

MD シミュレーションによる MgO の自己拡散の活性化体積の決定

The activation volumes of self-diffusions of MgO by Molecular Dynamics Simulations

伊藤 洋介[1], 鳥海 光弘[2]

Yosuke Ito[1], Mitsuhiro Toriumi[2]

[1] 東大・理・地惑, [2] 東大、新領域

[1] Earth and Planetary Sci, Univ of Tokyo, [2] Complexity S and E., Univ. Tokyo

地球深部での岩石の塑性変形は、いくつかの微視的なメカニズムに支配される。特に自己拡散はこれらのメカニズムのなかでも最も重要なものの一つである。自己拡散係数は温度と圧力に非常に強く依存し、温度依存性は活性化エネルギーによって、圧力依存性は活性化体積によって表される。今回 MD 計算によって活性化体積を与えた。原子間相互作用は Born-Mayer-Huggins モデルに基づいて、経験的パラメータによって与えている。原子移動の媒体となる欠陥は熱的に生成された Mg サイトと O サイトの空孔対を仮定した。欠陥の生成と移動のプロセスを分離して、おののに対して活性化体積を計算した。得られた活性化体積は、20-100GPa の範囲で

$$V^*_f(10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}) = -3.86 \times 10^{-2} P \text{ (GPa)} + 5.60 \quad : (\text{生成過程})$$

$$V^*_m(10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}) = -2.64 \times 10^{-2} P \text{ (GPa)} + 2.68 \quad : (\text{移動過程})$$

$$V^*(10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}) = -6.50 \times 10^{-2} P \text{ (GPa)} + 8.28 \quad : (\text{合計})$$

と表された。生成過程の活性化体積は常圧において大きな値をもち、また圧力に依存して減少する。空孔対による自己拡散の活性化体積は、この生成過程の活性化体積の挙動によって特徴づけられる。移動過程の活性化体積は、100GPa 付近において 0 になった。100GPa 以上では負になるかもしれない。今回の研究において、活性化体積は圧力に従って大きく減少することが明らかになった。Karato(1981) は、活性化体積の減少は圧縮率に等しいと仮定している。MgO の圧縮率は CMB (~140GPa) において ~0.75 程度である(Mao and Bell (1979))。しかし今回の結果、圧力効果はより大きく、下部マントル深部では、圧力増加により粘性が下がる可能性があることを示唆している。