

# 分子動力学法による MgO 自己拡散の研究

## Pressure effect of Self-diffusion in Periclase (MgO) by Molecular Dynamics

# 伊藤 洋介[1]; 鳥海 光弘[2]

# Yosuke Ito[1]; mitsuhiro toriumi[2]

[1] 東大・理・地球惑星; [2] 東大・新領域

[1] Earth and Planetary Sci., Univ of Tokyo; [2] Univ.Tokyo

MgO ペリクレーズの自己拡散の圧力効果を分子動力学(MD)計算によって調べた。得られた自己拡散係数からナビロヘリングのモデルを使って下部マントルを構成するペリクレーズの粘性率の深さ変化を推定した。計算中に記録した原子の位置から拡散係数を直接計算した。調べた温度圧力範囲は 2400K-6000K, 0-140GPa である。

空孔の移動エンタルピー ( $H_m^*$ ) と形成エンタルピー ( $H_f^*$ ) は常圧の実験値をよく再現した。拡散係数の圧力依存は、はじめは負であったが圧力の増加に伴って正に変わった。ナビロヘリングモデルにあてはめたところ、下部マントルのペリクレーズは深くなるにつれて柔らかくなるという結果が得られた。粘性率の減少は、1.3 桁(地温勾配 0.3K/km のとき) または 2.0 桁(地温勾配 0.6K/km のとき) であった。

Yamazaki et al., [2001] は、大きなひずみを受けた下部マントルの粘性率は柔らかい相であるペリクレーズの粘性率に近くなると指摘している。以上で発見された下部マントルの粘性の減少はプリュームの発生のような下部マントル深部の活発な地学現象の一つの原因かもしれない。

