

660km 地震波不連続面における密度変化の分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulation of the density jump at the 660 km seismic discontinuity

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.

分子動力学法を用いた計算機シミュレーションにより、 Mg_2SiO_4 スピネル、 MgO 、 $MgSiO_3$ ペロフスカイトの常温常圧から高温高压に至る構造と物性（特に弾性）を高精度で求めた。加えて、得られたシミュレーション結果をこれら3相についての既存の構造・物性データ、及び地震波観測データと比較検討することにより、660km 地震波不連続面の密度差を詳細に検討した。

1. はじめに

マントル内 660km 地震波不連続面は、 $(Mg, Fe)_2SiO_4$ スピネルから $(Mg, Fe)SiO_3$ ペロフスカイトと $(Mg, Fe)O$ への相転移と考えられている。今回の研究の目的は、分子動力学法を用いた計算機シミュレーションにより、 Mg_2SiO_4 スピネル、 $MgSiO_3$ ペロフスカイト及び MgO の常温常圧から高温高压に至る構造と弾性定数を高精度で求めること、及び 660km 不連続面を想定した高温高压下における相転移に伴う密度変化をシミュレーションにより精度良く求め、得られたシミュレーション結果を地震波観測データと比較検討することにより、660km 不連続面での $(Mg, Fe)_2SiO_4$ 成分の割合を求めることにある。

2. ポテンシャルモデル

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、結晶内における多体相互作用として、イオンの反発半径が結晶場の影響を受けて、等方的に変化する breathing shell model (Matsui, 1998) を取り入れた。必要なエネルギーパラメータは、常温常圧下における上記3相とそれぞれの多形の実測のモル体積、体積熱膨張率、弾性定数、静水圧縮データを可能な限り再現するという条件を用いて経験的に求めた。圧力への量子補正は Matsui (1989) により行った。

3. 計算結果及び考察

300K, 0GPa における構造と弾性定数についての実測値と MD 値との一致は、3相とも極めて高精度であった。体積弾性率と剛性率、及びそれらの温度圧力依存、室温での静水圧縮、常圧での体積熱膨張についても、3相とも、実測データが存在する広範な温度圧力範囲にわたって、それぞれの実測値を高精度で再現することに成功した。室温における圧力 23.4GPa (660km 不連続面での圧力に対応する) での、 Mg_2SiO_4 スピネルから $MgSiO_3$ ペロフスカイトと MgO への相転移に伴う密度変化の実測値 (8.5 パーセント) は、MD 計算値 (8.6 パーセント) と極めて良く一致した。これらのことは、以下に述べる高温高压下における密度変化の MD 結果にかなりの信頼性を保証するものである。

660km 不連続面での密度変化についての地震波観測データは、PREM (Dziewonski and Anderson, 1981) によれば 9.3 パーセントである。一方、660km 不連続面からの反射波を用いた解析により、Estabrook and Kind (1996)、Shearer and Flanagan (1999) は、いずれも PREM に比べてかなり小さな密度変化 (それぞれ 6.2 及び 5 パーセント) を報告している。660km 不連続面を想定した温度圧力条件下 (温度約 1900K、圧力 23.4GPa) における、相転移に伴う密度変化の MD 計算値は 8.2 パーセントであった。この MD 結果を Shearer and Flanagan (1999) のデータ (5 パーセント) と比較することにより、660km 不連続面における $(Mg, Fe)_2SiO_4$ 成分の割合として約 61 パーセント (体積比) を得るが、この値はパイロライトモデル (約 60 パーセント) と調和的である。一方、MD 値と PREM による密度変化の比較は、660km 不連続面での $(Mg, Fe)_2SiO_4$ 成分の割合が 100 パーセント以上との非現実的な値を与えることが明らかになった。