



Mr. Kazushi Kitaguchi
Master Student (M1)
Geodynamics Research Center

2021.11.04 (Fri.) 16:30 ~

Venue: Zoom

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

Keywords:

1. Magma Ocean
2. Charge Disproportionation
3. First-principles calculation

第一原理計算から予測される含鉄ケイ酸塩メルトにおける鉄の電荷不均化反応

原始地球において、微惑星の衝突によって大規模な融解が発生し、マグマオーシャン(MO)が形成されたとされている(Kleine, 2011)。核とマントルの分離に伴う地球の化学進化がこのMO中で進んだ。しかし、親鉄元素から予測される30~40 GPaの核形成条件(Wood +, 2006)とBasal MOモデルから予測される135 GPaの核-マントル境界条件(Labrosse +, 2007)では、想定される金属-ケイ酸塩の平衡圧力条件は大きく異なっている。

MO内部における鉄液滴形成メカニズムとしては、衝突した微惑星の核を起源とする説が主なものであるが、電荷不均化反応($3\text{Fe}^{2+} \rightleftharpoons 2\text{Fe}^{3+} + \text{Fe}^0$) (Frost +, 2005)が、含鉄ケイ酸塩鉱物中のみならずケイ酸塩メルト中でも生じるという可能性も指摘されている(Wade and Wood, 2006)。最近になり、実際にメルト中での電荷不均化反応が高圧実験により報告された(Armstrong +, 2020)。一方、第一原理計算では、含鉄ケイ酸塩メルトの熱力学モデルから鉄の酸化還元度が調査された例があるが(Deng +, 2020)、電荷不均化反応の安定性について直接計算した例は今のところ無い。

本研究では、この電荷不均化反応が含鉄ケイ酸塩メルトにおいても起こり得るか、熱力学積分法に基づく第一原理自由エネルギー計算(Taniuchi and Tsuchiya, 2018)を用いて予測を行った。計算の結果、40 GPa, 5000 K、60 GPa, 5000 K、135 GPa, 5000 Kでは負の反応自由エネルギー(ΔG)が得られ、2価鉄の安定性が保持された。これに対し、20 GPa, 4000 K、40 GPa, 4000 Kにおいては電荷不均化反応の安定化が確認された。

20及び40 GPaで金属鉄が生成されやすいという結果は、親鉄元素から予測された核形成条件である30~40 GPaという圧力と概ね一致しており、この電荷不均化反応がMOでの鉄核分離のメカニズムを説明する一端を担う可能性が示唆される。また、 ΔG は圧力による影響よりも温度による影響を大きく受けることが分かった。