

三浦英治 MIURA Eiji

京都大学大学院理学研究科 Graduate School of Science, Kyoto University

研究題目 「単斜輝石の相変化と微量元素の挙動」

Phase change and behavior of trase-element in clinopyroxene

期間 1998/03/08 ~ 1998/03/10

受入教官：基礎宇宙化学部門 中村栄三

1. はじめに エンスタタイト($MgSiO_3$)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いまだ明確になっていない。さらに、最近の高圧実験によって、高圧側に別の単斜相(HP-CEN)の存在が確認された。HP-CEN の空間群は他の鉱物との類推により HT-CEN と同じ $C2/c$ であると考えられているが、両相の構造の関係はまだ十分に研究されていない。本研究では分子動力学(MD)法を用いることにより、単斜エンスタタイトの高温型と高圧型の構造を再現した。その結果、HT-CEN \leftrightarrow HP-CEN の間で、空間群が同じにもかかわらず、1次の相転移が起きることが観察された。

2. 分子動力学法 計算は分子動力学計算プログラム MXDTRICL を用いて行った。ポテンシャルモデルは部分イオン性2体ポテンシャルモデル(クーロン項・近接反発項・ファンデルワールス項・モース項)、パラメータは Miyake(1998)のものを使用した。温度・圧力制御には強制スケーリング法を用い、それぞれ 300K~2000K, 0GPa~20GPa の範囲で計算を行った。基本セル内の粒子数は 640 粒子($2a \times 2b \times 4c$)で計算を行った。

3. 結果と考察 低温型単斜相(LT-CEN)を初期構造とし、常圧のまま温度を上昇させると 1200K 付近で HT-CEN へ一次の相転移が起きた。空間群は LT-CEN の $P2_1/c$ から HT-CEN の $C2/c$ へ変化することを確認した。次に温度を 2000K に保ったまま、HT-CEN の圧力を段階的に 3GPa ずつ上昇させると 15GPa で格子定数に大きな変化があり、その体積変化の不連続性から別の相に転移したことが分かる。この相は、空間群は HT-CEN と同じ $C2/c$ だが、原子座標データや SiO_3 chain の角度、特徴的な β 角の角度などから HP-CEN であると判断された。

次に、得られた HP-CEN を同様に等温で圧力を段階的に下げたところ、5GPa 付近で HT-CEN へ相転移した。この相転移圧のヒステリシスと前述の体積の不連続性から、HT-CEN と HP-CEN の間で空間群が $C2/c$ で同じにもかかわらず1次の相転移が起きることが分かった。

ただ、厳密に言えば、圧力をあげていった際に HT-CEN から HP-CEN へ直接相転移するのではなく、6GPa, 9GPa, 12GPa で LT-CEN (SiO_3 chain が2種類に分かれる)を経由している。これは、本来安定な斜方エンスタタイトの代わりに、構造の似通った LT-CEN が出現しているものと思われる。