Mg₂SiO₄オリビン、変型スピネル、スピネルの温度 - 圧力 - 体積状態方程式の分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulation of the T-P-V equation-of-states of the Mg₂SiO₄ polymorphs

松井 正典 [1]

Masanori Matsui [1]

[1] 九大・理・地球惑星

[1] Dept. of Earth and Planet. Sci., Kyushu Univ.

Mg₂SiO₄オリビン、変型スピネル、及びスピネルの3種の多形に適用できる高精度な有効原子間ポテンシャルを求めることに成功した。加えて、得られたポテンシャル

を用いた分子動力学(MD)シミュレーションにより、広範な温度圧力条件下におけるこれら3多形の実測の結晶構造、弾性定数、体積熱膨張率、静水圧縮データを

高精度で再現することに成功した。3多形のそれぞれについて、常温常圧から温度2000K、圧力30GPaに至る温度圧力範囲における温度 - 圧力 - 体積状態方程式、体積弾性率、剛性率のMD値を提出する。

Mg₂SiO₄オリビン、変型スピネル、及びスピネルは地球上部マントル、マントル遷移層の最重要構成鉱物である。本研究の目的は、それら3種の多形の高圧高温物性計算に適用できる高精度な有効原子間ポテンシャルを求め、及び得られたポテンシャルを用いた分子動力学(MD)シミュレーションにより、常温常圧からマントル深部に至る広範な温度圧力条件下におけるこれらMg₂SiO₄多形の温度(T) - 圧力(P) - 体積(V)状態方程式を高精度で予測することにある。

我々は最近、結晶における多体相互作用を取り扱うべく、イオンの大きさが結晶場の影響を受けて、等方的に変化するbreathing shell model (BSM) を含んだMDシミュレーションの手法を開発することに成功した(Matsui, 1998)が、このBSM-MD法を用いることにより、今回報告する様な、広範な温度圧力条件下における高精度なT-P-V状態方程式のシミュレーションが始めて可能になった。

結晶のポテンシャルエネルギーを、クーロン項、ファンデアワールス引力項、反発項から成る二体間相互作用の和で表した。加えて、酸素イオンについてはBSMを考慮した。なお、Mg及びSiイオンのbreathingは今回は無視した。3多形について同一のポテンシャルモデルを用いた。breathingポテンシャルを含む必要なエネルギーパラメータは、3多形の実測の結晶構造、熱膨張、圧縮率、弾性定数を可能な限り再現するとの条件を用いて経験的に求めた。

3多形のそれぞれについて、求めた物性が非常に多様で、且つ取り扱った温度圧力範囲が極めて広範であるにもかかわらず、実測値とMD計算値の一致は極めて満足ゆくものであった。例えば、300 Kにおける静水圧縮については、実測データが存在する常圧から17GPa(オリビン)、27GPa(変型スピネル)、31GPa(スピネル)に至る圧力範囲で、3多形のそれぞれについて、実測のモル体積の圧力依存を極めて高精度で再現することに成功した。常圧下における体積熱膨張についても300Kから2100K(オリビン)、1100K(変型スピネル)、1000K(スピネル)に至る温度範囲でそれぞれの実測値を高精度で再現した。300K, 0GPaにおける弾性定数(独立な弾性定数は、オリビンと変型スピネルでは共に9個、スピネルでは3個)とそれらの温度圧力依存についても、3多形の各々について、MD値が高精度で実測値を再現することを見出した。引き続き、マントル内410km、520km地震波不連続面を想定した温度圧力条件下におけるP及びS地震波速度をMD法を用いて求め、得られた結果を地震波観測データと比較した。加えて、温度2000K、圧力30GPaの範囲における3多形のT-P-V状態方程式、体積弾性率、剛性率のMD値を提出する。