Mm-P008 **時間：6月5日　17:00-18:30**

高温型－高圧型単斜エンスタタイトの相転移に関する分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulation of phase transition between high-temperature and high-pressure clinoenstatite

三宅　亮[1]，下林　典正[2]，北村　雅夫[2]，三浦　英治[3]
Akira Miyake[1], Norimasa Shimobayashi[2], Masao Kitamura[3], Eiji Miura[4]

[1] 京大・理・地球惑星，[2] 京大・理・地鉱，[3] 日特・総研
[1] Earth and Planetary Sci., Kyoto Univ., [2] Dept. of Geol. & Mineral., Kyoto Univ., [3] Dept. Geology and Mineralogy, Kyoto Univ., [4] R&D Center, NGK

高温型－高圧型単斜エンスタタイトの相転移について分子動力学シミュレーション実験（等温加圧実験）を行った。その結果、高圧で高温型エンスタタイトから高圧型エンスタタイトへ直接相転移するのが観察され、この相転移は体積が不連続に変化することから一次の相転移である事が分かった。

[はじめに] エンスタタイト(MgSiO3)の高温相としてはproto相以外に高温型の単斜相(HT-CEn)が報告されているが、その安定領域の存在に関しては未だ明確にはなっていない。さらに、高圧実験により高圧側に別の単斜相(HP-CEn)の存在が確認され、HP-CEnの空間群はHT-CEnと同じC2/cであると考えられている。しかし、両相の相関係に関してはまだ十分に研究されていない。そこで、本研究ではHT-CEnとHP-CEnの相転移の振る舞いに関して分子動力学(MD)シミュレーションを用いて研究を行った。

[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K2O-Na2O-CaO-MgO-Al2O3-SiO2系の25種類の鉱物を再現するように経験的に決定した（Miyake 1998)。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。2800, 2500, 2000Kの温度で、等温加圧・減圧実験を行った。基本セル内の粒子数は640粒子で行った。

[結果と考察] 2800, 2500Kでは高圧でHT-CEnからHP-CEnへ直接相転移するのが観察された。また、加圧・減圧実験ではヒステリシスが観察された。この相転移は体積が不連続に変化することから一次の相転移である事が分かった。一方、2000KではHT-CEnとHP-CEnとの間にこれらとは異なる相が出現した。すなわち、加圧実験ではHT-CEnから中間相をへてHP-CEnへ変化し、減圧実験ではその逆の変化が観察された。この中間相は、その対称性やO-chain, S-chainに対応した2種類のSiO4 chainの存在から低温型単斜エンスタタイト(LT-CEn)と確認できた。これら3種類の単斜エンスタタイトの構造を互いに比較すると、M2サイトを占めるMgと原子とO3サイトを占めるO原子との結合(M2-O3 結合)のつなぎ替えが、これらの単斜エンスタタイト間で起こっていることが確認された。このM2-O3結合のつなぎ換えを行うことによって、高圧ではM2O6八面体が整った形を示し、酸素原子の最密構造をとる事が分かった。また、今回の結果から三種類の単斜エンスタタイトの相関係図を得た。