

プロジェクト名(タイトル):

Magma from the early Earth to the current Earth

利用者氏名:

○飯高敏晃(1)、新井幸(1)、John S. Tse(1)、福井宏之(2)

理研における所属研究室名:

(1) 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

(2) 創発物性科学研究センター、計算物質科学研究チーム

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

約138億年前のビッグバン直後に誕生した陽子と電子はやがて互いに1個ずつ結合して生成した最も単純な原子「水素」は、宇宙で最も豊富な元素であり、生命誕生に不可欠な水を構成する元素である。水素原子はさらに水素分子となって星間領域を漂い、やがて地球形成のさいに取り込まれ一部が海洋の水になったと考えられている。しかしどれだけの量の水素がどのように取り込まれて、生命溢れる「水惑星」地球が誕生したのか、その詳細な物理的過程を我々は未だ知らない。ひとつの単純化したシナリオを考えてみよう。約46億年前に誕生したばかりの灼熱の原始地球は岩石が融けたマグマの海(マグマオーシャン)に覆われていたと考えられる。そこに水素が結合した微惑星や隕石が降り注ぎ、多くは微惑星の鉄成分に吸収されマグマオーシャンを沈下してコアに貯蔵されたと考えられる。残りの水素はマグマに溶けて残り、原始地球が冷えて現在の地球になったときマントル内に溶けきれなかった水が地表に海として残ったと考えられる。すなわち、微惑星や隕石とともに地球に降り注いだ水素の量から核とマントルに吸収された水素の量を引いた微少な差が、冥王代以降の地球の海の量を決めたのだ。もし、この微妙なバランスが成り立たなかったら、地球は水浸しの惑星だったかもしれないし、海のない乾燥した惑星だったかも知れない。生命誕生の条件とされる陸と海が適度な割合で存在する地球は存在しなかったかもしれないのである。

まず、珪酸塩メルト(マグマ)の高温高圧力下での巨視的物性(密度、拡散係数、粘性、熱伝導度、音速、など)の知見は、初期地球の形成、揮発性元素の輸送、火山噴火など地球型惑星の現象を理解する上で極めて重要である。その特異な物性挙動は短距離構造だけでなく珪酸塩融体が

持つ中長距離の多階層ネットワーク構造に由来すると考えられる。しかし、極限環境下の実験的測定、一般的経験的分子動力学の適用には限界があり、密度汎関数法が扱える系は中長距離構造の再現には系が小さすぎ、計算可能な時間は熱的平衡状態を達成するに不十分である。本課題では、高温高圧下での量子ビーム測定との共働により、「富岳」と高精度半経験的分子動力学を用いた数万~100万原子系の~1nsの分子動力学計算によりはじめて(含水)珪酸塩メルトの「混和・不混和転移」の高信頼度の解析を可能にする。

「富岳」の性能をフルに活かし、これらの地球惑星進化の理解に資する極限環境下での水・珪酸塩鉱物・鉄合金の固体および液体の構造と物性および各成分間の相互作用の研究を行う必要がある。本課題では、そのための準備としてHokusai上で小規模系に対して、最適計算条件の探索、データ解析プログラムの開発等を行う。

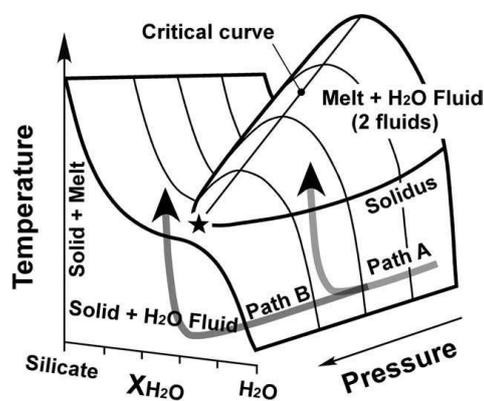
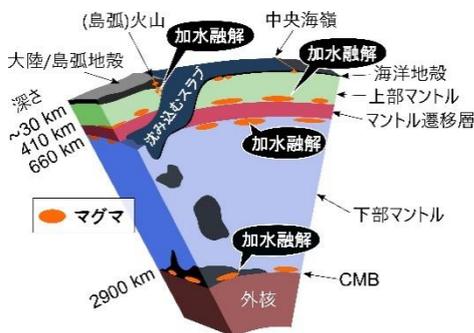


図1 マグマのありか

Fig. 2. Pressure-temperature paths during experiments (modified after Stalder et al., 2001). At conditions below the second critical end point (star) the equilibrium assemblage, melt (hydrous silicate magma) + H<sub>2</sub>O Fluid (aqueous fluid), can be obtained during heating under pressure (Path A). Beyond the second critical end point, only one fluid phase (i.e., supercritical

図2 Mibe (2007)

<https://doi.org/10.1029/2005JB004125>

水は、マグマや地球の進化に深く関わっている。地球の地殻やマントルには、2 種類の水を含む相(水成のフルイド相と水を含んだケイ酸塩メルト)が共存していると考えられており、一般にはケイ酸塩メルト中の水の溶解度と、水成フルイドにおけるケイ酸塩の溶解度はどちらも圧力と共に増大する。したがって、ある臨界点(第2 臨界点)以上の温度圧力になれば、ケイ酸塩メルトと水成フルイドはどちらも区別がつかなくなることが予想される。本申請課題では、含水珪酸塩メルトを高温下で圧縮し、量子ビームによる散乱測定と大規模 MD の協働により、含水珪酸塩の混和・不混和転移の第2 臨界点と流体の微視的構造について明らかにする。

Mysen, B. Water-melt interaction in hydrous magmatic systems at high temperature and pressure. *Prog. in Earth and Planet. Sci.* **1**, 4 (2014).

<https://doi.org/10.1186/2197-4284-1-4>

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

分子動力学ソフトウェア LAMMPS において電荷平衡型分子動力学を用いて、温度 2000K、圧力 1-10GPa での含水珪酸塩融体の熱平衡分子動力学を行い、対分布関数の圧力依存性を求めた。

## 3. 結果

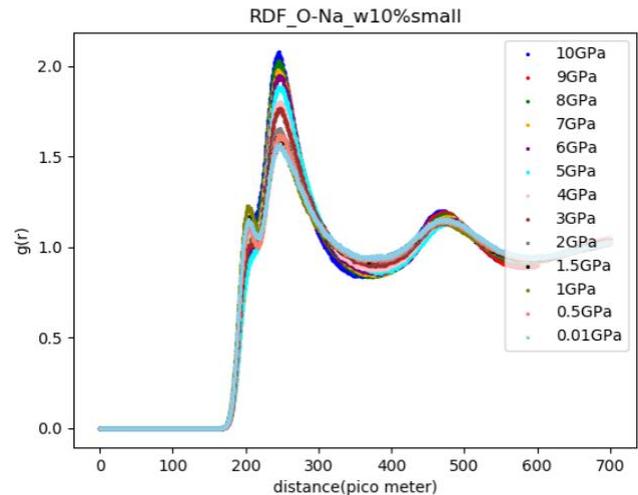


図3 O-Na 対分布関数の圧力依存性

## 4. まとめ

高温高压下での小規模系含水珪酸塩融体の対分布関数の圧力依存性(図3)の計算手順を確立した。小規模系のため、予想通り「混和・不混和転移」を検出することはできなかった。

## 5. 今後の計画・展望

今後、本計算プロジェクトを「富岳」に移植して、数万～数百万原子系へスケールアップすることにより、「混和・不混和転移」の物理を明らかにする。

## 6. 利用がなかった場合の理由

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)】