



国立大学法人 愛媛大学
地球深部ダイナミクス研究センター
〒790-8577 松山市文京町2-5
TEL : 089-927-8197 (代表)
FAX : 089-927-8167
<http://www.ehime-u.ac.jp/~grc/>

目 次

- ◆ センター長挨拶
- ◆ センター構成
- ◆ NEWS&EVENTS:
 - EU地球深部ネットワーク(c2c)にて招待講演
 - 第49回高压討論会ポスター賞受賞
 - 中性子実験関連「新学術領域研究」採択
 - 第19～21回 GRCフロンティアセミナー
 - 第7回GRCレクチャー開催
 - グローバルCOE特待生の募集
 - グローバルCOE発足記念フォーラム開催
 - TANDEMシンポジウム報告
- ◆ ジオダイナミクスセミナー
- ◆ 新人紹介
- ◆ 国際会議報告
- ◆ 最新の研究紹介 : $MgSiO_3-Al_2O_3$ 固溶系における
ポストペロヴスカイト相平衡

◆ センター長あいさつ ◆



入船 徹男

GRC を中核としたプログラムが、我が国の地球科学分野の「グローバル COE」3 拠点の 1 つに選出されてから、あっという間に半年が経ちました。この半年は拠点の立ち上げ期間と位置づけて、手探り状態で様々な取り組みをおこないました。幸い若手を中心に優秀な研究者が集まり、また国内外からの博士課程学生も順調に増加しつつあります。今年度中には体制を整え、

人材育成および研究目標達成に向けて邁進するとともに、4 年後を見据えた新たな取り組みも開始したいと思います。

1 年前にはこれにエントリーするつもりはなく、むしろ批判的でさえありました。諸般の事情により、また学長に背中を押され、覚悟を決めて構想を練りはじめたのがちょうど昨年正月。他の有力拠点はずっと前から周到な準備をしていたとのことで、とても勝ち目があるとは思えませんでした。「21 世紀 COE」では最終ヒアリングで落選したものの、この 5 年間の独自の努力で 21 世紀 COE 拠点に負けない研究業績をあげ、また若手育成においても成果を上げたことが高い評価につながったようです。

我々のプログラムでは、バイロイト大学地球科学研究所 (BGI) 型の拠点形成を、1 つの目標として掲げています。しかし様々な理由から、その実現はそう簡単ではありません。日本の大学、特に地方大学の現状を直視し、その (数少ない?) 利点をいかに生かして世界的拠点を作るか。非常に困難ではありますが、ある意味やりがいのあるチャレンジな事業でもあります。

この半年ですでに「日本の BGI」作りは相当困難であることを実感していますが、もちろん諦めたわけではありません。これを機会に、我が国でしかできない、特徴ある拠点形成の礎を築きたいと考えています。そのキーワードは、「独自技術」と「役割分担」です。これらの詳細はともかく、我々の拠点では、関連研究機関や研究室、また企業との連携を強め、一方で GRC 内部の協同体制を更に固めることにより、他では真似のできない先進的実験と、数値計算に基礎をおいた先端研究・人材育成に挑戦したいと考えています。

「グローバル COE」では、一極集中の流れを推奨しているように思われます。この流れに逆らう

ようですが、我々のプログラムではGRCだけでなく、拠点を核とした我が国のすぐれた研究室間の連携を発展させ、それぞれの特徴を生かしつつ、より高次元の先端研究と人材育成のシステムづくりができればと思います。今年もGRCとしても、そのための第一歩を踏み出したいと考えています。

◆センターの構成◆

(H21. 1. 1現在)

❖ 地球深部物質構造動態解析部門

入舩徹男 (教授)
井上 徹 (准教授)
大藤弘明 (助教)
西山宣正 (助教)
目島由紀子 (技術補佐員)
松影香子 (G-COE准教授) (H20. 11～)
河野義生 (G-COE研究員) (H20. 11～)
川添貴章 (G-COE研究員) (H20. 11～)
Steeve Gréaux (G-COE研究員) (H21. 1～)
丹下慶範 (G-COE研究員) (H21. 1～)
山田明寛 (G-COE研究員) (H21. 1～)

❖ 地球深部活動数値解析部門

土屋卓久 (准教授)
亀山真典 (准教授)
公募中 (助教)
臼井佑介 (G-COE研究員) (H20. 10～)

❖ 地球深部物性計測部門

花山洋一 (教授)
木村正樹 (助教)

❖ 連携部門

上級研究員センター
土屋 旬 (上級研究員 (GRC関連))
西原 遊 (上級研究員 (GRC関連)) (H20. 11～)
石河孝洋 (PD研究員 (GRC関連)) (H21. 1～)

先端研究推進支援機構教育研究高度化支援室

入舩徹男 (室長) (H20. 10～)
山田 朗 (リサーチアドミニストレーター)
(H21. 1～)
新名 亨 (ラボマネージャー) (H21. 1～)

❖ GRC研究員 (学内)

大野一郎 (理工学研究科教授)
川寄智佑 (理工学研究科教授)

榊原正幸 (理工学研究科教授)
山本明彦 (理工学研究科教授)
森 寛志 (理工学研究科准教授)
瀧崎員弘 (理工学研究科教授)
小西健介 (理工学研究科准教授)
山田幾也 (理工学研究科助教)
田中寿郎 (理工学研究科教授)
平岡耕一 (理工学研究科准教授)
山下 浩 (理工学研究科准教授)
野村信福 (理工学研究科教授)
八木秀次 (理工学研究科准教授)
豊田洋通 (理工学研究科准教授)
松下正史 (理工学研究科助教)
佐野 栄 (教育学部教授)

❖ GRC客員研究員 (学外)

藤野清志 (北海道大学大学院理学研究科教授)
遊佐 斉 (物質・材料研究機構物質研究所主幹研究員)
鍵 裕之 (東京大学大学院理学系研究科准教授)
平賀岳彦 (東京大学地震研究所助教)
川本竜彦 (京都大学大学院理学研究科助教)
大高 理 (大阪大学大学院理学研究科准教授)
重森啓介 (大阪大学レーザーエネルギー学研究センター准教授)
角谷 均 (住友電気工業 (株) エレクトロニクス・材料研究所スペシャリスト)
浦川 啓 (岡山大学理学部准教授)
山崎大輔 (岡山大学地球物質科学研究センター准教授)
田島文子 (広島大学大学院理学研究科教授)
安東淳一 (広島大学大学院理学研究科助教)
中久喜伴益 (広島大学大学院理学研究科助教)
片山郁夫 (広島大学大学院理学研究科助教)
赤松 直 (高知大学教育学部准教授)
本田理恵 (高知大学理学部准教授)
中田正夫 (九州大学大学院理学研究院教授)
加藤 工 (九州大学大学院理学研究院教授)
金嶋 聰 (九州大学大学院理学研究院教授)
巨海玄道 (九州大学大学院理学研究院教授)
吉岡祥一 (九州大学大学院理学研究院准教授)
久保友明 (九州大学大学院理学研究院准教授)

授)

Fabrice Brunet (フランス国立科学研究センター
(CNRS) 研究員)

Jennifer Kung (台湾国立成功大学地球科学
研准教授)

❖ 研究拠点担当

外山廣子 (副室長)
日野さゆり (TL) (H20.10~)
小野由紀子 (事務補佐員)
加藤智恵子 (事務補佐員)
宮本菜津子 (事務補佐員)
安藤華奈子 (事務補佐員)
田中規志 (事務補佐員)
大熊 知 (事務補佐員) (H20.10~)

NEWS & EVENTS

❖ EU地球深部ネットワーク (c2c) にて招待講演

GRCの土屋卓久准教授は、10/22-10/25にポーランドの古都Cracowにあるポーランド教育大学で行われた「地球科学における第一原理計算ワークショップ」に日本人で唯一フルサポートで招待され、これまでおこなってきた地球深部物質の第一原理研究について、方法論から具体的な研究例の紹介まで総合的なレビューをおこないました。このあと、GRCと学术交流協定を結んでいるドイツのバイエルン地球科学研究所を訪れ、最新の研究成果に関する講演をおこないました。

❖ 第49回高圧討論会ポスター賞受賞



GRC超高压グループの國本健広君(理工学研究科博士課程3年、日本學術振興會DC特別研究員)が、11月12-14日に姫路でおこなわれた、「高圧討論会」でポスター賞に選出されました。同討論会は日本高圧力学会の主催により毎年開催され、高圧力を研究手段として用いる、物理学・化学・地球科学・

生物学・工学などの広範な分野の研究者が参加する学際的な会議です。今回は國本君以外には、飯塚理子さんと佐藤友子さん(ともに東京大学理学研究科)の計3名が受賞しました。なお、飯塚さんはGRCを中心としたグローバルCOEの連携先である、東大地殻化学実験施設の鍵裕之准教授の大学院生です。

❖ 中性子実験関連「新学術領域研究」採択

このほど、本センター井上徹准教授が総括班分担者・計画研究代表者を務める科学研究費補助金、「新学術領域研究(研究領域提案型)」(H.20-24年度)の採択通知がありました。本科研費は、従来の「特定領域研究」と「学術創成研究」が廃止されたことに伴い、今年度から始まった研究機関の枠を越えた大型の科研費で、理工系分野では応募数132件の中で、採択されたのは10件のみでした。本領域名は「高温高压中性子実験で拓く地球の物質科学」で、領域代表者は東京大学物性研究所の八木健彦教授です。なお、GRCを中心としたグローバルCOEの、研究上の重点課題である「地球深部水」研究の展開においても、重要な役割を果たすことが期待されます。

❖ 第7回 GRC (第1回G-COE) 国際レクチャー

“Imaging Earth Structure”

講演者: Prof. Brian Kennett (オーストラリア
国立大学地球科学研究所 (RSES))

日時: 2008年9月18日 13:00-16:00

2008年9月19日 9:00-12:00

1. Introduction
2. The major elements of Earth structure
3. Seismic Waves
4. Probing the interior of the Earth
5. Elements of Seismic Tomography
6. The global seismic wavefield
7. Global Seismic Tomography
8. The seismic wavefield to 40 deg
9. Regional Seismic Tomography
10. Tomography and Earth Dynamics

❖ 国際フロンティアセミナー

第19回

“High-Pressure Neutron Scattering for Material-
and Geo-Sciences”

講演者：Prof. Stefan Klotz
(University P&M Curie, Paris)
日時：2008年8月29日 17:00-18:00

第20回

“Lithospheric Edges and Sutures”
講演者：Prof. Brian Kennett (オーストラリア
国立大学地球科学研究所 (RSES))
日時：2008年9月18日 17:00-18:00

第21回

“Let's creep! -An experimental pursue for high-
pressure rheology”
講演者：Prof. Yanbin Wang (GeoSoilEnviro
CARS, The University of Chicago)
日時：2008年11月21日 18:00-18:30

❖ グローバル COE 特待生の募集

愛媛大学理工学研究科博士後期課程・数理物質
科学専攻(地球進化学講座)では、グローバル COE
「先進的実験と理論による地球深部物質学拠点」
の人材育成計画に基づき、COE 特待生制度を設け、
以下の経済的支援をおこないます。

- (1) 入学料の不徴収
- (2) 授業料の不徴収
- (3) 渡日および帰国旅費の支給 (外国人の場合)
- (4) RA や TA による生活費相当額程度の支給

平成21年度4月入学の特待生は、博士課程入試
2次募集(例年出願1月20日頃、試験2月20日頃)
を受験していただくこととなりますので、詳細は
「グローバル COE 特待生募集(博士後期課程)」
(<http://www.ehime-u.ac.jp/~grc/>) をご参照
ください。またこの中から、学術振興会の特別研
究員(DC)に優先的に移行できる可能性もあります
(グローバル COE 特別枠)。

❖ グローバル COE 発足記念フォーラム

愛媛大学では、地球深部ダイナミクス研究セン
ターを中心としたグローバル COE プログラム「先
進的実験と理論による地球深部物質学拠点」の発
足を記念し、下記のように発足記念フォーラムと
祝賀会を開催いたしました。

日時：2008年12月1日(月) 15:00-17:15
会場：愛媛大学 グリーンホール
式次第

開会挨拶 学長 小松 正幸
特別講演 京都大学前総長 尾池 和夫

質疑応答

COE 概要説明 理事 能勢 真人
研究拠点形成計画、メンバー紹介
拠点リーダー 入船 徹男
閉会挨拶 理事 遠藤弥重太
主催：愛媛大学研究支援部研究支援課

❖ 第1回グローバル COE シンポジウム

“地球深部物質学のアジアにおけるネットワーク
(TANDEM) 形成に向けて”
—Towards Formation of The Asian Network in
Deep Earth Mineralogy (TANDEM)—

地球深部ダイナミクス研究センター(GRC)では、
11月23日-25日の3日間にわたり、グロー
バル COE 第1回国際シンポジウム「Toward
formation of The Asian Network in Deep Earth
Mineralogy (TANDEM)」を、愛媛大学理学部構内
の総合研究棟で開催しました。シンポジウムに
は中国、台湾、韓国、オーストラリアなどアジ
ア諸国を中心に35名、また国内から20名余り
の他大学からの参加者、GRCを中心とした約40
名の愛媛大学の研究者・大学院生など、合計100
名近くが参加し、各大学の主要研究プロジェクト
や設備の紹介、また最新の研究成果の発表をお
こなしました。



➡ ジオダイナミクスセミナー

❖ 今後の予定(詳細はHPをご参照下さい)

1月

1/23 「ナノ多結晶ダイヤモンドの生成温度圧力下
限と大型化」
磯部太志(愛媛大学修士1年)

“Effect of densification on pressure-
transmitting efficiency of pyrophyllite
gaskets”
Leiming Fang(愛媛大学博士1年)

1/30 “Phase equilibrium and structural properties of Ca-rich garnets at high-pressure and high-temperature”
Steeve Greaux (グローバルCOE研究員, GRC)

2月

2/6 「第一原理計算による下部マントル鉱物の融解関係 ～核-マントル境界における部分融解の可能性について～」
八幡直也 (愛媛大学修士1年)

「高温、高圧条件下における FeAlO₃ の相関係」
和田光平 (愛媛大学修士1年)

2/20 「 γ Fe の高温状態方程式とスピン転移の可能性」
西原 遊 (愛媛大学上級研究員センター上級研究員 (GRC 関連))

2/27 「ポストペロブスカイトの物性科学」
大串研也 (東京大学物性研究所)

3月

3/6 「先端技術で見る地震学的 CMB 構造」
竹内 希 (東京大学地震研究所)

3/13 「マントルウェッジかんらん岩の結晶方位異方性と地震波特性」
道林克禎 (静岡大学理学部地球科学科)

3/27 「大陸下のマントルと水」
松影香子 (G-COE 准教授, GRC)

❖ 過去の講演

第211回 “Computational study on the iron-bearing lower mantle phases”
土屋卓久 (GRC 教員) 2008. 10. 3

第 212 回 「マルチアンビル装置のための圧力定点再考」
國本健広 (愛媛大学博士3年) 2008. 10. 10

第 213 回 「単色放射光とドリッカマー型装置を組み合わせた実験技術開発 ～下部マントル条件下における変形実験を目指して～」
西山宣正 (GRC 教員) 2008. 10. 17

第 214 回 「沈み込みスラブに伴う地表から遷移層への水の運搬に関する地震学的観測・推測」

山田 朗 (GRC 教員) 2008. 10. 31
第 215 回 「高温高圧下でのカンラン石・ウォズリアイトの変形実験」

川添貴章 (G-COE 研究員) 2008. 11. 7
第 216 回 「新奇 A サイト秩序型ペロブスカイト酸化物の探索と構造・物性評価」
山田幾也 (愛媛大学理工学研究科教員) 2008. 11. 21

第 217 回 「地球深部水プロジェクト」
井上 徹 (GRC 教員) 2008. 11. 28

第 218 回 「多相多成分系マントルの 3 次元対流シミュレーションに向けて」
亀山真典 (GRC 教員) 2008. 12. 5

第 219 回 “Thermal structure in the lowermost mantle inferred from short-period P-wave reflections from the D”layer”
小早川麻衣 (愛媛大学修士2年)

「PcP, PKiKP を用いた日本列島下における CMB, ICB の構造推定」

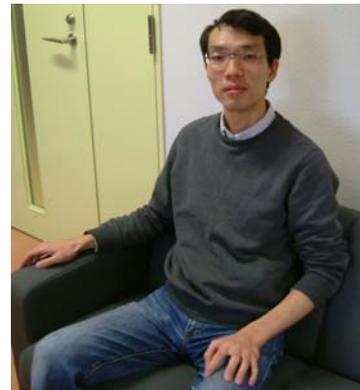
柴田直秀 (愛媛大学修士2年)

2008. 12. 12

⇩ 新人紹介 ⇩

西原 遊

(上級研究員センター上級研究員)



2008年11月から上級研究員センター(GRC関連)の上級研究員に着任いたしました西原です。学部、大学院時代は東京工業大学に在籍し2003年3月に博士号を取得しました。その後、米国 Yale 大にPDとして約2年間、再び東京工業大学でCOE教員として約4年間を過ぎた後、今回の赴任となりました。生まれ育ちも関東だったので、愛媛では人生で初めての西日本生活になります。

私はこれまで、地球深部の物質の挙動を探るためマルチアンビル型高圧発生装置などを使った実

験的研究を行なってきました。物質の挙動といってもいろいろな側面がありますが、私の取り組んだ研究は地球深部物質の(1)密度と弾性、(2)流動特性とカイネティクスとの2つに分けられます。主に学生時代に取り組んだ研究(1)では、天然の岩石を使った高温高压相平衡実験、マントル鉱物の熱弾性的性質の測定を行ないました。そしてその結果をもとに、過去に地球深部マントルに沈み込んだと考えられるコマチアイト(太古代の超塩基性火山岩)が現在のマントル遷移層に存在している可能性を指摘しました。最近重点をおいて行なってきた研究(2)では、これまで未開拓であった深さ200kmを超えるマントル深部での流動特性(粘性率など)を、新しく開発した高温高压変形実験技術によって解明しつつあります。Yale大学では回転ドリッカー装置を用いてウォズリアイトとカンラン石の変形実験を行ない、この結果をもとに深さ410kmのマントルに粘性率の不連続が存在する可能性があることを指摘しました。もしこの深さに粘性不連続が存在すれば沈み込むプレートの挙動に大きな影響を与えるかもしれません。

ここGRCでも、研究(2)を進め、特に下部マントル物質の流動特性の解明を目指したいと考えています。観測から下部マントルは上部マントルに比べ1~2桁程度粘性率が高いことがわかっています。このため下部マントルが地球内部の物質輸送を律速していると考えられ、その流動特性の理解は地球内部の熱史を解明するために重要です。非常に実験の難しい研究ですが、GRCの方々に協力していただきながらD-DIA型超高压変形装置(MADONNA)などを使って取り組めば、よい研究ができるのではないかと楽しみにしています。

松影香子

(G-COE 准教授)



2008年11月にグローバルCOE准教授として

GRCに赴任しました。専門分野はマントル岩石学・実験岩石学です。自分が存在する不思議な世界=地球がどのように形成され、成り立っているのかを少しでも多く理解したくて理学研究を始めました。学生のころは、天然の岩石や鉱物から得られる「地球内部進化の生の記録」を出来るだけ多く且つ正確に読み解くのが目的で、オフロードバイクに乗りハンマー片手に日本や海外の山を歩き回り、地質図を描きつつマントル起源のかんらん岩や輝岩を採集し、鉱物の化学分析をしてきました。地球物理学や室内実験を学んできた人が多いGRCでは異色のフィールド系出身といえるかもしれません。その後、地球のマントルで起きている現象をより定量的に理解したいと思い、地球マントルに相当する高温高压条件下での室内実験も始め、現在に至っています。

私が現在興味を持っているのは、地球内部での流体の移動に伴う元素移動に関することです。地球内部は主に固体と少量の流体から成り立っていますが、固体のみを介する元素移動、例えば固相-固相反応による元素の再分配、固体内の元素拡散速度、固体の流動などでは移動速度も非常に遅く短時間では移動範囲も限られたものになってしまいます。一方、地球内部の高温高压条件下では、流体は、様々な化学成分を大量に溶かし込み高速で広範囲に運び、再分配することが可能です。

従って、地球内部の化学進化を考える上で流体の物質学的特性の理解は必要不可欠です。地球マントルには主に二種類の流体、①珪酸塩を主成分とする高温マグマ、②H₂Oを主成分とする低温マグマ、が存在すると考えられていますが、両者が運ぶ成分にどのような違いがあるか、運ぶ成分に温度・圧力依存性があるか、実際の移動速度はどれくらいか、移動する方向は地表か地球深部か、など様々な疑問が存在します。

私は、これらの疑問への答えを1つでも多く得て地球の化学進化の本質を理解したいと思っています。赴任してまだ2ヶ月弱しか経っていませんが、自分の専門分野と異なる研究スタッフが多いことは私にとってGRCの大きな魅力のひとつだと感じています。またグローバルCOEプログラムは若手研究者を育成することに重点を置いているのですが、若手研究者の良い刺激になれるように様々な人と議論し、良い研究ができる様に努力したいと思います。どうぞよろしくお願いいたします。



◆ 国際会議報告 ◆

❖ EU 地球深部教育研究 (c2c) ワークショップに参加して



10/22-10/25にポーランドの古都クラクフにおいて“Workshop on ab initio calculations in geosciences”というタイトルで、ヨーロッパにおける物性科学と地球科学の学際的融合と、それに基づく次世代の研究者育成を目的とした分野横断型のユニークなワークショップが開催された。今回この会議にご招待いただき、これまで私が行ってきた地球深部物質のシミュレーション研究について、方法論から具体的な研究成果の紹介まで総合的なレビューをおこなってきたので、その様子を報告する。

会議には、主に物性理論や鉱物物理などの分野の研究者 100 人前後が、ヨーロッパ各地から集まっていた。参加者の約半数は博士後期課程の学生で、これも計算屋からこれから計算を始めてみようという実験屋まで様々であった。私の他にはドイツ Geoforschungszentrum Potsdam の Sandro Jahn 氏や、実験家である米国 Yale 大学の Kanani Lee 氏などが、招待講演者として招かれており、モデルポテンシャル法による大規模シミュレーションや、シミュレーションと実験の融合などについての話題が提供された。またそれらの招待講演以外には、本会議の主催者で直接法によるフォノン計算の権威であるポーランド教育大の Krzysztof Parlinski 教授による格子振動論の基礎から応用に関するレクチャーや、もう一人の主要な主催者メンバーであるドイツバイエルン地球科学研の Gerd Steinle-Neumann 博士による地球核関連物質についての研究紹介など、いずれも大変貴重な講演がおこなわれた。これらに加え、磁鉄鉱の磁気秩序と相転移研究をはじめ、鉱物水和の量子化学計算、クラスター展開法による 2 元系合金の状態図の計算といった物質科学オリエンタな発表や、珪酸塩メルトや鉄固溶体の高压物性、遷移金属化合物の圧力誘起スピン転移などの地球深

部科学の重要課題に関する発表など、物性物理から量子化学、地球科学に至る多彩な一般講演があった。それらの多くがとても興味深いものだったが、特にいくつかの講演では筆者も十分満足が行くような固体物理的な議論を交わすことができた。熱力学物性を統計力学にまで遡上して捉えることや、化学結合特性を固体電子論的に基づいて論ずることは、実は地球深部物質学においてもとても重要である。そのような視点に立って参加者間でコミュニケーションが取れていたということが、この会議の最大のポイントかつユニークな点であったと思う。地球惑星物質の物性シミュレーションというキーワードで、これだけの数の発表が集まるというのは今の日本では難しいであろう。

また本ワークショップでは、サイエンティフィックなセッション以外にも、初心者向けのイントロダクトリーな講演や、実際に計算機を使用しているチュートリアルなどのプログラムも用意されており、短期間ながらとても充実したプログラムとなっていて驚いた。それらは十分大学院半期分の講義にも値するような内容で、研究者育成の部分に関しても非常に効果があったのではないかと感じられた。私もこれまでにいろいろな会議に参加してきたが、これほど充実感のある会議も記憶に少なく、会議の形態など学ぶべき点が多かった。さらに、これら以外の企画も、例えば会議参加者だけのために弦楽四重奏コンサートやクラクフ旧市街を巡るシティーツアーまで用意されていて驚かされた。準備委員会のポーランド教育大の方々には心から感謝の意を表したい。ヨーロッパコミュニティの活発な活動に直に触れられたことは、とても貴重な経験で多くの収穫があった。

また今回はこの会議の後、ヨーロッパにおける地球深部物質研究の中心地であるバイエルン地球科学研究所に立ち寄り、セミナーをおこなう機会もいただいた。こちらも大変よい経験となったが、この際クラクフからバイロイトまで地図も持たずに真夜中 10 時間以上かけて車で移動し、途中国境付近の山中で道に迷うというアドベンチャーもあった。Steinle-Neumann 氏には今回の一連の旅にご招待いただいたことをはじめとして、長距離ドライブの運転も含め何かとお世話になった。この場を借りて厚くお礼申し上げたい。また今回の出張は EU 地球深部研究ネットワーク c2c およびポーランド科学アカデミーからの全額サポートによるものであったことを、最後に記す。(土屋 卓久)

最新の研究紹介

MgSiO₃-Al₂O₃ 固溶系におけるポストペロヴスカイト相平衡

地球内部はかんらん岩に近い組成(マグネシウム・ケイ素・酸素と少量の鉄・アルミニウム等)をもつマントルと主に鉄を主成分とする核から成ると考えられている。マントルは地震波速度の異なるいくつかの層に分類されることがわかっており、主たる地震波速度の違いは、マントルを構成する主要鉱物の結晶構造相転移により説明されている。しかし地球下部マントルと外核の間の約200~300キロメートルの厚さをもったD''(ディーダブルプライム)層と呼ばれる領域の成因については最近まで極めて不確定的であった。2004年に下部マントル主要構成鉱物であるペロヴスカイト相がこのD''層の温度圧力領域で新たな結晶構造をもつ物質に相転移(ポストペロヴスカイト相転移)することが、高压実験や我々のグループの理論シミュレーションにより報告された(図1)。

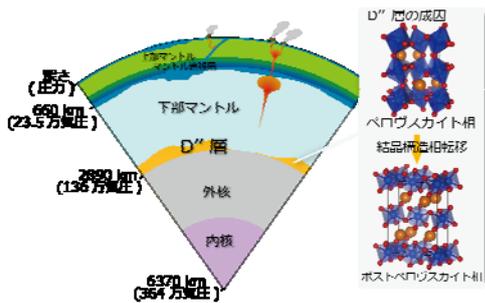


図1 D''層とポストペロヴスカイト相転移

その後、この相転移とD''層との関連性が盛んに研究されるようになったが、その結果少量のアルミニウムや鉄等を含む現実的なマントルの組成においては広い二相共存領域を持つため、相転移が徐々に進行し、D''不連続面として検知できるような明確な地震波速度の増加を引き起こすことができないという実験や計算結果が示され、大きな問題となっていた。

我々は、量子力学の基本原則に基づく第一原理電子状態シミュレーションにより、下部マントル主要構成鉱物である MgSiO₃ ペロヴスカイト相とポストペロヴスカイト相の安定性に対するアルミニウムの固溶効果を詳細に調べた。その結果、アルミニウムを少量含む組成ではポストペロヴスカイト相転移は比較的是っきりと起こり、アルミニウム濃度が高い組成においてはペロヴスカイトが Rh₂O₃(II)型と呼ばれる別の構造に変わり、そのため徐々に相転移が起こるといった結果が得られた。

よってD''層の圧力温度条件において、アルミニウムを少量しか含まない実際の地球深部の化学組成ではポストペロヴスカイト相転移により地震波速度のシャープな変化を生じ得ることを示した(図2)。破線が地球内部のアルミニウム濃度に対応する。

アルミニウムを多量に含む場合にポストペロヴスカイト相転移が徐々に進行するメカニズムについて、以下に少し詳しく説明する。アルミニウムを比較的多く固溶した組成はペロヴスカイト相と Rh₂O₃(II)型構造相に分離することが本研究により示された。相分離した系におけるポストペロヴスカイト相転移は徐々に進行する。その Rh₂O₃(II)型構造相とペロヴスカイト相はX線回折法では非常に判別が難しいことが知られており、そのため過去の研究ではペロヴスカイトからポストペロヴスカイトへの相転移が徐々に起こると報告された可能性が高い。

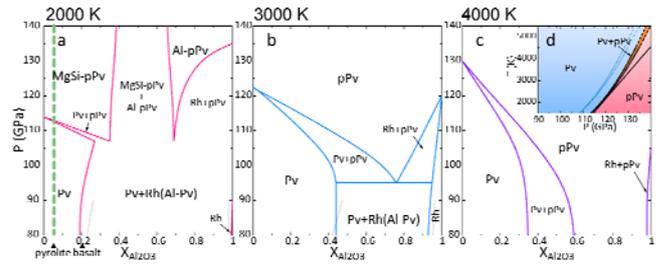


図2 第一原理電子状態計算により得られた温度2000-4000 Kにおける MgSiO₃-Al₂O₃ 固溶系の相図。二相共存領域(Pv+pPv)が狭いため、D''地震波不連続が説明できる。破線が地球内部のアルミニウム濃度に対応する。

今回の研究は、地球深部で予想されるような不純物元素を含む組成において D''層がポストペロヴスカイト相転移により形成できることを初めて証明した。また第一原理電子状態計算法を用いて地球深部複雑系物質の高温高压下における相平衡関係を世界で初めて理論的に決定したという点においても大変意義深い。このようなコンピューターシミュレーションは計算機演算能力の飛躍的な発展とともにますます重要性が増している。また今回新たに開発された計算手法である多配置サンプリング法は、今後鉄固溶体への応用なども可能で、数値計算に基づく地球深部物質学の新たな展開への重要な貢献が期待される。(土屋 旬)

編集後記: 本日(1/9)は新年会を兼ねた歓迎会でした。教職員・研究員だけでも約30名の参加者と、GRCの成長を実感しました。(T. I., Y. M., T. O.)