

Mg₂SiO₄ スピネルの温度 - 圧力 - 体積状態方程式

Temperature-pressure-volume equation of state of Mg₂SiO₄ spinel

松井 正典[1]

Masanori Matsui[1]

[1] 姫工大・理

[1] Fac. of Sci., Himeji Inst. of Tech.

1. はじめに

(Mg,Fe)₂SiO₄ スピネルはマントル遷移層の最重要鉱物である。我々は先に(Matsui, 1999)、高精度な原子間ポテンシャルを用いた MD シミュレーションにより、Mg₂SiO₄ の 3 種の多形 (オリビン、変型スピネル及びスピネル) の全てについて、それらの実測の結晶構造、弾性定数、熱膨張、静水圧縮データを極めて高精度で再現することに成功した。そこで今回は、MD シミュレーションを用いて、Mg₂SiO₄ スピネルについて、温度 2000K、圧力 30GPa までの温度 - 圧力 - 体積状態方程式を精密に求めることを試みた。マントル遷移層が関わる高温高压 X 線解析実験の際の圧力スケールとして特に有用であろう。

高温における圧力スケールとしては、金、白金、MgO 等が近年良く用いられている。Katsura et al. (2004) は、最近放射光を用いた高温高压 X 線解析実験により、Matsui et al. (2000) による MgO 圧力スケールに基づいて、広範な温度圧力範囲に渡って Mg₂SiO₄ スピネルの温度 - 圧力 - 体積関係を精密決定した。我々は今回これら Katsura et al. (2004) のデータに基づいて、MgO 圧力スケールと Mg₂SiO₄ スピネル圧力スケールを詳細に比較した。

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を取り扱うべく breathing shell model を適用した。マグネシウム及びケイ素イオンの breathing については無視した。酸素イオンの breathing を含む必要なエネルギーパラメータは、Matsui (1999) を用いた。構造、物性への量子補正は Matsui (1989) により行なった。

3. 結果と考察

Katsura et al. (2004) による、高温における MgO と Mg₂SiO₄ スピネルの温度 - 圧力 - 体積同時測定データを詳細に比較、検討した。その結果、MgO スケールと今回の Mg₂SiO₄ スピネルスケールが与える圧力値が、温度 1500 ~ 2000K、圧力 18 ~ 23GPa の範囲に渡って、非常に良く一致することを見出した。すなわち、両スケールが与える圧力値の差は、これらの温度圧力範囲で平均 0.1 ~ 0.2GPa であった。MD 計算が高温のシミュレーションに特に適した方法であること、及び MgO スケールと Mg₂SiO₄ スピネルスケールが全く独立に求められたことを考慮すれば、今回の結果は高温における、MgO スケールと Mg₂SiO₄ スピネルスケールの両者にかなりの高信頼性を保証するものである。

Matsui and Nishiyama (2002) は最近、Nishiyama et al. (2001) による MgO と金の温度 - 圧力 - 体積同時測定データに基づいて、マントル遷移層に対応する温度 1873K、圧力 20 ~ 24GPa において、Anderson et al. (1989) による金スケールは、MgO スケールと比べて 1.4(3)GPa 圧力を低く見積もりすぎると報告したが、今回の結果は、Anderson et al. (1989) による金スケールが高温で圧力を低く見積もりすぎるとの結論を再確認するものである。