

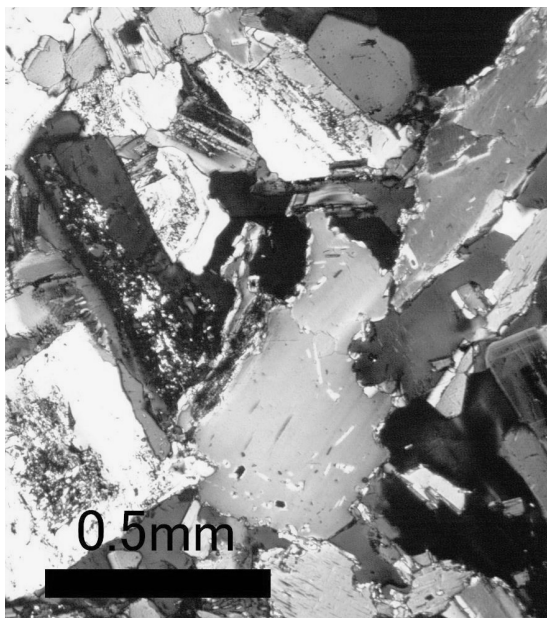
# 宇宙時代にこそ面白い岩石の研究： 数十年後の「惑星岩物性シミュレータ」の可能性

佐藤博樹<sup>1)</sup>

## 1. 岩石の成り立ちと その計算機による定量的な記載

2008年3月, 日本人宇宙飛行士の土井隆雄さんが, 日本初の宇宙実験施設「きぼう」を国際宇宙ステーションに設置しました. さらに同年6月には星出彰彦さんが「きぼう」の船内実験室を立ち上げました. まさしく日本人にとっての宇宙基地のスタートです. 人類が宇宙で本格的に実験する時代がやってきたわけですが, 一方, 地上でも宇宙実験に劣らず重要な様々な最先端の研究が行われています. 筆者が専門としている岩石の研究分野も, まだまだ未知のことが多く, 難解

な研究課題が豊富な分野の一つです. そのことは, どんな岩石でもいいですから, 顕微鏡でのぞいてみればわかります. 第1図に花崗岩の顕微鏡写真を示します. パソコンがあれば, このような写真をネット上でもたくさん目にすることができます. 顕微鏡下で複雑に織りなした種々の鉱物が放つ美しい色彩は, 宇宙にきらめく星々の輝きに勝るとも劣らない光沢を発しています. 第1図のように, 様々な鉱物が複雑に寄り集まって一つの岩石が形作られています. 現代の科学はこの大変複雑な岩石の構造(岩石組織といいます)を解明しようとしています. その複雑さゆえに, ひと昔前は岩石の組織を科学の研究対象としてとらえることはできませんでした. しかしながら, 岩石組織の研究は今日の地球科学では一つの重要な研究課題となっています. こうなった時代の背景には, 近年の計算機の急速な発展があります. 計算機の発展により, 複雑な岩石組織の構造を数値的に解析し, 定量的に評価することができるようになりました. これによって, 岩石がどのような形状の鉱物粒子からできており, 粒子の平均的な直径や面積, 扁平率がどのようなもので, それらの度数分布はどのようなものか, といった解析が比較的短時間でできるようになったのです.



第1図 石英と長石などを含む花崗岩の顕微鏡写真, スケールは0.5mm.

## 2. 計算機による鉱物の物理的性質の見積もり

計算機の発達はまだ, 岩石を構成する鉱物の物理的性質(物性といいます)のシミュレーションを可能としました. 地球や惑星の内部は温度が高く, また圧力も高いですが, そのような高温高压における鉱物の物性の見積もりが計算により可能となりつつあります. そのような計算の中でも重要なものに「第一原理

1) 兵庫県立大学

キーワード: 宇宙時代の岩石研究, マクロ物性シミュレータ, 地球惑星内部構造, 高温高压惑星科学, 第一原理計算, 岩石組織解析

計算」というものがあります。第一原理計算の特徴は、実験室で測定されたデータを使わずに、つまり非経験的に計算機だけで物質の物理的性質を計算するところにあります。第一原理計算では、物質を構成する原子とその配置だけを入力パラメータとして、物質のエネルギーが最小となるときの物性値を計算で求めることができます。このようにして計算した物性値は、実験室での測定値と整合しています。この計算手法は、近年、高温高压下の物質についても行われるようになり、地球惑星内部での鉱物の物理的性質が調べられるようになりました。ここで述べた計算機による鉱物の物性の見積もりと、前節で述べた計算機による岩石組織の解析結果とを組み合わせるとどうなるか、おわかりでしょう。計算機によって岩石の物理的性質が見積もれるようになります。つまり岩石物性シミュレータ機というものが、そう遠くない将来にできることとなります。とはいえ第1図のように岩石の構造は複雑ですから、多種多様の岩石についてシミュレートできるようになるには、今後、少なくとも100年くらいの時間が必要でしょうし、様々な岩石の物理的性質を計算機上で明らかにしようとするれば、さらに長い年月にわたる研究者の研鑽が必要となるでしょう。第1図を見ていただければわかる通り、岩石中にはいろいろな鉱物が複雑に分布し、一つの鉱物の中にも複雑な不均質のあることがわかります。このことは裏を返せば、岩石に関する研究は、今後、ますますの進展が期待され、宇宙ステーションにおける研究と同様に、大変気の長い第一級の研究であることがわかります。岩石物性が計算機の解析対象となった今日こそ、若い人たちにもぜひこの方面に目を向けていただいて、今後、多数の研究者によって岩石物性が明らかにされることを期待したいものです。

いうまでもなく、今後の岩石物性シミュレータの発展を左右する重要な要素の一つに計算機(PC)の計算スピードがあります。今日の卓上型PCの処理能力で、物質を構成する100個ほどの原子を計算対象にして物性の計算が行えます。原子数を2倍増やすと、計算時間もほぼ2倍必要になります。PCの計算スピードが2倍になれば、原子数を2倍増やしても計算時間はあまり変わりません。したがって、今後、計算スピードが向上すれば、さらに多くの原子について物性が計算できることとなります。たとえば石英(化学式は $\text{SiO}_2$ )を例にとりて、どのような状況でどれだけの

原子について計算しなければならないのか検討してみましよう。化学式からわかるように、石英にはSi原子1つとO原子2つで計3つの原子があります。不純物を含まない完全に純粋な石英の物性を計算するのであれば、少なくとも3つの原子について計算すればよいのですが、自然界の物質は必ず不純物を含みます。話を簡単にするため1割のSi原子が別のX原子に置き換わった場合を考えてみましょう。つまり仮想的に1割の不純物を含む石英( $\text{Si}_{0.9}\text{X}_{0.1}$ ) $\text{O}_2$ というものを考えることになります。このような物質の物理的性質を計算するには、3つの原子では足りません。化学式からわかるように、最低9つの $\text{SiO}_2$ セルと1つの $\text{XO}_2$ セルについて計算する必要があります。つまり計算に必要な原子数は $(9+1)\times 3=30$ 個以上になります。1%の不純物を含む石英なら、99個の $\text{SiO}_2$ セルと1個の $\text{XO}_2$ セルについて計算することになりますから、300個以上の原子について計算する必要があります。

さらにやっかいなことに、物質の物理的性質の中にはわずかな量の不純物によって、その性質が大きく左右されるものがあります。たとえば、鉱物中の電流の流れやすさは、高温の石英であれば、SiイオンやOイオンの動きやすさと関係しています。イオンは電荷をもっているため、イオンが鉱物中で動きやすければ電流は流れやすくなります。このようなイオンによる電流の流れをイオン電導といいます。この場合について考えてみましょう。石英であれば、石英結晶格子の中には、Siイオンのあるべき位置にSiイオンがないような穴が必ず存在し、その穴を空孔と呼びます。そのような空孔の数は結晶全体から見れば非常に少ないですが、たとえば0.0001%程度あります。0.0001%はppmという単位を用いて1ppmと表されます。Siイオンは正の電荷を持っているため、石英に電圧を加えるとSiイオンは1ppmの空孔を利用して、負の電極側に移動し電流を流します。このように石英の電気的な性質はたった1ppmの空孔によって大きく左右されることがあります。この場合の石英の電気的性質を計算機で見積もるには、999,999個の $\text{SiO}_2$ セルと1個のSi空孔を含んだセルについて第一原理計算をすることになりますから、合計3,000,000個以上の原子について計算する必要があります。次に議論するように、昨今の計算機の急速な発展により、3,000,000個の原子について第一原理計算により鉱物の電気的な性質を見積もることは、そう遠くない将来に実現する

可能性が高いのです。空孔によって左右される物理的性質は、電氣的性質の他に、粘性や流動性、原子の拡散など、いろいろあります。したがって、計算機の発達により、これらの性質も、近い将来、第一原理計算により見積もられることでしょう。

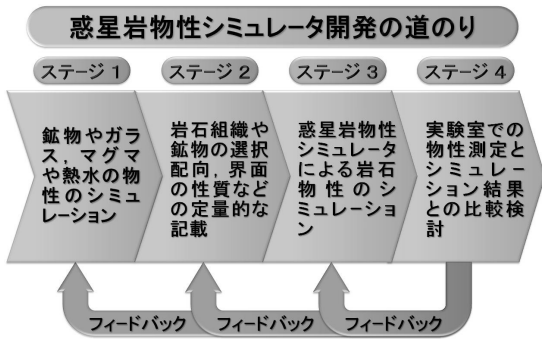
計算機が世に出てから今日まで、卓上型PCの計算スピードは、約1.6年で2倍ずつ向上しているといわれています。現在でも約100個の原子について第一原理計算がPCで行われるようになったので、今後も同じ割合でPCの処理能力が向上すると仮定すれば、 $100 \times 2^{\wedge} (23.8 \text{年}/1.6 \text{年}) \approx 3,000,000$ の計算からわかる通り、約24年後には1ppmの空孔（あるいは不純物）によって左右される物性がPCによって計算できることとなります。これだけの数の原子が扱えるようになると、結晶に比べ非常に不規則な原子配列をしているガラスや溶融物についても、第一原理計算が適用できるようになります。現在すでに、ガラスやメルトの物理的性質を第一原理計算によって見積もる研究も行われています。今後、計算機の発展がさらに加速されれば、20～30年後のシミュレーションの可能性はもっと広がっていることでしょう。ここでは計算スピードのみ考慮しましたが、その他のハード面の進歩および、計算時間を短縮するソフト面の進歩なども、今後、大いに期待されます。ちなみに112年後は、 $100 \times 2^{\wedge} (112 \text{年}/1.6 \text{年}) = 1.2 \times 10^{23}$ から、アボガドロ数の桁の原子数について、すなわち巨視的な大きさの鉱物についてシミュレーションができることとなります。つまり約100年後には、第1図に示されているサイズの鉱物について、不純物や不均質の効果も加味して、その物性が計算機によって計算できるようになる可能性があります。今後の計算機の発展によっては、100年もかからないかもしれません。

### 3. 今後の発展に向けて

上記のような理由から、数十年後、岩石の研究分野では高圧発生装置を用いた実験とともに、PCを用いたシミュレーション実験が重要になっていることでしょう。計算機の発展スピードによっては、シミュレーション実験のほうがより重要になっている可能性があります。高圧装置による実験では、大掛かりな装置に岩石試料を設置し、惑星内部の高温と高圧を加えて岩石の電氣的性質などの物性を実験室で測定しま

す。このような高圧実験の作業にかかる手間は大変なもので、数十年たってもその作業が自動化されたり簡素化されたりすることは考えにくいのです。また高圧実験には再利用できない高価な消耗品が必要で、実験費用がかなり高額となります。高圧実験では必然的に用いる試料に制限があり、実験の圧力や温度範囲にも使用する装置によって制限があります。また天然の試料であれば、化学組成が一様でなかったり、不純物を含んでいたり、クラック（割れ目）が入っていたりして、組成変化やクラックの影響を受けたものの物理的性質が測定されることとなります。天然のもので高品質高純度の試料を手に入れることは大変難しいのです。一方、シミュレーションでは、鉱物試料の化学組成はPCのキーボードから入力するパラメータなので、今後、計算機のスピードさえ速くなれば、原理的にどのような組成のものについても計算が可能です。シミュレーションですから計算ミスによる計算時間の無駄が生じて、PCの電気代以外の費用はかかりません。第一原理計算は今日でも物理系、化学系、工学系など幅広い分野の研究者によって利用されていますから、そのソフトを、たとえば、大学単位あるいは学部単位で一式揃えて、学内の研究者が共同で利用することがあります。その方面の専門家でない限り、個々の研究室で高価な第一原理計算のソフトをすべて揃える必要はありません。ですから高圧実験に比べれば、一般に一研究室が負担する研究費はシミュレーションの場合、格段に安価なものとなります。またシミュレーションですから、様々な化学組成・温度・圧力条件での物性の傾向がとりにくく計算で推測できることとなります。実際の高圧実験では難しい温度圧力領域でのシミュレーションも可能です。このような事情から、近い将来、高圧実験を主要な研究テーマとしている研究者であれ、高圧実験を行う前に、第一原理計算で予測される実験結果を推測し、実際の実験で行うべき温度圧力条件などを選定してから、高温高圧物性測定を行うことになるでしょう。計算機の発展のため、岩石物理学や惑星内部物理学、高温高圧科学は、将来、まずシミュレーションありきで研究が進められていくことでしょう。

そこで地球惑星科学を志す若い人々にとって、今後、第一原理計算をするための基礎知識が欠かせなくなってきました。それには、量子力学や固体物理学や群論などの現代物理学の知識が必要です。これらの



第2図 惑星岩物性シミュレータ開発の4つのステージ。

教科を地球科学の学部教育で必修科目とすることも必要となるでしょう。今日まで地球科学の研究者であれば、ごく一部の研究者を除いて、いわゆる古典物理学を修得すれば十分でした。しかしながら、これからは第一原理計算の他に、現代物理学の知識に基づいた種々の測定機器も、地球惑星科学の分野で一層活用されることになります。物理や化学分野のシミュレーションの専門家と共同で研究することも考えられますが、鉱物や岩石のシミュレーションについては、やはり地球科学の分野で専門家を育成し、また基礎知識を持たせ、実験家でも基礎的なシミュレーションが行えるように教育体制を整えていく必要があります。

第2図では、岩石物性のシミュレーション過程を、大きく4段階に分けてみました。ステージ1は岩石の構成要素である個々の鉱物やガラス、メルトや水の高圧高温物性を計算で求める過程です。ここで必要なのが第一原理計算であり、また流体などの状態方程式です。ステージ2は、岩石の構成要素がどのように集合しているのかを定量的に記載し、また集合形態が物性に及ぼす効果を評価する過程です。岩石を構成する鉱物・ガラス・メルトなどの形状と分布状態、またクラックや空隙があればそれらの分布と物性に及ぼす効果の定量的な見積もりが必要です。メルトのように鉱物に比べ非常に柔らかいものが岩石中に存在すると、メルトが繋がってネットワークを形成している場合と、繋がっていない場合で、岩石全体の物性に及ぼすメルトの影響は大きく異なります。そ

のような違いもステージ2で定量的に評価することになります。最終的にステージ1と2の計算結果を総合し、個々の構成要素の集合体としての岩石の物性がステージ3で計算されることになります。最後にステージ4でシミュレーションした結果を実験室の測定結果と比較検討し、両結果の整合性を確認し、不一致が認められれば、その原因を探り、ステージ4からステージ1や2、3にフィードバックすることになります。このフィードバックにより各段階での計算値を再検討し、またモデルを再考し、必要な修正などを施すこととなります。修正後、再計算し、再び結果の整合性を確認するという手順を繰り返すこととなります。ですから、ステージ4にある実験室における高温高圧物性測定も、シミュレーションと同様に重要であることはいうまでもありません。実験室の測定と計算機によるシミュレーションは、いわば車の両輪で、どちらが欠けても車はまっすぐ前に進みません。最終的にシミュレーション結果と実験室の測定値とが整合するまで、第2図のフィードバックの作業は繰り返されます。岩石物性の研究は、今後、このような作業を限りなく繰り返しながら発展していくことになります。進歩のあるところには必ずこのような繰り返しの作業が必要で、読者の皆さんも、たとえばスペースシャトルが宇宙ステーションと地球を何度も往復して、宇宙開発の発展に寄与していることはご存知の通りです。

人類が宇宙へ月へ惑星へと飛び出す時代がやってきました。興味深いことに時を同じくして、地球や惑星を構成する岩石の研究がいよいよ佳境を迎え、宇宙開発とともに21世紀の特筆すべき研究課題となっています。有人月面探査計画(アポロ計画)により人類は月の石を手に入れました。今後、人類は火星や金星や小惑星の石も手に入れることでしょう。地球や惑星は岩石によって構成されていますから、惑星の内部構造や進化過程、またダイナミックな振る舞いを解明するために、岩石物性の研究は欠かせない研究となっています。宇宙開発とともに惑星岩石の研究が進展することは間違いありません。

SATO Hiroki (2009) : Significance of rock research in the space age: Possibility of terrestrial rock physical property simulator in the near future.

<受付: 2008年12月17日>