

2004年7月22日
独立行政法人 理化学研究所
国立大学法人東京工業大学

地球マントル最深部 D”層における地震波の伝播特性を解明

- 第一原理電子状態計算を用いた量子力学的原子モデルによる研究 -

独立行政法人理化学研究所（野依良治理事長）と国立大学法人東京工業大学（相澤益男学長）は、第一原理電子状態計算法^{*1}で、地球最深部マントル構成物質「MgSiO₃ポストペロブスカイト」^{*2}の地震波の伝播特性を初めて明らかにしました。理研中央研究所・戎崎計算宇宙物理研究室の飯高敏晃先任研究員、東工大大学院理工学研究科地球惑星科学専攻廣瀬敬助教授らによる研究成果です。

地球の内部は、地殻の下から深さ 2,900km までがマントルでその下に核があります。マントルは上から順に、上部マントル、遷移層、下部マントル、D”層^{*3} という層構造を持つことが地震波解析より知られています。D”層がどんな物質からできているのかはよくわかっていませんでしたが、最近の研究で D”層が「MgSiO₃ ポストペロブスカイト」という新発見の鉱物から成り立っているらしいことが明らかになりました。

本研究では第一原理電子状態計算法を使って「MgSiO₃ ポストペロブスカイト」の地震波速度を計算しました。その結果、「MgSiO₃ ポストペロブスカイト」の存在により D”層における地震波速度の不連続性・異方性など種々の観測結果を矛盾無く説明し得ることが明らかになりました。これにより地球科学の最も重要な謎の一つに光が当てられました。

本研究成果は、英国の科学雑誌『Nature』（7月22日号）に掲載されます。

1. 背景

地球の半径は約 6400km ですがそのうち地殻の下から深さ 2900km までがマントルでその下が核です。マントルは上から順に、上部マントル、遷移層、下部マントル、D”層という層構造を持つことが地震波解析より知られていました。（図 1）下部マントルと D”層は「MgSiO₃ ペロブスカイト」と呼ばれる鉱物（図 2a）であると考えられてきましたが、「MgSiO₃ ペロブスカイト」では D”層での地震波速度の不連続性・異方性などの観測結果うまく説明できず、D”層の実体は地球科学の重要な謎とされてきました。

2. 研究成果

東工大廣瀬研究室では、地球最深部の温度圧力を実験室内に再現し、超高温高压下で X 線結晶構造解析を行う技術を発展させ、D”層が「MgSiO₃ ポストペロブスカイト」という新発見の鉱物（図 2b）から成り立っているらしいことを最近明らかにしました[参考：2004年5月の Science 誌 304, 855-858]。実験では「MgSiO₃ ポストペロブスカイト」の結晶構造を明らかにしました。しかし、「MgSiO₃ ポストペロブスカイト」の弾性テンソルの測定は現在の技術では不可能です。弾性テンソルと

は鉱物を歪ませたときに生じる応力の大きさを表す比例定数（単位は圧力と同じ）で、鉱物の硬さを表し地震波速度を決める量です。

理研戎崎計算宇宙物理研究室では、スーパーコンピュータを使った大規模第一原理電子状態計算により惑星内部相当高圧力下での物質の性質を研究してきました。そこで本研究では第一原理電子状態計算を使って「 MgSiO_3 ペロブスカイト」と「 MgSiO_3 ポストペロブスカイト」の弾性テンソルを計算しました。その結果、「 MgSiO_3 ポストペロブスカイト」の存在によりD”層における地震波速度の不連続性・異方性など種々の観測結果を矛盾無く説明できることが明らかになりました（表1）。例えば、垂直方向に揺れる横波の速さを V_{SV} 、水平方向に揺れる横波の速さを V_{SH} とすると、「 MgSiO_3 ポストペロブスカイト」では $V_{SH}>V_{SV}$ となって観測と一致しますが、「 MgSiO_3 ペロブスカイト」では $V_{SV}>V_{SH}$ となって観測と矛盾してしまいます。

3. 今後の展開

これまでの地震波伝播、マントル対流などを扱う地球モデルでは「 MgSiO_3 ポストペロブスカイト」の存在が考慮されていません。今後、本研究成果を含め「 MgSiO_3 ポストペロブスカイト」の効果を取り入れて、マントル深部の地震波構造モデルを再構築する必要があります。またこのようにマントル対流の境界層であるD”層の地震波構造モデルが精密化されることにより、マントル対流の実態、とくにマントルの底からの上昇流（ホットプルーム）の発生メカニズムが解明される大きな可能性があります。ホットプルームは地球深部の熱を地表へ輸送し大規模な火山活動をもたらすため、地球の環境変動にも大きな影響があります。現在活動しているハワイやアイスランドといったホットスポットと呼ばれる巨大火山もこのホットプルームによって形成されています。また過去には超大陸の分裂を引き起こしたり、大量のガスを放出して気候変動の原因となったこともありました。このようにホットプルームがどのように発生するのかを理解することは、地球内部の活動が地表の環境変動をもたらすメカニズムを理解する上で大変重要です。

本研究成果の意義は、実験では未だ測定不可能な地球マントル最深部の鉱物の弾性を第一原理計算により予測し、地震波の観測結果との関連を明らかにした点にあります。このことは今後の惑星内部の研究にはスーパーコンピュータを使った大規模第一原理計算による鉱物の高温高圧物性の研究が不可欠な手段になることを示しています。

(問い合わせ先)

独立行政法人理化学研究所

中央研究所 戎崎計算宇宙物理研究室

前任研究員 飯高 敏晃

Tel : 048-467-9416 / Fax : 048-467-4078

Mail : tiitaka@riken.jp

主任研究員 戎崎 俊一

Tel : 048-467-9414 / Fax : 048-467-4078

Mail : ebisu@riken.jp

国立大学法人東京工業大学
理工学研究科 地球惑星科学専攻

助教授 廣瀬 敬

Tel : 03-5734-2618 / Fax : 03-5734-3538

Mail : kei@geo.titech.ac.jp

(報道担当)

独立行政法人理化学研究所 広報室

Tel : 048-467-9272 / Fax : 048-462-4715

Mail : koho@riken.jp

国立大学法人東京工業大学

評価・広報課 広報・社会連携係

Tel : 03-5734-2975 / Fax : 03-5734-3661

<補足説明>

※1 第一原理電子状態計算法

第一原理電子状態計算法は、実験結果に頼らないで量子力学の基本原則から分子や結晶の性質を計算する方法です。実験結果に頼らないので実験が不可能な極限状況での物質の性質を予測することができます。しかし、全てを計算だけで導出するので膨大な計算をしなければなりません。高性能のスーパーコンピュータがしばしば必要になります。

※2 MgSiO₃ポストペロブスカイト

下部マントルの主要構成要素は、図 2a のように SiO₆ 八面体が頂点を共有してつながった結晶構造を持つ鉱物「MgSiO₃ペロブスカイト」であることが知られています。この鉱物はマントルの底の圧力まで安定に存在すると考えられていましたが、最近の高温高圧実験により D''層相当の温度圧力条件で原子配列が変わり図 2b のような層状の鉱物「MgSiO₃ポストペロブスカイト」になることが発見されました。

「MgSiO₃ポストペロブスカイト」では SiO₆ 八面体が一方向に辺を共有するようになり、小さなイオン半径の Mg²⁺のまわりの隙間が詰まって結晶の体積が小さくなります。そのため圧力が高くなると「MgSiO₃ポストペロブスカイト」が「MgSiO₃ペロブスカイト」より安定になるのです。

※3 D''層

マントル最下部にある 200km-300km の厚みを持ったマントル層のことです。場所による厚みの変化が大きい。地震波速度が D''層と下部マントルの境界で不連続に

変化する（D”層中の方が速い。地震波速度の不連続性）。D”層中では水平に揺れる横波の方が垂直に揺れる横波より速い（S波偏向異方性）。などの特徴があります。地震波観測によりD”層の存在が知られていましたが、D”層がどんな物質からできているのかはよくわかっていませんでした。

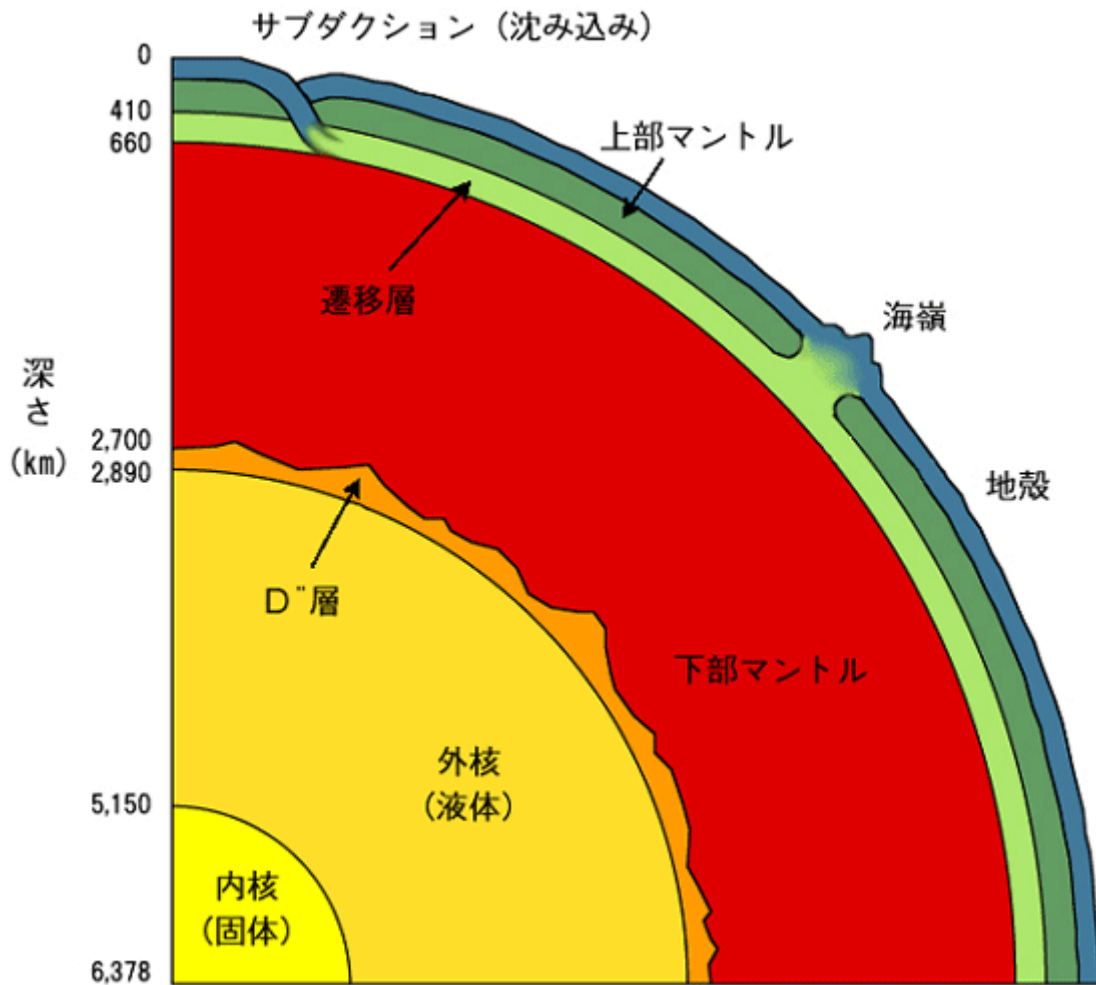


図1 地球の断面図

出典サイト：<http://www.edu.pe.ca/southernkings/compositionch.htm>

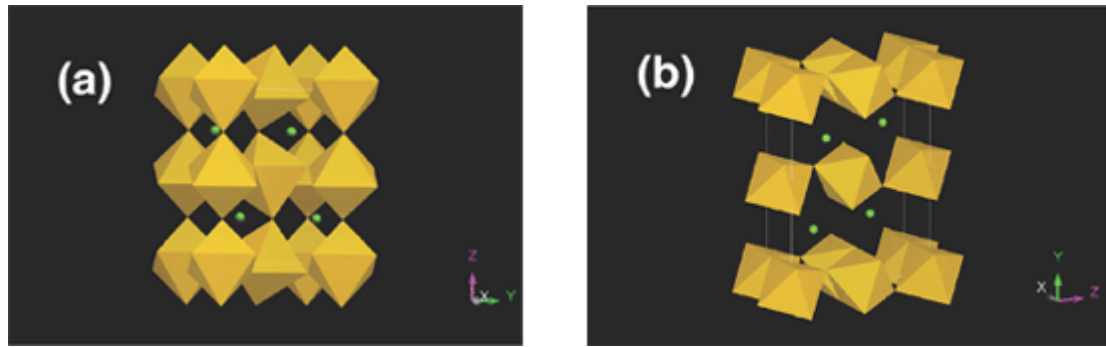


図2 MgSi₃ ペロブスカイト(a)と MgSiO₃ ポストペロブスカイト(b) :

緑色の球は Mg²⁺イオンを表し、八面体は中心にシリコン原子、各頂点に酸素原子があることを示す。

表. 比較表

	観測	D ^g 層がポストペロブスカイトの場合	D ^g 層がペロブスカイトの場合
D ^g 層直上での地震波速度不連続性	~3%	4~7%	単純なモデルでは説明不可能
S波偏向異方性	1~3%	4%	- 4%
バルク音速とS波速度の相関	負	負	単純なモデルでは説明不可能