


図 2 分子動力学法計算によるバイデライトの膨潤挙動．
底面間隔-水和水数，および層間水の内部エネルギー-水和水数のグラフ．

Fig. 2 Swelling properties of computer simulated beidellite comparing with that of a natural clay mineral: the basal spacing and internal energy of interlayer water are plotted for hydration number.

沖合いが形成されていない可能性がある。

現在，局所物性について，さらに，種々の結晶の様々な結晶方位と表面状態，および水と水溶液について，結晶表面原子配置とその水構造形成性との関係を系統的に調べており，酸化物結晶-水・水溶液複合体の物性予測に発展させる予定である。

3) その他の物性の分子シミュレーションによる導出について

イオンや分子の吸着等温線を求める分子シミュレーションは，通常は吸着種の化学ポテンシャルあるいは分圧を規定して， (μVT) アンサンブル（グランドカノニカルアンサンブル）のモンテ・カルロ法で行われる。粘土鉱物への吸着は体積変化を伴うことが本質であるので，体積を一定とするこのアンサンブルは使えない。分子シミュレーション手法における工夫が必要である。

単結晶粘土鉱物の弾性や粘性は，応力を付加して，MD 基本セルの弾性変形あるいは応力テンソ

ルの成分などにより系の応答を調べることでより可能である。

端面を持つ粘土分子を含む系の吸着挙動，水・水溶液の粘性などを調べるために作成した構造を図 4 に示す。

複合体としての吸着や粘性を調べるためには現在用いている系（原子数 2 万個程度まで）に比べ，飛躍的に大きな系が必要である。すなわち多相系の分子シミュレーションである。そのためには粘土を有限の分子として扱う必要がある。図 4 に水中の帯状の粘土分子の系を示す。端面がイオンや分子の吸着，その近傍の水・水溶液にどのような影響を持つかを解析しているところである。このような計算を行うことにより，種々の粒界，表面，界面での局所物性が定量的に求まることが期待できる。ただし局所物性の解析手法の開発が伴うであろう。

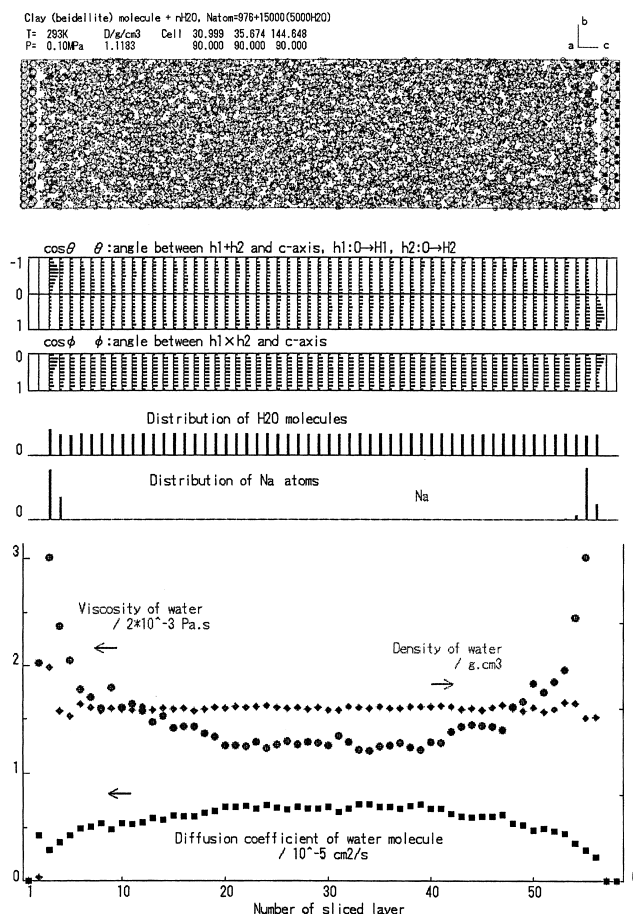


図 3 スメクタイト (バイデライト) 1 分子- 5000H₂O 分子系の MD 計算 (50 万ステップ = 200ps)。
 (上) 構造のスナップショット, (中) H₂O 分子配向性の位置依存の統計, (下) H₂O 分子の拡散係数 (■), 粘性係数 (●), 密度 (○) の粘土分子表面からの距離依存性。

Fig. 3 Molecular dynamics simulation of clay molecule-water system.
 Structural snap shot, orientation of water molecules, and diffusion and viscosity coefficients of water at distances from clay molecule surface.

IV . 実験による人工バリア物質の物性解明

1) スメクタイトの膨潤挙動

地殻において粘土鉱物がさらされる温度は 100 をかなり超える場合もある。そのような高温までの粘土鉱物の膨潤特性を調べておく必要がる。我々は, 温度が 200 まで, 水蒸気圧を $P(\text{H}_2\text{O}) = 1$ 気圧まで精密に設定できる試料室を作成し

(図 5), 市販のスメクタイト (クニゲル V1) について 50 から 150 までの底面間隔の測定を行っている (Kawamura *et al.*, 1999)。湿度を規定するための水蒸気の発生には ± 0.01 で温度制御された恒温水槽からの飽和水蒸気を用いた。50, 70, 90, 120, および 150 における, 種々の水蒸気圧 (湿度) で X 線回折パターンを測定し, 回折角 5 ° から 10 ° 付近 (Cu/K α 線)

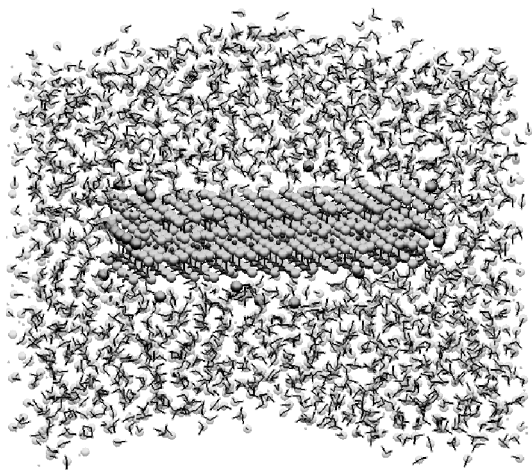


図 4 端面を持つ粘土分子-水系の分子動力学計算による構造のスナップショット。

Fig. 4 Structural snap shots of clay molecules in water with edge by molecular dynamics calculation.

に現れている底面反射のピークを用いて層間距離を求めた。

層間距離を、水蒸気発生温度から換算した水蒸気圧に対してプロットしたものが図 6 である。70

および 90 ° では明瞭に 3 段階のステップ状の変化が見られた。これらの各ステップの層間距離は、およそ 10Å, 12Å, および 15Å であり、これらは、分子動力学法シミュレーションによる結果から、層間水の層がそれぞれ 0 層, 1 層, および 2 層に対応しているものである。

50 ° では、測定湿度範囲内では、低湿度で 10Å 程度の小さな層間距離の構造が観測されなかった。120 ° では $P(\text{H}_2\text{O}) = 1$ 気圧までの範囲内では 1 層吸着までが観測された。ただし、0 層吸着と 1 層吸着の間において、中間的な底面間隔が観測された ($P(\text{H}_2\text{O}) = 33 \text{ kPa}$ 付近)。これは図 1 における $n = 0.417$ の構造に対応するものではないかと考えている。150 ° では $P(\text{H}_2\text{O}) = 1$ 気圧近くまで水和膨潤しなかった。

分子動力学法シミュレーションによる層間距離と水和数のグラフ (図 2) では変化がステップ状よりは曲線になっている。この違いは、MD シ

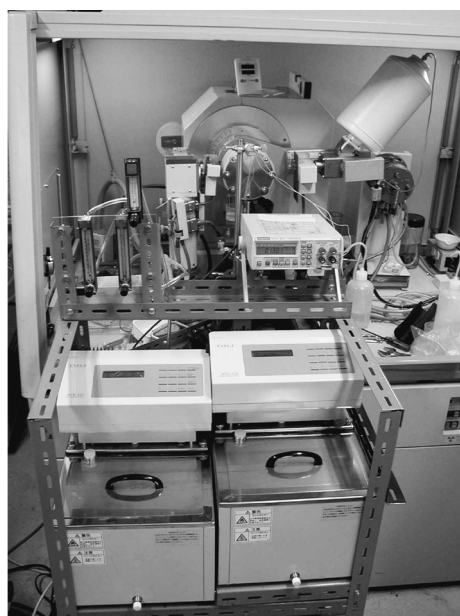


図 5 温湿度制御 X 線回折装置。
ゴニオメータ中心にある金属円形のものゝ温湿度制御試料室、左側に温湿度発生器 (200 °C まで、 $P(\text{H}_2\text{O}) = 1$ 気圧まで)。

Fig. 5 X-ray diffractometer with environment controlled sample chamber up to 200 °C and $P(\text{H}_2\text{O}) = 1 \text{ atm.}$

ミュレーションにおける層間水の内部エネルギーのプロットから理解できる。すなわち、吸着のエントロピー変化を無視あるいは一定とすると、このプロットの傾きが H_2O の分圧を与えるものであり、このグラフの変曲点において、 H_2O 分圧が大きく変化している。図 6 の $P(\text{H}_2\text{O})$ に対して平らな部分が H_2O のエネルギー曲線の変曲点に対応しているのである。3.3 で言及した $P(\text{H}_2\text{O})$ を規定したグランドカノニカルモンテカルロ法により吸着等温線の計算が行えたとしたら、それによる $P(\text{H}_2\text{O})$ -層間距離のグラフは図 6 のようにステップ状の変化を示すはずである。

2) その他の実験観察の必要性

粘土鉱物単分子の形状は、多相系の分子シミュレーションを行う上でも、また 2 章で示すマクロ力学解析手法を適用する上でも不可欠である。1 nm の厚さの数 10 から数 100 nm の粘土分子の

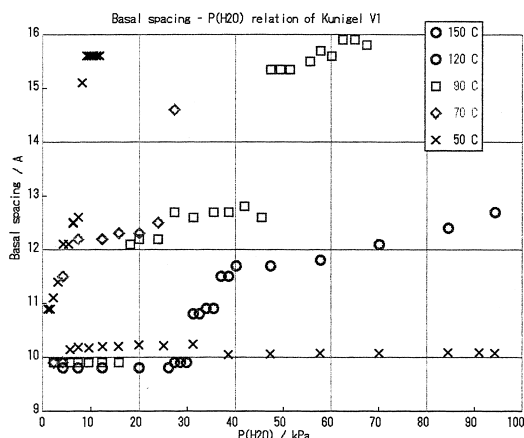


図 6 50, 70, 90, 120, および 150 °C に おける、クニゲル V1 の膨潤挙動。測定は図 5 の環境制御（温湿度制御）試料水平型 X 線回折計（Cu/K α ）による。

Fig. 6 Swelling behavior of Kunigel V1 measured with environment controlled x-ray diffractometer at 50, 70, 90, 120 and 150 °C.

形状を測定することは、FE-SEM を用いることにより有効に行えることがわかっている。粘土分子の形状の統計的な検討が不可欠であると考えられる。

粘土鉱物と粘土の水の吸脱着挙動を検討するために、粘土の圧密特性を調べることが必要である。水に飽和した圧密粘土を膨潤圧力（20 kg/cm² から 30 kg/cm² 程度）より高い応力下で、水についての解放系の実験を行うと、3 層水和から 2 層水和の転換などを伴って、粘土は徐々に圧密されていく。1 日程度の 1 次圧密（速い速度）と、1 年以上継続するゆっくりした圧密（2 次圧密）が観察される。これらの圧密下でどのような変化が粘土鉱物に起こっているのだろうか。我々は圧密下その場 X 線回折実験を実施しつつある。

さらには、環境制御や圧密実験、 $P(H_2O) = 1$ 気圧を超え、水の臨界点付近の温度圧力条件まで行うことが、地震発生を含む地殻内での地質過程の解明のために重要であると考え、その準備を行っているところである。

V. マクロ長期挙動予測のためのミクロ構造とミクロ物性の連携

地質現象のような空間時間スケール大きな系については、ミクロな挙動が理解できることは最終目標ではなく、マクロな系の精密な長期挙動予測ができることが要求される。

Ichikawa らは分子シミュレーションと均質化解析の緊密な連携による統合解析手法を確立してきた（Ichikawa *et al.*, 1999）。粘土分子-水系の分子動力学計算（章 2）による粘土表面からの水の粘性係数分布（図 3（下））を用い、圧密粘土を平行平板で表したモデルを用いた流体力学計算による均質化解析による、粘土の透水係数の予測が行われた。その結果、 10^{-12} から 10^{-11} cm/s という透水係数が得られた（1 年間で 0.2 μ m 程度移動するだけである）。この数値は、均一な粘性係数による計算より 1 ないし 2 桁小さく、実験事実とも良く一致している。

この手法は、化学結合の理解に基づいた原子・分子の集団系の挙動（ナノメートルスケール）から、ミクロな材料組織（マイクロメートルからミリメートルスケール）を通して、マクロ（数メートル規模）でかつ長期の挙動を予測しようとするものである。言い換えれば、分子シミュレーションを用いてミクロ局所物性を導出し、鉱物結晶粒子、間隙水などからなる材料組織にミクロ物性を対応させ、マクロな系の拡散、流動、変形などの時間発展を精密に予測することである。

このようなシミュレーション計算は容易ではないが、着実に成果が上がりつつあり、我々は、この手法が、唯一ではないかもしれないが、現時点でのもっとも有力な手法であると考えている。

VI. おわりに

地質現象の本質の解明を目的としている場合、本稿で示したような、ミクロな結晶化学、分子集団系の挙動の解明、それ自体が目的ではない。章で示したようなマクロ挙動を予測するためのマクロ力学と連携した手法を確立し、あるいはマクロ力学解析に有効・不可欠なミクロ挙動を解明し、

定量的なミクロ物性を導出することが求められている。すなわち、ミクロな結晶化学、化学結合論、分子集団系挙動解析などが、マクロ力学解析と共同してはじめて意義が生ずることになる。その場合、岩石組織などのミクロないしマクロな組織を理解することも不可欠である。

スメクタイトと並んで地震に関わって重要な蛇紋石、土壌に広く見られるイモゴライト（管状）やアロフェン（中空球状）など、さらに各種分子の吸着能を持つゼオライト、地球温暖化に関してCO₂固定化のためのCO₂ハイドレートなど、地球表層環境の維持あるいは回復の目的のためにもそのような材料物質について原子レベルからの理解が重要であると考えられる。そのためにこれまでの鉱物学とは異なり、地球科学における物質科学の基盤を与えるという役割を行うための学問分野、地

球惑星構成物質についての化学結合論に基づく精密化学を確立する必要がある。

文 献

- Ichikawa, Y., Kawamura, K., Nakano, M., Kitayama, K. and Kawamura, H. (1999) Unified molecular dynamics and homogenization analysis for bentonite behavior: Current results and future possibilities. *Engineering Geology*, **54**, 21–31.
- 平尾一之・河村雄行 (1994) パソコンによる材料設計。裳華房。
- Kawamura, K., Ichikawa, Y., Nakano, M., Kitayama, K. and Kawamura, H. (1999) Swelling properties of smectite up to 90 °C. In situ X-ray diffraction experiments and molecular dynamic simulation. *Engineering Geology*, **54**, 75–79.
- Sutheimer, S.H., Maurice, P.A. and Zhou, Q. (1999) Dissolution of well and poorly crystallized kaolinites: Al speciation and effects of surface characteristics. *Amer. Miner.*, **84**, 620–628.