

地球内部条件での炭酸塩鉱物の安定性

Stability of carbonate minerals in the Earth's interior

小野 重明 [1]

Shigeaki Ono[1]

[1] 海洋研究開発機構

[1] JAMSTEC

近年、地球内部に相当する高温高压条件における炭酸塩鉱物の研究は、大きな転換点を迎えている。なぜならば、最近、目覚ましい発展を遂げている新しい研究手法である第一原理計算を、研究手法に取り入れることにより、次々と新しい高压鉱物が発見されているからである。一方、従来から行われてきている高压実験による研究にも大きな進展が得られ、この二つの手法を効果的に組み合わせることにより、地球深部における炭酸塩鉱物の振る舞いについて、より深い理解ができるようになってきている。具体的には、計算により新たな高压鉱物が見出された場合、実験によって計算結果の信頼性をチェックし、その実験結果を、再び計算にフィードバックするという手法が用いられている。十分な信頼性のある計算結果が得られた後は、実験においては測定が非常に困難である数々の物性値を計算することにより、高温高压条件下でのその新鉱物の振る舞いを予測できる。本研究発表においては、上記のような手法を用いて、近年、我々が精力的に研究を推し進めている炭酸塩鉱物の高压相について報告する。研究対象の炭酸塩鉱物としては、 $MgCO_3$ [1]、 $CaCO_3$ [2]、 $SrCO_3$ [3]、 $BaCO_3$ [4]、 $MnCO_3$ [5] などを取り扱っている。我々のプロジェクトにおいて、おおよそ10相ほどの新高圧鉱物の発見に成功した。これらの新高圧鉱物の結晶構造を比較してみると、二種類の構造に分類できる。一つは従来の炭酸塩鉱物に見られる基本構造である CO_3 が、平面的に並ぶ構造である。もう一つは、これまでの炭酸塩鉱物では見つかっていない CO_4 の四面体を基本とするネットワーク構造である。この構造はケイ酸塩鉱物で普遍的に見られる構造と同じである。構造相転移に伴うこの構造変化は、鉱物の物性に与える影響は非常に大きい。例えば、 CO_3 の平面構造を持つ炭酸塩鉱物は、平面構造に対して垂直な方向からは圧縮されやすく、平行な方向からは圧縮されにくいという異方性を持つ。つまり、いろいろな物性において、大きな異方性を持つことが予測されている。一方、 CO_4 の四面体を持つ高压相では、それらの異方性が劇的に小さくなる。従って、基本構造の相転移により、等方的な物性を持つ鉱物に変化するということである。これらの物性の変化は、計算及び実験の両方の研究で確認された。また、この相転移により、高温高压条件下での炭酸塩鉱物の安定性が増し、 CO_4 の四面体を持つ炭酸塩鉱物の高压相は、地球マントル最下部においても安定に存在しうることが判明した。すなわち、この炭酸塩鉱物は、マントル深部での炭素のホスト相となりうる。このことは、地球内部の炭素循環を理解する上で、きわめて重要であると考えられる。

[1] Oganov et al., *Earth Planet. Sci. Lett.*, 241, 95-103 (2006).[2] Ono et al., *Am. Mineral.*, 92, 1246-1249 (2007).[3] Ono et al., *Phys. Chem. Minerals*, 32, 8-12 (2005).[4] Ono, *Phys. Chem. Minerals*, 34, 215-221 (2007).[5] Ono, *Mineral. Mag.*, 71, 105-111 (2007).