

第一原理計算によるスピネルとペロフスカイトの圧縮機構

Compression mechanisms of the spinel and the perovskite by the first principles calculations

山本 知之[1], 戎崎 俊一[1]

Tomoyuki Yamamoto[1], Toshikazu Ebisuzaki[2]

[1] 理研

[1] RIKEN, [2] Advanced Computing Center, RIKEN

近年の高温高压実験装置の発展に伴い、地球内部環境下での多種多様なマントル物質の構造決定が活発に行われている。しかしながら、すべての環境下での実験を行うのは、現状ではまだ難しい。そこで、これらを補うために分子動力学法や第一原理計算法を用いたシミュレーションも盛んに行われており、高温・高压化での圧縮機構、構造相転移、弾性定数などが求められている。

本講演では、平面波擬ポテンシャルを用いた第一原理計算による gamma-spinel および MgSiO₃ ペロフスカイトの圧縮機構について発表する。この計算では、200GPa までの圧力範囲を GGA(Generalized Gradient Approximation) 近似のもとで計算を行った。実測の gamma-spinel および MgSiO₃ ペロフスカイトの圧縮率をこの計算で精度良く再現することが出来た。また、オリビンをはじめとする鉱物が水を多量に含む可能性が示唆されており、水を含むことによる圧縮率や弾性定数などの大きな変化が予想されている。しかしながら、現時点では高压化で水分子がどのような過程で鉱物中に侵入し、それら物質の物性値にどのように貢献しているかが十分に明らかにされていない。そこで、我々は今回 gamma-spinel および MgSiO₃ ペロフスカイトから MgO または SiO₂ を取り除き H₂O 分子を挿入するモデルを作成し、それらの圧縮機構について第一原理計算を行った。今回の計算から水を含ませた場合と純粋な gamma-spinel および MgSiO₃ ペロフスカイトの圧縮機構との間に大きな違いが現れたので、その結果を報告する。