

第一原理計算による MgO-MgSiO₃ 共融系の超高压融解関係 ~マントル最深部ULVZの成因について~

土屋研 村上 さやか

はじめに 核-マントル境界(CMB)直上には急激な地震波速度低下の観測される領域(ULVZ)が存在している(Garnero & Helmberger, 1995 など)。ULVZの速度低下は V_p で~10%、 V_s で~25%(Rost et al., 2005)と予想されており、その分布は下部マントルのS波低速域(Grand, 2002)周縁に集中している(Thorne & Garnero 2004)。部分熔融を含むマントル対流シミュレーションの研究(Labrosse et al., 2007; Hernlund & Tackley 2007)では上昇流の根元でメルト層が厚くなることから、マントルブルームの発生源とULVZの分布には相関があると考えられる。ULVZの成因は、マントルの部分熔融や化学的不均質などが考えられているが、現在のところまだ解明されていない。下部マントル主要構成物質MgO(Pc), MgSiO₃(Pv), CaSiO₃(Ca-Pv)などの融解関係を解明することはULVZの成因・性質を考える上で重要な手がかりとなる。そこで本研究ではMgO-MgSiO₃系メルトの第一原理計算を行い、下部マントル圧力下における共融関係の予測を試みた。第一原理計算による共融系相平衡の予測は本研究が初めてである。

方法と計算条件 本研究ではMgO-MgSiO₃系メルトの定温第一原理分子動力学計算を行なった。温度一定条件で計算を行うにあたり、粒子速度スケールに基づく温度制御プログラムを作成し実装した。電子状態計算には密度汎関数法を用い、相関交換エネルギーの計算には局所密度近似を適用し、ノルム保存型擬ポテンシャル及び平面波基底を用いて電子状態を記述した。分子動力学計算はNVTアンサンブルで行い、共融系相平衡を予想するために端成分 MgO 及び MgSiO₃、MgO-MgSiO₃系メルトの非理想性を調べるために中間組成 Mg₂SiO₄の計算を行なった。また、CMB 圧力(135 GPa)における共融点組成 X^{eutectic} メルトの性質を調べるために Mg₅Si₄O₁₃ ($X_{\text{MgSiO}_3} = 0.8$)についても計算を行なった。

結果 ①端成分融解曲線: MgO-MgSiO₃共融系相平衡の予測に先立ち、端成分MgO、MgSiO₃の融解曲線を求めた。この際、メルトの圧縮挙動を調べ、陽イオンの酸素配位数が135 GPaまで増加し続けることを確認した。クラジウス-クラペイロンの式 $\partial T_m / \partial P = T \Delta V / \Delta H$ [T_m : 融点、 ΔV : 融解による体積変化(= $V_{\text{melt}} - V_{\text{solid}}$)、 ΔH : 融解エンタルピー(= $H_{\text{melt}} - H_{\text{solid}}$)] を積分し融解曲線を得た結果が図1である。MgO、MgSiO₃の融解曲線はどちらも ΔH の誤差が大きいことを考慮すると過去の研究結果と十分一致している。

②MgO-MgSiO₃共融系相平衡図: MgO、MgSiO₃の計算結果からMgO-MgSiO₃共融系相平衡図を計算した(図2)。この際、メルトの非理想効果について検討したがこの

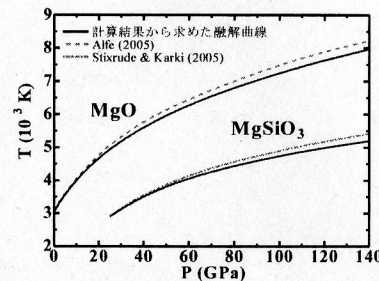


図1

効果は理想溶液近似での誤差の範囲内であった。30 GPaでの $X^{\text{eutectic}} = 0.90$ はMgSiO₃に富んでおり、Ito & Katsura (1992)の実験結果(~0.83)と調和的であった。一方、135 GPaにおいてはソリダス温度 T^{solidus} は5235 Kとなった。この T^{solidus} は現在推定されているCMBの温度 $T^{\text{CMB}} \sim 4200$ K (Alfè, 2002)よりも1000 K程度高く、したがってMgO+MgSiO₃混合体はマントル最下部でも熔融しないと考えられる。またpyrolite様組成 $X^{\text{pyrolite}} = 0.65$ において T^{solidus} でのメルト量は0.81となった。 $X_{\text{MgSiO}_3} \sim 0.85$ ではリキダス相が低压でPc、高压(60 GPa以上)でPvとなる。chondrite様組成(~0.92)に近い場合は、マントル最下部でリキダス相がMgSiO₃になる可能性がある。

考察 ①固液共存状態の地震波速度: Mg₅Si₄O₁₃の計算結果と固相Pcのデータから135 GPa、 T^{solidus} での断熱体積弾性率 B_s^{ell} 、 B_s^{pc} を求めた。それらを用いてメルトの濡れ性による依存性も考慮して(Takei, 1998)部分熔融状態の地震波速度を計算した(図3)。 X^{pyrolite} 、 T^{solidus} の場合 $\alpha=1$ (濡れ角180°)の場合であっても、メルト量が0.81と大きい場合固相粒子間の連結がなくなる。その結果、地震波速度は ΔV_p : ~25%、 ΔV_s : ~100%と大きく低下し、観測結果と一致しない。

②(Mg, Fe)O-MgSiO₃-CaSiO₃系: 三番目の主成分であるCaSiO₃を加えた(Mg, Fe)O、MgSiO₃、CaSiO₃の3成分共融系についても考察した。Fe固溶効果など不明な値は実験値から予想した。その結果、MgO-MgSiO₃系のとこと比べ T^{solidus} が~900 K低くなることから(Mg, Fe)O-MgSiO₃-CaSiO₃混合体ではマントル最下部条件下で熔融する可能性がある。

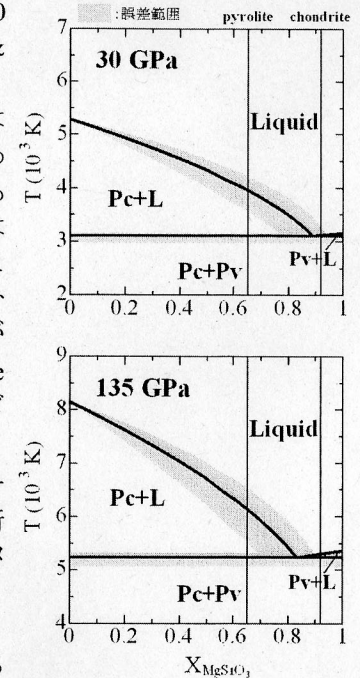


図2

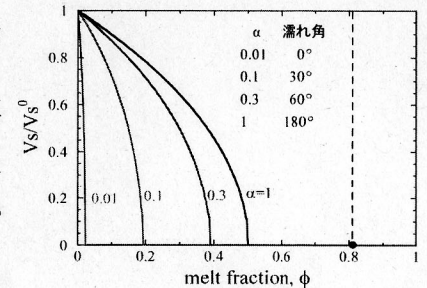


図3

参考文献: Alfè, *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 235701, (2005).
Alfè et al., *Earth Planet. Sci. Lett.* **195**, 91, (2002).
Garnero & Helmberger, *Phys. Earth Planet. Inter.* **91**, 161, (1995).
Grand, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **360**, 2475, (2002).
Hernlund & Tackley, *Phys. Earth Planet. Inter.* **162**, 149, (2007).
Ito & Katsura, *High-Pressure Research: Application to Earth and Planet. Sci.*, AGU, 315, (1992).
Labrosse et al., *nature*, **450**, 866, (2007).
Rost et al., *nature*, **435**, 666, (2005).

Shen & Lazor, *J. Geophys. Res.*, **100**, 17699, (1995).
Stixrude and Karki, *Science* **310**, 297, (2005).
Takei, *J. Geophys. Res.*, **103**, 18183, (1998).
Thorne & Garnero, *J. Geophys. Res.*, **109**, B08301, doi: 10.1029/2004JB003010, (2004).
Tsuchiya et al., *Earth Planet. Sci. Lett.* **224**, 351 (2004).
川崎智介 岩石熱力学 共立出版 (2006).