

## 地球内部物性の MD シミュレーション

## MD simulation of physical properties of earth interior

# 鳥海 光弘[1]

# Mitsuhiro Toriumi[1]

[1] 東大、新領域

[1] Complexity S and E., Univ. Tokyo

地球内部を構成する鉱物の流動則は、地球のダイナミクスを理解する上で基本的な物性であるにも関わらず、実験的な困難さのために 5 Gpa 以上の高圧条件では求められていない。間接的には自己拡散係数を実験的に決定することにより、拡散支配の流動則を推定することができるために、ペロフスカイトやペリクレースで Si, Mg, O 等の自己拡散係数が 2.5 GPa まで決定されている (Yamazaki et al., 1999, Van Orman et al., 2003, inpress)。しかし、下部マントル条件での変形実験や自己拡散実験は多くの困難があり、今後も大変困難であると言わざるを得ない。

一方、地球内部の構成鉱物の結晶構造、圧縮率などはすでにかかなりの精度で計算機実験されている。こうした分子動力学法、および第一原理計算による物性の評価は、それ自体原理的に単純であり、多粒子系できちんと計算することができるならば、超高圧・高温条件および任意の偏差応力下での変形を実現できると考えられる。そこで、本研究シリーズでは計算地球物質科学の開拓を目指し、重要な地球内部物質のレオロジイを精度高く計算科学的に評価し、マントルのダイナミクスに寄与する目的で以下のような研究を開始した。

1. 分子動力学法を用いて、MgO および MgSiO<sub>3</sub> のショットキー欠陥を導入し、これを緩和させることにより、自己拡散係数を決定する。この欠陥濃度を現実的なものとするために 100 万体の基本セルで計算実験する。

2. 超高圧条件までの十分な緩和時間における計算機実験をおこない、温度・圧力依存性を決定する。

3. 上に上げた結晶の転位を導入し、その運動速度を決定する。此により転位支配の流動則を決定する。

4. 水を含む系について自己拡散、および転位運動を計算機実験する。

これらの目標に対して、我々は現在、下部マントル条件での自己拡散係数を決定し、その結果、下部マントル全体の粘性率分布を推定することができた。それは低圧では実験結果と一致し、高圧では今までの推定値より十分に低い粘性率なる。つまり、下部マントルは MgO の拡散支配粘性とすると、上部より下部は 2 桁程度まで粘性率が低下することが推定された。