弾性論と地球内部の弾性的性質 (II)

京都大学理学部地球物理学教室 島 通 保

(昭和 30 年 3 月 28 日)

Elastic Theory and Elastic Properties of the Earth's Interior (II)

Michiyasu SHIMA

Geophysical Institute, Kyoto University

(Received March 28, 1955)

On the assumption that the mantle is composed of the ionic crystals, the distribution of the ratio of bulkmodulus k to density ρ and the pressure p is investigated by means of the atomic theory to reveal the change occurring between the layers B (33 km~413 km) and D (1000 km~2898 km). It is found that, if this change were the polymorphic transition from low pressure phase to the higher one, the decrease of the gradient of k/ρ would occur between B and D . Then, this may be of the chemical composition. If so, the dissociation energy and the reduced density ρ_0 increase and the inverse power n of the potential between the atoms hardly change there.

1. 序

地震波速度から分かる k/ρ 等のような量の変わり方を見てみると, Bullen のいわゆる B 層 (33 km~413 km), D 層 (1000 km~2898 km) では単調に増大している. それで, Bullen は密度の分布その他を出す時, B 層, D 層の物質はそれぞれ同一のものであると仮定した. こゝでも同様に考える. 所が C 層 (413 km~1000 km) での k/ρ の変わり方は異常であつて, k/ρ の勾配は急に増大する. k/μ をとつてみても, 又異常な変わり方をしている. 以上のような変化は C 層の物質の構成の変化に帰せられてきた. 例えば 1) Bernal¹⁾ は高压の位相に物質が多形転移したものであることを示唆したし, 2) Birch²⁾ は化学組成が変化したと考えた. こゝでは先ず 1) の多形転移の可能性から考えて見た. 結果として次のように言える. 地球内部について我々の持つてゐる直接的で確かな知識は地震波速度だけであるが, 少なくとも, C 層での地震波速度, 従つて k/ρ のような量の異常な変化を, 多形転移に帰してはならない.

2. k/ρ の分布と mantle の構造

地球内部を構成している物質は同じ場所で色々の鉱物が混合しており, 結晶構造も複雑なものであつて, そのまゝ取扱うわけにもいかないのだから, 上述の性質を表示し得る簡単で典型的のだと思われるものを取上げ, それに還元して取扱うことにする. こゝでは 2 つの原子から成るイオン結晶で NaCl 型のものと CaCl 型のものを取上げた.

高压下の多形転移の実験で AgI のような NaCl 型のものに数千気圧以上の大きい圧を

加えると, CsCl 型に多形転移することが知られている. 例えば AgI では 4500 気圧, NaI では 50000 気圧で CsCl 型に多形転移する³⁾. 所で弾性常数を圧力や温度の函数として, 結晶構

Fig. 1. Crystal lattice

造を仮定して原子論的に表わす時, それは等温的な物理量なので地震波から出される断熱的な k_s/ρ を等温的なものに換算する. その比をとると

$$k_s/k_T = 1 + T\alpha\gamma_G \quad (1)$$

k_s : 断熱的体積弾性率, k_T : 等温的体積弾性率, T : 温度, α : 熱膨張係数,

γ_G : グルナイゼン常数

こゝで T は地球内部深くなるにつれて増大し, α は主に圧力のため減少する. 又 γ_G はほぼ一定でゆつくり減少するが結局 33 km~2898 km では $T\alpha\gamma_G$ はほぼ一定と見て差支えない. olivine 等の岩中で見られる $\alpha=20.10^{-1}$, $\gamma_G=1.5$, $T=1000^\circ\text{K}$ を採用すれば $T\alpha\gamma_G=0.03$ となる. 即ち k_T は 3% 程度 k_s より小さい. k_s/ρ は Jeffreys⁷⁾ のものである.

結晶構造から原子論的に k_T/ρ , p を表示するには前の [I] で出した c_{ij} と k_T の関係を使う.

$$k_T/\rho = [c_{11} + 2(c_{12} + p)]/3\rho \quad (2)$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial e_1}\right)_{e=0} \quad c_{ij} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial e_i \partial e_j}\right)_{e=0} \quad (3)$$

$$F = \phi + \frac{kT}{vN} \sum_{p=1}^m \log \left(\frac{\hbar w_p}{kT} \right) \quad (4)$$

N : 1 mol あたりの原子数, v : 1 原子あたりの体積, w_p : 格子原子の振動数

結晶の種類としては今の場合, イオン結晶を取上げることにしたから, 異原子間に働く力は静電的な引力とイオンの重合いによる反撥力, 同原子間では静電的な反撥力とイオンの重合いによる反撥力である. 即ち

$$\phi_{AB} = \frac{\alpha_{AB}}{\gamma_{AB}} + \frac{\beta_{AB}}{\gamma_{AB}^n} \quad \beta_{AB} = \beta_0 \left(\frac{z_A}{N_A} + \frac{z_B}{N_B} \right) (R_A + R_B)^{n-1} \quad (5)$$

第二項の反撥力の項は Pauling⁴⁾ によつて導出されたものである。水素原子類似イオンに還元して、Heitler-London の方法を使つて出した表示を更に簡単化したものであつて、イオン間距離がこの半径の和以下になると、急に反撥ポテンシャルが大きくなるとするのである。こゝでの z はイオンの荷電数、 N はイオンの外殻電子数である。そうするとポテンシャルエネルギー ϕ は

$$\phi = \frac{1}{2vN} \sum_i \left(\frac{\alpha_{AB}}{r_i} + \frac{\beta_{AB}}{r_i^n} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha}{a} S_1^0 + \frac{\beta}{a^n} T_{n^0} \right) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} r_i = & a(l_i^2 + l_2^2 + l_3^2) + a^2 \{ 2(l_1^2 e_1 + l_2^2 e_2 + l_3^2 l_3^2 e_3 + l_2 l_3 c_4 + l_3 l_1 e_5 + l_1 l_2 e_6) \\ & + l_1^2 (e_1^2 + e_5^2/4 + e_6^2/4) + l_2^2 (e_2^2 + e_6^2/4 + e_4^2/4) + l_3^2 (e_3^2 + e_5^2/4 + e_4^2/4) \\ & + (l_2 l_3/4)(e_5 e_6 + 2e_2 e_4 + 2e_3 e_4) + (l_3 l_1/4)(e_4 e_6 + 2e_3 e_5 + 2e_2 e_5) + (l_1 l_2/4)(e_4 e_5 + 2e_1 e_6 + 2e_2 e_6) \} \end{aligned} \quad (7)$$

$$\beta T_n = (\beta_{++} + \beta_{--}) S_n^{++} + 2\beta_{+-} S_n^{+-} = \beta (S_n^{++} + \delta S_n^{+-}) \quad (8)$$

l_1, l_2, l_3 は Fig. 1 の a を単位とした格子点の番号である。 S_n^{++}, S_n^{+-} はそれぞれ同符号、異符号についての総和を表わす。又、 p, c_{ij} は振動エネルギーの項を除いて (3), (4) から⁵⁾

$$p = \frac{a^4}{2v} \left(\frac{\alpha}{a} S_3^{(1)} + \frac{n\beta}{a^n} T_{n+2}^{(1)} \right) \quad (9)$$

$$C_{11} = \frac{a^4}{2v} \left[\frac{\alpha}{a} (3S_5^{(2)} - S_3^{(1)}) + \frac{n\beta}{a^n} ((n+2)T_{n+4}^{(2)} - T_{n+2}^{(1)}) \right] \quad (10)$$

$$c_{12} = \frac{a^4}{2v} \left[\frac{3\alpha}{a} S_5^{(1,1)} + \frac{n(n+2)}{a^n} T_{n+4}^{(1,1)} \right] \quad (11)$$

$$c_{44} = \frac{a^4}{2v} \left[\frac{\alpha}{a} \left(3S_5^{(1,1)} - S_3^{(1)}/2 \right) + \frac{n\beta}{a^n} ((n+2)T_{n+4}^{(1,1)} - T_{n+2}^{(1)}/2) \right] \quad (12)$$

$$S_n^{(p,q,r)} = \sum \frac{l_1^{2p} l_2^{2q} l_3^{2r}}{(l_1^2 + l_2^2 + l_3^2)^{n/2}} \quad (0, 0, 0) \rightarrow (0) \quad (13)$$

$$(0, 0, 1), (0, 1, 0), (1, 0, 0) \rightarrow (1)$$

$$(2, 0, 0), (0, 2, 0), (0, 0, 2) \rightarrow (2)$$

$$(1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1) \rightarrow (1, 1)$$

次に振動エネルギーの項をポテンシャルを使つて書換える。振動数 w_p についての総和は⁶⁾

$$\frac{1}{N} \sum_{p=1}^m \log w_p = \frac{1}{6} \log (\det [i, j]) - \frac{1}{2} \log \mu, \quad (14)$$

$$\det [i, j] = \begin{vmatrix} \phi_{11}^i & \phi_{12}^i & \phi_{13}^i \\ \phi_{21}^i & \phi_{22}^i & \phi_{23}^i \\ \phi_{31}^i & \phi_{32}^i & \phi_{33}^i \end{vmatrix} \quad \mu: \text{原子の質量} \quad (15)$$

$$\phi_{ij} = \delta_{ij} \frac{1}{r_2} \frac{\partial \phi^i}{\partial r_2} + r_{ii} r_{ij} \frac{1}{r_2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left(\frac{1}{r_i} \frac{\partial \phi^i}{\partial r_i} \right) \quad (16)$$

絶対温度零度，圧力零の時の間隔を a_0 ，従つてその時の密度を ρ_0 とすると， p ， c_{ij} は振動エネルギーからの項も考慮すると

$$p = -\frac{R\theta}{A} \rho \left[\frac{c}{2} \left(S_3^{(1)} - r \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{(n-1)/3} T_{n+2}^{(1)} \right) + \frac{(R_3^2 + 2R_3^{11} + 5R_2^1)T}{2(R_1^0 + R_2^1)\theta} \right] \quad (17)$$

$$c_{11} = \frac{R\theta}{A} \rho \left[\frac{c}{2} \left\{ (S_3^{(2)} - S_3^{(1)} + r \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{(n-1)/3} (T_{n+4}^{(2)} - T_{n+2}^{(1)})) \right\} \right. \\ \left. + \frac{\{(R_1^0 + R_2^1)(R_3^2 + 2R_3^{11} + 5R_2^1)/2 + (R_1^2 + R_2^1)(R_4^3 + 2R_4^{21} + 3R_3^2)/8 \right.}{2(R_1^0 + R_2^1)^2\theta} T \left. \right] \quad (18)$$

$$c_{12} = \frac{R\theta}{A} \rho \left[\frac{c}{2} \left(S_5^{(1,1)} + r \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{(n-1)/3} T_{n+4}^{(11)} \right) \right. \\ \left. + \frac{\{(R_1^0 + R_2^1)(2R_4^{21} + R_4^{111} + 3R_3^{111})/2 + ((R_3^2)^2 + 3(R_3^{11})^2 + 2R_3^2 R_3^{11})/4 \right.}{2(R_1^0 + R_2^1)^2\theta} T \left. \right] \quad (19)$$

$$c_{44} = \frac{R\theta}{A} \rho \left[\frac{c}{2} \left\{ (S_5^{(1,1)} - S_3^{(1)}/2) + r \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{(n-1)/3} (T_{n+4}^{(1,1)} - T_3^{(1)}/2) \right\} \right. \\ \left. + \frac{\{(R_1^0 + R_2^1)(R_3^2 + 2R_3^{11} + 5R_2^1)/4 + (R_1^0 + R_2^1)(2R_4^{21} + R_4^{11} + 3R_3^{11}) \right.}{2(R_1^0 + R_2^1)\theta} T \left. \right] \quad (20)$$

$$c = \frac{k\theta n}{n-1} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1/3} r^{1(n-1)}, \quad r = -\frac{S_1^{(0)}}{T_n^{(0)}}$$

$$R_s^{pqr} = \left[(-1)^{s+1} \cdot 1(1+2) \cdots \{1+2(s-1)\} S_{2s+1}^{pqr} + r \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{(n-1)/3} \right. \\ \left. \times (-1)^s \cdot 1 \cdot (n+2) \cdots \{n+2(s-1)\} T_{2s+n}^{pqr} \right] \frac{c}{a_0^2} \quad (21)$$

$k\theta$: 解離エネルギー， R : ガス常数， A : 平均原子量。

$S_n^{(pqr)}$ を (13) の和の形式から積分による表示に改めると

$$S_n^{(pqr)} = \frac{1}{\Gamma(n/2)} \int_0^\infty u^{n/2-1} (\sum l_1^{2p} l_2^{2q} l_3^{2r} e^{-l^2 u}) du = \frac{1}{\Gamma(n/2)} \int_0^\infty u^{n/2-1} \sigma_{(u)}^{(pqr)} du \quad (22)$$

で $S_n^{(pqr)}$ の間には次のような関係がある。

$$S_n^{(0)} = 3S_{n+2}^{(1)} \quad 3S_{n+4}^{(2)} + 6S_{n+4}^{(1,1)} = S_n^{(0)}, \quad S_{n+6}^{(3)} + 2S_{n+6}^{(21)} = S_{n+4}^{(2)} \quad (23)$$

基本となる $\sigma^{(0)}$ と $\sigma^{(2)}$ の表示を NaCl 型，CsCl 型について具体的に θ -函数を使つて示せば次のようになる。

$$\left. \begin{aligned} \sigma^{(0)}(4u) &= \theta_3^2(0, e^{-4u}) + 3\theta_3(0, e^{-4u})\theta_2^2(0, e^{-4u}) - 1 \\ \text{NaCl}_{++} \\ \sigma^{(0)}(4u) &= \theta_2^3(0, e^{-4u}) + 3\theta_3^2(0, e^{-4u})\theta_2(0, e^{-4u}) \\ \text{NaCl}_{+-} \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

$$\left. \begin{aligned} \sigma^{(2)}(4u) &= \theta_3^2 \frac{\partial^2 \theta_3}{\partial u^2} + \theta_2^2 \frac{\partial^2 \theta_3}{\partial u^2} + 2\theta_2 \theta_3 \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial u^2} \\ \text{NaCl}_{++} \\ \sigma^{(2)}(4u) &= \theta_2^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial u^2} + \theta_3^2 \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial u^2} + 2\theta_2 \theta_3 \frac{\partial^2 \theta_3}{\partial u^2} \\ \text{NaCl}_{+-} \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

$$\left. \begin{aligned} \sigma^{(0)}(4u) &= \theta_3^3 - 1, & \sigma^{(0)}(4u) &= \theta_2^3 \\ \text{CsCl}_{++} & & \text{CsCl}_{+-} & \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

$$\left. \begin{aligned} \sigma^{(2)}(4u) &= \theta_3^2 \frac{\partial^2 \theta_3}{\partial u^2} & \sigma^{(2)}(4u) &= \theta_2^2 \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial u^2} \\ \text{CsCl}_{++} & & \text{CsCl}_{+-} & \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

S_n の計算は Born 等^{6), 6)} のもの及びそこでのやり方に従つた。

B 層の物質の弾性常数, 圧力の変化に対応する諸常数 $\rho_0, \theta, n, \delta$ を決めねばならぬが, ここでは B 層と C 層の間で物質にどのような変化があるかを調べるのが目的であるから, として先づ低圧側から高圧側への多形転移の可能性について調べようとしているのであるから, B 層の物質としては低圧の位相の NaCl 型を採用する. B 層の p と $\rho, k_T/\rho$ と ρ の関係からこの層の物質を特徴づける $n, \rho_0, \delta, \theta$ を決めた. この時密度分布としては Bullen⁷⁾ の計算したものを採用した. 彼のものは断熱的な温度勾配を仮定しているので, 温度の分布もそれにそつた. A としては Mg-Olivine のもの 21 をとつた. そうすると

$$\delta=1, n=6, \theta=225000. \text{ C.G.S. unit. } \rho_0=3.45. \quad (28)$$

C 層に移ると k_T/ρ は Fig. 2 のように変化している. 多形転移に際しては, 原子の配位が変化するだけで $n, \theta, \delta, \rho_0, A$ 等の常数は不変である. 今例えば C 層の物質が 413 km から 800 km までに, この層の構成している物質が一段の多形転移を次々に起していつたとする. この附近の圧力の下では (17) からの算出により密度は多形転移の際 4% 前後増大する. ($\rho \rightarrow \rho'$)

$$\begin{aligned} \frac{k_T}{\rho} &= \frac{R\theta}{3A} \left\{ -1.0213 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1/2} + 2.298 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{n/3} + 12.000 \frac{T}{\theta} \right\} \frac{800-h}{387} \\ &+ \frac{R\theta}{3A} \left\{ -0.9440 \left(\frac{\rho'}{\rho_0} \right)^{1/3} + 1.9885 \left(\frac{\rho'}{\rho_0} \right)^{n/3} + 12.000 \frac{T}{\theta} \right\} \frac{h-413}{387} \end{aligned} \quad (29)$$

このような多形転移をグラフに表せば, Fig. 2 の点線のようになる. 即ち測定値からのものとは反対の傾向を持つている.

従つて, 測定値から導出された k_s/ρ の分布は Bernal その他の人々¹⁾ によつて示唆された多形転移の可能性を否定するようなものである. そうすると C 層での k/ρ の変化の異常性を説明するものとしては化学的組成の変化が一番可能性をもつように思われる.

次に化学的な組成に変化が起つたとした時、どのようなかを考えて見る。化学的な変化の中には始めのものとは違つた格子構造えの変化を同時に行うものも含まれるが、この点は今の場合二次的なものなので、同じ格子構造、例えばこゝでは NaCl 型で格子原子だけ変つた時

fig. 2. Distribution curve of $k_T/\rho F$

どのようなものえ 変るかを調べる。($\text{NaO} \rightarrow \text{MgO}$)。こゝで使つた物質構造のモデルでは弾性常数を決める諸常数 $n, \theta, \delta, \rho_0, A$ がどのように変るかを調べる。 B 層から D 層えと化学的に違つた組成のものに移つた物質は、 C 層と D 層の境で k_T/ρ が滑らかであることから、この点では同じものが続いていると考えられる。従つて C 層の下限の物質に対応する常数 n, θ, ρ_0, A はそのまま D 層全体にわたつて持続されるものと考えてよい。これらの事を考慮して、 A 層の物質の常数を決めた時と同様に新しい値を決めると

$$\delta=1, \theta=225000, \rho_0=3.45, n=6, A=21$$

$$\delta=1, \theta=430000, \rho_0=4.20, n=5, A=21$$

(30)

即ち解離エネルギー $u=k\theta$ と reduced density ρ_0 にはかなり著しい増大がみられる。こゝで

A, δ, n の変化は k_T/ρ に余り響かない。この場合 B 層の時と同様 Bullen の密度分布を使用した。最も問題となる 1000 km の所の密度は全質量、全慣性能率に合致するように定められた時、0.1 以下の誤差しか生じない。又 1000 km の圧力には 413 km~1000 km の密度分布の ambiguity が影響するが、Bullen の二次曲線的なものに対して、仮に一次的なものであつたとしても、1000 km の所の圧力の差は 2% 以下であつて、結局 Bullen の密度分布を採用しても差支えない。又 B 層、 D 層の密度分布決定の際、断熱的温度勾配が仮定されたが、こゝでも Mantle の部分に対してこれを採用した。数値は Verhoogen⁸⁾ の算出したものを用いた。もし温度勾配がこれより大きいと密度の勾配は小さくなり、 k_T/ρ の式の温度を含む項と含まない項は互いに打消し合うように働くのでこの影響は無視される。

本研究は、三木晴男兄との議論に負うところが多い。厚く感謝の意を表したい。

文 献

- 1) Bernal Observatory 59 (1936) 268, Jeffreys Mon. Not. R. Astro 1/2 Soc. Geophy. Sup. 3 406
- 2) Birch Jour. Geophy. Res. 57 (1952) 227
- 3) Jacobs Phy. Rev. 54, 468 (1938)
- 4) Pauling Nature of the chemical bond (1940)
- 5) Born and Misra Proc. Camb. Phil. Soc. 36 (1940) 466
- 6) Bradburn Proc. Camb. Phil. Soc. 39 (1943) 113 Gow *ibid.*, -151.
- 7) Bullen Introduction to the theory of seismology
- 8) Verhoogen Trans. Amer. Geophy. Union. 32 (1952) 41