

分子動力学計算による高温高压下における塩水の誘電率と分子描像

Molecular dynamics simulations of dielectric constant of salt water at elevated temperatures and pressures

*佐久間 博¹*Hiroshi Sakuma¹

1. 物質・材料研究機構

1. National Institute for Materials Science

地殻における流体は、物質移動・熱輸送・岩石物性に影響を与えており、その性質を知ることが重要である。特に鉱物の溶解・沈殿に係わる溶液の誘電率は、温度・圧力・塩濃度の関数として地殻を網羅する条件で必要とされている。しかしながら、純水の誘電率は高温・高压まで実験値があるが、塩水の誘電率の実験値は我々の知る限り50℃以下の低温に限られ、塩の影響が明らかでない。これまで地球化学モデリングで使用されている状態方程式の多くは、350℃以上の高温での使用には限界があり、この要因として、地球化学モデリングのベースとなる水や塩水の分子論的描像が正確に取り入れられていないことが考えられる[1]。そこで分子間相互作用をある程度定量的に評価した上で巨視的な熱力学物性を算出することができる有用な手法の一つは分子シミュレーションである。

本研究では、NaCl水溶液の古典分子動力学（MD）計算を実施し、高温（573 K）高压（100-200 MPa）条件での塩水の誘電率を導出する。また水分子の双極子モーメント・イオンの解離度・水和構造と誘電率の関係を考察する。誘電率は電場の周波数に依存するが、本研究では周波数0の極限である静的誘電率を計算する。MD計算による電解質溶液の誘電率は、Caillol *et al.* (1986) [2]によって提案された手法を用いた。

NaClの濃度1.0 mol/kg、573 Kにおけるイオンの解離度を見積もったところ、100 MPaで72%、200 MPaで76%が解離することが分かった。以上の結果、および誘電率の計算結果から、高温高压条件における塩水の分子描像と熱力学物性の関係を議論する。

参考文献

[1] Driesner, *Rev. Mineral. Geochem.* **76** (2013) 5[2] Caillol, Levesque, Weis, *J. Chem. Phys.* **85** (1986) 6645.

キーワード：超臨界流体、イオンペア、水和、双極子モーメント、塩濃度

Keywords: Supercritical fluid, Ion pair, Hydration, Dipole moment, Salinity