様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成２２年　５月２５日現在

研究種目：基盤研究（C）
研究期間：2007～2009
課題番号：１９５４０５０６
研究課題名（和文）鉱物組織形成過程の統計物理学的描像の構築にむけて

研究課題名（英文）　Construction of statistic physical images of formation processes of minerals

研究代表者
北村　雅夫（KITAMURA MASAO）
京都大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号：70004489

研究成果の概要（和文）：
成長組成累帯構造の統計力学的描像の構築と数値計算を行い、斜長石とガーネットの累帯構造と比較し、天然における温度・圧力変化における加速度変化の推定を行なった。ガーネットの累帯構造からは初めて広域変成岩作用中での接触変成作用の存在を推定した。また、非平衡な過程ではセクター構造と逆累帯構造のオーバーラップすることを見出した。さらに、構築した統計物理学的描像に基づいた地球惑星物質科学の新しい教育を行った。

研究成果の概要（英文）：
An image of mineral behavior during growth was constructed based on the statistic mechanics and compared with zonings in natural minerals. By the comparison, the acceleration of temperature-pressure changes in natural growth systems was estimated. These studies reveal an existence of contact metamorphism during region metamorphism and the overlapping of sector and reverse zonings in one crystal. In addition, a new education based on the images of mineral behaviors was performed.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2007 年度	1,700,000	510,000	2,210,000
2008 年度	900,000	270,000	1,170,000
2009 年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総　計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：数物系科学
科研費の分科・細目：地球惑星科学・岩石・鉱物・鉱床学
キーワード：鉱物・結晶成長・累帯構造・元素分配

１．研究開始当初の背景

地球や惑星で生じる最も基本的な過程の一つは、地球や惑星を構成する物質（鉱物）の温度圧力変化に伴う相変態や化学的変化である。これらの変化によって天体の化学進化・分化などが生じる。その時、鉱物の内部にはそれらの変化による組織が形成される。

逆に、この内部組織は、鉱物や岩石の履歴ひいては地球・惑星の進化を明らかにする上で不可欠な情報を提供する。そのため、地球惑星物質の組織解析がその進化の研究で最も重要であり、古くから多くの研究が行われてきた。

地球惑星物質の履歴の解読では未知の条件下で形成した組織からその生成環境を逆に推定を行うため、どのように組織が形成されるかについての理論が必要不可欠である。しかしながら、地球惑星物質の組織形成に関する既存の理論の多くは熱力学に立脚するかあるいは現象論的であるため、天然での物質進化の詳細を本質的に理解するためには未発達であった。特に高い非平衡下で形成されたと考えられている鉱物に見られる組織の解析では、熱力学に立脚したものや現象論には自ずと限界があった。また、組織記載も現象論を背景にしたものが多く、複雑な現象の本質を理解する上で足かせとなってきた。したがって、局所平衡の仮定や現象論を離れてより予言性のある理論を構築することが求められていた。最近、申請者らは、結晶成長時の晶相変化と実効元素分配がどのように与えられるかという、古くから最も基本的であるとされてきた２つの問題を、その場にかかわる原子の振る舞いを統計力学的手法から解析し、基本的な解決をみた。したがって、このような統計物理学的な基礎理論に基づいて、天然鉱物の組織形成の研究が行えるという新しい局面を迎えるようになっていた。

２．研究の目的

本研究では、統計物理学的観点から地球や隕石を構成する造岩鉱物の組織形成過程の統計物理学的描像の構築を目指す。本研究期間中では、特に、鉱物の成長に伴う組織形成過程を集中的に取り扱う。さらに、構築する統計物理学的描像に基づいた地球惑星物質科学の新しい教育を世界に先駆けて試みる。

３．研究の方法

本研究は、以下のような解析的研究、数値計算法、そして天然鉱物の組織観察の3つの方法を併称して行った。

理論的研究では、すでに提唱した新しい理論を基礎として、統計力学的立場から結晶成長による形や化学組成の変動に関する一般的な場合への理論の拡張を、北村を中心とした。提唱した理論（Kitamura and Matsumoto, 2004）は、２成分系において、２成分固溶体結晶がそのメルトから成長する場合である。天然の火成岩中の斜長石に適用するためには、多成分系からの２成分固溶体の成長に理論を拡張する必要があったが、多成分系の格子溶液モデルを新たに構築する事で、拡張した。

拡張した理論によると、連立常微分方程式を解く事になるが、解析的には解けないため数値計算法を用いた。まず、プログラミングし、超高速演算処理システムを用いて、岩石の温度・圧力変化に伴う成長組成累帯構造の数値計算を行った。温度・圧力変化による計算では、①その加速度を変える、②元素（分配係数）を変える、③元素濃度を変える、という事に留意して進めた。数値計算した成長組成累帯構造の特徴を、温度・圧力変化における加速度と対応させて整理した。

天然の斜長石とガーネットの成長組成累帯構造の特徴と、理論による成長組成累帯構造の特徴を比較し、天然における温度・圧力変化における加速度の推定を行った。

４．研究成果

本研究の結果、以下のような成果を得た。

（１）　成長組成累帯構造の統計力学的描像の構築　：　温度・圧力を変化させた場合、特にその加速度、元素（分配係数)、元素濃度を変えの成長組成累帯構造の数値計算を行なった。これらの計算結果と斜長石とガーネットの成長組成累帯構造の特徴と比較し、天然における温度・圧力変化における加速度変化の推定を行なった。その代表的な成果は、三波川変成岩中に産するガーネットの逆累帯構造は、温度・圧力変化に比べて遅れた核形成によって形成されたことが示唆され、初めて広域変成岩作用中での接触変成作用の存在が推定できたことである。

（２）　他の組織形成過程に関する統計力学的描像の構築　：　成長組成累帯構造に関する理論に結晶方位依存性を置くことで、セクター構造の統計力学的解析を行なった。その成果として、非平衡な成長過程ではセクター構造と逆累帯構造がオーバーラップしている可能性が高いことを見出した。この結果と輝石などの累帯構造の特徴を比較し、理論的な予測の正当性を見出した。

（３）　結晶の成長の伴う組織の全体像の構築　：　（１）と（２）の研究を統合して、天然での結晶化過程での元素分配の微視的描増を得ることが出来た。しかしながら、未だに理論が確立していない振動成長については一般的な解は得られなかったが、不純物のある特殊な場合に振動するという結果を得た。

（４）これらの研究成果を用いて、大学院教育を行い、統計物理学的描像に基づいた地球惑星物質科学の新しい教育を行った。

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計　８件）
論文

1. Jun Kawano, Norimasa Shimobayashi, Akira Miyake and Masao Kitamura. Precipitation diagram of calcium carbonate polymorphs: its construction and significance. Journal of Physics: Condensed Matter, 21, 425102, (2009), 査読有.
2. Jun Kawano, Akira Miyake, Norimasa Shimobayashi and Masao Kitamura. Molecular dynamics simulation of the phase transition between calcite and CaCO3-II. Journal of Physics: Condensed Matter, 21, 275403, (2009), 査読有.
3. Jun Kawano, Akira Miyake, Norimasa Shimobayashi and Masao Kitamura. Molecular dynamics simulation of the rotational order - disorder phase transition in calcite. Journal of Physics: Condensed Matter, 21, 095406, (2009), 査読有.
4. Kiiko Matsumoto, Toshiharu Irisawa, Etsuro Yokoyama, and Masao Kitamura: Growth of a binary ideal solid solution crystal studied by Monte Carlo simulation. Journal of Crystal Growth, 310, 646-654 (2008), 査読有.
5. Masaru Ibuki, Yoshikazu Fujimoto, Masaki Takaya, Akira Miyake and Takao Hirajima. Howieite from meta-manganese-siliceous rock in the Hakoishi serpentinite melange of Kurosegawa belt, western Kyushu, Japan. Journal of Mineralogical and Petrological Sciences, 103, 365-370, (2008), 査読有.
6. Hidemi Ishibashi, Masashi Arakawa, Shugo Ohi, Junji Yamamoto, Akira Miyake, and Hiroyuki Kagi. Relationship between Raman spectral pattern and crystallographic orientation of a rock-forming mineral: a case study of Fo89Fa11 olivine. Journal of Raman Spectroscopy, 39, 1653-1659, (2008), 査読有.
7. Shugo Ohi, Akira Miyake, Norimasa Shimobayashi, Masatomo Yashima, and Masao Kitamura. An isosymmetric phase transition of orthopyroxene found by high-temperature X-ray Diffraction. American Mineralogist, 93, 1682-1685, (2008), 査読有.
8. Yoshio Kono, Akira Miyake, M. Ishikawa, and M. Arima. Discontinuous change in temperature derivative of elastic wave velocities in plagioclase (An51±1) above and below the order-disorder transition temperature. American Mineralogist, 93, 558-564, (2008), 査読有.

〔学会発表〕（計　９件）

発表　（筆頭のみ）
1. 三宅亮・川野潤；アラゴナイトの高温分子動力学シミュレーション・分子シミュレーション討論会・名古屋市中小企業振興会館（名古屋）・2009 年 11 月 30-12 月 2 日
2. 北村雅夫：らせん成長する多面体間の晶相変化・第 39 回結晶成長国内会議・名古屋大学（名古屋）・2009 年 11 月 12 日―14 日
3. 三宅亮・川野潤；アラゴナイトの高温分子動力学シミュレーション・日本鉱物科学会 2009 年会・北海道大学（札幌）・2009 年 9 月 8-10 日
4. 北村雅夫；多面体間の晶相変化：理論的研究・日本鉱物科学会 2009 年会・北海道大学（札幌）・2009 年 9 月 8-10 日
5. 三宅亮；アラゴナイト(CaCO3)の MD 計算・物質・材料研究機構　ナノ構造制御グループ研究会・物質・材料研究機構（つくば）・2009 年 7 月 16 日
6. 北村雅夫：高速輸送路と晶相変化：2 次元結晶・第 39 回結晶成長国内会議・名古屋大学（仙台）・2008 年 11 月 4 日―6 日
7. 三宅亮・崎山智昭・外田智千；東南極ナピア岩体に産する超高温変成岩中の sillimanite の微細組織・日本鉱物科学会 2008 年会・秋田大学（秋田）・2008 年 9 月 20-22 日
8. 三宅亮・崎山智昭・外田智千；東南極ナピア岩体に産する超高温変成岩中の sillimanite の微細組織・第 27 回南極地学シンポジウム・国立極地研究所（東京）・2007 年 10 月 18-19 日
9. 三宅亮・外田智千・鳥越洋平；東南極大陸ナピア岩体に産する石英中に産する ferropseudobrookite について・日本鉱物科学会 2007 年会・東京大学（東京）・2007 年 9 月 22-24 日

〔図書〕（計 0 件）
〔産業財産権〕
○出願状況（計０件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計◇件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

６．研究組織
(1)研究代表者
北村　雅夫（KITAMURA MASAO）
京都大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号：70004489

(2)研究分担者
三宅　亮（MIYAKE AKIRA）
京都大学・大学院理学研究科・准教授
研究者番号：10324609

(3)連携研究者
（　　）

研究者番号：