

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 6 日現在

機関番号：16301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2013

課題番号：24740357

研究課題名(和文) 第一原理電子状態計算法を用いた蛇紋岩鉱物の弾性特性

研究課題名(英文) First principles investigation of the elasticity of serpentine minerals

研究代表者

土屋 旬 (Tsuchiya, Jun)

愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・准教授

研究者番号：00527608

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円、(間接経費) 1,020,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、プレートの沈み込みに伴い地球深部へ水を運搬する役割を担う含水鉱物である蛇紋岩鉱物の地球内部条件に対応した高圧力下における構造や弾性特性について、量子力学の基本原則に基づく第一原理電子状態計算法を用いたコンピューターシミュレーションによって決定することにより、プレート内部におけるこれら含水鉱物の存在状態を調べた。蛇紋石の低温多型であるリザーダイトにおいては、高圧下において水素結合が失われることにより弾性異常が起こることを報告した。また沈み込む東北日本や西南日本のプレート中で観測される地震波異常性が蛇紋石高温多型であるアンチゴライトの結晶選択配向によりよく説明できることを明らかにした。

研究成果の概要(英文)：Serpentine minerals play important role for the transportation of water into Earth's deep interiors. In this study, the structure and elasticity of lizardite and antigorite (modulation $m = 16$ and 17) have been determined by first principles calculation up to about 12 GPa. We found that the polarization direction is drastically changed by tilting the foliation plane of antigorite and the trench normal polarization anisotropy increases with pressure. As the result, trench normal polarization anisotropy about 0.2 s observed in the back-arc region can also be explained by the preferably oriented serpentinized fault about 10-20 km thick. The present study also suggests that serpentine transports water more than 100 km depth into the deep earth's interior.

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：高圧鉱物物性

1. 研究開始当初の背景

地球において水素は表層における大量の水という状態で存在し、物質・気象・風化・生命現象などに深くかかわっている。一方で、地球内部における水素の存在量や存在形態はほとんどわかっていない。これを明らかにすることは、地球の形成・進化過程を知るために不可欠である。プレートの沈み込みにより含水鉱物が水を地球内部へと運びこむが、多くの含水鉱物は地球内部の高温高圧力条件で分解することがわかっている。しかし、含水鉱物がどの領域まで水を運び込んでいるか分かっていないし、またマントル構成鉱物にはどの程度水が含まれるか不明である。

蛇紋岩鉱物(蛇紋石・緑泥石・滑石)は SiO_4 四面体や MgO_6 八面体が層状に配列し、その層間もしくは層内に水素を含む含水層状ケイ酸塩である。これらの含水鉱物は上部マントル主要成分であるカンラン岩と水が反応することにより生成される(Schmidt and Poli 1998)ため、水が地球深部へ運び込まれる際に重要な役割を占めていると考えられている。

地震波観測結果(例えば Long and van der Hilst, 2005)から地球内部における蛇紋岩鉱物の存在が推測されている。しかし、観測と比較すべき蛇紋石の地球内部条件下における弾性はまだ未解明であった。本研究では密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算法で弾性特性を求め、得られた弾性波速度を観測と比較することにより地球内部における含水鉱物の存在度を調べる。

2. 研究の目的

本研究は地球上における代表的な含水鉱物である蛇紋岩鉱物(蛇紋石・緑泥石・滑石)の弾性を第一原理電子状態計算を用いて明らかにする。これら含水鉱物は地球内部へ水を運搬する重要な役割を担うと考えられている。一方で、地球内部条件におけるこれら鉱物の弾性および地震波速度はよくわかっていない。本研究ではそれを第一原理電子状態計算法を用いて計算し、地震波速度と地震波異方性を見積り、地震波観測結果との比較によりこれら含水鉱物の沈み込み帯における存在度を見積もることにより、地球内部の水の循環経路を明らかにすることを目的とする。

3. 研究の方法

本研究は、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態計算法を用いて安定構造を決定し、その安定構造から応力歪み関係により結晶格子を歪ませて計算を行うことによって、蛇紋石・緑泥石・滑石の弾性特性をしらべる。本研究では、擬ポテンシャル法を用い、波動関数を記述するために平面波展開を行う手法を用いることを予定している。使用予定の第一原理電子状態計算プ

ログラムはPWSCF(<http://www.pwscf.org>)である。結晶格子と原子座標の構造最適化には variable cell shape molecular dynamics法(Wentzcovitch 1991)を用いる。これらの手法は申請者による無水・含水鉱物の研究でも用いられて、有効な手段であることが分かっている。

さらにこれら鉱物の単結晶弾性波速度を決定した後、電子後方散乱回折像解析等により得られた結晶方位情報をもとに格子選択配向した多結晶体(岩石)の弾性波速度を決定する。これを観測による地震波異方性と比較することにより、蛇紋岩鉱物のプレート内部における存在状態を考察する。

4. 研究成果

まず初年度は、蛇紋岩構成鉱物であり、蛇紋石の低温多形であるリザーダイトの構造と弾性特性、さらに振動特性の圧力依存性について第一原理電子状態計算法を用いて決定した。リザーダイトは蛇紋岩鉱物のなかで最も基本的な結晶構造を持ち、その振る舞いは他の含水層状ケイ酸塩の圧力下における振る舞いと比較・参照するうえで重要である。

本研究の結果、リザーダイトにおいて約10万気圧付近で弾性異常が見られ、同時に振動数の急激な上昇が見られた。この異常はリザーダイト中の6員環を成す SiO_4 四面体間の結合角が圧縮に伴い急激に変化することに起因する。これまでにラマン散乱測定などで本研究と同様の振動数の急激な上昇が約6万気圧において見られるため、実際に弾性異常が起こるのは6万気圧である可能性がある。また同様の加圧に伴う振動数増加が他の蛇紋岩鉱物においても報告されているため、今後これらの鉱物でも同じメカニズムで構造や弾性変化が引き起こされているか検証する必要がある。上記の内容について学会発表を行い、論文を作成し、国際誌(American Mineralogist)に発表した。また国際学会(AGU Fall meeting 2013)において招待講演を行った。

次年度は蛇紋石の高温多型であるアンチゴライトについて研究を行った。アンチゴライトは沈み込むスラブ条件下で安定であり、カンラン石と水の反応により生成されるために水を地球内部へ運搬するもっとも重要な役割を担うと考えられている。しかし、単位格子中に含まれる原子が約300個と非常に複雑な構造を持つために、第一原理電子状態計算法を用いて調べるには多くの計算機資源と時間を要する。さらにアン

チゴライトは温度や圧力に依存して構造（モジュレーション）を変化させている可能性が示唆されている。しかしこのモジュレーションの違いがどのように弾性に影響を及ぼしているかは不明である。よって本研究では二つのモジュレーション構造（ $m=16, 17$ ）について構造と弾性特性を決定した。

その結果、二つのモジュレーション構造について圧縮曲線や弾性について定性的に類似した変化を示すが、弾性異常を示す圧力条件が異なるなど定量的には明確な差異を示すことが判明した。さらにエンタルピーの比較により、高圧下においてモジュレーション数の大きい構造($m=17$)のほうがより安定であることが判明した。計算により得られた蛇紋石の弾性定数を基に様々な結晶方位に伝播する地震波速度を見積もった結果、琉球や東北地方における観測でみられる偏向異方性が、蛇紋石の結晶格子選択配向により説明できることを明らかにした。

以上の結果を国際誌に発表準備中である。

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 3 件)

1. M. Nishi, T. Irifune, J. Tsuchiya, Y. Tange, Y. Nishihara, K. Fujino, Y. Higo, Stability of hydrous silicate at high pressures and water transport to the deep lower mantle, *Nature Geoscience*, 7, 224-227, 2014, doi:10.1038/ngeo2074. 査読有

2. Jun Tsuchiya, A first-principles calculation of the elastic and vibrational anomalies of lizardite under pressure, *American Mineralogist*, 98, 2046-2052, 2013 doi:10.2138/am.2013.4369. 査読有

3. Jun Tsuchiya, First principles prediction of a new high-pressure phase of dense hydrous magnesium silicates in the lower mantle, *Geophysical Research Letters*, 40, 4570-4573, 2013, doi:10.1002/grl.50875. 査読有

〔学会発表〕(計 8 件)

1. Jun Tsuchiya and Taku Tsuchiya, First principles investigation of the structure, elasticity, and vibrational property of the serpentine minerals. AGU Fall Meeting 2013, 2013年12月11日 San Francisco, USA (招待講演)

2. Jun Tsuchiya, First principles prediction of a new high pressure phase of dense hydrous

magnesium silicates in the lower mantle. AGU Fall Meeting 2013, 2013年12月10日 San Francisco, USA

3. Jun Tsuchiya, First principles investigations of hydrous phases under pressure: Implications for the transportation of water into the earth's deep interior. AOGS 2013, 2013年6月24日 Brisbane, Australia (招待講演)

4. 土屋 旬, 第一原理計算による新しい高圧含水ケイ酸塩相の予測. 日本地球惑星連合大会, 2013年5月19日, 幕張メッセ

5. 土屋 旬, First principles investigations of hydrous phases under pressure: Implications for the transportation of water into the Earth's deep interior. The 3rd Global-COE international symposium on Deep Earth Mineralogy, 2013年3月5日, 愛媛大学

6. 土屋 旬, 土屋卓久, 第一原理電子状態計算法によるリザーダイトの弾性異常. 日本鉱物科学会 2012年年会, 2012年9月21日, 京都

7. 土屋 旬, 土屋卓久, 高圧下における蛇紋岩鉱物の偏向異方性. 日本鉱物科学会 2012年年会, 2012年9月21日, 京都

8. Jun Tsuchiya and Taku Tsuchiya, First-principles investigation on the structure and elasticity of serpentine. AOGS-WPGM 2012, 2012年8月16日, Singapore

〔図書〕(計 件)

〔産業財産権〕
出願状況(計 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況(計 件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等
<http://earth.sci.ehime-u.ac.jp/~junt/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

土屋 旬 (TSUCHIYA, Jun)
愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究セン
ター・准教授
研究者番号：00527608

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：