

論文審査の結果の要旨

氏名 伊藤 洋介

本論文は 7 章からなる。第 1 章はイントロダクションで、第 2 章はこの研究で用いられた分子動力学計算法に関する記述、第 3 章は主たる研究対象となった MgO に関する研究結果、第 4 章は比較のために計算した希ガス固体の結果、第 5 章は下部マントルの最主要構成鉱物である MgSiO_3 ペロフスカイトの結果、第 6 章が上記の物質の結果を総合して議論した下部マントルのレオロジー、そして第 7 章が結論、という構成になっている。

マントルダイナミクスを議論する上で、地球深部を構成すると考えられる物質の粘弾性的性質を知ることは不可欠である。弾性的性質に関しては、近年の超高圧高温 X 線実験技術やブリルアン散乱実験技術の飛躍的發展に伴い、実験により直接情報を得ることが可能になりつつあるが、粘性的性質に関しては地球科学的現象の時間スケールが非常に長いために実験でそれを明らかにすることは、少なくとも現在の科学のレベルでは絶望的である。そこで本論文では、分子動力学法を用いた理論計算により、この問題の解明に取り組んだ。具体的には、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いるため、拡散クリープの素過程である自己拡散を下部マントルの主要な構成鉱物の端成分である MgSiO_3 ペロフスカイトと MgO ペリクレーズについて計算し、得られた自己拡散係数から下部マントルの粘性率を議論するという研究手法を用いた。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なので、各結晶の構造を持ち、かつその中に空孔を含む系を考え、その系における原子の

移動を分子動力学計算により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再現して調べた。分子動力学を用いたこのような計算は以前からいろいろ行われてはいるが、計算時間を膨大に必要とすることから、十分な信頼度と精度を持った結果を得ることは容易ではなかった。しかし本研究ではこの問題を、大型計算機（地球シミュレータ）の能力をフルに使う計算手法を開発して長時間（ 10^7 step=20ns）のシミュレーションを行うことによって克服し、信頼度の高い結果を得ることに成功した。その結果、MgO では自己拡散係数が圧力と共に単調に減少するという従来の予測を覆して 80GPa 程度から増加に転じるという新しい知見を得た。この計算結果の信頼性をチェックするため、原子間ポテンシャルの形が大きく異なる希ガス固体のネオンについても計算を行い、この場合はそのような非線形性は見られず、MgO ペリクレースの特異な振る舞いは、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）項に起因する可能性が高いことを明らかにした。さらに、MgSiO₃ ペロフスカイトに関する計算結果と合わせて、2相の粘性率比は下部マントル最深部において非常に大きく（ $\approx 10^{4.5}$ ）なり得ることを明らかにし、全マントル規模のホットプルームの形態を考えたとき、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を明らかにした。以上のように本論文は地球シミュレータの能力を最大限に引き出して、地球下部マントルのレオロジーに関して新しい知見を得ることに成功している。

なお、本論文の第2章、第3章、および第6章の一部はすでに鳥海光弘教授との共著論文として公表されており共同研究ではあるが、論文提出者が主体となって理論計算や解析、検証を行ったものであり、公表予定の他の章の内容についても同様であるので、論文提出者の寄与が充分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。