

令和 4 年 6 月 28 日現在

機関番号：12608

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2020～2021

課題番号：20K22365

研究課題名（和文）地球内核の積層欠陥エネルギー

研究課題名（英文）Stacking fault energy of the Earth's inner core

研究代表者

五味 斎（Gomi, Hitoshi）

東京工業大学・地球生命研究所・特任助教

研究者番号：10876171

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では(1)地球の内核圧力におけるB2-FeSiの規則・不規則転移温度の推定、(2)水素に飽和した面心立方構造鉄水素化物(fcc-FeH)に対する磁性と状態方程式の関係、(3)水素に飽和していない面心立方構造鉄(fcc-FeH_x, 0 < x < 1)に対する磁性と状態方程式の関係についてKKR-CPA法を用いて第一原理計算を行った。

以下の結論が得られた。(1)B2-FeSiの規則・不規則転移温度は非常に高く、内核では不規則化が起きない。(2)強磁性を仮定したfcc-FeHの計算が、室温の実験をよく再現する。(3)常磁性を仮定したfcc-FeH_xの計算が、高温の実験をよく再現する。

研究成果の学術的意義や社会的意義

地球の中心部分は、360万気圧以上の高圧がかかっているのみならず、5000 程度の高温状態になっている。このような高温条件では、物質は化学的・構造的・磁氣的に不規則な状態が熱力学的に安定になる可能性がある。本研究では、こういった不規則の効果が、地球や惑星の深部条件でどのような影響をもたらすのかを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：In this study, we have performed first-principles calculations using the KKR-CPA method to study the followings. (1) Estimate the order-disorder transition temperatures of B2-FeSi at the Earth's inner core pressure, (2) the relationship between magnetism and the equation of state for hydrogen-saturated fcc-FeH (face-centered cubic iron hydride), and (3) the relationship between magnetism and the equation of state for fcc-FeH_x (0 < x < 1), which is not saturated with hydrogen.

The following conclusions were obtained. (1) The ordered-disordered transition temperature of B2-FeSi is very high, and no disorder transition occurs in the inner core. (2) The calculation of fcc-FeH with ferromagnetism reproduces the ambient-temperature experiment well. (3) The calculation of fcc-FeH_x with paramagnetism reproduces the high-temperature experiment well.

研究分野：高圧地球科学

キーワード：内核 積層欠陥エネルギー KKR-CPA

1. 研究開始当初の背景

地球の中心部分は、360 万気圧以上の高圧力がかかっているのみならず、5000°C 程度の高温状態になっている。この中心部分には、内核と呼ばれる鉄を主要な元素とする固体の合金が存在している。その結晶構造の決定は、高圧地球科学の最も重要なテーマの一つである。常温常圧における鉄の結晶構造は、体心立方構造(bcc)を取ることが知られている。これに対して、内核は非常に高い圧力がかかっているため、その結晶構造が最密充填構造を取っている可能性が高い。その候補は面心立方構造(fcc)、六方最密充填構造(hcp)、複六方最密充填構造(dhcp)などが挙げられる。ただし、シリコンなどが大量に含まれる場合には、最密充填構造を取らない可能性もある。例えば高圧・室温下における FeSi は、B2 構造が安定となることが知られている。このように、鉄合金の結晶構造は、その化学組成や圧力に影響を受けることが知られている。

鉄合金の結晶構造は、圧力と化学組成のみならず、温度にも影響を受ける。高温条件下では、エントロピーが大きい不規則な状態が、熱力学的に安定になる。まず、前述の 3 種類の最密充填構造に関して言えば、全て単純六方格子における層構造の順序が入れ替わったものとして表現することが可能であるという点で、類似の構造である。したがって、高温状況下では、これらの結晶の持つ層構造の順序がランダムに入れ替わる積層欠陥が熱力学的に安定化する可能性がある。また、鉄とシリコンが規則的に並んでいる B2 FeSi に関して、内核の様な高温下では、鉄原子とシリコン原子が不規則的に入れ替わった bcc FeSi へと規則・不規則転移を起こす可能性がある。単純六方格子の層構造が入れ替わる積層欠陥、B2 FeSi の原子が入れ替わる化学不規則の他に、強磁性状態において一方向に揃った鉄原子のスピンの不規則な方向を持つ常磁性状態へ変化する磁気不規則も、高温・高圧下で重要になる可能性がある。

2. 研究の目的

地球や惑星の固体金属核の結晶構造や物性に対する不規則性の影響を調べる。

3. 研究の方法

Korringa-Kohn-Rostoker (KKR)法による第一原理計算から、結晶の全エネルギーをもとめた。化学不規則・磁気不規則に関しては、コヒーレントポテンシャル近似(CPA)を用いた。

4. 研究成果

本研究課題では(1)地球の内核圧力における B2 FeSi の規則・不規則転移温度の推定、(2)水素に飽和した面心立方構造鉄水素化物(fcc FeH)に対する磁性と状態方程式の関係、(3)水素に飽和していない面心立方構造鉄(fcc FeH_x, 0 < x < 1)に対する磁性と状態方程式の関係について KKR-CPA 法を用いた第一原理計算を行った。

(1) B2 FeSi の規則・不規則転移

FeSi は、高圧下で B2 規則構造を取ることが知られている。多くの B2 規則構造を持つ物質は、高温下で bcc 不規則相に相転移することが知られている。本研究では、KKR-CPA 法を用いて B2 FeSi, bcc FeSi, およびその中間の不規則度を持つ構造の全エネルギーを計算した。得られた全エネルギーから状態方程式を計算したところ、B2 FeSi の状態方程式は、先行研究の常温の状態方程式をよく再現した。状態方程式から計算されたエンタルピーと不規則性に起因するエントロピーから、高温下におけるギブスエネルギーの比較を行い、規則・不規則転移温度を見積もった。その結果は、FeSi の融点よりもはるかに高く、地球の内核条件では B2 FeSi は規則・不規則転移を起こさないことが明らかになった。この結果に関して、第 62 回高圧討論会で口頭発表を行った。

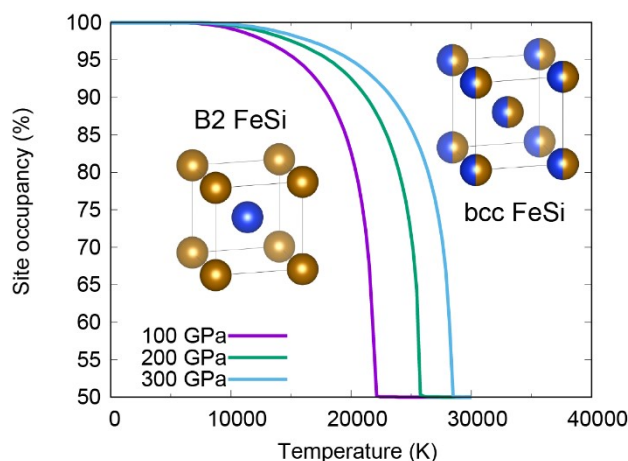


図 1. B2 FeSi の鉄原子が鉄サイトを占有する確率の温度依存性。鉄原子が鉄サイトとシリコンサイトを完全にランダムに占有するようになる規則・不規則転移温度は、非常に高いと見積もられた。

(2) fcc FeH の状態方程式

水素は、地球の核に含まれている軽い不純物元素の有力な候補のひとつである。高温高压下で鉄を水素に飽和させた状況に置くと、面心立方構造 (fcc) の格子間位置に水素が侵入した fcc FeH となる。本研究では、この fcc FeH の磁性と状態方程式の関係を KKR-CPA 法を用いて調べた。その結果、fcc FeH は、約 45 万気圧以下の圧力では強磁性が安定であるが、それよりも高压条件では、非磁性状態に転移することが明らかになった。強磁性状態のキュリー温度は、常圧付近で、約 1000 K となり、圧力の増加に伴って低下する挙動を示した。本研究によって得られた状態方程式は、共同研究者によって行われたダイヤモンドアンビルセル装置を用いた高压実験と調和的である。この結果は、共同研究者の高温高压実験とともに国際誌に発表されている (Tagawa, Gomi et al. 2022, Geophysical Research Letters)。

(3) fcc FeH_x の状態方程式

水素に不飽和な条件では、前述の fcc FeH の格子間サイトのうち、一部が空格子となっている fcc FeH_x ($0 < x < 1$) を作ることができる。本研究では、fcc FeH と同様の方法で、水素に飽和していない fcc FeH_x の状態方程式に対する磁性の影響を計算した。

その結果、fcc FeH_x は水素量が増えるほど体積が増加し、強磁性が安定となる圧力範囲が広がることが分かった。また、キュリー温度も水素量が多いほど、圧力が低いほど高くなる傾向がみられた。本研究の状態方程式と先行研究の高温高压実験の結果との比較から、常磁性状態を仮定した計算結果が最もよく先行研究を説明できることが明らかになった。この結果に関して、日本地球惑星科学連合 2022 年大会で口頭発表を行った。

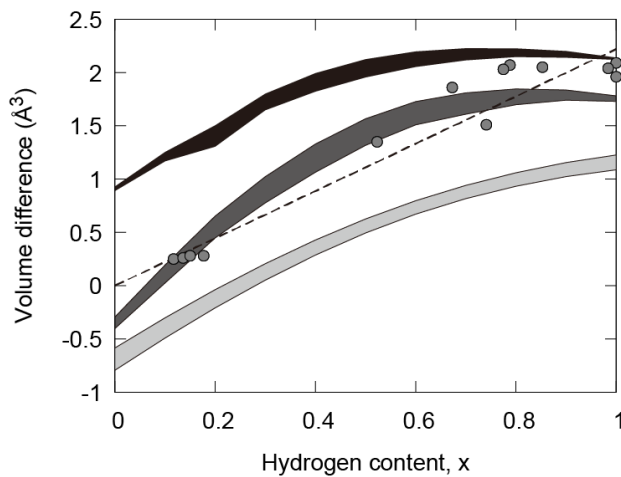


図 2. fcc FeH_x の体積膨張の水素量依存性。丸型シンボルは、先行研究の中性子線実験 (Ikuta et al. 2019) の結果を表す。強磁性の結果 (黒のバンド) は体積を過大評価し、非磁性の結果 (薄いグレーのバンド) は過小評価している。これに対して、常磁性の結果 (濃いグレーのバンド) は、先行研究の実験を説明できる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Tagawa Shoh, Gomi Hitoshi, Hirose Kei, Ohishi Yasuo	4. 巻 49
2. 論文標題 High Temperature Equation of State of FeH: Implications for Hydrogen in Earth's Inner Core	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Geophysical Research Letters	6. 最初と最後の頁 e2021GL096260
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1029/2021GL096260	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 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 五味 斎, 廣瀬 敬
2. 発表標題 FeSiのB2-bcc相転移と内核の温度プロファイル
3. 学会等名 第61回高圧討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 五味 斎, 廣瀬 敬
2. 発表標題 Magnetism and equation of states of fcc FeHx at high pressure
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 長屋 慶大, 五味 斎, 太田 健二, 廣瀬 敬
2. 発表標題 B2-bcc Fe1-xSixの状態方程式
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 五味 齋, 廣瀬 敬
2. 発表標題 Impurity resistivity of the inner core
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

〔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
---------	---------