

「造岩鉱物の分子動力学シミュレーション」

講演者：三宅 亮 (理学研究科 地球惑星科学専攻)

報告者：鵜生川太郎 (地球惑星科学専攻・地球物質科学講座)

J(2) b-2 は、地震学手法と地球物質科学手法の融合による水・熱フローの解明をめざし、沈み込む海洋プレートで生じている現象を解き明かすことを目的とする。ところが高温高压条件下の実験は困難であり、地下深部物質の物性を知ることは難しい。コンピューターを使った分子動力学シミュレーション(MD 法)を用いると、実験が困難であるような条件下での造岩鉱物の弾性や異方性を計算することができる。今回、MD 法を用いることにより、造岩鉱物のひとつであるエンスタタイト($MgSiO_3$)の弾性を計算することができた。求められた弾性から地震波速度を見積もった結果、地下 400km より浅い地震波速度の不連続面はエンスタタイトの相転移が関係している可能性が強いことが分かった。

1 . 造岩鉱物の分子動力学シミュレーション(MD 法)とは？

多粒子から構成される系を考え、鉱物の基本格子(粒子配置)、粒子の初期、速度粒子間相互関係を与えることにより、運動方程式の時間に関する近時方程式により全粒子に一斉に運動させ、シミュレーションを行う。これにより時間に対する粒子の位置と速度から各種のマクロ量を求めることができる。鉱物の動的性質を求めることができる点、高温高压条件など室内実験で困難な条件下での実験ができる点などが優れている点である。

2 . 地震波速度の決定方法

() 鉱物の弾性定数を求める

原子を結晶格子状に並べ、応力を加えて結晶格子をひずませるシミュレーションを行った。応力を変えると結晶格子は線形に変化し、結晶は弾性変形をしていることがわかった。フックの法則を用いれば、応力と歪みから弾性定数を求めることができる。今回求めたオルソエンスタタイト(以下 OEn と表記)の弾性定数は Weidner et al.(1978)にほぼ一致する(図 1)。

	c11	c22	c33	c44	c55	c66
MD	212.67	151.35	193.1	62.18	59.52	59.30
Weidner et al. (1978)	224.7	177.9	213.6	77.6	75.9	81.6
	c12	c13	c23			
MD	73.05	72.68	62.82			
Weidner et al. (1978)	72.4	54.1	52.7			

図 1. 300K,1atm におけるオルソエンスタタイトの弾性定数

() 多結晶体・岩石の弾性特性を推定

岩石は通常多結晶体であり、求められた鉱物の弾性定数をそのまま適用することはできない。結晶方位の分布関数とコンプライアンスもしくは stiffness の積をすべての方向に積分することで単結晶の弾性定数から多結晶体の弾性定数を求めることができる。これらの方法は Voight(1928)や Reuss(1929)や Hill(1952)によって提案されている。

() 地震波の推定

求められた弾性定数を用いて方程式を解くことによって V_p, V_s を求めることができる(図 2)。今回は地震波を isotropic として解いた。地震波速度の異方性を考える場合は方程式を斜方晶系・単斜晶系について解くことで各軸方向の地震波速度を求めることができる。

	R	V	VRH
V_p (OEn)	7.6129	7.6883	7.6506
V_s (OEn)	4.3024	4.3290	4.3157
V_p (CEn)	7.6727	8.0087	7.8407
V_s (CEn)	4.3871	4.5272	4.4572

図 2. Reuss, Voight, Hill(VRH)それぞれの弾性定数から求めた地震波速度

3 . 実際への適応の例

地震波速度は 660km, ~410km で不連続面があり、これらはカンラン石の相転移が原因であることが知られているが、それより浅い~200km もしくは~300km にも地震波不連続面が存在する。マントルの代表的な造岩鉱物のひとつであるエンスタタイトの相平衡図 (Gasparik,1990;Miyake et al.,2002)からこの地震波不連続面がエンスタタイトの相転移であると予測し MD 法による解析を行った。ポテンシャル関数にはクーロン力、近接反発力、van der waals 項、Morse 項を考え、ポテンシャルパラメーターは Miyake (1998)を用いた。

温度 1000K では 7GPa 付近で OEn もしくは低温型クライノエンスタタイト (LT-CEn) から高压型クライノエンスタタイト(HP-CEn)への相転移が起こる。MD 法を用い OEn,

LT-CEn, HP-CEn それぞれの地震波速度を求めた結果、相転移圧力付近で V_p に 1.9%、 V_s に 11.9%の地震波速度ギャップが観察された(図 3)。相転移圧力の 7GPa は~200km の地下深部に対応する。

温度 1700K では 9GPa 付近(深さ~300km に対応)で相転移が起こる。MD 法を用い解析した結果、相転移圧力付近で V_p に 2.3%、 V_s に 7.1%の地震波速度ギャップが観察された。これにより~200km, ~300km の地震波不連続面とエンスタタイトの相転移は関係があることが分かった。

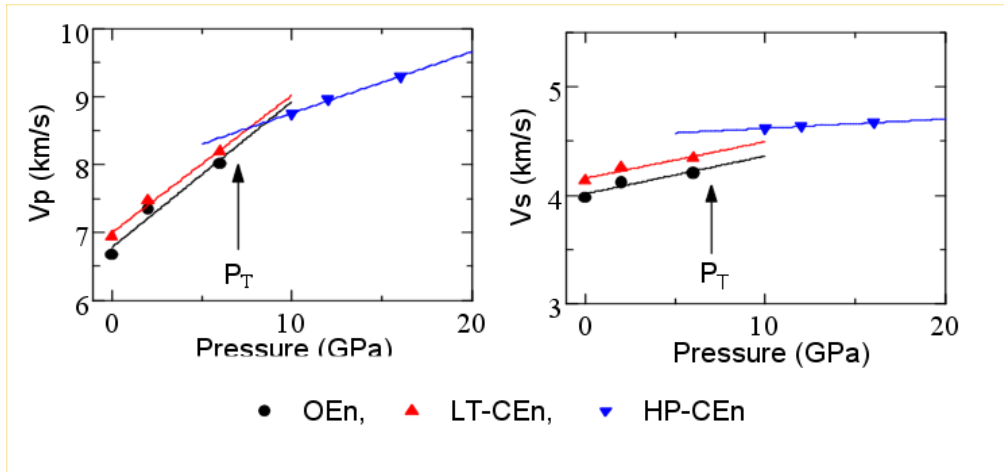


図 3. 1000K における地震波の圧力変化(P_T は相転移圧力)