OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Molecular Dynamics of Pressure-Induced Structural Transformations and Elastic Stability in Oxide Minerals
Author(s)	土屋, 卓久
Citation	大阪大学, 2000, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.11501/3169163
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

氏名	土屋卓久（つちやたく）
博士の専攻分野の名称	博士（理学）
学位記番号	第 15201 号
学位授与年月日	平成12年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科宇宙地球科学専攻
学位論文名	Molecular Dynamics of Pressure-Induced Structural Transformations and Elastic Stability in Oxide Minerals （酸化物鉱物の圧力誘起構造相転移と弾性安定性に関する分子動力学計算）
論文審査委員	（主査） 教授 山中 高光 （副査） 教授 赤井 久純　教授 河原崎修三　教授 武居 文彦 東京工業大学理学研究科教授 河村 雄行

論文内容の要旨

分子動力学法を用いて地球内部物質或いはその高圧アナログ物質として極めて重要である酸化物鉱物 MgO、CaO、GeO_2、$MgGeO_3$ に関し、その圧縮挙動や圧力誘起構造相転移を再現し、転移における原子変位や高圧下での弾性特性、高圧下での化学結合性の変化から転移のメカニズムの解明を試みた。さらに転移に対する非静水圧性の影響に関し議論した。またそのための計算手法の開発を行った。

地球内部の層構造は、主に構成物質である鉱物の構造相転移に起因する。沈み込むスラブの流動特性や深発地震の起源などの固体地球の動的性質にも、構成鉱物の構造転移が重要な役割を果たす。圧力誘起構造相転移の原子・分子などの微視的レベルからの理解は地球科学的のみならず、鉱物学的、結晶学的また固体物理学的に極めて意義深いものである。地震波の観測は地球内部構造を知る上で最も直接的且つ基礎的な手段であるが、弾性波には固体の原子構造や化学結合の特徴が反映されるため、高圧下での物質の弾性特性は地球科学的に重要であるばかりでなく物質科学的にも意義深い。技術的困難さから実験的に精度良い結果が得られる温度・圧力領域は常温常圧近くのごく狭い範囲に限られる。任意の温度・圧力条件下で多粒子系の時間発展を計算する分子動力学計算法は極めて有効な研究手段である。

物質の弾性特性を正しく再現するために電荷平衡化法に基づく多体汎関数ポテンシャルモデルを用いた新しい分子動力学法の開発を行った。また計算に必要な原子間モデルポテンシャル・パラメータを密度汎関数理論に基づくフルポテンシャル・マフィンティンオービタル法により第一原理的に決定することにより、計算結果の信頼性の飛躍的向上に成功した。

低圧構造と高圧構造の幾何学的変化過程をまとめた結果、酸化物鉱物の高圧転移においては基本的にイオン充填形式の変化を伴うが、最密充填配列を実現するよりも陽イオンの配位数を増加させることで高密度構造を実現しやすいことを示した。

CaO をはじめとして多くのイオン性固体に見られる B1－B2 転移、GeO_2 をはじめとしてクォーツ型物質に見られる非晶質転移やルチル型化合物のポストルチル転移が、それぞれ c_{44}、$(c_{11}+c_{12})\,c_{33}-2c_{13}^2$、$c_{11}-c_{12}$ の減少に起因する弾性不安定化により生じることを示した。結晶構造変化や諸物性値の時間発展と弾性不安定化の関連性を詳細に検討し、一次転移と二次転移における不安定化の相違を論じた。特にクォーツの非晶質転移、ルチル－$CaCl_2$ 強弾性転移、高圧単斜輝石の高圧相転移などは弾性不安定化に直接起因して生じる転移であると考えられる。またポストルチル構

造が $c_{11}-c_{12}$ の温度依存性により分類できることを示した。さらに異方性弾性波速度を算出し、弾性異方性が圧力に極めて敏感であることや特に横波速度異方性に直接弾性不安定化が直接反映することを示した。また不安定化に関連する応力が転移を活性化し転移圧を下げるように影響することを示し、特殊な非静水圧下では静水圧下とは異なる相転移が生じる可能性を示した。

論文審査の結果の要旨

新しく多体間ポテンシャルを考慮した分子動力学計算方法を開発し、高圧高温状態での物質の構造の再現・予察と構造相転移の機構を解明した。得られた弾性定数の圧力、温度変化、さらに弾性速度から弾性安定性の議論を展開し、新しい転移機構の提案を行った。

以上の結果から博士（理学）の学位論文として十分価値あるものと認める。