

## 論文内容の要旨

論文題目 下部マントルレオロジーの計算科学的研究  
(A computational study of the lower mantle rheology)

氏名 伊藤 洋介

マントルダイナミクスをモデル化する上で以前から障害になっているのがマントル、特に下部マントルの粘性率に関する知見の乏しさである。下部マントルは固相のまま流動しているため、その粘性率は下部マントルの流動（レオロジー）に関する性質を解明することによって明らかになる。下部マントルは拡散クリープによって流動していると信じられており、拡散クリープの素過程である自己拡散は拡散クリープそのものより取り扱いやすいため、下部マントルの構成鉱物の自己拡散を調べ、得られた自己拡散係数から下部マントルの粘性率を推定する試みは古くから行われてきた。しかし、自己拡散の実験的研究は、下部マントルに相当する高温高压に試料を長時間保持して試料中に拡散を起こさせ、拡散のプロファイルを正確に得る技術的困難があり、成功例は下部マントルの最上部の圧力条件で数例にとどまっている。マントルダイナミクスのモデル化には、下部マントル全域にわたる粘性率の情報が必要であるが、実験的研究のみから近い将来に得られる見込みは薄い。一方計算科学的方法は、本質的に時間発展する確率現象である自己拡散をモデルとして再現しなければならない困難があり、また常にモデルの精度を実験データによって検証し続けなければならないものの、温度圧力条件の再現が容易であるため、成功すれば下部マントル全域にわたって信頼できる知見が得られる。自己拡散の微視的過程は空孔を介した原子の自発的な移動である。下部マントルの高温、高压中で、原子は激しく振動し、高いエネルギーを持つ。原子のエネルギー分布はマクスウェル・ボルツマン則に従い不均一であり、空孔周囲の原子が高いエネルギーを有するときに空孔への自発的な移動が偶然

に生じ、移動した原子の元の位置が新たに空孔となる。下部マントルは高压であるのみならず圧力範囲が非常に広い（25 – 135 GPa）ため、活性化体積をパラメータとする拡散係数の圧力線形則が破れ非線形的な挙動を示す可能性が考えられる。したがって、低圧領域で得られた拡散係数の圧力依存性の、下部マントル圧力領域への単純な外挿は信頼できない。下部マントルの自己拡散は、計算科学を適用して、空孔を介した原子の自発的な移動を下部マントルの実際の温度圧力領域で再現することによって、はじめて理解できる。

本研究は下部マントルの構成鉱物の主要な端成分である MgO ペリクレーズ、および MgSiO<sub>3</sub> ペロブスカイトの自己拡散を、計算科学の手法の一つである分子動力学法を用いて、下部マントル全域に相当する広範囲の温度圧力条件下で、空孔を介した原子の自発的移動を再現して調べた。本手法により得られる自己拡散係数は、計算機の能力の限界から原子の自発的移動を十分再現することができず、その結果、精度が低下することが報告されている。この問題は大型計算機（地球シミュレータ）を用いて温度圧力条件毎に長時間（10<sup>7</sup>step=20ns）の計算を行うことによって改善した。得られた MgSiO<sub>3</sub> ペロブスカイトのシリコン(Si)の活性化エンタルピー [ $H_m^*(P)$ ] は圧力が增大するにつれて単純に増大し、圧力の線形依存を仮定して 40GPa – 100GPa の範囲で  $H_m^*(P)$  [kJ/mol] = 0.875 \*P[GPa] + 310 と決定され、25GPa に外挿した [ $H_m^*(P)$ ] は実験データとよく一致した。MgO ペリクレーズのマグネシウム(Mg)および酸素(O)の活性化エンタルピー [ $H_m^*(P)$ ] は、0-140GPa の圧力範囲に対して、215-297[kJ/mol](O)、202-288[kJ/mol](Mg)の範囲で変化し、いずれも、(1) 0-60GPa の範囲で圧力増加にしたがって増加し、(2)60GPa において最大となり、増加から減少に転じ、(3)60-140GPa の範囲で圧力増加にしたがって減少する、非線形的挙動を示した。この結果は、常圧の O, Mg の  $H_m^*(P)$ 、および、15-25GPa における Mg の活性化体積の実験データとよく一致した。MgO ペリクレーズ  $H_m^*(P)$  の非線形的挙動の原因を調べるため、MgO ペリクレーズと異なる Lennard-Jones[L-J]型の原子間相互作用を有する固体ネオン(Ne)の自己拡散の圧力依存性を調べて、MgO ペリクレーズと比較した。得られた自己拡散係数の圧力依存性は線形性が高く、活性化体積は 90-160GPa の圧力範囲で 0.62

-0.74 (cm<sup>3</sup>/mol)と決定された。結果の線形性から、MgO ペリクレースの非線形性の原因は、Lennard-Jones 型の原子間相互作用モデルに含まれておらず、MgO ペリクレースの原子間相互作用において支配的な役割を持つ、長距離力（クーロン力）項であることが示唆された。得られた MgO ペリクレースおよび MgSiO<sub>3</sub> ペロブスカイトの自己拡散係数の結果から、対応する下部マントルの相の粘性率を与えた。得られた粘性率は、MgSiO<sub>3</sub> ペロブスカイトが、深さ変化は小さく単調な微増となったのに対し、MgO ペリクレースは深さが深くなるにつれ増加から減少に転じ、減少は 1/100 と大幅であった。MgSiO<sub>3</sub> ペロブスカイトの粘性率の小さな深さ変化は、地球物理学的観測から深さ方向のみを考慮した 1 次元のモデルを使って推定した下部マントル粘性率の深さ変化と一致するのに対し、MgO ペリクレースの粘性の深さ変化はこれと一致しないため、観測の 1 次元モデルは MgSiO<sub>3</sub> ペロブスカイトの粘性を反映していることが判明した。また、2 相の粘性率比は下部マントル最深部にて非常に大きく ( $\approx 10^{4.5}$ ) なり得ることが判明し、下部マントル最深部にて MgO ペリクレースが下部マントルのレオロジイを支配したときに、例えば全マントル規模の上昇流の付け根部分が小さくなるなどの、特徴的な構造が現れる可能性が示唆された。