

マントル内 660km 不連続面における密度及びバルク音速変化について

On the density and bulk sound velocity jumps at the 660 km seismic discontinuity in the mantle

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.

我々は最近、 Mg_2SiO_4 系結晶、 MgO ペリクレイス、 $MgSiO_3$ ペロフスカイトについて、結晶内の多体相互作用を考慮した精密な原子間ポテンシャルモデルを求めることに成功した。今回は、これらの精密なポテンシャルモデルを用いた分子動力学シミュレーションにより、マントル内 660km 地震波不連続面を想定した高温高压下（温度 1800 ~ 1900K、圧力 23.4GPa）における密度及びバルク音速変化を求め、得られた結果を 660km 不連続面についての地震波観測データと詳細に比較した。

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 $(Mg, Fe)O$ への相変化によると考えられている。我々は今回、分子動力学 (MD) 法を用いた計算機シミュレーションにより、上記相変化に伴う密度及びバルク音速 (bulk sound velocity) 変化を 660km 不連続面を想定した高温高压下で求め、得られた結果を、それら不連続面における地震波観測データと詳細に比較したので、その結果を報告する。

2. MD シミュレーション

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 (BSM) (Matsui, 1998) を考慮した。Mg 及び Si イオンの breathing については無視した。酸素イオンの BSM を含む必要なエネルギーパラメータは、 Mg_2SiO_4 スピネルについては Matsui (1999) を、 MgO については Matsui et al. (2000) を、また $MgSiO_3$ ペロフスカイトについては Matsui (2000) を用いた。圧力への量子補正は Matsui (1989) により行った。我々は、密度及びバルク音速変化の割合 (パーセント) について以下に議論する。マントル内では、鉄イオンが一部マグネシウムイオンを置換している。しかしながら、鉄 - マグネシウム置換が密度及びバルク音速変化の割合に与える影響は小さいので、今回はこの置換の影響を無視した。

3. 結果及び考察

我々が今回用いたポテンシャルモデルは、 Mg_2SiO_4 スピネル、 MgO 、 $MgSiO_3$ ペロフスカイトのいずれについても、常温常圧から高温高压に至る広範な温度圧力範囲に渡って、それぞれの実測の構造、弾性定数、及びそれらの温度圧力依存を高精度で再現することに成功している。これらの結果は、以下に述べる 660km 不連続面を想定した高温高压下 (温度 1800 ~ 1900K、圧力 23.4GPa) における MD の予測値にもかなりの信頼性を保証するものであろう。

660km 不連続面における、密度及びバルク音速変化についての地震波観測データは、用いるデータの種類、解析手段の違いによりかなりの差が存在する。密度変化 (パーセント) については、PREM (Dziewonski and Anderson, 1981) の 9.3 から、ak135 (Kennett et al., 1995) が 7.3、EK1 (Estabrook and Kind, 1996) が 6.2、RJ91 (Revenaugh and Jordan, 1991) が 6.1、SF99 (Shearer and Flanagan, 1999) が 4.7 ~ 5.6、CC00 (Castle and Creager, 2000) が 4.2 である。バルク音速変化 (パーセント) については、ak135 が 5.3、sp6 (Morelli and Dziewonski, 1993) が 4.6、PREM が 3.4、SF99 が 0.0 ~ 2.0、EK1 が 0 と報告されている。660km 不連続面での鉱物組成として、pyrolite 組成あるいは piclogite 組成を考え、MD の結果をもとに、いずれの地震波モデルが妥当であるかを詳細に検討した。