

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 22 日現在

機関番号：16301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26800273

研究課題名(和文)地球内核条件下における金属鉄の第一原理電子輸送特性シミュレーション

研究課題名(英文)Ab initio simulation of electron transport property of solid iron under Earth's inner core conditions

研究代表者

出倉 春彦 (Dekura, Haruhiko)

愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・講師

研究者番号：90700146

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：惑星構成物質の熱輸送特性は固体地球惑星内部の熱的進化過程を理解するうえで欠かせない情報である。地球核は鉄を主成分とする合金で構成されていると考えられている。金属の電子輸送特性を定量決定するための鍵となる物理量が電子-フォノン散乱強度である。本研究では地球内核の主要構成鉱物と考えられる六方最密充填構造の金属鉄を対象として、電子-フォノン相互作用行列およびフェルミ電子寿命を密度汎関数摂動論に基づき計算し、電子-フォノン散乱由来の電気・熱伝導率を地球内核条件で決定した。

研究成果の概要(英文)：Heat transport properties of planetary constituent materials are indispensable information for understanding thermal evolution of solid earth planets. It is thought that the earth's core is composed of an alloy containing iron as a main component. The key physical quantity for the quantitative evaluation of the electron transport is the strength of electron-phonon interaction that is a major heat transport mechanism in metals. In this study, we calculated the electron lifetime and total electron-phonon coupling constants associated with the electron-phonon scattering for the hexagonal close-packed iron considered to be the major constituent mineral of the earth's inner core. The electric and thermal conductivities were then determined under the earth's inner core conditions.

研究分野：物性理論

キーワード：地球核 電気・熱伝導率 金属鉄 電子-フォノン相互作用 密度汎関数摂動論

## 1 . 研究開始当初の背景

地球の形成時期に蓄えられた重力エネルギーの解放および放射性元素の壊変に伴うエネルギー散逸が地表へ熱を運ぶことによって、地球内部ではマントル対流や地磁気発生などのダイナミクスが生じている。エネルギーの流入・散逸は、物質の物理的・化学的性質によって制約される。地球構成物質の熱伝導度、電気伝導度の精緻な情報は地球深部の熱輸送特性を理解するうえで必要不可欠であり、理論・実験による研究が活発に行われていた。地震波観測によると、地球中心核内部には、地震波速度異方性の不均質構造・層構造・東西半球の存在が報告されている(e.g. Souriau 2007)。これら不均質構造の物質科学的起源を明らかにするためには、内核に相当する圧力・温度条件における内核物質(鉄を主成分とする合金)の相平衡関係ならびに結晶構造に関する知見と共に、電気伝導度・熱伝導度といった電子輸送特性の知識が必要不可欠である。

しかし内核の温度・圧力は非常に高いため、実験による伝導度の直接測定は困難である。衝撃波実験によって地球外核に相当する 200 万気圧までの鉄の電気伝導度の報告がなされているが(Keeler et al. 1971; Bi et al. 2002)、地球内核その場条件下での実験は現在でも報告されていない。また、理論研究に関しても、研究開始当初は金属鉄の電子構造およびその圧力依存性を単純化することで得られていた推定値があるのみであった(Stacey and Loper 2007)。地球内核条件下における鉄の電子輸送特性は現在でもほとんど制約されておらず、依然として実験・理論共に地球深部科学における挑戦的な課題の一つとなっている。

研究手法のブレイクスルーが望まれる中、量子力学的理論の一つである密度汎関数理論(DFT)に基づき実験のパラメータを一切仮定せず物性予測が可能な「第一原理計算」技

術の発展に伴い電子輸送特性の計算がようやく可能になりつつあった。第一原理計算による地球核の物性研究は、熱状態方程式、比熱、そして熱膨張率など熱特性の研究(e.g. Sha and Cohen 2010)を除き、熱・電気伝導度に関しては、外核の構成物質と考えられる液体鉄合金に関する報告があるだけであり(Pozzo et al. 2012; de Koker et al. 2012)、地球内核条件下での固体鉄(合金)についての研究報告例は皆無であった。

## 2 . 研究の目的

任意の温度・圧力下における固体金属の電子輸送特性(電気・熱伝導率)の第一原理計算手法を確立する。次いでその手法を地球内核に相当する 330 万気圧・5000 度以上の超高压高温条件下における hcp 鉄へと適用し、地球内核の電子輸送特性を定量的に推定する。

## 3 . 研究の方法

金属の電気・熱伝導は、電場の作用のもとに電子が移動して電荷およびエネルギーが物質内で輸送される現象を指す。それらの輸送効率を示す指標が電気・熱伝導度である。電子は格子波(フォノン)によって散乱され、その散乱強度は電子-フォノン相互作用を系への摂動として取り扱う量子力学的摂動論によって評価できる(Ziman 1960)。電子輸送特性の決定のためには、さらに伝導電子密度や電子速度の電子物性値の情報が必要である。本研究では電子構造の高精度計算手法として知られる DFT に基づきそれらの物性値を決定した。また、フォノン特性および電子-フォノン散乱強度は DFT に摂動論を組み込んだ理論として知られる密度汎関数摂動論(DFPT)(Baroni et al. 2001)に基づいて評価した。この方法では最小シミュレーションセルサイズでフォノン・電子-フォノン散乱強度の計算が可能であり、電気・熱伝導度の高効率シミュレーションが可能である。

#### 4. 研究成果

金属の高温高圧下における第一原理電子輸送特性計算手法の開発を目的として、フェルミ面における電子特性である伝導電子密度及び伝導電子速度を効率良く計算するためのプログラムを最初に開発した。これらの物理量はフェルミ面のトポロジーに非常に敏感である。本研究では、有限フーリエ基底によるフェルミ面内挿法を用いた。これにより、任意形状のフェルミ面上で電子速度を効率良く計算することが可能となった。

フォノンによる伝導電子の散乱強度は電子輸送特性を決定するうえで鍵となる物理量である。固体電子論では電子-フォノン相互作用の摂動論に基づく手法の有効性が広く知られており、本研究においてもその手法を導入した。最終的に、マルチメガバール条件下において電子-フォノン相互作用行列、電子-フォノン散乱由来のバンド依存電子寿命、そして総電子-フォノン結合定数を第一原理的に決定できた。

地球内核に相当する圧力下における鉄の最安定構造の候補の一つがhcp構造である。この構造を仮定し、高圧力下における結晶構造最適化をDFT計算によって行った。各圧力下におけるフォノン振動特性はDFPT計算によって決定し、準調和近似に基づく自由エネルギー計算により高温高圧下における熱状態方程式を決定した。なお、hcp構造の結晶軸の非調和性は加温に伴い大きくなることが知られており、本研究でもその効果を考慮した電子構造・フォノン・電子-フォノン相互作用計算を行った。

計算した電子・熱物性値、フェルミ電子の平均自由行程値を用いて、地球中心核圧力条件(およそ300万気圧)で電子-フォノン散乱由来の電気・熱伝導度を第一原理的に決定することができた。結晶構造の非調和性により、体積一定下でも電気抵抗率が加温に対して非

線形挙動を示すことを明らかにした。hcp構造の非調和性を考慮した電子-フォノン相互作用由来の電子輸送特性を計算した報告例はこれまでにない。超高温下における金属の電気伝導度の研究報告例は理論・実験共に限られている。本研究成果は固体金属の極限環境下における電子輸送特性の振る舞いに関するケーススタディとしても機能するはずである。

地球内核の電子輸送特性をより詳細に決定するためには、超高温下における電子-電子散乱、軽元素固溶に伴う電子-不純物散乱、そして電子-フォノン多重散乱(高次摂動由来)の定量評価が望まれる。本科学研究費助成事業によって得られた電子・熱物性値は当該分野の研究をさらに進めるうえで欠かせない基礎データとなるだろう。

#### 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計0件)

〔学会発表〕(計2件)

出倉春彦, Electron-phonon contribution to electrical resistivity of hcp Fe, 日本地球惑星科学連合 2016 年大会, 2016 年 5 月 23 日, 幕張メッセ国際会議場(千葉県千葉市)

出倉春彦, マルチメガバール条件下における固体金属鉄の第一原理電子-フォノン相互作用計算, 第 56 回高圧討論会, 2015 年 11 月 10 日, 広島市アステールプラザ(広島県広島市)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕(計0件)

出願状況(計0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0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

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

出倉 春彦（DEKURA Haruhiko）

愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・講師

研究者番号：90700146

### (2) 研究分担者

（ ）

研究者番号：

### (3) 連携研究者

（ ）

研究者番号：

### (4) 研究協力者

（ ）