

令和 6 年 6 月 5 日現在

機関番号：16301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2023

課題番号：20K04110

研究課題名(和文)沈み込みスラブの熱伝導率の研究 - 下部マントルの温度不均質構造の解明に向けて -

研究課題名(英文) Theoretical study on the thermal conductivity of subducting slabs toward understanding the temperature heterogeneity in the lower mantle

研究代表者

出倉 春彦 (Dekura, Haruhiko)

愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・講師

研究者番号：90700146

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：地球内部の温度は現在でも不確かな物理量の一つである。スラブ・マントルの両者の鉱物組成の違いを反映して、マントル内部は極めて不均質な温度構造が実現していると考えられている。本研究では、種々の沈み込みスラブ上面の玄武岩組成層の構成鉱物および中・下面のパイロライト構成鉱物を対象として第一原理格子動力学計算を実施し、スラブの沈み込みに由来する下部マントルの温度不均質構造の制約のために必要となる格子熱伝導率を理論的に決定した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

マントル鉱物の格子熱伝導率は、地球ダイナミクス等の解明に必要な物理量である。しかし、下部マントル温度・圧力条件下の実験は依然として容易ではない。また、理論研究においても、鉄固溶体などの現実的な化学組成を対象とした計算報告例は極めて少ない。本研究では、沈み込みスラブを構成する鉱物の端成分組成の深部マントルその場条件における格子熱伝導率、ならびに、高温高圧下における鉄固溶効果等について、先駆的な研究成果が得られた。今後、これらの物質科学的な知見を取り入れた熱的進化モデリングの構築を通じて、地球内部の温度構造の進化(熱史)についての理解が促進されるだろう。

研究成果の概要(英文)：One of the most uncertain physical quantities is the temperature of the Earth's interior. Differences in the mineral composition of both the subducting slabs and surrounding mantle result in a substantial heterogeneity in the temperature of the mantle. In this project, I conducted a series of first-principles lattice dynamics calculations based on the density functional theory for the constituent minerals of the basaltic and pyrolytic compositions in the lower mantle. The lattice thermal conductivities of those minerals were successfully determined at high pressure and temperature, which are required to constrain the temperature heterogeneity of the lower mantle due to the subduction of the slabs.

研究分野：計算物質科学

キーワード：格子熱伝導 下部マントル 玄武岩 パイロライト 第一原理計算

## 1. 研究開始当初の背景

マンツルの対流様式はマンツルの粘性率に強く影響を受けることから、マンツル構成鉱物の粘性率の温度・圧力・化学組成依存性の研究が盛んに行われている。粘性率は特に温度に敏感であることから、マンツルの温度構造を決めればマンツルダイナミクスについての理解がより深まる。さらに、対流を駆動する主要な熱源と考えられる核からマンツルへの熱輸送についての知見も得ることができる。近年の地震波観測技術・高圧物質科学技術・対流シミュレーション技術の向上により、地震波速度と鉱物の密度・弾性定数の関係を用いたマンツル・核の温度分布の理解が着々と進んでいる。しかし、観測によって得られる地震波速度は温度と化学組成の両方の影響を受けており、温度のみよる影響を抽出することは容易ではない。そのため、地球内部の温度構造は依然として不確定性が大きい(e.g., Stacey 2008)。沈み込むスラブの上面は中央海嶺玄武岩に由来し、その下層には鉄に枯渇したハルツバージャイト、上部マンツルと同組成のかんらん岩と続く多層剛体板である。固体中の元素の拡散速度の低さから、スラブの沈み込みはマンツル内に温度不均質性のみならず化学組成不均質性ももたらしている。スラブ内部は結晶格子による熱伝導(格子熱伝導)による熱輸送機構が卓越しているため、熱伝導方程式を解くことによって沈み込みスラブ由来の地球深部マンツルの温度不均質構造を制約できる。その際、スラブ構成鉱物の熱伝導率の温度・圧力・化学組成依存性の詳細を知る必要がある。しかし、下部マンツルの温度・圧力条件下における格子熱伝導率の実験測定は技術的に容易ではなく、スラブの熱輸送特性の解明につながる熱伝導率データは極めて乏しかった。

## 2. 研究の目的

下部マンツルに沈み込んだスラブが形成する中央海嶺玄武岩・パイロライトの深部マンツル条件下における格子熱伝導率の詳細は明らかになっておらず、沈み込みスラブの内部温度構造とその深さ依存性の定量的な理解が遅れている。本研究では、大規模コンピューターシミュレーションによる沈み込みスラブの格子熱伝導率・温度構造の決定を目指し、下部マンツルに沈み込む

だスラブ構成鉱物の格子熱伝導率の温度・圧力・組成依存性や、鉄などの不純物による格子熱伝導率への影響の解明を主目的とした。

### 3．研究の方法

本研究ではスラブ構成鉱物の高温高圧下における格子熱伝導率を理論物質科学で発展した手法に基づき計算する。格子熱伝導現象とは、物質中に温度勾配があるときに、格子の振動によってエネルギーが伝播することを指す。エネルギー輸送の効率を示す指標が格子熱伝導率である(フーリエの法則)。熱伝導現象は格子波の振動を量子化した“フォノン”描像を用いることで微視的な観点から理解できる。この描像では、物質中の多数のフォノンが互いに相互作用しながら運動することで熱流を作る。この「フォノン流」の運動量(速度)や比熱、平均自由行程などの運動学的特性は、結晶中の原子に働く力により規定される。本研究では、経験的パラメータを一切用いず原子間力の高精度計算が可能な密度汎関数理論に基づく「第一原理計算法」を用い、上述のフォノンの運動特性を決定する。得られたフォノン特性から構築するフォノン-ボルツマン方程式を解くことで、鉱物の格子熱伝導率を決定できる。

### 4．研究成果

種々の沈み込みスラブ構成鉱物の端成分の格子熱伝導率を下部マントル温度・圧力条件で決定し、また、熱伝導率への鉄固溶効果について、特にパイロライトの主要構成鉱物(MgO ペリクレイス, MgSiO<sub>3</sub> ブリッジマナイト・ポストペロプスカイト)を対象として第一原理的な検証を併せて進めた。これにより、地球下部マントルの熱輸送特性の理解が進むとともに、絶縁体の熱伝導率の温度・圧力・組成依存性など理論物質科学的観点からも種々の有益な知見が得られた。今後は、本研究で培った熱伝導率を含む物性データをさらに拡充し、それによる深部マントルの温度不均質性・核-マントル間の熱的相互作用・地球の熱的進化の理解の促進を目指す。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Haruhiko DEKURA, Taku TSUCHIYA	4. 巻 35
2. 論文標題 Ab initio lattice thermal conductivity of (Mg,Fe)O ferropericlasite at the Earth's lower mantle pressure and temperature	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 1,11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1361-648X/acce16	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Taku, TSUCHIYA, Jun TSUCHIYA, Haruhiko DEKURA, Sebastian Ritterbex	4. 巻 48
2. 論文標題 Ab Initio Study on the Lower Mantle Minerals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Annual Review of Earth and Planetary Sciences	6. 最初と最後の頁 99 ~ 119
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1146/annurev-earth-071719-055139	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 0件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Haruhiko DEKURA, Taku TSUCHIYA
2. 発表標題 Ab initio lattice thermal conductivity of pyrolytic lower mantle to infer the core-mantle boundary heat flow
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2023年大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 出倉 春彦, 土屋 卓久
2. 発表標題 第一原理鉱物物性学に基づくCMB熱流量モデリング
3. 学会等名 第64回高圧討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Haruhiko DEKURA
2. 発表標題 An ab initio approach to the lattice dynamics of cubic CaSiO <sub>3</sub> perovskite
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2022年大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Haruhiko DEKURA
2. 発表標題 First principles study on the thermal transport properties of the subducting slab
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2021年大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Haruhiko DEKURA, Taku TSUCHIYA
2. 発表標題 Effect of iron on the lattice thermal conductivity of lower mantle minerals
3. 学会等名 Annual Meeting of the Asia Oceania Geosciences Society (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Haruhiko DEKURA, Taku TSUCHIYA
2. 発表標題 Ab initio lattice thermal conductivity of (Mg,Fe)O ferropericlasite at the deepest mantle
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2020年大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------