PR0111

第一原理計算による溶融鉄と珪酸塩メルト間の Hf と W の分配と地球の ^{182}W 同位体進化

○鈴木勝彦[1]，土屋卓久[2]
（[1]海洋研究開発機構・海底資源センター，[2]愛媛大学・GRC）

^{182}Hf の半減期は 890 万年と地質学的に短く(Vockenhuber et al., 2004)，^{182}Hf が存在する間に生じた Hf と W の分別によって ^{182}W の同位体変動が生じる。Hf と W はそれぞれ親石元素と親鉄元素であるため，地球コア形成時には，Hf はケイ酸塩メルト相に留まり，W は溶融金属相に分布すると考えられている。その結果，初期マントルは高い μ^{182}W 値（現在の上部マントルの値との乖離（ppm)），金属核は μ^{182}W が低いと考えられている。その後，低い μ^{182}W を持った late veneer によって，初期マントルの W 同位体比は下がり，現在の上部マントルの値になったと考えられている。実際のところ，初期のマントル由来岩であるコマチアイトなどでは，μ^{182}W 値は+10～+20ppm の正の値である（Mei, et al., 2019 など）。一方，ハワイやサモアなど現世の最下部マントルを起源とする海洋島玄武岩は，負の μ^{182}W を示している岩石も報告され（Mundl et al.2017; Rizo et al.2019 など），これらはコア物質が含まれている証拠と考えられている。

マントルの ^{182}W 変動，およびその進化を理解するためには，高圧下での Hf と W の挙動と隕石衝突などの地球外物質の影響に注目する必要がある。μ^{182}W 値の変動は以下の 3 つの主なプロセスに起因する。(1) マントルにおける Hf-W の分別。第一原理計算により bridgmanite では Hf が濃縮されると報告されている。が，下部マントルに沈み込む bridgmanite は Hf が濃縮されるため，同位体組成の結果とは一致しない（Deng and Stixrude, 2021）。(2) コア形成時に Hf-W 分別が起きた。（Mundl et al. 2017; Rizo et al.）(3) μ^{182}W 値の低い地球外物質が間欠的衝突によって地表に降下し，火山岩やダイアミクタイトに取り込まれた。

本研究では，室内実験では困難な高温高圧条件下での珪酸塩メルトと溶融鉄の間の Hf-W の分配を，第一原理自由エネルギー計算を用いて調べた。また，鉄が珪酸塩と混合した場合とその逆の場合に分配係数が変化するかどうかも計算した。その結果，いずれの場合も W は親鉄性を，Hf は親石性を維持することが確認された。W と Hf の分配係数は珪酸塩メルトに Fe を添加しても大きな影響を受けなかったが，Fe に O を混合すると W と Hf の分配係数はそれぞれ減少し，増加した。ただし重要なことは，いずれの場合も，計算条件下では W は親鉄性，Hf は親石性を維持したことであり，(2)のモデルと整合的である。今後，(2)と(3)のモデルを踏まえつつ，μ^{182}W 値の進化を明らかにしていくことが必要である。

Hf and W partitioning between liquid metal and silicate melt calculated by ab initio thermodynamic integration molecular dynamics and the evolution of ^{182}W isotope of the earth.

*Katsuhiko Suzuki[1] and Taku Tuchiya[2] ([1]SRRC, JAMSTEC, [2]GRC, Ehime Univ.)