

令和4年1月3日

若手研究者海外挑戦プログラム報告書

独立行政法人日本学術振興会 理事長 殿

受付番号 202080258

氏名 萩原、雄貴

(氏名は必ず自署すること)

若手研究者海外挑戦プログラムによる派遣を終了しましたので、下記のとおり報告いたします。
なお、下記記載の内容については相違ありません。

記

1 派遣先: 都市名 ロンバルディア州パヴィア県 (国名 イタリア共和国)

2 研究課題名 (和文) : 流体包有物を用いた地質圧力計の開発：鉱物の状態方程式と有限要素法によるアプローチ

3 派遣期間 : 令和3年9月20日 ~ 令和3年12月19日 (91日間)

4 受入機関名・部局名 : University of Pavia, Department of Earth and Environmental Sciences

5 派遣先で従事した研究内容と研究状況 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

マントル捕獲岩が経験した温度圧力履歴、特に圧力の決定は、最上部マントルの物理化学的な層構造を解明するために不可欠である。しかし、スピネルレルゾライトには大きな体積変化を伴う固溶体鉱物間の連続的な反応がないため、鉱物組成に基づく従来の地質圧力計の適用が困難であった。そこで派遣先では、岩石の平衡温度圧力条件を決定するための補完的な手法である elastic geobarometry (Angel et al., 2014; Angel et al., 2017)をマントル捕獲岩中のカンラン石中のスピネル包有物に適用した。

Elastic geobarometryを利用するためには、ホスト鉱物と包有物の信頼性の高い状態方程式 (EoS)が不可欠である。かんらん石のEoSはAngel et al. (2018)により良く制約されているが、スピネルの端成分であるMgAl₂O₄のEoSに関する詳細な研究は乏しい。また、先行研究で得られたMgAl₂O₄の体積(V)と温度(T)の関係には大きなばらつきがある。そこで、先ず、体積(V)、断熱体積弾性率(K_s)、等圧熱容量(C_p)の温度・圧力依存性を調べた先行研究を網羅的にレビューし、 K_s 、 C_p 、 VP データとの一貫性が最も高いVTデータセットを決定するためにEoSfit7cを用いて C_p -EoSによるフィッティングを行った (Milani et al., 2017)。その結果、Suzuki and Kumazawa (1980)のVTデータセットが他の物性値と調和的であることが明らかになった。得られたデータセットを利用して、3次のBirch-Murnaghan EoSとMie-Grüneisen-Debye EoSを組み合わせたthermal pressure EoSによりフィッティングを行いEoSパラメータを決定した。

次に、ラマン分光法を用いて、極東ロシアのEnnokentievのマントル捕獲岩中のカンラン石にトラップされたスピネル包有物の残留圧力 (P_{inc})の推定を試みた。その結果、スピネル包有物のピークは同じ捕獲岩中の歪みの無いスピネルのピークよりも常に高い波数にシフトしていたが、 P_{inc} の定量分析に十分な精度で測定できたのはE_g (~410 cm⁻¹) と A_{1g} (~750 cm⁻¹) ピークのみであった。Chopelas and Hofmeister (1991)が報告したMgAl₂O₄のピーク位置と圧力の関係から P_{inc} を推定したところ、包有物の中

心から得られたデータは A_{1g} と E_g の両ピークから正の P_{inc} が得られ、誤差の範囲で一致した。調査したすべての包有物から正の P_{inc} が得られたことから、本研究で制約したスピネルの EoS と測定した P_{inc} を組み合わせることで、カンラン石にトラップされたスピネル包有物は含スピネルかんらん岩の由来深度を推定する新しい方法として期待できる。

6 研究成果発表等の見通し及び今後の研究計画の方向性 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

今回の滞在で得られた研究結果は、2022年4月に開催される欧洲地球科学連合大会(EGU)において”Evaluation of elastic geobarometry of spinel inclusions in olivine and its application to mantle xenoliths”という演題で発表を予定している。共同研究の成果は最終的に複数の論文に分割して国際誌に投稿する方針で派遣先の教員と話し合いを進めており、恐らく最初に投稿することになるであろう” $MgAl_2O_4$ の状態方程式の制約とそのelastic geobarometryへの応用”に関する原稿の執筆を既に開始している。それ以外の成果に関しては、今後分析を追加する必要があるため、具体的な投稿予定などは未定である。

今後は、”カンラン石に捕獲されたスピネル包有物の残留応力を用いた由来深度推定法の開発”と”流体包有物地質圧力計、鉱物包有物地質圧力計、鉱物の化学組成を用いた地質圧力計、の3つの地質圧力計の比較”を目的に研究を継続する。具体的には、1) ラマン分光法による包有物の残留応力の測定、2) EPMAによる包有物の主成分化学組成の測定、3) 捕獲岩中の各鉱物にトラップされた流体包有物の密度測定、4) density functional theoryによるスピネルのラマンスペクトルのピーク位置の歪み依存性の解明、5) X-ray Diffractionによるスピネル包有物の歪みと inversion degree の測定、を行う予定である。上記1)~3)に関しては、分析のためラマン分光分析装置とEPMAが必要であるが、現所属先若しくは次年度の所属先で遂行可能な分析であるため研究に支障なく継続して分析を行っていく予定である。4)に関しては、シミュレーションを行うためにCRYSTAL17というソフトウェアを用いる予定だが、派遣先からソフトウェアへのアクセス権を貸与してもらい遠隔で計算を行う予定である。また、共同研究者である派遣先のパヴィア大学の指導教員に加えDFTシミュレーションの専門家であるミラノビコッカ大学のPostdoctoral Fellowの方とテレビ会議やメールでの議論を継続する予定である。5)に関しては、包有物のX-ray Diffraction分析には特殊な装置が必要であるため、再度パヴィア大学へ訪問し分析を行う必要がある。訪問の日程に関しては既にある程度打ち合わせを行っており、来年度の5月頃を予定している。また、次の訪問前にテスト分析を行ってもらうため派遣先に試料の一部を預けており、次の滞在ではスムーズに分析を開始できると考えている。

7. 本プログラムに採用されたことで得られたこと (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

派遣先では、EoSパラメータの決定や物性データのハンドリング、包有物の残留圧力の計算など、本研究課題を遂行する上で重要な役割を果たすソフトウェア (EoSfit7c, EoSfit GUI, EoScalculator) の使い方を、それらの開発者であるRoss Angel氏に直接ご指導頂いた。そのソフトウェアは通常固相を取り扱うが、流体を含む系へ拡張するための手法を学んだり、β版のソフトウェアを利用し最新の計算機能を試すことができたり、開発者本人から手法を教わることで効率よく新しい計算技術を習得できた。また、自身は渡航前に鉱物物理学に関する知識はほとんど持っていないかったが、滞在中にRoss Angel氏に状態方程式の理論とその計算に係るソフトウェアに関する計15回のworkshopを開いて頂き、講義・演習・課題・添削・議論を通して僅か3カ月でその分野の論文を批判的に読む力や、最終的には論文を書く能力を身に着けることができた。研究以外の面において、派遣先の指導教員のMatteo Alvaro氏や同僚には、コロナ禍ではあったがランチ、アペリティーボ、ホームパーティー等に何度も誘って頂き、イタリアの多様な食文化を学んだり、同僚との会話を楽しんだりすることができ、イタリアの滞在を楽しみつつ研究ネットワークの構築にも繋がった。