

計算地球物質科学の開拓

計算地球物質科学による
地球内部物質の物性
評価計算

鳥海光弘
(ifree/FSGS,UT)

研究グループの構成

◆Members;

◆M. Toriumi, Y.Ito, T. Sakai, Matuttis
Hans-Georg (IFREE, GSFSUT, TETU)

◆S.Tsuneyuki, K.Akagi, J.Tsuchiya,
Y.Yoshimoto, Y.Tateyama (DPUT)

◆Y.Kawamura, H.Sakuma, T.Tsuchiya
(TIT),

◆M.Kameyama(ESC)

Rheology of Mantle and Crust

- ◆ Flow law and friction law: diffusion creep and dislocation creep
- ◆ Water effects on rheology
- ◆ Anisotropy generation by solid flow
- ◆ Grain size reduction and growth by polycrystalline flow

Targets

- ◆ 1, 地球深部を構成するペリクレーヌ、
MgSiO₃ペロブスカイトの転位構造、転位
運動、自己拡散係数、粘性係数の下部マ
ントルにおける変化、
- ◆ 2, 地球内部を構成する鉱物の不純物とし
ての水の状態、および物性計算、
- ◆ 3, 化学反応、物質移動、流体移動、クラッ
ク形成などを含む剪断帯の力学挙動

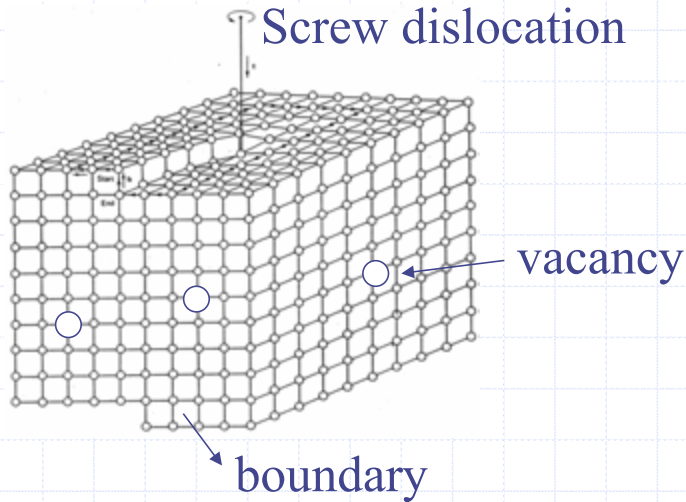
Methods

- ◆ 第一原理計算分子動力学法を空孔拡散および鉱物中の水に適用し、その状態変化を明らかにする。
- ◆ 2体力による分子動力学を駆使して自然系に近い転位密度の転位構造、転位運動を地球内部の高圧高温状態で明らかにする。
- ◆ 精密な拡散係数を決定することで下部マントルの粘性率を明らかにする。
- ◆ 鉱物の脱水・吸水反応を含み、水が移動する剪断帯の流体分布の変化と対応する構成則をミクロな粒子系の物理過程から計算実験をおこなう。

昨年の成果

- ◆ Full nodes simulation of vacancy diffusion
- ◆ Vacancy migration to 150GPa and 6000K
- ◆ Decrease of Newtonian viscosity above 50 GPa in the lower mantle
- ◆ Installation of ab initio MD

Introduction of vacancy, dislocation, and boundary

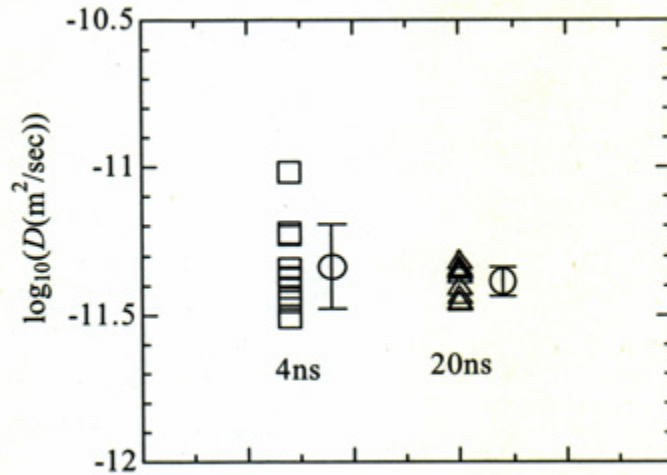


Basic cell
+
Periodic boundary



Schottky defect
formation
migration

Drastic error reduction and negative activation volume



今年度目標

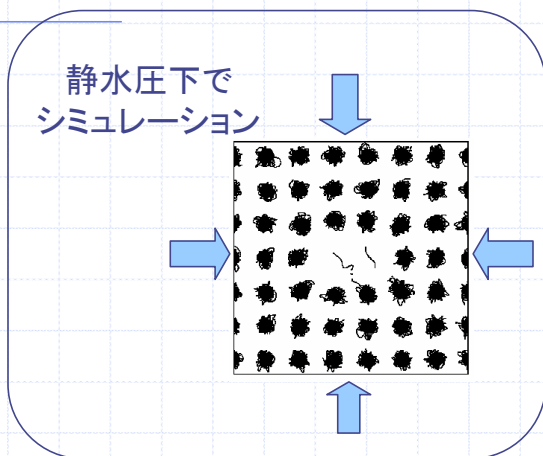
- 実験で知られている粒内拡散クリープのニュートン性 ($\eta \propto |\sigma_1 - \sigma_3|$) の検証
- シミュレーションから、粒内拡散クリープの構成方程式を与える

非静水圧場における結晶内 拡散のMDシミュレーション

伊藤洋介
鳥海光弘

拡散クリープ

従来

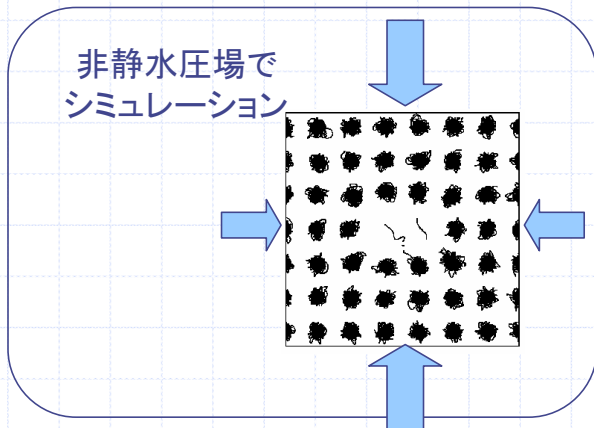


拡散クリープの
構成方程式

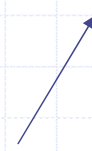
$$\eta = A \frac{RT}{V} \frac{G^2}{D}$$

粘性率 η

今回



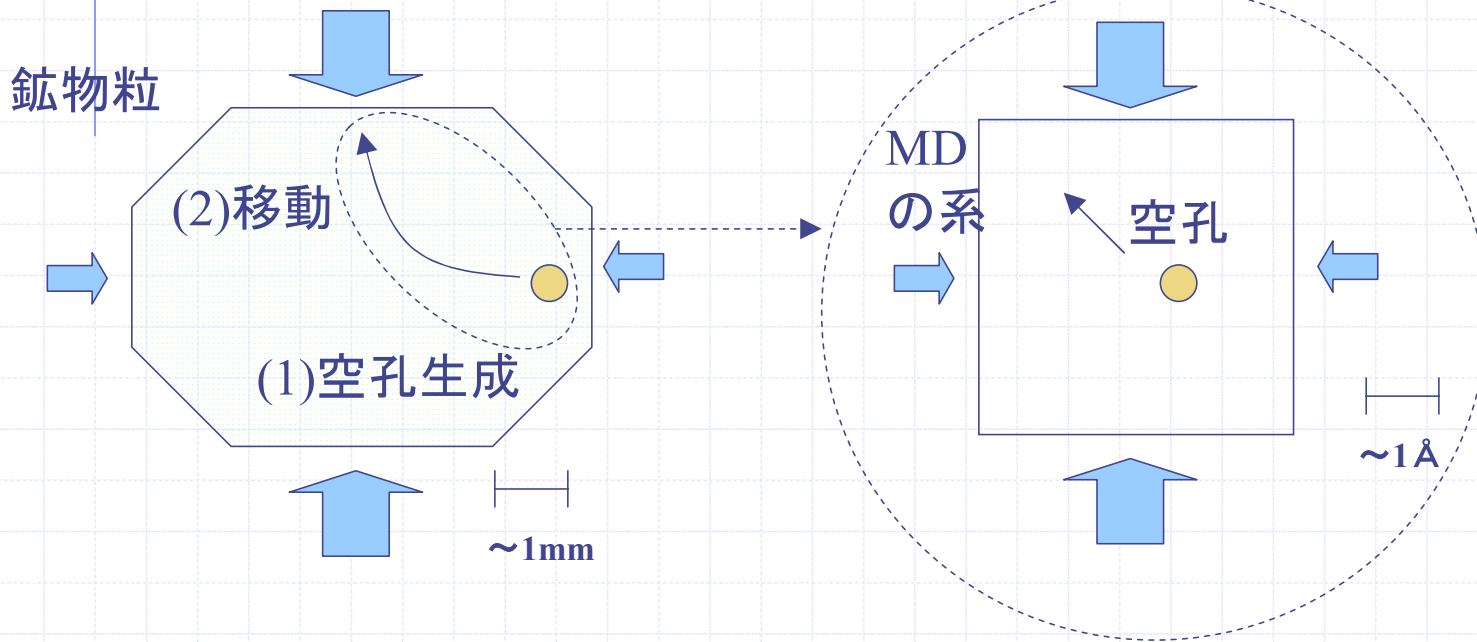
拡散係数の
異方性の検出



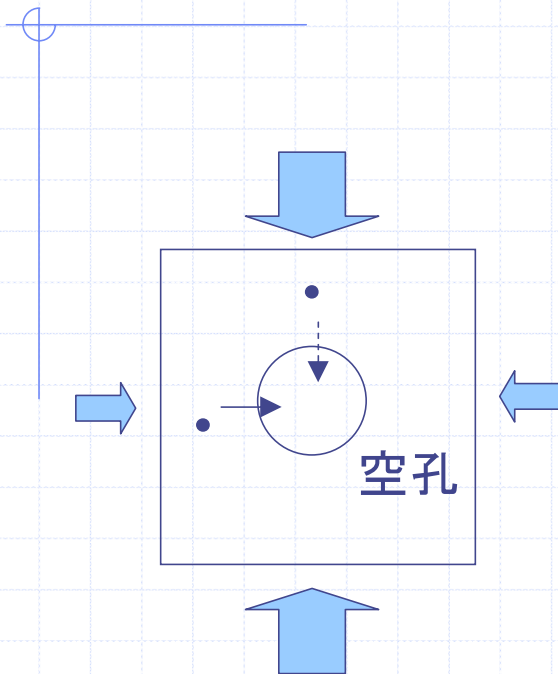
拡散クリープの直接シミュレーション

拡散クリープの原子レベルメカニズムは(1)空孔生成と(2)移動

空孔の異方的場での Random walk; MDでシミュレーション



非静水圧性による拡散係数の異方性



圧縮軸に垂直な方向の拡散係数
が圧縮軸に平行な方向の拡散
係数より大きくなる

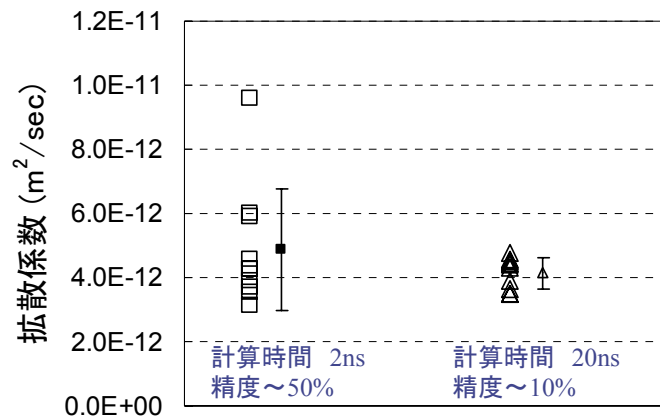
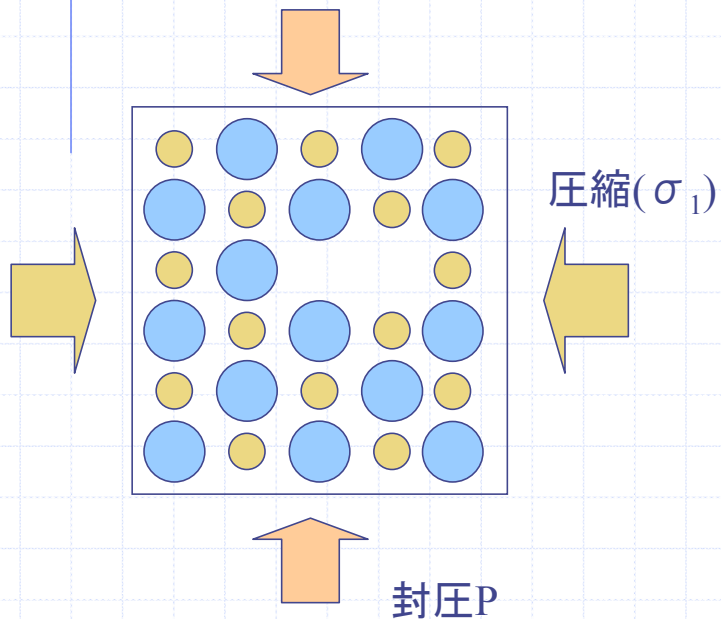
↓
拡散係数の比 (D_1/D_3) を
計算する

$$\begin{aligned}d\varepsilon/dt &= (D_1 - D_3)/G \\ &= D_1(1 - D_1/D_3)/G\end{aligned}$$

実行条件

鉍物: (MgOペリクレース)

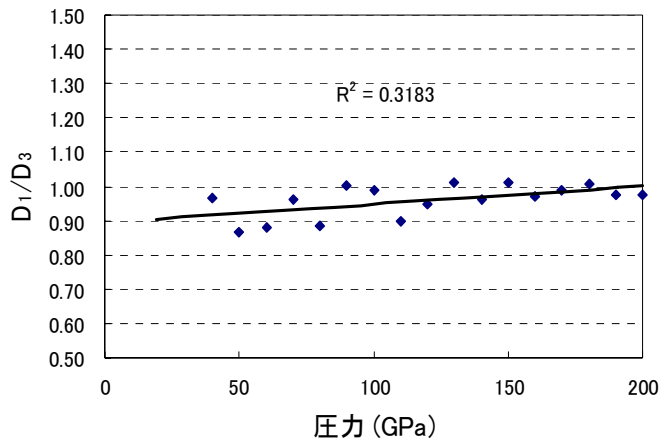
圧縮軸: (100)面



MgOで高精度の
計算を実現

温度 T (4000-6000K)
封圧 σ_3 (30-200GPa)
差応力 $\sigma_1 - \sigma_3$
(-10-10GPa)

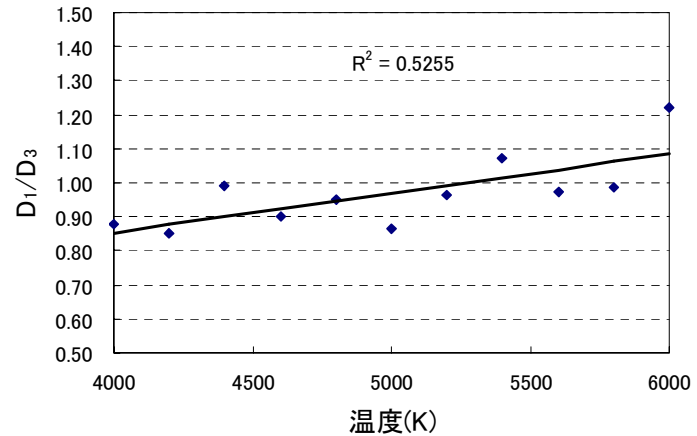
結果(温度、圧力依存性)



At 5000 K, 5GPa

$$D_1/D_3 = C \exp(-dQ/RT)$$

$$dQ = dH + PdV^*$$



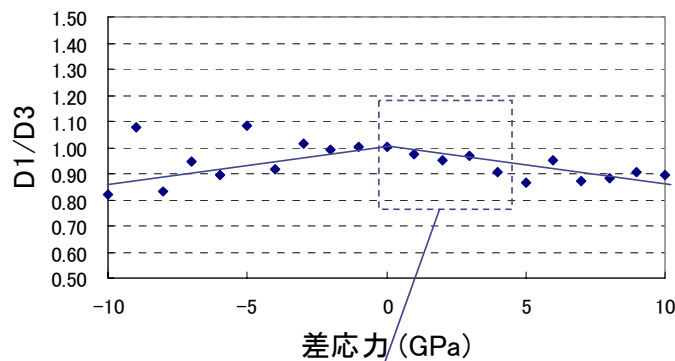
At 100 GPa, 5GPa

負の圧力依存性

負の温度依存性

dV^* small

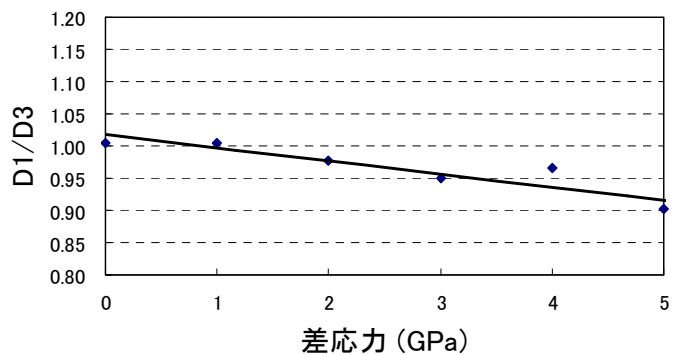
結果(差応力依存性)



at 4000K, 50GPa

$$d\varepsilon/dt = D_1(1-D_1/D_3)/G$$

$$= \text{const} \times \Delta\sigma/G$$



差応力0-5GPaの領域
で正の差応力依存性

まとめ

- ✓ 非静水圧場における結晶内拡散のMDシミュレーションを行った
- ✓ 非静水圧性による拡散係数の異方性の検出
- ✓ 拡散係数の異方性の温度依存性と圧力依存性は共に負である
- ✓ 拡散クリープはニュートン粘性を示し、粒子径には逆比例する

今後

- ✓ 差応力依存性、温度・圧力依存性の決定、地球内部の低差応力条件への適用を可能にする
- ✓ 差応力の結晶方位依存性 (現在(100)面のみ、(110)面(拡散パス))
- ✓ 粒子径依存性に関する問題