

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)
- H.Sakaguchi, S.Alex (IFEE)
- Kao Honn, He Jiangheng (GSCanada)

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。

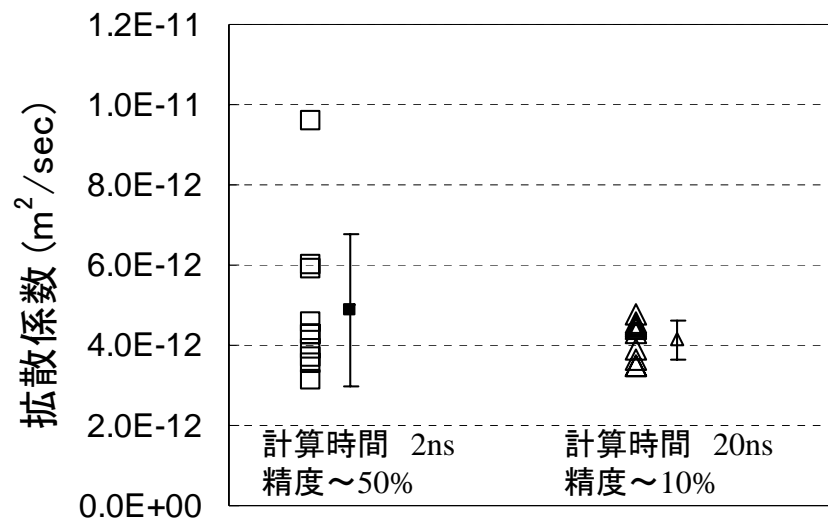
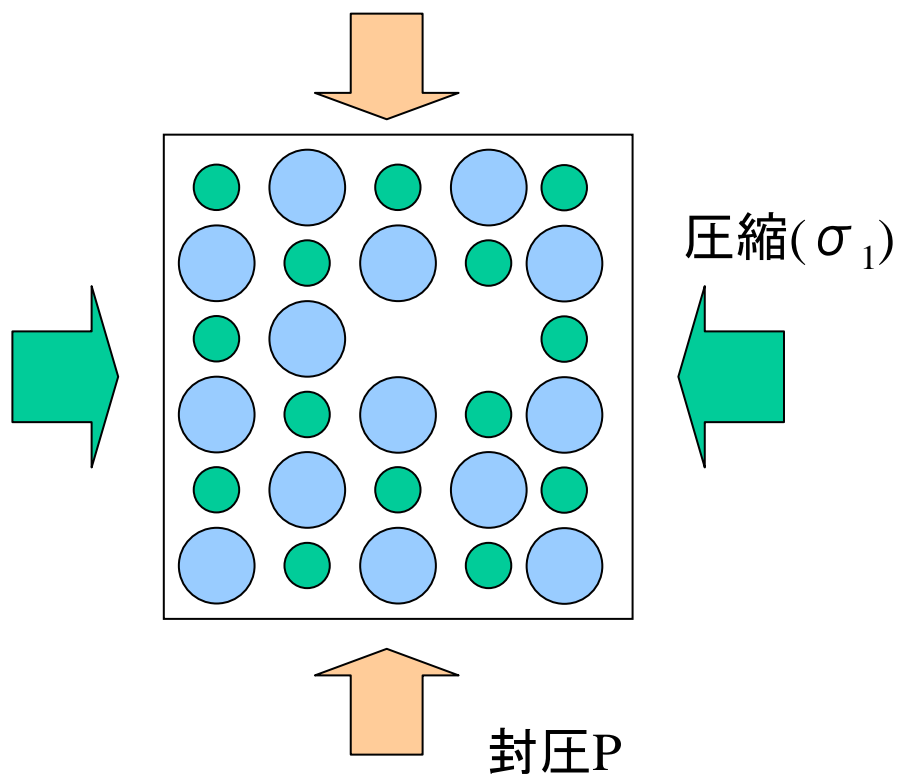
1、昨年度の成果： 拡散変形の直接計算

- ✓ 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

実行条件

鉱物: (MgOペリクレス)

圧縮軸: (100)面

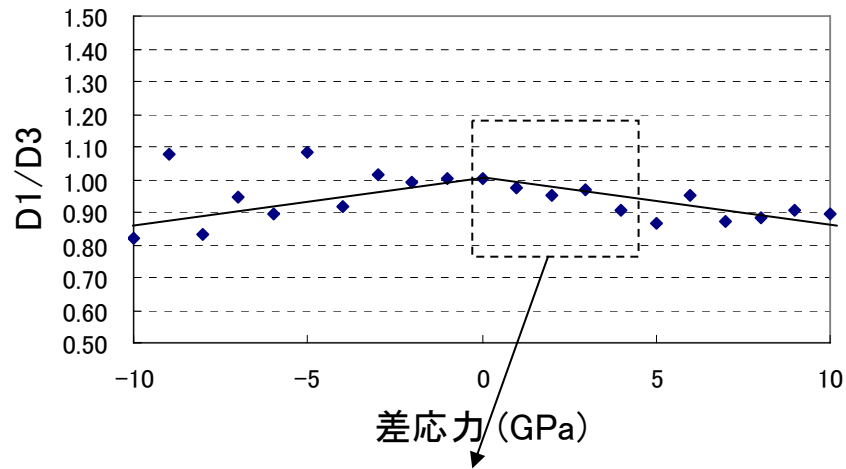


MgOで高精度の計算を実現

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

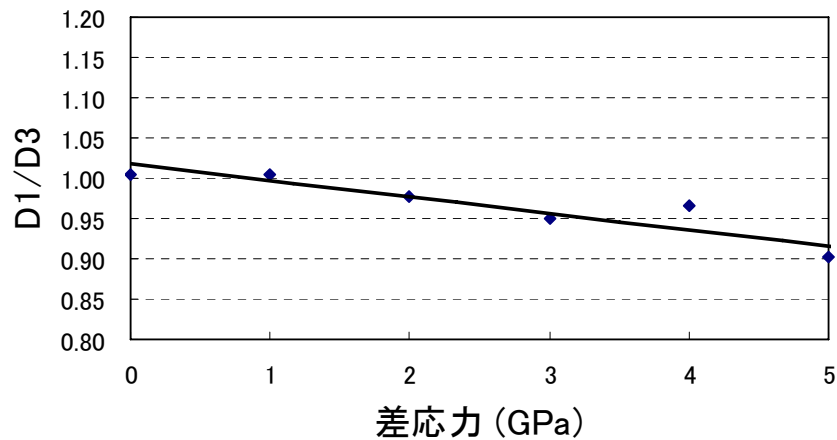
結果(差応力依存性)

at 4000K, 50GPa



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

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

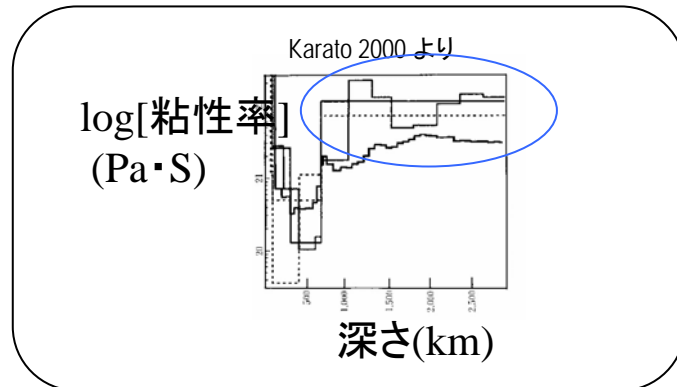


差応力0-5GPaの領域
で正の差応力依存性

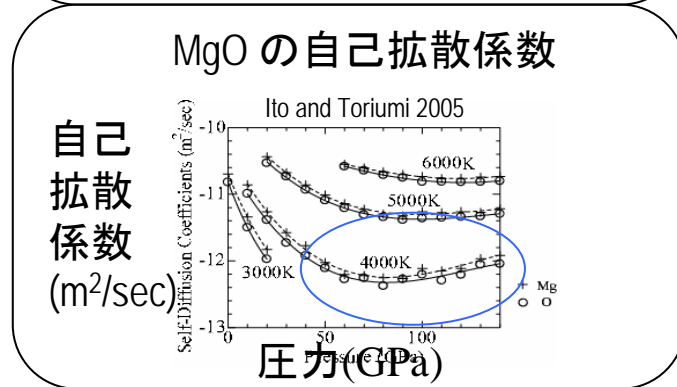
2、LJ型およびBM型相互作用を持つ結晶
の
自己拡散と高圧軟化

伊藤洋介
鳥海光弘

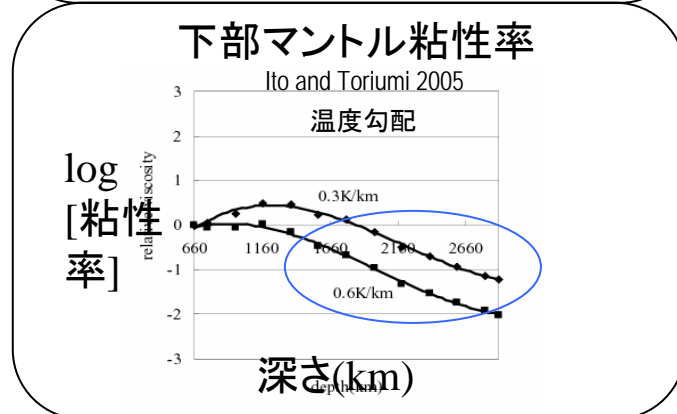
下部マントルの粘性率



- ・従来下部マントルの粘性率は深さによらず均一に近いと理解されてきた(地球の自由振動解析[Hager 1985])

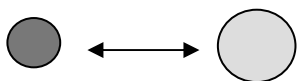
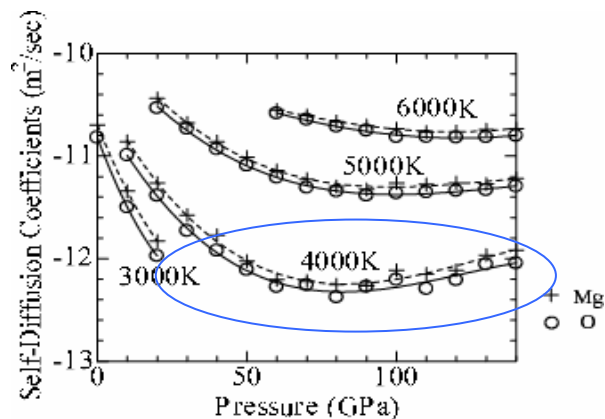


- ・Ito and Toriumi (2005) はMgOの自己拡散を分子動力学法で調べ、圧力増加に応じて自己拡散係数が減少→増加となることを発見した



- ・Ito and Toriumi の結果から下部マントルの粘性率を推定すると下部マントル深部では粘性率は低いと推定されるため、この結果は重要であり、検証する必要がある

本研究の目的と内容



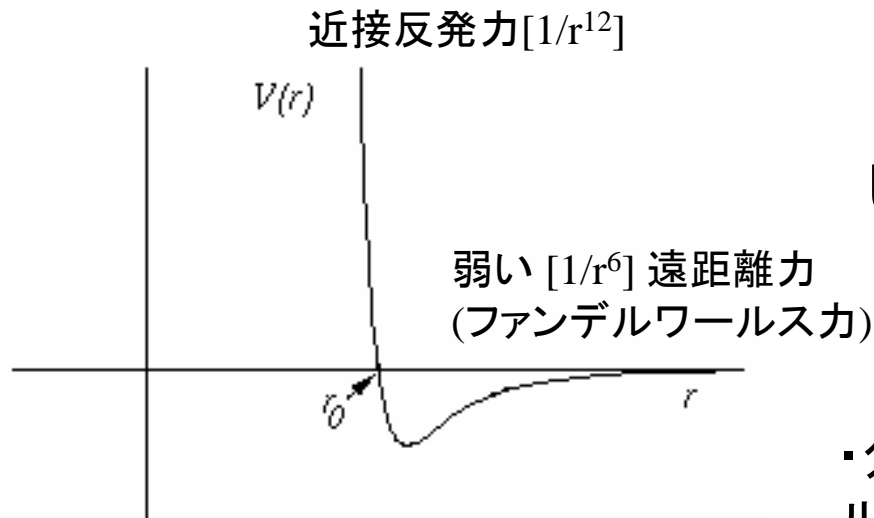
・ポテンシャル形式に対して圧力軟化はどうか？

・異なった原子間相互作用をもつ物質の自己拡散の圧力依存性を調べる

もし違う相互作用の物質にも同じ現象が見つかれば、この現象は物質によらず自己拡散自体の普遍的な性質であることが示唆され、この現象自体の確度も高まる

・以上の考え方に基づき、**L-J型の相互作用**を持つ物質の自己拡散の圧力依存性を調べて、この現象が物質によるかよらないか検証する

L-J型相互作用



Lennard – Jones型相互作用

$$U(r_{ij}) = 4 \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

- ・分子間力、および希ガスの原子間力のモデル化に用いられる
- ・希ガスの物性をよく再現するとされている

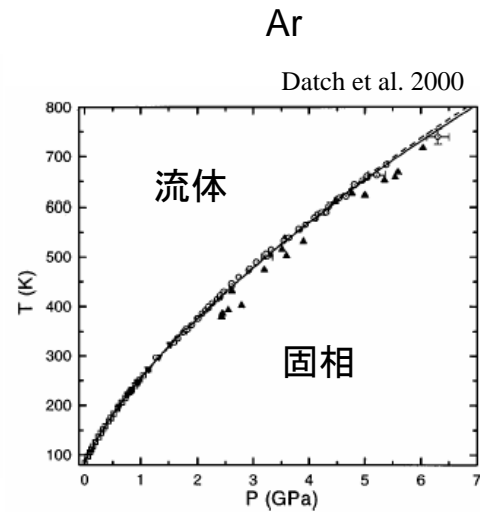
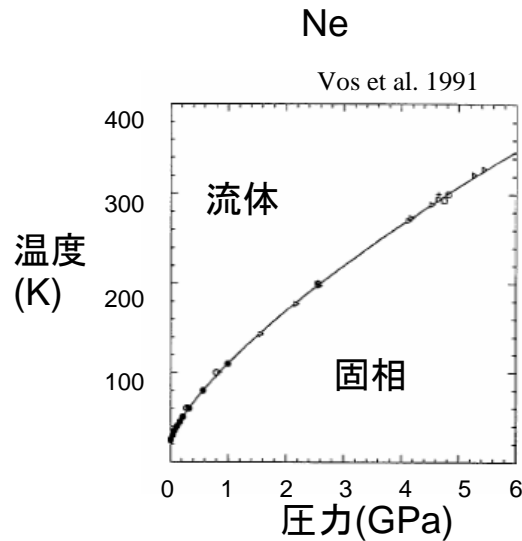
パラメータ (Kittel 1972)

気相の粘性率、第2ビリアル係数の実験値から経験的に決めた

	$\varepsilon [10^{-16} \text{erg}]$	$\sigma [\text{\AA}]$
Ne	50	2.74
Ar	167	3.4

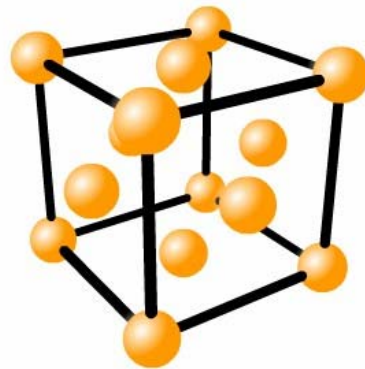
希ガスの物性

相図



・圧力をかけることによって流体→固体となる

結晶構造



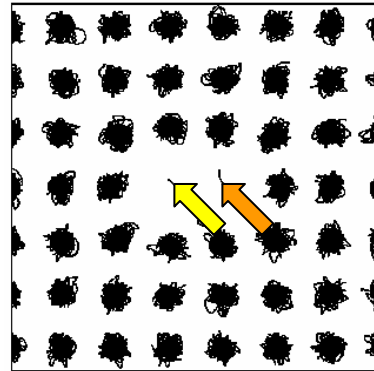
・HeはHCP、Ne, Ar, (Xe, Kr)の結晶構造は全てFCC

自己拡散の計算

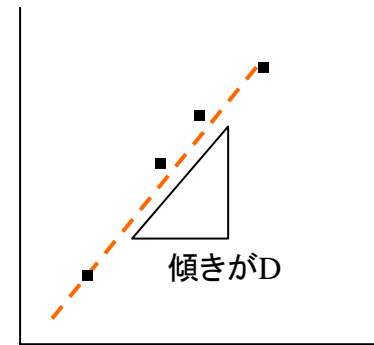
自己拡散係数は原子の軌跡から
直接計算している

原子の平均2乗変位 (MSD)から
自己拡散係数Dを計算している

- ・今回の研究
- ・Ito and Toriumi
2005



MSD



$$D = \frac{d}{dt} \left(\frac{MSD}{6} \right)$$

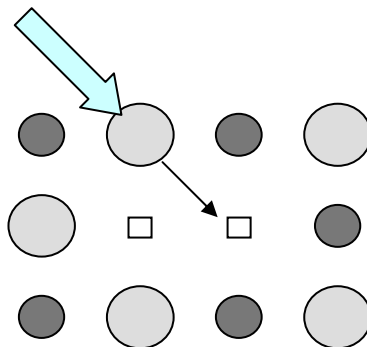
$$MSD = \langle r - r_0 \rangle^2$$

時間

従来の 手法

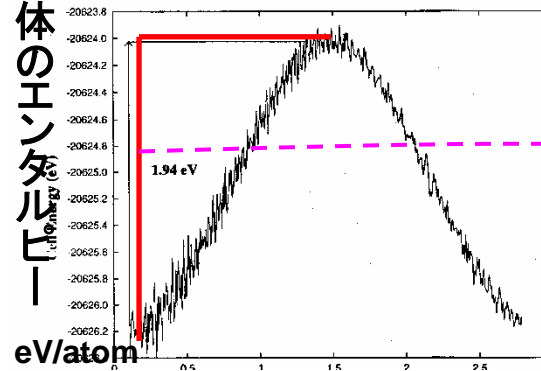
(Ita & Cohen 1997
Harris et al., 1997)

原子は人為的な力
で空孔に押されて動く



活性化エンタルピー (H^*)は系全体の
エネルギーバリアから与える

系全体のエンタルピー

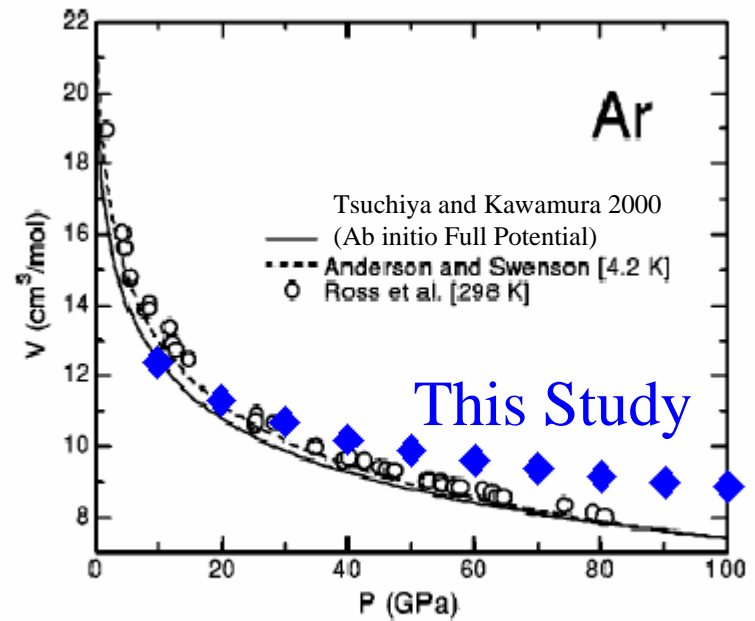
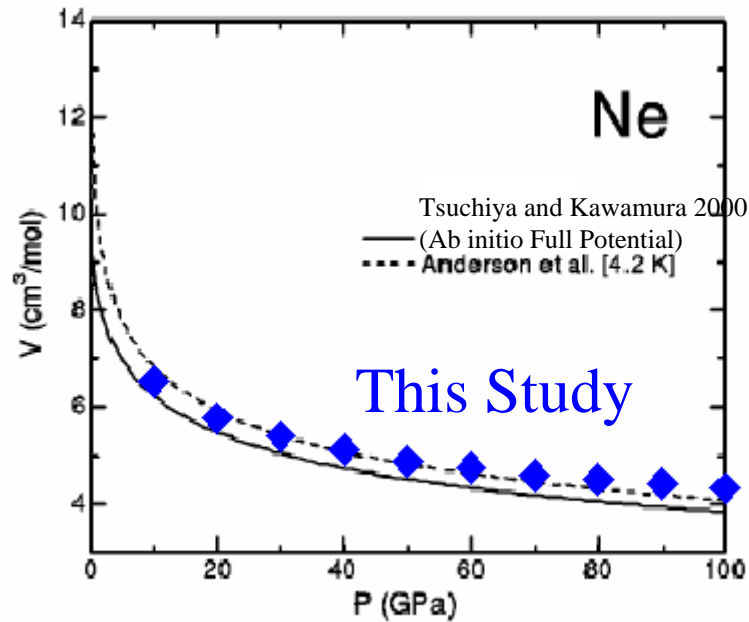


Harris et al. 1997より

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-H^*}{RT}\right)$$

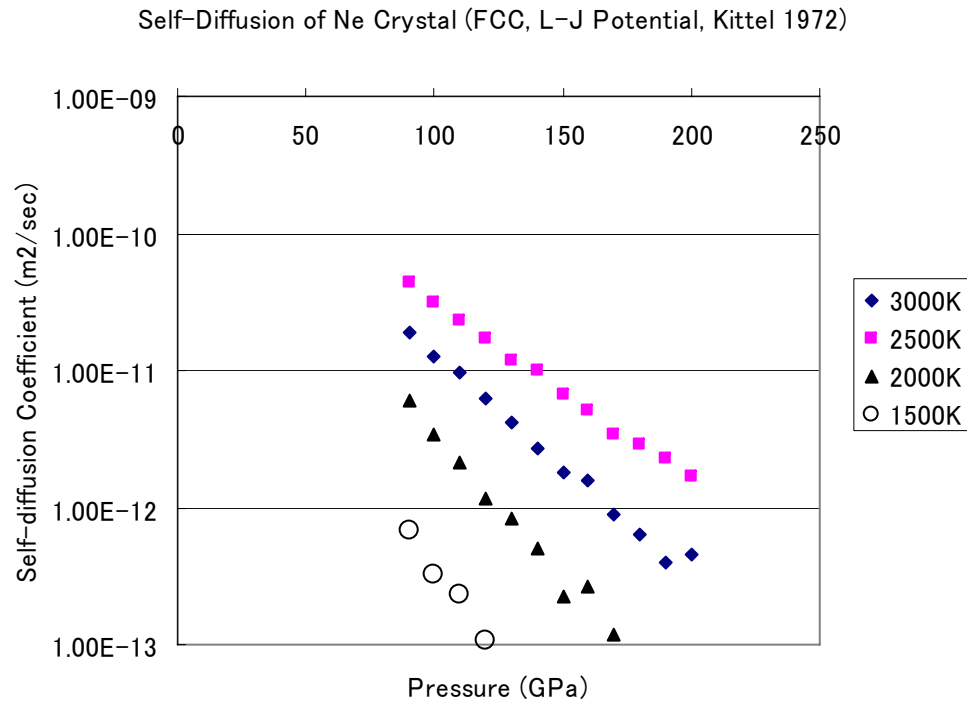
押す原子の移動距離 (Å)

圧縮



Neは実験値をよく再現する
Arは実験値よりやや圧縮率が小さい

自己拡散係数



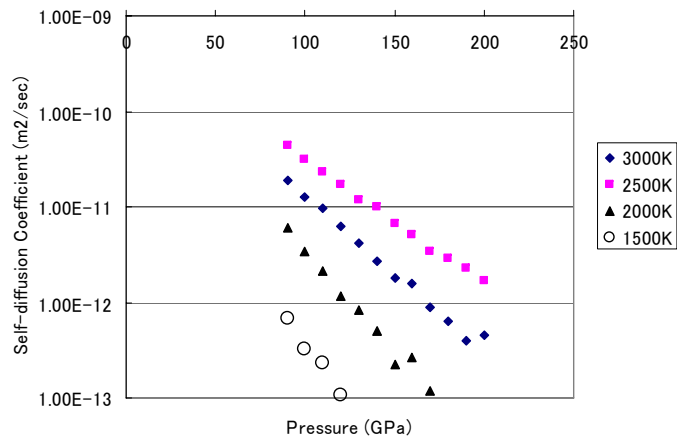
- Neの一部の圧力領域で計算に成功、左図の拡散係数を得た

- Arは自己拡散係数が検出下限($1.0 \times 10^{-13} \text{m}^2/\text{sec}$)を大体の領域で下回るため、計算に成功していない

MgOとの比較

Ne

Self-Diffusion of Ne Crystal (FCC, L-J Potential, Kittel 1972)



- Neの自己拡散係数は圧力増加に対して線形に減少する
- MgO(Ito and Toriumi 2005) は圧力増加に応じて減少→増加となる



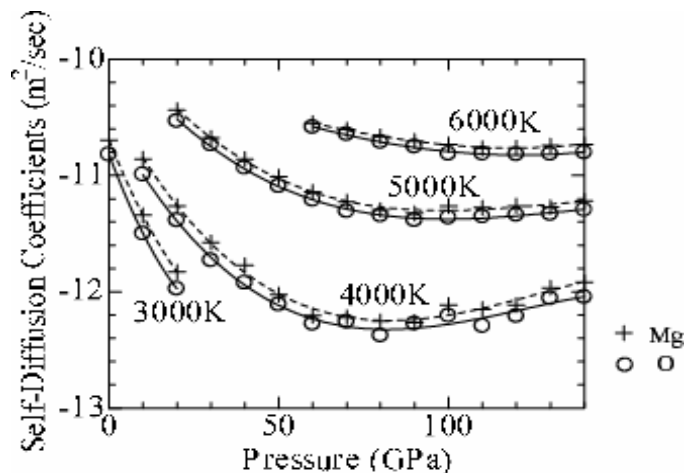
- MgOと違って、L-J型の相互作用を持つ物質の自己拡散の圧力依存性は、線形であるという結果となった



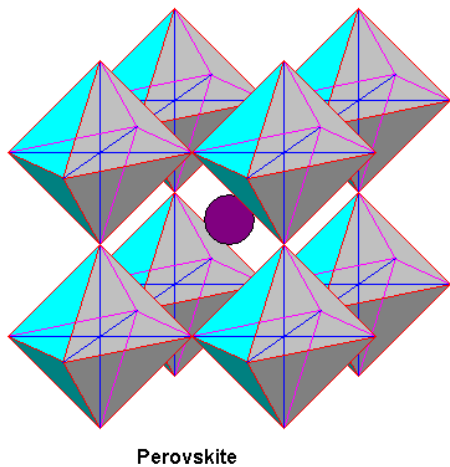
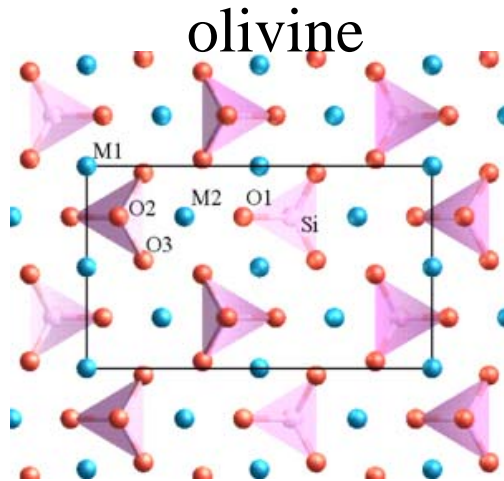
- Ito and Toriumi 2005 で観察された自己拡散の圧力依存性は、自己拡散自体の普遍的現象ではなく、物質依存であることが分かった

MgO

Ito and Toriumi (2005)



地球内部物質への適用

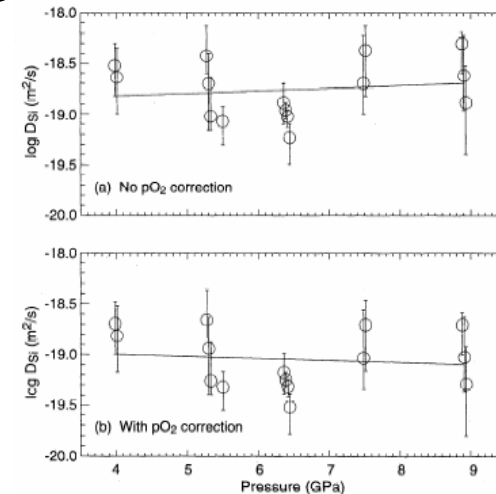


- ・上部マントルのシリケート(ol, px, sp, grt, ...)のSi-Oが全て4配位であるのに対して下部マントルのペロブスカイトのSi-Oは6配位



- ・4配位→6配位への転移によって共有結合性が減少し、クーロン力が増す。したがってペロブスカイトもNeよりMgOに近い拡散係数の挙動を示す可能性がある

olivine 拡散の
圧力依存性
(Bejina et al. 1999,
San Carlos olivine)



結論

- ✓L-J型の相互作用をもつ結晶の自己拡散の計算を Ito and Toriumi 2005 と同じ手法で直接計算した
- ✓計算は希ガスの結晶(Ne, Ar)を想定した、(パラメータ Kittel 1972)
- ✓Ne の自己拡散係数の圧力依存性の計算に成功した。結果は圧力に対して線形の減少であり、MgO(Ito and Toriumi 2005)と異なる結果となった
- ✓MgOとNeの相互作用の違いがクーロン力であることから、Ito and Toriumi の自己拡散係数の挙動はクーロン力である可能性があることを示唆した