

令和 2 年 6 月 18 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05627

研究課題名（和文）地球内核・系外惑星深部圧力下における地球惑星構成物質の理論研究

研究課題名（英文）Theoretical study of Earth/planet-forming materials in Earth's inner core and deep inside of exoplanets

研究代表者

梅本 幸一郎 (Umemoto, Koichiro)

東京工業大学・地球生命研究所・研究員

研究者番号：60726991

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：・水素、酸素、炭素、硫黄、ケイ素と、液体鉄との合金について第一原理動力学計算を行い、その結果を地震波測定の結果と比較して、外核の軽元素の種類と量を拘束することを目指した。地震波測定の結果と最も一致する外核化学組成を決定した。
・Mg-Si-O系について、スーパーアースのマントル深部で起こるであろう新たな相転移（ポストポストペロブスカイト転移）を予言した。超高压下でMgSiO₃ PPVは3段階の分解反応を起こし、MgOあるいはSiO₂と共存している場合は再結合することが明らかになった。また、Mg-Ge-O系とNa-Mg-F系を有用な低圧アナログ物質として提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

・地球外核の化学組成は、地球物理学において長年未解決であり続ける問題である。本研究はこの問題の解決に向けて大きな一歩となり、さらに今後どのような研究が必要なのかの指針を示した。
・2019年のノーベル物理学賞の対象になったことから明らかな通り、近年数多く見つかった系外惑星への注目は非常に高まっている。地球型系外惑星（スーパーアース）の内部構造を明らかにする上で、本研究が予言した相転移は最も基本的な情報の一つとなる。

研究成果の概要（英文）：・We performed first-principles molecular dynamics simulations on liquid iron alloys with hydrogen, oxygen, carbon, sulfur, and silicon. By comparing the computational results with seismic observation, we have constrained the kind and amount of the light elements in the outer core of the Earth. Then, we have determined the chemical composition of the outer core which shows the best coincidence with the seismic observation.
・For the Mg-Si-O system, we have predicted the post-post-perovskite transitions which are expected to occur in deep interiors of super-Earths. Under ultrahigh pressures, MgSiO₃ PPV should undergo the three-stage dissociations. When MgSiO₃ PPV coexists with MgO or SiO₂, they should recombine. In addition, we have proposed that Mg-Ge-O and Na-Mg-F systems can be used as useful low-pressure analogs of the Mg-Si-O system.

研究分野：計算地球惑星科学

キーワード：第一原理計算 アナログ物質 高压相転移 スーパーアース 外核 液体鉄合金 ポストポストペロブスカイト 低圧

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

地球深部の温度、圧力は非常に高い。下部マントルの深部では 100 万気圧(100 GPa)以上の圧力になる。外核、内核ではさらに圧力は高く、360 万気圧にまで達する。近年、天文学において太陽系の外にある惑星、すなわち系外惑星の探索が非常に活発になっている。発見され続けている系外惑星の中には、地球より大きく密度が地球と近い「スーパーアース」と呼ばれる系外惑星が数多くあり、地球外生命の可能性や惑星形成論などの観点から注目を集めている。このスーパーアースの深部では、地球深部よりもはるかに高い圧力が生じると期待される。そのような超高压における地球惑星構成物質の物性を調べることは、地球深部、スーパーアース深部を理解する上で不可欠であるが、そのような超高压を実験で再現することは、実験技術が進化し続けている現在でも困難である。信頼できる第一原理計算を用いて超高压下での地球惑星構成物質の物性を研究することの重要性は、ますます高まっている。

2. 研究の目的

2.1. 地球外核・内核における鉄軽元素合金

地球深部の核(外核・内核)の主成分は鉄であり、地震波測定から外核と内核の主成分はそれぞれ液体鉄と固体鉄であることが知られている。推定されている密度は、外核内核と同じ高压高温条件における純粋な鉄の密度に比べて小さいことから、核は純粋な鉄ではなく、鉄と何か別の軽元素との合金によって構成されていると考えられている。軽元素の候補として、水素、炭素、酸素、ケイ素、硫黄があるが、軽元素の種類と量は未だに特定されていない。地球外核条件下における液体鉄合金の実験を行うことはいまだに困難なことから、第一原理計算を行い、それと地震波測定と組み合わせることによって、地球外核の軽元素の種類と量をできるだけ拘束することが目的である。

2.2. 系外惑星深部におけるマグネシウムケイ酸塩

スーパーアースの密度は地球と近いので、その構成物質もまた地球と近いと期待される。すなわち、スーパーアースのマントル深部も地球の下部マントルと同様に Mg-Si-O 系の物質が主要構成物質であると考えられる。地球の下部マントルの最深部(核マントル境界直上)では MgSiO_3 はポストペロプスカイト(PPV)構造を取り、この PPV 構造が地球においては MgSiO_3 の最終形態である。ところが、地球より大きなスーパーアース内部の圧力は地球よりもはるかに高い。そのような条件下で、 MgSiO_3 を含めた Mg-Si-O 系がどのような相転移(「ポスト」PPV 転移)をするかを調べるのが目的である。また、ポスト PPV 転移は、500GPa 以上という超高压で起きると言われているが、実験でそれを確かめることは現時点では不可能である。そこで、Mg-Si-O 系と同じようなポスト PPV 転移を、実験で再現可能な圧力で起こす低压アナログ物質を提案し、この転移に関する実験を促したい。

3. 研究の方法

密度汎関数法、擬ポテンシャル法、平面波展開に基づいた第一原理計算手法を用いる。液体鉄合金については、高温条件をシミュレーションするために、第一原理分子動力学法を用いた。固体相については、第一原理計算のソフトウェアとしてオープンソースの Quantum-ESPRESSO パッケージを利用する。それを実行するため、東京工業大学の TSUBAME などのスーパーコンピ

ュータシステムを利用した。

4 . 研究成果

4.1 地球外核・内核における鉄軽元素合金

地球外核の温度圧力条件における液体鉄合金((Fe,Ni)_x(H, Si, O, S, C)_{1-x})の密度と音速を、温度、圧力、軽元素の濃度の関数として計算し、地震波測定(PREM)と統合的な軽元素の濃度を推定することを試みた。ところが、軽元素の候補は5種類あり、地震波測定によって得られている外核の密度と音速という2つの拘束条件からだけでは、軽元素の種類と量(5つの自由度)を完全に拘束することはできなかった。すなわち、炭素を除く水素、酸素、ケイ素、硫黄単独でも、PREMと統合的な結果が得られてしまった。そこで、PREMの密度と音速からの差を最も小さくするという条件を加えた。その結果、PREMと最も一致する軽元素の「最善」の組み合わせは、内核境界温度(T_{ICB})に依存することを示した。T_{ICB}が高いとき(~6,000K)、酸素が最も主要な軽元素である。一方、T_{ICB}が低いとき(<~5,400K)、今度は水素が最も主要な軽元素である。本研究ではPREMの密度と音速を拘束条件として用いたが、今後は他の拘束条件も用いることによって、さらに外核の化学組成を拘束することが必要になるだろう。例えば、複数の軽元素が同時に液体鉄に溶け込めるかどうかは重要である。もし同時に液体鉄に溶け込めない軽元素の組み合わせが存在するなら、そのような組み合わせは外核の化学組成の候補からは除外される。また、鉄合金の融点もきわめて重大な役割を果たす。外核は液体なので、融点が非常に高くなるような化学組成は除外される。主要な軽元素を決める要因の一つであるT_{ICB}は、内核境界圧力での融点で決まる。実験と理論計算の両面から鉄合金の融点について研究することは、外核の化学組成を本研究からさらに絞り込む上で、次の重要な課題になる。

発表論文：K. Umemoto, K. Hirose, Chemical compositions of the outer core examined by first principles calculations, *Earth Planet. Sci. Lett.* **531**, 116009 (2020).

4.2. 系外惑星深部におけるマグネシウムケイ酸塩

これまで、MgSiO₃ PPVは、「ポスト」ポストペロブスカイト転移として、3段階の分解反応を起こすことが予言されていた： $MgSiO_3 \text{ PPV} \rightarrow Mg_2SiO_4 + MgSi_2O_5 \rightarrow Mg_2SiO_4 + SiO_2 \rightarrow MgO + SiO_2$ 。ところが、実際のスーパーアースのマントルは、MgSiO₃単独で存在するとは限らない。地球のマントルでは、MgがSiより存在量が多いので、地球の下部マントルはMgSiO₃と、少量のMgOが共存している。スーパーアースでも、Mg/Siの存在比に依存して、MgSiO₃はMgO、あるいはSiO₂と共存していると考えられる。実際にそれらが共存している時、それらが超高压下では、分解反応が起こる前に再結合することを示した： $MgSiO_3 \text{ PPV} + MgO \rightarrow Mg_2SiO_4$ 、あるいは $MgSiO_3 \text{ PPV} + SiO_2 \rightarrow MgSi_2O_5$ 。この再結合の予言は全く意外なものだった。地球の上部マントルは主にMg₂SiO₄で構成されているが、スピネル型構造をもつMg₂SiO₄(リングウツダイトとして知られる)はMgOとMgSiO₃に分解し、それが上部マントルと下部マントルを分割している。それと逆の反応がスーパーアースの深部では起こる、ということが予言されたのだ。これらのポストPPV転移の計算結果は、実際にスーパーアース内部の数値シミュレーションに応用され始めている。

発表論文：K. Umemoto, R. M. Wentzcovitch, S. Q. Wu, M. Ji, C. Z. Wang, and K. M. Ho, Phase transitions in MgSiO₃ post-perovskite in super-Earth mantles, *Earth Planet. Sci. Lett.* **478**, 40-45 (2017).

A.P. van den Berg, D.A. Yuen, K. Umemoto, M.H.G. Jacobs, and R.M. Wentzcovitch, Mass-dependent dynamics of terrestrial exoplanets using ab initio mineral properties, *Icarus* **317**, 412-426 (2019).

Mg-Si-O系におけるポスト PPV 転移はスーパーアース深部を理解する上で不可欠だが、その圧力は非常に高く、実験的に確認するのは極めて難しい。そこで、MgSiO₃ プリッジマナイトの低圧アナログ物質候補としてしばしば用いられてきた MgGeO₃ および NaMgF₃ における高圧誘起構造相転移を、第一原理計算によって研究した。この2つの物質は、どちらも完璧な MgSiO₃ のアナログ物質では無いが、それでもなお、以下にあげる3つの理由によりポスト PPV 転移を研究するにあたり非常に有用な低圧アナログ物質であることが示された。理由1：どちらも MgSiO₃ と同様に PPV 転移を示す。理由2：Na-Mg-F系では約 20GPa で NaMgF₃ PPV が分解する / あるいは MgF₂ と NaMgF₃ PPV が一緒に圧縮されることにより NaMg₂F₅ が生成される。Mg-Ge-O系では約 200GPa で MgGeO₃ PPV が分解する / あるいは MgO と MgGeO₃ PPV が一緒に圧縮されることにより Mg₂GeO₄ が生成される。理由3：どちらも究極的には MgSiO₃ と同様に2元化合物 AX と BX₂ に分解する。ごく最近(Dutta et al., Proc. Nat. Acad. Sci. 116, 19324 (2019))、NaMgF₃ PPV で予言されたポスト PPV 転移が実験的に確認されたことは注目に値する。本研究での提案に基づき、今後低圧アナログ物質を用いて、ポスト PPV 転移の研究が、ひいてはスーパーアース深部の理解がますます進んでいくことだろう。

発表論文：K. Umemoto, R. M. Wentzcovitch, *Ab initio* exploration of post-PPV transitions in low-pressure analogs of MgSiO₃, *Phys. Rev. Mat.*, **3**, 123601 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 9件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Qin Tian, Wentzcovitch Renata M., Umemoto Koichiro, Hirschmann Marc M., Kohlstedt David L.	4. 巻 103
2. 論文標題 Ab initio study of water speciation in forsterite: Importance of the entropic effect	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 American Mineralogist	6. 最初と最後の頁 692 ~ 699
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2138/am-2018-6262	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
1. 著者名 van den Berg A.P., Yuen D.A., Umemoto K., Jacobs M.H.G., Wentzcovitch R.M.	4. 巻 317
2. 論文標題 Mass-dependent dynamics of terrestrial exoplanets using ab initio mineral properties	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Icarus	6. 最初と最後の頁 412 ~ 426
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.icarus.2018.08.016	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
1. 著者名 Qin Tian, Zhang Qi, Wentzcovitch Renata M., Umemoto Koichiro	4. 巻 237
2. 論文標題 qha: A Python package for quasiharmonic free energy calculation for multi-configuration systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 199 ~ 207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2018.11.003	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
1. 著者名 K. Umemoto, R. M. Wentzcovitch, S. Q. Wu, M. Ji, C. Z. Wang, and K. M. Ho	4. 巻 478
2. 論文標題 Phase transitions in MgSiO ₃ post-perovskite in super-Earth mantles	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Earth and Planetary Science Letters	6. 最初と最後の頁 40-45
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.epsl.2017.08.032	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

1. 著者名 K. Umemoto and R. M. Wentzcovitch	4. 巻 56
2. 論文標題 First Principles Study of Volume Isotope Effects in Ices VIII and X	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 JJAP Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 05FA03
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.56.05FA03	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

1. 著者名 梅本幸一郎	4. 巻 27
2. 論文標題 地球型系外惑星内部における物質構造相転移の第一原理計算による研究	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 高圧力の科学と技術	6. 最初と最後の頁 205-212
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4131/jshpreview.27.205	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 -

1. 著者名 K. Hirose, G. Morard, R. Sinmyo, K. Umemoto, J. Hernlund, G. Helffrich, and S. Labrosse	4. 巻 543
2. 論文標題 SiO ₂ crystallization and compositional evolution of the Earth's core	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Nature	6. 最初と最後の頁 99
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/nature21367	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

1. 著者名 Y. Kidokoro, K. Umemoto, K. Hirose, and Y. Ohishi	4. 巻 102
2. 論文標題 Phase transition in SiC from zinc-blende to rock-salt structure in carbon-rich extrasolar planets	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 American Mineralogist	6. 最初と最後の頁 2230-2234
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2138/am-2017-6033	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

1. 著者名 T. Qin, R. M. Wentzcovitch, K. Umemoto, M. M. Hirschmann, and D. L. Kohlstedt	4. 巻 103
2. 論文標題 Ab initio study of water speciation in forsterite: Importance of the entropic effect	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 American Mineralogist	6. 最初と最後の頁 692-699
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2138/am-2018-6262	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

1. 著者名 Umemoto Koichiro, Wentzcovitch Renata M.	4. 巻 3
2. 論文標題 Ab initio exploration of post-PPV transitions in low-pressure analogs of MgSiO ₃	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 123601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.123601	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

1. 著者名 Umemoto Koichiro, Hirose Kei	4. 巻 531
2. 論文標題 Chemical compositions of the outer core examined by first principles calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Earth and Planetary Science Letters	6. 最初と最後の頁 116009 ~ 116009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1016/j.epsl.2019.116009	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 -

1. 著者名 Kato Chie, Umemoto Koichiro, Ohta Kenji, Tagawa Shoh, Hirose Kei, Ohishi Yasuo	4. 巻 105
2. 論文標題 Stability of fcc phase FeH to 137 GPa	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 American Mineralogist	6. 最初と最後の頁 917 ~ 921
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.2138/am-2020-7153	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 -

1. 著者名 Tsuchiya Jun, Umemoto Koichiro	4. 巻 46
2. 論文標題 First Principles Determination of the Dissociation Phase Boundary of Phase H MgSiO 4 H 2	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Geophysical Research Letters	6. 最初と最後の頁 7333 ~ 7336
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1029/2019GL083472	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14件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 11件)

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Ab initio search for low-pressure analogs of MgSiO ₃ post-perovskite at ultrahigh pressures
3. 学会等名 American Physics Society March Meeting 2018 (Los Angeles) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Low-pressure analogs of MgSiO ₃ post-perovskite at ultrahigh pressures by first principle
3. 学会等名 Japan Geoscience Union Meeting 2018 (Makuhari) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Post-post-perovskite transitions in MgSiO ₃ by first principles
3. 学会等名 IUCr High Pressure 2018 (Honolulu) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梅本幸一郎
2. 発表標題 MgSiO ₃ ポストポストペロブスカイト転移のためのアナログ物質の探索
3. 学会等名 第59回高圧討論会(岡山)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 liquid Iron Alloys with Light Elements at Outer Core Conditions by First Principles
3. 学会等名 AGU Fall meeting, 2018 (Washington DC) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Phase transitions in mantle silicates and the internal structure of terrestrial exoplanets
3. 学会等名 American Physics Society March Meeting 2019 (Boston) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Fate of MgSiO ₃ Post-Perovskite at Terapascal Pressures
3. 学会等名 Japan Geoscience Union Meeting 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Fate of MgSiO ₃ Post-Perovskite at Terapascal Pressures
3. 学会等名 AIRAPT 26 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 梅本幸一郎
2. 発表標題 地球型系外惑星深部におけるMgSiO ₃ ポストペロブスカイトの構造相転移
3. 学会等名 第58回高圧討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 First principles study of iron-bearing MgO under ultrahigh pressure
3. 学会等名 AGU Fall Meeting 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Ab initio search for low-pressure analogs of MgSiO ₃ post-perovskite at ultrahigh pressures
3. 学会等名 APS March Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Effect of impurity on post-post-perovskite transition of MgSiO ₃ by first principles
3. 学会等名 AGU Fall meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Umemoto
2. 発表標題 Effect of impurity on post-post-perovskite transition of MgSiO ₃ by first principles
3. 学会等名 Japan Geoscience Union Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梅本幸一郎
2. 発表標題 第一原理計算による MgSiO ₃ ポストペロブスカイト分解反応への アルミニウム不純物の影響
3. 学会等名 第 6 0 回高圧討論会
4. 発表年 2019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
---------	---------------------------	-----------------------	----