



## Mr. Kei Itoh

Master Student (M2)

Geodynamics Research Center

2021.10.28 (Fri.) 16:30 ~

## Venue: Zoom

A link will be sent @grc-all within 30 minutes before the beginning of the seminar.

### Keywords:

1. Sulfur
2. Core-mantle interaction
3. First-principles calculation

## Earth's core containing sulfur predicted by ab initio iron-silicate partitioning simulations

核—マントル相互作用の第一原理的予測による硫黄に富んだ地球核

地球の核は純鉄に比べて5-10%密度が低く、この密度欠損はH, C, O, Si, Sなどの元素が含まれることに起因すると予測されている (例えば Birch, 1952)。中でも硫黄は、マルチアンビルやピストンシリンダーを用いた分配実験 (~25 GPa) (例えば Li and Agee, 2001; Rose-Weston et al., 2009)の結果等から、密度欠損を説明する可能性の高い元素の一つである。しかし近年、ダイヤモンドアンビルセルを用いた高圧下 (45~90 GPa) での分配実験 (Suer et al., 2017)が硫黄の低い親鉄性を報告した。これにより硫黄は地球核の主要軽元素ではないことが示唆されている。硫黄の分配実験の結果にはこのように大きな隔りがあり、理論的な検証が望まれる状況にある。

本研究では、熱力学積分法 (Kirkwood, 1935; Meijer et al., 1990)に基づく第一原理自由エネルギーシミュレーション (Taniuchi & Tsuchiya, 2018; Xiong et al., 2018, 2021)を実施し、高温高圧下 (4000~5000 K, 20~135 GPa)における液体鉄-ケイ酸塩メルト間の硫黄分配挙動の予測を行った。液体状態は密度汎関数法 (Hohenberg & Kohn, 1964; Kohn & Sham, 1965)に基づく第一原理分子動力学法により再現した。本計算は、硫黄の親鉄性の度合い (分配係数D)に対して正の圧力依存性を、負の温度依存性を示した。鉄液体中の酸素濃度を上げると親鉄性は低くなった。ケイ酸塩中の鉄量を増減させても親鉄性はあまり変化しなかった。結果をまとめると、硫黄は4000~5000 K, 20~135 GPaにおいて鉄液体へ100~10000倍多く分配される。これはマルチアンビルやピストンシリンダーの実験結果と比較的整合し、地球核に硫黄が多く含まれることを支持する結果である。

この結果から圧力や温度の関係に対して硫黄分配のモデリングを行った。加えて本研究の硫黄分配モデルから原始地球におけるマントルと核の硫黄含有量を見積もり、核に硫黄が存在する可能性について考察している。これにより地球がペブル成長する場合や核の酸素量が10 mol%を超える場合、マントル硫黄量の見積もりが現実のマントル硫黄量 (100~400 ppm) (Lorand et al., 2013)を超過することを示唆した。