

## 高圧下における Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> 融体の構造

### Structural and dynamical properties of Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> at high pressures

# 森下 徹也[1], 森下 律生[2], 戎崎 俊一[3]

# Tetsuya Morishita[1], Ritsuo Morishita[2], Toshikazu Ebisuzaki[2]

[1] 理研・計算科学, [2] 理研・計算科学技術推進室, [3] 理研

[1] Comp. Sci. Div., RIKEN, [2] Advanced Computing Center, RIKEN

<http://atlas.riken.go.jp/~tetsuya>

マントルは地球内部の約 7 割を占め、地震波の伝搬や地球内部での物質移動に密接に関係している。マントルは上部と下部に分けられ、上部は Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> を主とする鉱物を多く含むと考えられている。この物質の性質を調べることは、マントル層の性質解明に大いに役立つと思われる。特に原子レベルからの物性解明は、輸送現象などの理解に不可欠である。そこで我々は MD シミュレーションを行い、Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> の融体の性質を広い圧力領域で調べた。今回は特に、微視的な液体構造と輸送係数に注目してシミュレーションを行った。

定温定圧の古典 MD を 5GPa--29GPa の圧力領域で行い、動径分布関数  $g(r)$ 、拡散係数、粘性率などを求めた。原子間ポテンシャルは CMAS94 を用い、896 の原子を周期境界条件を課したシミュレーションセルに配置した。Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> の低圧相はオリビン型の結晶構造で、O 原子 4 つが Si 原子 1 つに結合してできた四面体のユニットが規則的に並んでいる。融体ではこのユニットは壊れず、ひとまとまりとして存在することがわかった。実際、Si と O 原子間の分布に対応する  $g(r)$  の第 1 ピークはあまり変化していない。一方 Si 原子間の分布は大きく変化し、四面体ユニット自体はほぼランダムに分布していることがわかった。拡散係数は圧力に対して単調に減少し、SiO<sub>2</sub> 融体で見られるような極大値は見られなかった。講演では、粘性率や状態方程式にも触れる予定である。