

Forsterite-Monticellite 系の分子動力学計算

Molecular dynamics simulation of mixing properties in forsterite-monticellite system

三宅 亮[1], 三石 泰行[2]

Akira Miyake[1], Yasuyuki Mitsuishi[2]

[1] 京大・理・地球惑星, [2] 京大・理・地鋳

[1] Earth and Planetary Sci., Kyoto Univ., [2] Geology and Mineralogy, Kyoto Univ.

[はじめに] Olivine における Ca-Mg の置換の特性を調べるために、forsterite (Mg_2SiO_4 , Fo) - monticellite ($CaMgSiO_4$, Mnt) olivine 系における研究がこれまで数多く行われてきた。Adams and Bishop (1985) の実験により、過剰体積 Vex や bex, cex が負になり、aex が正になることが知られている。しかし、これらの合成実験を主体にした研究では、olivine 中の Mnt の固溶形態を直接観測されていない。一方、固溶体の諸物性がどのように決まるのかを知るための有力な手法に分子動力学(MD)法がある。たとえば赤松他(1996)はオリビン型固溶体について分子動力学計算を行っている。本研究では、Fo-Mnt 系固溶体の固溶形式に着目し MD 法を用いた計算機シミュレーションを行った。

[計算実験] 計算は分子動力学プログラム MXDORTO(Kawamura, 1996)を用い、常圧下・300~1900K の温度範囲で行った。固溶形式の異なる 2 種類のモデル、(I)olivine 中の M2 site を Ca がランダムに占めるモデル、(II)Mnt クラスタを作るモデル、に関して計算を行った。

[結果・考察] (I)Olivine 中の M2 site を Ca がランダムに占めるモデルにおいて、単位セルの大きさ、M2 site における Ca の位置を決める乱数の振り方、ポテンシャルパラメータを変更した計算、も併せて行ったが、このモデルでは Vex や bex, cex が全て正となり Adams and Bishop (1985)の実験値と合わないことがわかった。従来考えられている非対称正則固溶体モデルでは説明できない可能性が高い。

一方、(II)Mnt クラスタを作るモデルでは、様々な形態の Mnt クラスタで MD 計算を行ったが、どのモデルも実験値と完全には一致しなかった。しかし、いくつかの Mnt クラスタ・モデルでは、Vex, bex, cex が負になる場合があり、クラスタの入れ方によって種々のマクロ量が変化することが分かった。今回実施した MD 計算から、Fo-Mnt 系中で Mnt がクラスタを作るモデルには相当の妥当性があると思われる。本研究で考えたクラスタは、どれも実験値と完全には一致しなかったが、MD cell を大きくして様々な形態のクラスタで MD 計算を行うことにより、実験値と合致する固溶形態が見つかる可能性がある。