

斜長石の分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulation of plagioclase feldspar

三宅 亮 [1]

Akira Miyake [1]

[1] 東工大・理工・地球惑星

[1] Earth and Planetary Sci., TITECH

斜長石の低温での相関係を明らかにするために、2種類の異なる構造（クラスター・ランダム構造、ラメラ構造）を用いて分子動力学シミュレーションを行った。その結果、クラスター・ランダム構造の過剰な自由エネルギーは上に凸を示し、さらにラメラ構造の自由エネルギーよりも大きな値を示した。これらの結果は、低温での加熱時間が十分長い場合中間組成の斜長石はアルバイトとアノーサイトの2相の相分離する可能性を示唆している。

[はじめに] アルバイト($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$)とアノーサイト($\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$)を端成分とする斜長石は、最も重要な造岩鉱物の一つである。斜長石は高温の無秩序構造ではアルバイトからアノーサイトまで完全固溶体を形成する。しかし、端成分であるアルバイトとアノーサイトの低温での秩序相では、Al/Siの秩序配列の仕方が全く違っている。そのため、低温でアルバイトとアノーサイトの間に完全に均質な秩序配列を持つ斜長石を形成することは不可能であり、中間組成での可能な秩序構造はアルバイトとアノーサイトの秩序構造をもつ2相に相分離すると考えられている。しかし、低温ではAl/Siの交換が非常に遅いため相分離を支持する熱力学データは未だ提出されていない。一方、分子動力学シミュレーションでは任意の初期構造を選ぶことが可能である。そこで本研究では低温での相関係を明らかにするために、2種類の秩序化している斜長石（クラスター・ランダム構造、ラメラ構造）の分子動力学シミュレーションを行った。

[分子動力学シミュレーション] シミュレーションは分子動力学計算プログラム, MXDTRICL (Kawamura, 1996, JCPE #077), を用いて行った。原子間相互作用モデルは、クーロン、近接反発、ファン・デル・ワールスおよびモース項からなる2体中心力形式を用い、パラメーターはアルバイトおよびアノーサイトの格子定数を再現するように経験的に決定した。クーロン力の計算にはエワルド法を用い、三次元周期境界条件を課し、2fs/stepにて運動方程式を解いた。初期構造として、クラスター・ランダム構造：アルバイトの構造中にアノーサイトの単位格子の半分からなるアノーサイトクラスターをランダムに配置した構造、ラメラ構造：アルバイトおよびアノーサイト端成分を(0-11)面を界面として接合したラメラ構造、の二種類を用意してシミュレーションを行った。

[結果と考察] クラスター・ランダム構造のシミュレーションの結果から過剰な自由エネルギーを見積もった。その際、エントロピーはアノーサイトクラスターの配置のエントロピーのみを考慮した。その結果、過剰な自由エネルギーは900K以下では上に凸のカーブを示し、1100K以上ではほとんど一定値を示した。この事はアルバイトとアノーサイトの2相分離の可能性を示唆している。また、ラメラ構造のシミュレーションの過剰な自由エネルギーと比較を行った結果、ラメラ構造の過剰な自由エネルギーの方がクラスター・ランダム構造よりも小さい値を示した。この事はラメラ構造の方がより安定な構造であることを意味しており、アルバイトとアノーサイトに相分離することをサポートしている。これらの結果は、低温での加熱時間が十分長い場合中間組成の斜長石はアルバイトとアノーサイトの2相の相分離する可能性を示唆している。