

【理工系(数物系科学)】

研究課題名	Fe系物質の超高压下での挙動と最下部マントル～内核の物質科学
研究代表者名	いりふね てつお 入 松 徹 男 (愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・教授)

ヒメダイヤモンドと第一原理計算で探る地球の中心物質

地球は薄い地殻とその下のマントル、また中心部を占める核の3つの層からできています。近年の地球科学の研究により、地殻とマントル上部については、どのような成分を持つどんな物質からできているかが明らかになってきました。しかし、マントル下部やマントル-核境界、また内核の物質については多くの謎が残されています。地球深部の物質を探るためには、地震波の伝播を利用して地震波（弾性波）速度の変化や密度の変化を観測により調べます。しかし、そのような観測データに適合する物質が何かを明らかにするためには、地球深部に対応する温度圧力条件下での実験的・理論的研究が重要になります。

地球はその中心部で訳360万気圧、温度5000度という超高压・高温の世界です。このような超高压高温状態を、実験室の中で持続的に発生させ、物質の構造や特性を明らかにすることはこれまで困難でした。本研究では独自に生み出した世界で最も硬い超高硬度ナノ多結晶ダイヤモンド（ヒメダイヤモンド）を用いて、これまでの静的超高压圧力発生限界を打破する新しい超高压発生の技術開発に挑戦します。また従来から研究をすすめてきた、焼結ダイヤモンドを利用した超高压発生技術の更なる改良をおこない、より高い圧力・温度条件下での精密な実験を可能にすることを目指します。一方、当面どうしても実験的に実現が困難な圧力温度条件に対しては、複雑系物質に対する独自の第一原理シミュレーションに基づき、現実的な地球物質の構造や特性を予測します。

地球のマントル下部はMg, Fe, Ca, Al, Si, Oなどを主成分とする鉱物からできています。最近このように重要な元素の1つであるFeの電子状態が、地球の下部マントル領域で大きく変化することが明らかになってきました。また核の主成分は金属Feであることがわかっていますが、核に対応する高温高压下での結晶構造や融点の変化は良くわかっていません。本研究ではマントル下部から内核に至る地球中心部の温度圧力条件下でのこのようなFe系物質の挙動を、上記の独創的超高压実験および数値シミュレーション技術を駆使してより詳細・定量的に明らかにすることを目指します。本研究の進展により、下部マントルの化学組成と初期地球の分化過程、マントル-核境界領域における地震波速度・密度異常構造の起源、外核-内核境界の温度と核中に存在する軽元素、内核Feの結晶構造と地震波速度異方性の起源などの解明が大きく進展するものと期待されます。

【キーワード】

ヒメダイヤモンド：グラファイトの高温高压下での直接変換により合成される、ナノサイズのダイヤモンドからなり、単結晶以上の硬度を有する超高硬度多結晶体。
第一原理計算：量子力学の基本に基づき、実験によるパラメーターや制約を導入せずに物質の電子状態などを計算する手法。

【部会における所見】

申請者らの世界に先駆けた高温高压下でのマントル物質その場観察実験の成果は、国際的にも高い評価を受けている。本課題の重要な部分である超高压・高温実験のための超硬材料としてのヒメダイヤモンドは、高圧力研究でのエポックメイキング的存在の可能性を秘めている。現時点では未だ性能評価段階ではと懸念する意見もあったが、電子物性に関しての理論家も加えた全体の研究計画については、特別推進研究として推進することが適当と判断した。