科学研究費補助金研究成果報告書

平成22年 6 月 1 日現在

研究種目:若手研究(B)
研究期間:2008~2009
課題番号:20740306
研究課題名(和文) 内熱式ダイアモンドアンビルセルを用いた地球核物質の相関係の解明
研究課題名(英文) Phase relations of the Earth's core material determined in an internally-heated diamond anvil cell
研究代表者
駒林 鉄也(KOMABAYASHI TETSUYA)
東京工業大学・大学院理工学研究科・助教
研究者番号:20444119

研究成果の概要(和文):

内熱式ダイアモンドアンビルセル(diamond anvil cell -DAC-)を放射光 X 線と組み合わせた高 温高圧 X 線その場観察実験により、純鉄の HCP-FCC 構造相転移曲線の温度圧力位置を決定し た。同時に HCP および FCC 構造の体積のデータを取得した。また、本実験で得られたデータ (相境界、相の体積)から、熱力学データセットを構築し、相平衡計算を地球の中心の温度圧 力まで行い、核における鉄の安定相を議論した。

研究成果の概要(英文):

We conducted in-situ X-ray diffraction experiments on pure iron in a newly developed internally-resistive-heated diamond anvil cell. We determined the P-T location of the HCP-FCC phase transition boundary and obtained unit-cell volume data of the phases. From these experimental data, we have constructed a self-consistent thermodynamic database for iron which is applicable to conditions of the center of the Earth.

7	/	¥h	╧	安舌
~~ 1	1	14	$l \mapsto$	谷日
\sim		ν		H27

(金額単位:円)

	直接経費	間接経費	合 計
2008 年度	1, 800, 000	540, 000	2, 340, 000
2009 年度	1, 600, 000	480, 000	2, 080, 000
年度			
年度			
年度			
総計	3, 400, 000	1, 020, 000	4, 420, 000

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、鉄、核、ダイアモンドアンビル、熱力学、抵抗加熱

1. 研究開始当初の背景

(1) 地球の核(135-364 万気圧、およそ 4000-6000 ケルビン(K))の物質は、数%程 度の軽元素を含む鉄であることがわかって いる。核における鉄合金の安定相、および純 鉄と観測との密度差(つまり軽元素の量)を 精密に求めるためには純鉄に対する高温高 E実験によるデータが必要であり、過去 50 年間精力的に研究されてきた。しかし、鉄の 高温高圧の状態図は 20 万気圧以上ではいく つか論争があり決定されていなかった。主な 争点は、①FCC-HCP 相転移境界のクラペイロ ンスロープ、②β相の存在、③融点である。 ダイアモンドアンビルセル (Diamond Anvil Cell -DAC-)実験における問題は、①と③に ついては、温度圧力のエラーバーが大きいこ とが理由である。②については、X線回折測 定の分解能が低いことや、反応のカイネティ クスが原因と考えられた。また、固相鉄の圧 カー体積一温度 (P-V-T)のデータが得られ ている温度圧力範囲は限られていた。

(2) 本研究では、駒林の開発した内部抵 抗加熱式(内熱式)DACを用いた実験、およ びその実験結果に基いた熱力学計算により 上にあげた論争を解決しようと試みた。内熱 式DACは、金属ヒーターをDACの試料室(~ 100µm)に埋め込み、そこに電気を流してヒ ーターの抵抗で発熱するシステムであり、レ ーザー加熱に匹敵する高い温度を高精度で 制御することが可能である。

2. 研究の目的

(1) 本研究の目的は、①新しく開発した 内熱システムを放射光施設の角度分散型のX 線回折装置と組み合わせることで鉄の相平 衡および高温下での体積測定を 100 万気圧 3000K まで行うこと、②得られた実験結果か ら鉄の熱力学データを導出し、地球中心まで の状態図を熱力学計算により計算し、そこで 安定な鉄の構造および密度を議論する。

3. 研究の方法

 (1) 内熱式 DAC を用いた X 線その場観 察により、純鉄の温度圧力相関系(FCC-HCP 境界、β相の有無、融点)を 100 万気圧、3000K まで明らかにする。先端径 350µm および 200µm のダイアモンドアンビルを用いて高 圧発生を行い、試料兼ヒーターである鉄箔に 電流を流すことで高温発生を行う。X 線その 場観察は放射光施設 SPring-8(兵庫県)、APS (シカゴ)にて行う。

(2) 内熱式 DAC を用いた X 線その場観
 察を 100 万気圧、3000K まで行い、固体鉄
 (FCC 構造)の P-V-T 状態方程式を構築する。

(3) 上記(1)、(2)で得られた実験デ ータに基づき、純鉄の熱力学データセットを 構築し、熱力学計算により核の温度圧力条件 まで相平衡を計算する。

(4) 相平衡図および状態方程式から、核 における鉄の構造を議論する。また、その密 度を算出し、観測と比較することで、核中の 軽元素量を精密に決定する。

4. 研究成果

(1) 内熱式 DAC を放射光 X 線と組み合わせて、純鉄の相平衡および格子体積データの取得のための高温高圧 X 線その場観察を行った(図1)。

а



図 1. 内部抵抗加熱式ダイアモンドアンビル セル。(a) 試料部拡大断面図。(b) 加熱中の 様子。

(2) 実験の結果、70万気圧、2500Kまで の範囲にわたり、鉄の HCP-FCC 構造相転移 を観察することができた。相転移曲線の温度 圧力位置およびクラペイロンスロープの決 定を行い、HCP および FCC 構造の体積のデ ータを取得した(図2)。内熱式 DAC は温度 の精度が従来のレーザー加熱式 DAC より一 桁高いため、相転移曲線の位置決定および相 の体積について既報の文献よりも信頼性の 高いデータが取得できたことになる。特に、 従来のレーザー加熱式 DAC による FCC-HCP 境界に関する論争(温度圧力位置、境界のク ラペイロンスロープ、他の構造の出現の有 無)に決着をつけることができた(図3)。 ここまでの結果は、国際誌 Earth and Planetary Science Letters 誌に印刷された。



図 2. 本研究により決定された純鉄の HCP(ε)-FCC(γ)境界。白三角は FCC 相、黒三 角は HCP 相が確認された実験点を示す



図3. 純鉄の HCP(ε)-FCC(γ)境界。本研究 (This study) 以外は既報の研究結果。

(3) 本実験において、高温でのみ安定な FCC 相の格子体積のデータも取得すること ができた。高圧下では HCP-FCC 相転移の反 応の進行が遅くなり、HCP 相と FCC 相が共 存する X 線回折パターンが得られた。すなわ ち、本実験により初めて、HCP 相の状態方程 式と整合的な FCC 相の状態方程式を構築す ることができた(図4)。



図4.本研究で構築した状態方程式により求 めた FCC 相の等温圧縮曲線。シンボルおよび シンボル上の数字は実験点、およびその実験 温度をそれぞれ示す。

(4) つづいて、実験により決定した純鉄の相平衡および格子体積データを基に、地球中心(圧力=364万気圧、温度=5000~7000K)まで適用可能な純鉄の熱力学データセットを構築した。その際、液体鉄の圧力一体積一温度(P-V-T)状態方程式を見積もった。液体鉄の密度は地球中心核の密度を議論する上で非常に重要であるが、限られた温度圧力範囲でしか実験データが存在せず、既報の状態方程式には大きな仮定が導入されていた。本研究では、融解曲線(温度一圧力)を1気圧~200万気圧まで再現するように方程式のパラメタを調整した(図5)。



図5.液体鉄の密度曲線。PREM は地震学的 に観測される値を示す。

(5) 相平衡計算により、地球の固体内核 の安定相は HCP(六方最密構造)相であり、 固体内核一液体外核境界圧力(330 万気圧) におけるその融点は 4900K である(図6)。 330 万気圧における核の密度欠損(すなわち 軽元素の量)は、外核で 8.1 、内核で 5.3wt.% とそれぞれ見積もられた。



図6.純鉄の温度圧力状態図。シンボルはそ れぞれ実験点を示す。200万気圧、4000K以 上の点は衝撃圧縮実験における融点を示す。 ただし、灰色の点(BM)は固相転移を示し ている。

(6) 本研究で見積もられた 330 万気圧に おける鉄の融点(4900K)は衝撃圧縮実験か ら報告されている温度(6000~7000K)に比 べてはるかに低い(図6)。そこで、HCP 相 の高圧相の存在を仮定し、衝撃実験の融点を 再現するようにこの相の熱力学パラメタを 見積もった。仮想的な相は、従来から議論さ れている BCC(体心立方構造)相とした。結 果は、この高圧 BCC 相は HCP 相に比べて高 いエントロピーを持つ相であることがわか った(図7)。今後、実験による高圧 BCC 相の探査が待たれる。この結果は国際誌 Journal of Geophysical Research 誌に印刷され た。

(7) 本研究により決定された純鉄の相平 衡関係や相の状態方程式は、核の熱力学を議 論する際に重要なデータセットとなる。また、 核に溶け込んでいる軽元素の種類と量の特 定のためにも重要なデータとなる。



図7.仮想的な高圧 BCC 相を安定化させた 場合の状態図。衝撃実験の融点を説明可能な ように BCC の熱力学パラメタを調整した。

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2件)

① <u>Komabayashi, T.</u>, and Fei, Y., (2010) Internally consistent thermodynamic database for iron to the Earth's core conditions. Journal of Geophysical Research, 115, B03202, doi:10.1029/2009JB006442. 査読有

② <u>Komabayashi, T.</u>, Fei, Y., Meng, Y., and Prakapenka, V., (2009) In-situ X-ray diffraction measurements of the γ - ϵ transition boundary of iron in an internally-heated diamond anvil cell. Earth and Planetary Science Letters, 282, 252-257. 査読有

〔学会発表〕(計3件)

①<u>Komabayashi, T.</u>, Fei, Y., Phase relations and density of iron at the Earth's core conditions American Geophysical Union, 2009 Fall Meeting, San Francisco, California, December, 17, 2009.

<u>Komabayashi, T.</u>, Fei, Y.,
HCP vs. FCC vs. BCC phases in the Earth's inner core.
American Geophysical Union, 2008 Fall Meeting, San Francisco, California, December, 18, 2008.

⁽³⁾<u>Komabayashi, T.</u>, Fei, Y., Stable iron phase in the Earth's inner core and its melting temperature. International workshop, Transport properties in the lower mantle, Nikko, Japan, October, 23, 2008.

 6.研究組織
 (1)研究代表者 駒林 鉄也(KOMABAYASHI TETSUYA)
 東京工業大学・大学院理工学研究科・助教 研究者番号:20444119

(2)研究分担者

なし

(3)連携研究者

なし