# 科学研究費助成事業 研究成果報告書



平成 26 年 6 月 4 日現在

機関番号: 16301 研究種目: 基盤研究(C) 研究期間: 2011~2013

課題番号: 23540560

研究課題名(和文)沈み込んだ地殻物質の高温高圧弾性特性と下部マントルの化学不均質の解明

研究課題名(英文)Study on high-pressure and temperature elasticity of subducted crustal materials and lower mantle chemical heterogeneity

#### 研究代表者

土屋 卓久 (Tsuchiya, Taku)

愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・教授

研究者番号:70403863

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 3,900,000円、(間接経費) 1,170,000円

研究成果の概要(和文):地球深部圧力条件における主要地殻構成鉱物の密度及び弾性特性を密度汎関数第一原理計算法によりに決定し、地殻物質のマントル深部への沈み込みの可能性、沈み込んだ場合の地球内部での分布、マントルダイナミクスへの影響について考察した。

その結果、典型的な地殻物質はいずれも力学的にはマントル最下部まで到達し、下部マントルの化学的不均質の成因になり得るが、核からの加熱や内部発熱の時間スケールを考慮すると、グローバルなマントル対流に巻き込まれ安定成層は形成しづらいことが分かった。このことから、地殻形成がマントルの分化プロセスであるのに対し、その沈み込みは基本的には同化プロセスとなると考えられる。

研究成果の概要(英文): The density and elasticity of the major crustal minerals in the deep mantle pressure condition were determined using the density functional first principles computation method. Based on the calculated results, potential subduction of the crustal materials into the deep mantle, their stable distribution in the mantle, and influences on the mantle dynamics were discussed.

It was found that each typical crustal material could reach the lowermost mantle and cause the chemical he terogeneity, but their stable stratification is less likely when considering the time scale of the basal heating from the outer core and the internal heating. Instead they would likely be involved in the global mantle convection. This suggests that while the crust formation is a differentiation process of the mantle, the subduction generally serves as an assimilation process.

研究分野: 数物系科学

科研費の分科・細目: 地球惑星科学・岩石・鉱物・鉱床学

キーワード: 第一原理電子状態計算 沈み込んだ地殻物質 下部マントルの不均質性

## 1.研究開始当初の背景

- (1) アフリカや中央太平洋下の下部マントル 中部~下部領域において、約-2%の S 波低速 度異常を伴う、いわゆる広域低速度領域 (Large low velocity province, LLVP) が地 震学的に観測されていた。LLVP の解明は、 マントル対流メカニズム、沈み込むスラブの **挙動、プルームの成因など深部マントルのグ** ローバル・ダイナミクスの理解につながり重 要であるが(例えば Lav et al., PEPI, 2004) マントル対流シミュレーションモデル (Bull et al., EPSL, 2009) によれば、最新の地震波 トモグラフィの精度であっても LLVP が高温 異常による巨大上昇流(スーパープルーム) であるのか、或いは化学的に異なる領域の存 在を示しているのかは区別できないとされ ていた。
- (2) 化学的に異なる物質が存在するとすれば、その代表的な候補として考えられるのが、沈み込んだ地殻物質である。従って下部マントル圧力領域におけるそれらの弾性特性、特に弾性特性の温度依存性や組成依存性の決定が、LLVP の起源を解明するうえで重要な鍵となる。下部マントル全域をカバーする温度圧力条件での弾性波速度測定実験はほぼ不可能であり、第一原理シミュレーションがほぼ唯一の有効なアプローチであった。

# 2.研究の目的

- (1) 量子力学の基本原理から出発し、経験パラメータを一切用いない密度汎関数第一原理電子状態計算法は、極端圧力条件下における物性研究に極めて有用な研究手法である。本研究の目的は、この第一原理計算法に基づき、地球マントル主要構成鉱物及び関連物質の高温高圧相平衡・熱弾性特性を高精度で予測し、得られた鉱物物性データを用いて地球下部マントル深部のセルフコンシステントな鉱物学モデルを創出することである。
- (2) さらに最新の地震学的観測結果、特に地震波速度不均質構造の物質学的解釈を試み、地球深部のダイナミクス、進化プロセスの解明に向けブレークスルーを目指す。

### 3.研究の方法

(1) 本研究では、これまで独自に開発・改良を行ってきた第一原理鉱物物性シミュレーションシステムを用いて、地殻物質の主要構成鉱物の高温高圧物性予測をおこなう。特に玄武岩や花崗岩を加圧した際に下部マントル圧力領域で出現する $SiO_2(シリカ)$ やアルミナス相に焦点を当て、その高温高圧下のトトントス相に大態方程式、弾性特性)の決定をおこなう。またアルミナス相ついては関イオン分布の無秩序化やNa、K 成分に関する固溶体形成の可能性、及びそれらの物性への効果を明らかにする。

(2) 得られた物性データと、これまでの研究から得られた他の下部マントル主要鉱物(Mg-Pv、PPv、Fp、Ca-Pv)の物性データを組み合わせ、多成分多相系の岩石物性を導き、橄欖岩などのマントル物質と沈み込んだ地殻物質の相違を解明する。それに基づき、下部マントルの地震波速度構造を再現し、大規模不均質性(LLPV)の起源を解明する。

#### 4.研究成果

- (1) 主要地殻構成鉱物の地球深部圧力条件での密度及び弾性特性を第一原理計算法によりに決定し、マントル岩石の物性との比較を通して、地殻物質の沈み込みの可能性、沈み込んだ場合の地球内部での分布、マントルダイナミクスへの影響について考察した。
- (2) まず下部マントルの標準岩石モデルを特定するために、上部マントル物質と考えられているパイロライトの密度・弾性特性を計算し、地震学的観測モデル (PREM)と比較した。その結果、パイロライト組成がPREMを大変よく再現することを見出した。次に地殻岩石として海洋地殻 (中央海嶺玄武岩)組成、大陸上部地殻 (花崗岩)組成、太古代花崗岩(TTG)組成や月地殻の主成分である斜長岩組成を採用し、密度をパイロライトと比較することで、これらが沈み込んだ場合の重力的な安定性について調べた。
- (3) 結果をまとめると、(1)玄武岩組成は下部マントル全域でパイロライトよりも高密度であるが、密度差は下部マントル上部からた。(2)花崗岩及びTTG は、SiO2 高圧相であるスティショバイトが安定化する約 10 万気圧程度まで沈み込めば、遷移層条件ではパイロライトよりも高密度、また下部マントル条件でもパイロライトとほぼ同密度となる。(3)斜長岩組成は、下部マントル条件でパイロライトとほぼ同程度の密度となる。いずれの場合も、下部マントル条件では周囲との密度差が核マントル境界に長時間停滞し蓄積されるのに必要とされる 3%程度の密度差よりも小さい。
- (4) 以上の結果は、典型的な地殻物質はいずれも力学的にはマントル最下部まで到達し、下部マントルの化学的不均質の成因になり得るが、核からの加熱や内部発熱の時間スケールを考慮すると、グローバルなマントル対流に巻き込まれ安定成層は形成しづらいことを示している。このことから、地殻形成がマントルの分化プロセスであるのに対し、その沈み込みは基本的には同化プロセスであると考えられる。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者に は下線)

## [雑誌論文](計12件)

K. Kawai and <u>T. Tsuchiya</u>, P-V-T equation of state of cubic CaSiO<sub>3</sub> perovskite from first principles computation. J. Geophys. Res., 查 読有, 2014, 2801-2809

DOI: 10.1002/2013JB010905

土屋卓久,第一原理計算による地球惑星 理学.高圧力の科学と技術,査読有,2013,

DOI: 10.4131/jshpreview.23.103

<u>T. Tsuchiya</u>, K. Kawai, and S. Maruyama, Expanding-contracting Earth. Geosci. Front., 查読有, 2013, 341-347

DOI: 10.1016/j.gsf.2012.11.008

<u>T. Tsuchiya</u> and X. Wang, Ab initio investigation on the high-temperature thermodynamic properties of Fe<sup>3+</sup>-bearing MgSiO<sub>3</sub> perovskite. J. Geophys. Res.: Solid Earth, 查読有, 2013, 83-91

DOI: 10.1029/2012JB009696

A. Metsue and  $\underline{\text{T. Tsuchiya}}$ , Shear response of Fe-bearing MgSiO<sub>3</sub> post-perovskite at lower mantle pressures. PJA Ser. B,查読有,2013, 51-58

DOI: 10.2183/pjab.89.51

K. Kawai and <u>T. Tsuchiya</u>, First principles study on the high-pressure phase transition and elasticity of KAlSi $_3$ O $_8$  hollandite. Am. Mineral., 查読有, 2013, 207-218

DOI: 10.2138/am.2013.4077

K. Kawai, S. Yamamoto, <u>T. Tsuchiya</u>, and S. Maruyama, The second continent: Existence of granitic continental materials around the bottom of the mantle transition zone. Geosci. Front., 查読有, 2013, 1-6

DOI: 10.1016/j.gsf.2012.08.003

A. Metsue and <u>T. Tsuchiya</u>, Thermodynamic properties of (Mg,Fe<sup>2+</sup>)SiO<sub>3</sub> perovskite at the lower mantle pressures and temperatures: An internally consistent LSDA+U study. Geophys. J. Inter., 查読有, 2012, 310-322 DOI: 10.1111/j.1365-246X.2012.05511.x

K. Kawai and  $\underline{\text{T. Tsuchiya}}$ , High-P,T phase relations in the NaAlSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub> system from first principles computation. Phys. Chem. Miner., 查読有, 2012, 305-310

DOI: 10.1007/s00269-012-0485-0

K. Kawai and <u>T. Tsuchiya</u>, Phase stability and elastic properties of the NAL and CF phases in the  $NaMg_2Al_5SiO_{12}$  system from first principles. Am. Miner., 查読有, 2012, 305-314

DOI: 10.2138/am.2012.3915

K. Kawai and <u>T. Tsuchiya</u>, First principles investigations on the elasticity and phase stability of grossular garnet. J. Geophys. Res., 查読有, 2012, B02202

DOI: 10.1029/2011JB008529

T. Tsuchiya, Elasticity of subducted basaltic

crust at the lower mantle pressures: Insights on the nature of deep mantle heterogeneity. Phys. Earth Planet. Inter., 查読有, 2011, 142-149

DOI: 10.1016/j.pepi.2011.06.018

## [学会発表](計 24 件)

河合研志, <u>土屋卓久</u>, 立方晶カルシウムペロブスカイトの小さな剛性率. 日本地球惑星科学連合, 2014 年 5 月 2 日, 横浜

X. Wang and <u>T. Tsuchiya</u>, Thermodynamic properties of Mg-postperovskite with Fe<sup>3+</sup> and Al<sup>3+</sup> dopant: an internally consistent LSDA+U study. 日本地球惑星科学連合, 2014 年 4 月 29 日,横浜

X. Wang and <u>T. Tsuchiya</u>, A pyrolitic lower mantle with (Mg,Fe<sup>3+</sup>)(Si,Al<sup>3+</sup>)O<sub>3</sub> perovskite. 日本地球惑星科学連合, 2014年4月29日,横浜

丸山茂徳,河合研志,<u>土屋卓久</u>,Where had the primordial continent gone? 日本地球惑星科学連合,2014年4月29日,横浜

河合研志,市川浩樹,山本伸次,<u>土屋卓久</u>,丸山茂徳,第2大陸の役割.日本地球惑星科学連合,2014年4月29日,横浜

<u>T. Tsuchiya</u> and X. Wang, Thermodynamic properties of Fe- and Al-bearing MgSiO<sub>3</sub> perovskite: an internally consistent LSDA+U study. AGU Fall Meeting, 2013 年 12 月 12 日, San Francisco, USA

K. Kawai, H. Ichikawa, S. Yamamoto, <u>T. Tsuchiya</u>, and S. Maruyama, Supercontinent cycle and 2nd continents. Goldschmidt 2013, 2013 年 8 月 26 日, Florence, Italy

X. Wang and  $\underline{\text{T. Tsuchiya}}$ , Investigations on thermodynamic properties of Fe- and Al-bearing MgSiO<sub>3</sub> perovskite: An internally consistent LSDA+U study. AOGS 2013, 2013 年 6 月 24 日, Brisbane, Australia

X. Wang and  $\underline{T}$ . Tsuchiya, Investigation on thermodynamic properties of Fe- and Al-bearing MgSiO<sub>3</sub> perovskite: an internally consistent LSDA+U study. 日本 地球惑星科学連合, 2013年5月24日,幕 張

河合研志, <u>土屋卓久</u>, 土屋 旬, 丸山茂 徳, Three layers model of continents and whole mantle dynamics. 日本地球惑星科 学連合, 2013 年 5 月 24 日, 幕張

<u>士屋卓久</u>,河合研志,丸山茂徳,膨張収縮地球.日本地球惑星科学連合,2013年5月24日,幕張

X. Wang and <u>T. Tsuchiya</u>, Ab initio computation on the Fe L-edge X-ray emission spectroscopy of Fe-bearing

MgSiO<sub>3</sub>. 日本地球惑星科学連合, 2013 年 5 月 20 日, 幕張

X. Wang and <u>T. Tsuchiya</u>, Theoretical modeling for the X-ray spectroscopy of iron-bearing MgSiO<sub>3</sub> under high pressure. American Geophysical Union, Fall Meeting, 2012年12月6日, San Francisco, USA

X. Wang and <u>T. Tsuchiya</u>, X-ray spectral analysis of iron in lower mantle minerals: A theoretical investigation. 第 53 回高圧討論会, 2012 年 11 月 8 日, 大阪

T. Tsuchiya and X. Wang, Effects of Fe<sup>3+</sup> incorporation on thermodynamic property of MgSiO<sub>3</sub> perovskite. AOGS-WPGM 2012, 2012 年 8 月 16 日, Singapore

河合研志, 山本伸次, <u>土屋卓久</u>, 市川浩樹, 丸山茂徳, The second continent model. 日本地球惑星科学連合, 2012 年5月21日, 幕張

丸山茂徳,河合研志,<u>土屋卓久</u>,土屋旬, Three-layers model of continent and whole mantle dynamics through time. 日本地球惑星科学連合,2012年5月21日,墓張

A. Metsue and  $\underline{T}$ . Tsuchiya, Spin crossover and thermodynamic properties of ferric Fe-bearing  $MgSiO_3$  perovskite at lower mantle P-T conditions. 日本地球惑星科学連合, 2012 年 5 月 21 日,幕張

A. Metsue and  $\underline{T.}$  Tsuchiya, Lattice dynamics and thermodynamics of Fe-bearing MgSiO $_3$  perovskite and post-perovskite. American Geophysics Union, Fall Meeting, 2011年12月8日, San Francisco, USA

福井宏之, <u>土屋卓久</u>, 第一原理格子動力学によるフェロペリクレイスの熱力学量. 第 52 回高圧討論会, 2011 年 11 月 9 日, 沖縄

- 21 K. Kawai, S. Yamamoto, H. Ichikawa, <u>T. Tsuchiya</u>, and S. Maruyama, Continental materials around the bottom of the mantle transition zone. Goldschmidt conference 2011, 2011 年 8 月 19 日, Prague
- 22 A. Metsue and <u>T. Tsuchiya</u>, Effects of iron on the thermoelastic properties of MgSiO<sub>3</sub> perovskite. 日本地球惑星科学連合, 2011 年 5 月 25 日, 幕張
- 23 河合研志, 山本伸次, <u>土屋卓久</u>, 丸山茂 徳, 第 2 大陸. 日本地球惑星科学連合, 2011 年 5 月 23 日, 幕張
- 24 市川浩樹,河合研志,亀山真典,土屋卓久,マントル深部へ沈み込む大陸地殻の量の推定.日本地球惑星科学連合,2011年5月23日,幕張

[図書](計2件)

<u>士屋卓久</u>, 他, 朝倉書店, 地球の物理学 事典, 2013, 295-338. T. Tsuchiya, 他, Wiley, Physics and Chemistry of the Deep Earth, 2013, 213-243.

〔その他〕 ホームページ等

https://sites.google.com/site/ehimetmpg/research

6.研究組織

(1)研究代表者

士屋 卓久 (TSUCHIYA, Taku) 愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究セン ター・教授

研究者番号: 70403863