

Mr. Kei Itoh

Master Student (M1)

Geodynamics Research Center

2021.11.26 (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

## Effects of the core mantle composition and pressure changes on the sulfur partitioning in the deep Earth

地球深部の硫黄分配に対する核マントル組成や圧力効果の影響

地球の核は純鉄に比べて5~10%密度が小さいことが知られている。マントル中の硫黄量が宇宙存在度に比べて少ないことや、核形成の際に親鉄的な硫黄が核に取り込まれた可能性が高いことから、硫黄は核の密度欠損を説明する有力候補の一つである。核マントル相互作用を通じて硫黄が核に吸収されたか否かを判断するためには、高温高圧下における硫黄の親鉄性の理解が重要となる。

これまで行われた硫黄の鉄一ケイ酸塩間分配の実験や理論研究には、研究によって大きな相違がみられる。例えば、マルチアンビル(MA)等による比較的低圧の実験(例えば、Rose-Weston et al., 2009; 5~25GPa, ~2400K)や理論研究による検証(伊藤卒論, 2021; 135GPa, 5000K)が報告した硫黄の高い親鉄性に反して、レーザー加熱式ダイアモンドアンビルセル(DAC)を用いた比較的高圧の実験(Suer et al., 2017; ~90GPa, ~4100K)により硫黄の非常に低い親鉄性が報告され、硫黄は地球核の主要軽元素ではないとの指摘がなされた。現在、どちらの傾向がより信頼できるのか論争が生じており硫黄分配に対する更なる検証が必要である。

そこで本研究では、Suer et al. (2017)が行ったDAC実験の環境を再現する組成や反応を仮定しかつ複数の圧力条件を設定した上で、熱力学積分法に基づく自由エネルギーの第一原理シミュレーション (Taniuchi and Tsuchiya, 2018; Xiong et al., 2018, 2020)を実行し、硫黄の液体鉄―ケイ酸塩メルト間分配を行った (温度圧力条件は5000K, 60-135GPa)。

結果として、いずれの反応や条件においてもDAC実験の結果を支持する分配係数LogDを得ることはできなかった。従って本研究は、伊藤卒論(2021)が示した始原物質が硫黄を数%でも含めば硫黄は地球核の主要軽元素の可能性が大きいとする考察をより確かなものとした。

また本研究の結果から、Suer et al. (2017)などが用いた硫黄分配モデルの評価をある程度行えるようになってきたため結果と併せて紹介する。