

プロジェクト名(タイトル):

極限環境での状態変化:物質の理解から惑星深部へ

利用者氏名:梅本幸一郎(1), 李志(1), Nguyen Van Hong (1), John S. Tse(2), 飯高敏晃(3)

理研における所属研究室名:

- (1) 開拓研究本部、Nori 理論量子物理研究室
- (2) 創発物性科学研究センター、計算物質科学研究チーム
- (3) 計算科学研究センター、離散事象シミュレーション研究チーム

1. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

地球内部の最も深い中心部分には、主に鉄でできている核が存在している。その核は液体の外核と固体の内核に分かれている。どちらも軽元素(酸素、硫黄、ケイ素、炭素、水素)と鉄との合金で構成されているが、その軽元素の化学組成はいまだに解明されておらず、これは長らく地球科学における未解決問題である。どの軽元素がどれだけ核に存在するのを決定するには、実際に核に相当する温度圧力条件で鉄合金の密度と音速を測定して、地震波測定の結果と比較できれば一番良いのだが、実験でそれを測定するには今なお大変難しい。そこで実験のかわりに信頼性の高い第一原理計算を用いてそれらを計算し、地震波測定の結果と比較するのが、非常に有力な手段である。

最近になり、圧力下で鉄と合金を作る水素が、核に存在する軽元素の有力候補になっている。そこで、内核に相当する温度圧力条件(360GPa, 2000–6000K)において、固体鉄水素合金の密度を、第一原理計算を行なった。

2. 具体的な利用内容、計算方法

計算手法は密度汎関数法に基づく第一原理計算である。計算パッケージとして、Quantum-ESPRESSO を用いた。交換相関汎関数は PBE 型 GGA を用いた。4つの組成の hcp 鉄水素合金 (Fe64, Fe64H4, Fe64H8, Fe64H12) について、360GPa, 2000K~6000K の温度条件で、温度圧力一定の分子動力学シミュレーションを行なった。

3. 結果

図1に、360GPa における鉄水素合金の密度の温度および濃度依存性を示す。期待通り、温度上昇と共に、そして水素濃度上昇と共に、密度は減少する。内核の温度はまだわかっていない。内核と外核との境界(ICB)では圧力は約 330GPa であり、温度は、4800~6000K のどこかと考えられ

ている。圧力が約 360GPa の内核中心部での温度が約 6000K であると仮定すると、仮に内核の軽元素が水素だけであるならば、地震波測定による密度を再現するには、組成はおおよそ Fe64H16 である。もしも中心部の温度が 6000K より低ければ、水素濃度はもう少し高くなければならない。

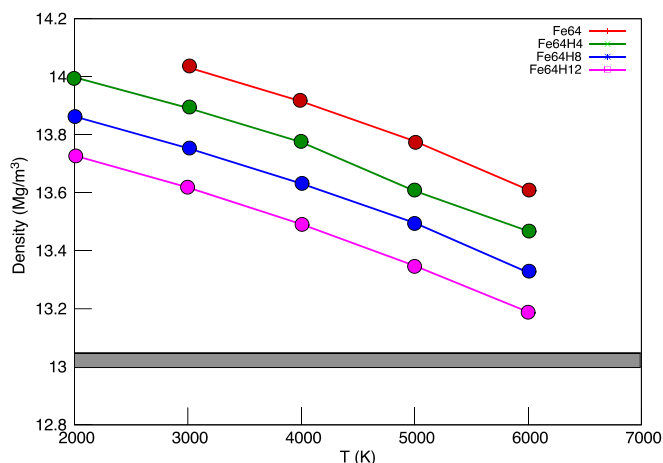


図1: 360GPa で計算した固体鉄水素合金の密度。灰色の部分、地震波測定によって得られている内核の密度を示している。

また、内核相当の高温で拡散係数を計算すると、鉄原子は hcp 格子点の周辺で熱振動を続けるが、水素原子は超イオンの振る舞いをして、hcp 格子のなかを動き回ることがわかった。

4. まとめ

第一原理計算によって、内核の温度圧力条件における固体鉄水素合金の密度を計算することに成功した。その結果から、内核に存在する軽元素が水素のみであるときのおおよその水素濃度を推定した。

5. 今後の計画・展望

今回の計算では、内核の軽元素として水素のみを考えたが、実際は硫黄、ケイ素、炭素が他の軽元素候補として提案されている。当然これらの軽元素が存在すれば、内核にある水素量は、今回の計算で推定した量よりも少なくなるはずである。水素と他の軽元素候補を同時に入れた組成について、今回の計算と同様に、密度の温度依存性を求めたい。また、今回の計算では密度のみを計算したが、音速も新たに計算して、密度と音速を同時に地震波測定を満足する組成を絞り込みたい。

2022年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

【会議の予稿集】

【口頭発表】

【ポスター発表】

【その他(著書、プレスリリースなど)】