

機関番号：16301

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2009～2010

課題番号：21740330

研究課題名（和文）地震波観測と第一原理物性モデリングによる地球深部マントルの異方性と不均質性の研究

研究課題名（英文）Seismological and mineral physical joint modeling on seismic anisotropy and velocity heterogeneity in the Earth's deep mantle

研究代表者

臼井 佑介（USUI YUSUKE）

愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・グローバルCOE 研究員

研究者番号：70435824

研究成果の概要（和文）：地球深部のマントルの地震波速度不均質や異方性の原因は、未だ多くの謎が残されている。本研究課題は、地球のダイナミクスの解明に向けて地震波観測のみならず第一原理計算に基づいた数値シミュレーションを行い、双方を組み合わせた新しい解釈をすることを目的として研究を行った。特に、D”層内の速度変化及び異方性に注目して研究を遂行した。

研究成果の概要（英文） The precise role of Earth's deep mantle remains a topic of vigorous research and debate requiring improved resolution of the structure. It is, therefore, necessary to investigate not only the details of regional seismic velocity structure but also compositional effects based on mineral physics. Therefore I performed seismological and mineral physical joint modeling on seismic anisotropy and velocity heterogeneity in the bottom of mantle.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	800,000	240,000	1,040,000
2010年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
年度			
総計	1,400,000	420,000	1,820,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：地球惑星科学・固体地球惑星物理学

キーワード：内部構造

1. 研究開始当初の背景

(1) 地球深部のマントルにおける地震波速度異方性と速度不均質性は、地震学のみならず様々な分野において多くの研究者たちによ

って研究されてきた。特に不均質性が強い上部・下部マントルについては、その不均質性がマントル対流を反映しているものと考えられており、地球のダイナミクスを解明する

上で、非常に重要な領域である。

(2) マントル最下部に位置する D'層については、これまでの地震学的調査から横方向に強い不均質があることが観測されている。このような地域では、沈み込んだスラブの行き着く先であることが考えられている。D'層最上部においては速度不連続面の存在が見つかり、D'層内では S 波の鉛直成分 (V_{sv}) が水平成分 (V_{sh}) よりも遅い $V_{sv} < V_{sh}$ 型の地震波速度異方性があることが観測されている。

(3) 近年、超高压実験及び第一原理計算による数値シミュレーションから、最下部マントルにおける温度・圧力条件下でペロブスカイト (Pv) からポストペロブスカイト (PPv) への相転移が報告されている。これにより、その成因がよくわからなかった異方性や不連続面の観測事実が、PPv の実験やシミュレーションの面からも裏付けが取れるようになり、地球深部の構造が明らかになってきた。本課題研究では、地震波観測だけではなく、鉱物物理学的なモデリングを組み合わせた解釈を用いることで、これまでになかった新しいインパクトを与えることができると考え、本課題研究の着想に至った。

2. 研究の目的

(1) 最下部マントルの D'層の速度不均質及び異方性を知るために、まずマグネシウムジャーマイト ($MgGeO_3$) に注目した。D'層の主な構成物質は、マグネシウムケイ酸塩 ($MgSiO_3$) のポストペロブスカイト相 (PPv) であるが、その物性を調べるには超高温・高圧力の条件が必要なため非常に困難である。そこで本研究では、シリコン (Si) の代わりにゲルマニウム (Ge) が入った $MgGeO_3$ に注目し、弾性・原子振動・熱力学特性を、密度汎関数理論に基づく第一原理計算法によって計算し、 $MgSiO_3$ との比較を行いアナログ物質としての妥当性を検討した。

(2) 次に、核-マントル境界 (CMB) での部分溶融の可能性を検討するために、シリカ (SiO_2) の高圧融解曲線の決定を行った。 SiO_2 は、地球を構成する主要な鉱物であるが、高圧力での融点決定はなされていない。そこで本研究では、第一原理 2 相 MD シミュレーション法を開発し、温度 6,000K、圧力 160GPa までの融点を決定し、 $MgO-SiO_2$ 共融系での共融点を見積もった。

(3) 最後に、これまで発見されなかった不連続面より上での異方性の検出を試みた。これまで異方性は不連続面より下の D'層内のみ観測されていた。しかし、不連続面の境界が異方性の境界である必要はなく、Pv も異方的であることが知られている。そこで新しいデータセットを用いて、D'層の異方性の深さ分布を調べた。さらに、上記 2 例の研究を踏

まえ、異方性の原因を調べるために多結晶体の弾性計算プログラム (PEA) を開発し、どの鉱物がどの割合で結晶選択配向 (LPO) すれば観測事実を説明できるかを見積もった。

3. 研究の方法

(1) $MgGeO_3$ の弾性特性は、密度汎関数理論に基づく第一原理計算法によって計算した。また同時に熱力学特性についても密度汎関数摂動法により固有振動解析を行い、準調和近似に基づき求めた。交換相関ポテンシャルに対しては、局所密度近似 (LDA) を適用し、一部一般化勾配近似 (PBE-GGA) の効果も調べた。

(2) 2 相 MD シミュレーションについては、原子数、体積及び温度を一定とするカノニカルアンサンブル (NVT) の下で行った。温度は速度スケールによって制御した。2 相とは固相と液相のことであり、本研究では 16 分子 (48 原子) ずつ計 32 分子 (96 原子) でシミュレーションを行った。固相については 2,000K、液相については 10,000K で平衡化させて初期構造を作成した後、固相と液相を接触させシミュレーションを開始した。もし設定した温度が融点より低ければ、シミュレーションセルの構造は結晶化に向かい、融点より高ければメルト構造に向かう。最終安定構造を得るために、本研究では 2ps のシミュレーション時間を設定した。

(3) 異方性の観測については、1990 年～2009 年にパプアニューギニア及びトンガールマディック海溝で起こったマグニチュード Mw5.6 以上の深発地震を、南極昭和基地及びその周辺に展開された 5 点の地震観測点で記録された波形データを用いた。SKS 波を用いた上部マントル異方性を補正後、D'層を通る S 波を使って S 波スプリッティングを観測した。

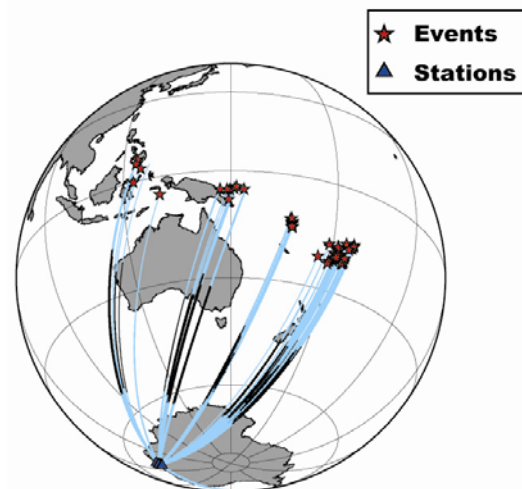
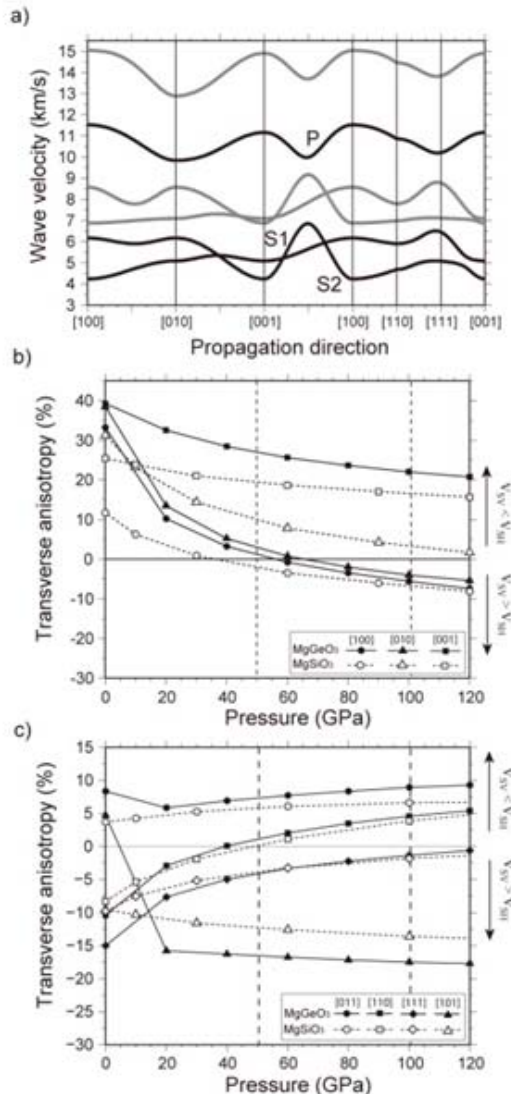


図 1 震源 (★) 観測点 (▲) の分布及び地震波線経路図。

(4) 異方性の物性モデリングについては、まず圧力 80GPa~130GPa において、 $MgSiO_3$ -Pv, PPv, MgO の弾性定数を第一原理計算から求めた。最下部マントルは Pv+MgO、D'層は PPv+MgO の多結晶体を想定し、その割合は PPv(Pv):MgO=8:2 であり、マントルの理想的な岩石 pyrolite に近い比率を仮定した。粒子数はそれぞれ 1,000,000 粒子を想定した。LPO の向きは、[100], [010], [001], [110], [101], [011], [111] を計算し、LPO の度合いを 0~100% の間で変化させモデリングを行った。

4. 研究成果

(1) $MgGeO_3$ の弾性定数の圧縮特性は $MgSiO_3$ ととても似ているが、PPv 相転移に伴う地震波速度の変化量が負となり、 $MgSiO_3$ とは異なることが分かった。地震波速度異方性については、 $MgSiO_3$ と同じ配向パターンで $V_{SV} < V_{SH}$ 型異方性が得られた(図 2)。高圧力での原子の振動特性は、 $MgGeO_3$ と $MgSiO_3$ は非常に似ていることが分かった。しかし、ラマン分光測定における実験結果は、本研究の計算結果とは合わず、再測定が必要であることを示唆している。体積弾性率、熱膨張率、グルーナイゼンパラメータ、比熱及びエントロピーの温度・圧力特性は、 $MgSiO_3$ とほとんど変わらないことが分かった(図 3)。最終的に、 $MgGeO_3$ は $MgSiO_3$ と非常



に似た物性をもつ物質であることを、第一原理計算によるシミュレーションで初めて証明した。この成果をまとめ、Journal of Earth Science 誌にて発表した。

図 2 (a) $MgSiO_3$ (灰線) と $MgGeO_3$ (黒線) の方位異方性 (b)(c) $MgSiO_3$ (点線) と $MgGeO_3$ (実線) の Transverse anisotropy の圧力変化。

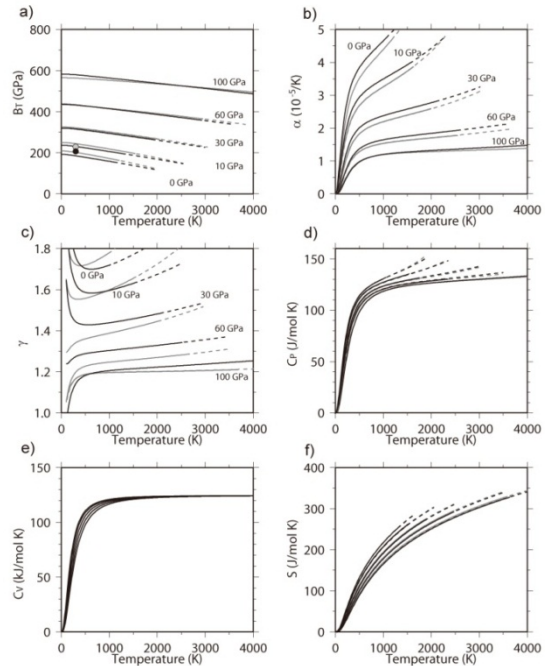


図 3 $MgGeO_3$ の Pv (黒線) と PPv (灰線) の (a) 体積弾性率 (b) 熱膨張率 (c) グルーナイゼンパラメータ (d) 等温比熱 (e) 等積比熱 (f) エントロピーの温度特性。

(2) 第一原理 2 相 MD シミュレーションにより、 SiO_2 の融解曲線 (T_m) を圧力 160GPa まで求めた(図 4)。得られた T_m は、液相-Stisovite- $CaCl_2$ 及び液相- $CaCl_2$ - α - PbO_2 の三重点ではほとんど変化が見られなかった。CMB 付近の圧力 135GPa では、融点は約 5,900K であった。 T_m に沿ったメルトの輸送特性については、自己拡散係数が $1.3 \times 10^{-9} \sim 3.3 \times 10^{-9} m^2/s$ であり、粘性率は $0.02 \sim 0.03 Pa \cdot s$ であった。圧力依存性は見られず、温度効果が圧縮効果を打ち消していることを示している。圧力 135GPa での MgO - SiO_2 共融系のリキダスを計算したところ(図 5)、中央海嶺玄武岩(MORB)の融点が $4,550 \pm 200K$ であり、最新の CMB 温度(3,800K)より高いことが分かった。しかし、Fe や Al の効果や H_2O , CO_2 及び S などの軽元素は、大幅に融点を下げることが知られており、実際

のマンツルは CMB 付近で部分溶融している可能性が高いことが分かった。この成果は、*Journal of Earth Science* 誌にて発表した。

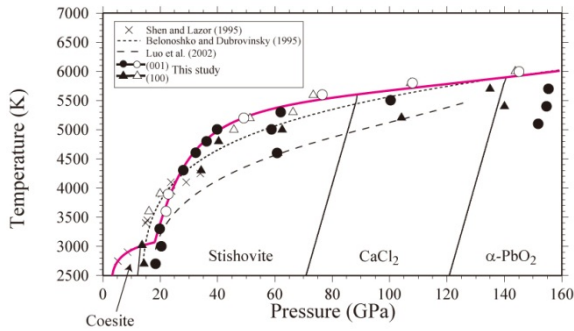


図4 SiO₂の融解曲線（ピンク線）及び最終安定構造が固相になった点（●及び▲）、液相になった点（○及び△）。

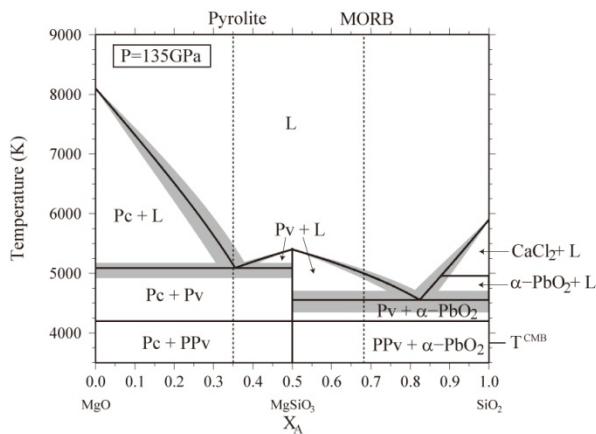


図5 MgO-SiO₂共融系の相図。Lは液相、Pcはペリクレス、Pvはペロブスカイト、PPvはポストペロブスカイト。

(3) D”層の異方性について、D”層を通るS波のスプリッティング(ΔT_{sv-sh})を観測した(図6)。その結果、先行研究で得られていたこの地域のD”層の不連続面の深さよりも浅いところでも異方性があることが分かった。次に観測された異方性を説明する新しい地震波速度構造を、波形モデリングによって求めた。波形モデリングは、想定した速度構造から理論波形を計算し、観測波形との残差が最も小さい最適化モデルを得る手法である。本研究では、深さ2200km~2891kmの範囲で構造を変え、不連続面の深さは2400km~2600kmとした(図7)。不連続面での速度増加量は、+0.5%~+2.5%と設定し、CMBでの速度は-1.0%~+1.0%で変えた。そ

の結果、 V_{sv} はPREMモデルよりも遅く、 V_{sh} は深さ2500kmで2.0%の速度不連続がある構造が得られた。また、異方的な領域は深さ2400kmから始まり、不連続面の上では最大0.5%、D”層内では最大2.5%の異方性があることが分かった。

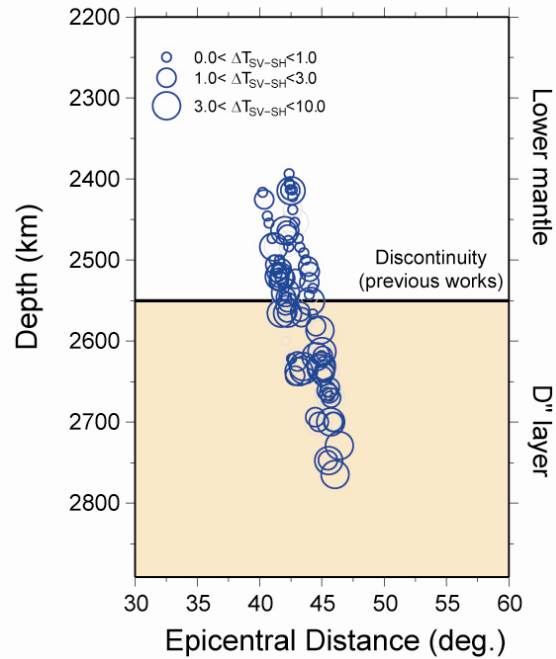


図6 観測された異方性(ΔT_{sv-sh})の深さ分布。それぞれS波の最深点でプロットしている。

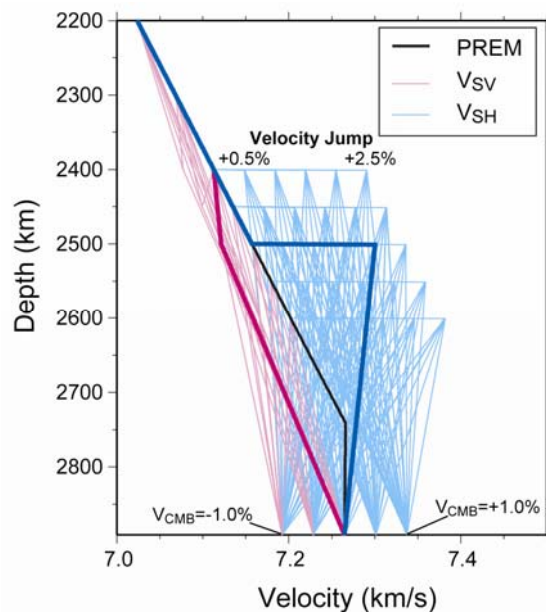


図7 想定した構造(細線)と得られた最適化モデル(太線)。ReferenceモデルはPREM(Dziewonski and Anderson, 1981)を用いた(黒線)。

(4) 次に、地震学的解析で得られた最適モデルについて、PEAを用いて、異方性をモデリングした(図8)。D''層より上の異方性をPv[100]とした場合(Case1~4)、速度勾配が異なりVsvにも負の速度不連続が出てくる。一方、MgO[100]とした場合(Case5~12)、速度勾配はほぼ一致し、観測から得られたモデルをよく説明できることが分かった(図9)。D''層内の異方性については、PPv[001](Case5)またはPPv[001]+MgO[100](Case6)のモデルが、不連続面での速度増加量が、Vsv及びVshともに非常によく一致することが分かった。一方、強い異方性を持つMgO[100]モデルや(Case7)、これまで異方性の原因と考えられてきたPPv[010](Case8)では、Vsvに負の速度不連続があり、Vshの増加量も小さく一致しないことが分かった。その他、PPv[110](Case9,10)やPPv[011](Case11,12)の場合でも同様に、一致しないことが分かった。

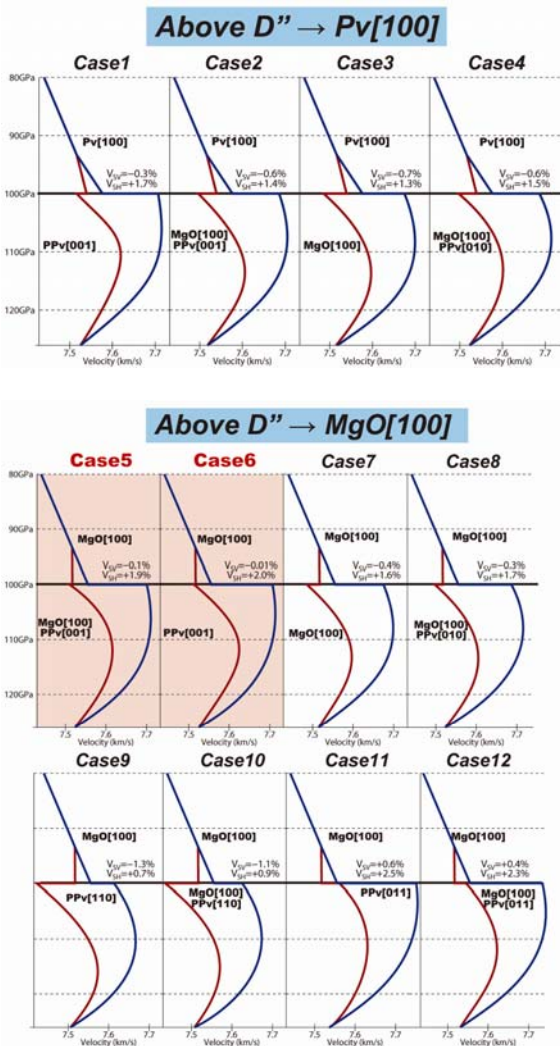


図8 物性モデリングによって得られた速度

構造。Vsvは赤線、Vshは青線。

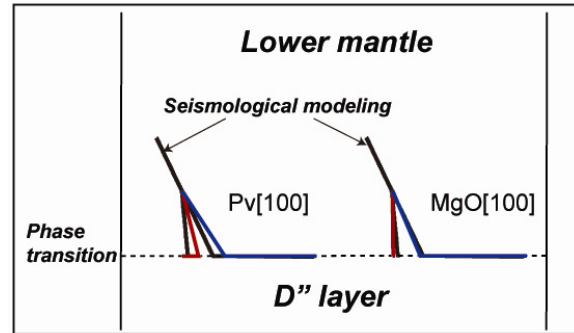


図9 D''層より上での地震波解析から得られた最適モデル(黒線)と、Pv[100]モデル及びMgO[100]モデルとの比較。

(5) 以上のことから、D''層の上での異方性の原因は、MgOが[100]方向に結晶選択配向しており、D''層内はPPvが[001]方向に配向している可能性が高いことが分かった。MgOについては、高圧変形実験により主すべり面が(100)面であり、PPvは第一原理計算から(001)面であることが報告されている。このことから、それぞれの面の法線方向であるMgO[100]及びPPv[001]方向に結晶が揃いやすいことが分かり、本研究結果と一致することが分かった(図10)。これまででは、D''層内だけ異方性が観測されており、Pv→PPv相転移に伴って異方性が得られるとされてきたが、本研究によりD''層の上にも異方性が存在し、結晶の選択配向を生み出す最下部マン托ルの水平方向の流れは不連続面の上にも存在する可能性が高いことが分かった。この結果をまとめて、現在国際誌に投稿中である。

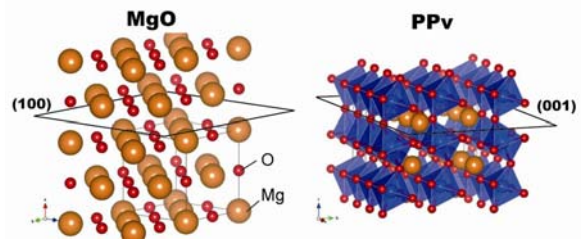


図10 MgO及びPPvの結晶構造とすべり面。

(6) 近年の地球科学では、グローバルに観測されてきたことを鉱物の結晶構造というミクروسケールの現象によって推定することが非常に重要になりつつある。本課題研究では、その両方を行うことで、最下部マン托ルの不均質及び異方性構造を推定し一定の評

価を得ることができた。最後に、科学研究費補助金を獲得できたことに感謝の意を表すとともに、今後の研究活動においてもよりいっそう努力し、日本の地球科学の発展の助力となれるよう尽力することを公言する。

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2件)

- ① Yusuke Usui, Taku Tsuchiya, Ab initio two phase molecular dynamics on the melting curve of SiO₂, Journal of Earth Science, 査読有, 21 巻, 2010, 205-216.
- ② Yusuke Usui, Jun Tsuchiya, Taku Tsuchiya, Elastic, vibrational and thermodynamic properties of MgGeO₃ post-perovskite investigated by first principles simulation, Journal of Geophysical Research, 査読有, 115 巻, 2010, doi:10.1029/2009JB006468.

[学会発表] (計10件)

- ① 臼井 佑介, 地震波観測と第一原理物性モデリングによる D"層の地震波速度異方性について, 2010年冬北陸地震研究会, 2010年12月21日, 七尾市.
- ② Yusuke Usui, Detection of the seismic anisotropy above D" discontinuity using broad-band data recorded at Lützow Holm Bay area, 第30回極域地学シンポジウム, 2010年12月1日, 立川市.
- ③ Yusuke Usui, Ab initio two phase molecular dynamics on the melting curve of silica, 2010 TANDEM Symposium on Deep Earth Mineralogy, Nov. 5, 2010, Wuhan, China.
- ④ 臼井 佑介, パンアフリカン造山帯の上部マントル異方性, 日本地球惑星科学連合2010年大会, 2010年5月27日, Chiba, Japan.
- ⑤ Yusuke Usui, Detection of the seismic anisotropy above D" discontinuity and its mineral physics interpretation, Japan Geoscience Union Meeting 2010, May 25, 2010, Chiba, Japan.
- ⑥ 臼井 佑介, 多結晶体の弾性計算による D"層の異方性モデリング, 第29回極域地学シンポジウム, 2009年10月8日, 立川市.
- ⑦ 臼井 佑介, 第一原理二相 MD シミュレーションによる SiO₂ の高圧融解曲線の決定, 日本セラミクス協会第22回秋季シンポジウム, 2009年9月16日, 松山市.
- ⑧ Yusuke Usui, Elastic, thermodynamic

and vibrational properties of MgGeO₃ post perovskite by first principles calculations, the 22nd biennial AIRAPT conference and the 50th annual High Pressure Conference of Japan, July 28, 2009, Tokyo, Japan.

- ⑨ Yusuke Usui, Seismic anisotropy in the D" layer beneath the Antarctic Ocean, BGI-GRC Workshop, June 18, 2009, Bayreuth, Germany.
- ⑩ 臼井 佑介, S波スプリッティング及びレシーバ関数解析から見たパンアフリカン造山帯の地震波速度異方性, 日本地球惑星科学連合2009年大会, 2009年5月26日, 千葉市.

[その他]

ホームページ等

<http://www.sci.ehime-u.ac.jp/~usui/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

臼井 佑介 (USUI YUSUKE)

愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・グローバルCOE研究員

研究者番号: 70435824

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者