

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	地球上部マントル中の水素挙動に関する実験的研究
Title(English)	Experimental study on behavior of hydrogen in the Earth ' s upper mantle
著者(和文)	櫻井萌
Author(English)	Moe Sakurai
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第10077号, 授与年月日:2016年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:高橋 栄一,廣瀬 敬,中島 淳一,太田 健二,横山 哲也,鍵 裕之
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第10077号, Conferred date:2016/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	論文要旨
Type(English)	Summary

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻： Department of	地球惑星科学	専攻	申請学位 (専攻分野)： 博士 (理学)
学生氏名： Student's Name	櫻井 萌		指導教員 (主)： 高橋 栄一
			指導教員 (副)： 廣瀬 敬

要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

本論文は「Experimental study on behavior of hydrogen in the Earth's upper mantle」と題し、実験岩石学的・結晶鉱物学的研究をまとめたものである。本論分は、以下に述べる 5 つの章から成っている。

第 1 章「Introduction」では、これまで行われてきた地球マントルを構成する無水鉱物中の水素挙動に関する実験岩石学および結晶鉱物学的研究を概説し、本研究の位置づけについて論じている。無水鉱物中に取り込まれる水は地球マントルの鉱物物性に大きな影響を与え、無水鉱物中の水素挙動を結晶化学的観点から理解することは、地球内部のダイナミクスを理論的に理解するために重要である。

第 2 章「Effects of Al content on water partitioning between orthopyroxene and olivine: Implications for lithosphere–asthenosphere boundary」では、斜方輝石 (以下 Opx) –かんらん石 (以下 Ol) 間の極低含水量下・上部マントル条件下における水の分配 (以下 $D_{(Opx/Ol)}$) について述べている。 $D_{(Opx/Ol)}$ は Opx が Al を固溶しないとき、上部マントル圧力条件下ではほぼ 1 であった。しかし、Opx が Al を固溶したとき、Opx の含水量は非常に増大し、 $D_{(Opx/Ol)}$ は増加した。さらに、この効果は高圧下ほど顕著であることがわかった。その結果、地球上部マントルにおいて、Opx が Al をはきだす圧力において、 $D_{(Opx/Ol)}$ は急速に減少し、Ol が水を保持するようになることがわかった。

第 3 章「Effects of aluminum on changing hydration mechanism of enstatite studied by DFT calculations」では、Opx が Al を固溶したときの含水メカニズムの変化について述べている。密度汎関数理論に基づいた第一原理計算により、IR スペクトルのバンド・強度比を求め、IR スペクトルを再現し、実験結果と比較することで斜方輝石中の水素配置の特定を行った。Opx が Al を固溶しないとき、主要な含水メカニズムは $Si \rightarrow 4H$ 、または $Mg \rightarrow 2H$ の置換であった。一方、Opx が Al を固溶したとき、主要な含水メカニズムは陽イオン ($Si \cdot Mg$) が Al と H とともに置換される $2Mg \rightarrow Al+H$ 、または $Si \rightarrow A+H \cdot Si \rightarrow 4H$ に変化することがわかった。この結果は第 2 章において明らかになった Opx が Al を固溶したときに Opx の含水量が増加することの理論的解釈となる。

第 4 章「In-situ IR high pressure experiment on the upper mantle nominally anhydrous minerals」では、室温・高圧下におけるダイヤモンドアンビルセルを用いた高圧その場 IR 観察から、高圧下におけるフォルステライト (以下 Fo) の水素配置の変化について述べている。実験より、Fo の a 軸に平行な偏光 IR において、4 GPa 以上で OH バンドの高波数側への大きなシフトが観測された。第 3 章同様に Fo の水素位置を DFT を用い考察したところ、Si を 4 つの H で置換した構造において、4 GPa 以上で OH 結合角の大きな変化が生じ、実験と同様 OH バンドの高波数側への大きなシフトが確認できた。

第 5 章「Behavior of hydrogen in the Earth's upper mantle: Implications from crystal chemistry to mantle dynamics」では、本研究結果を振り返り、結果を踏まえ、地球上部マントル中の水素挙動に関し、結晶鉱物学的観点から述べられている。第 2 章で FT-IR により実験から得られた IR スペクトルと、第 3 章で第一原理計算により得られた振動数を直接比較することで、無水鉱物の水素位置を決定する手法を開発した。さらに、第 4 章において含水量の低い無水鉱物のため高圧その場 IR 測定の手法開発を行った。最後に、高圧条件下で得られた IR スペクトルを第 3 章で確立した第一原理的手法と組み合わせ、Fo の水素配置の変化について考察した。この結果、実験的に含水量の変化に伴いかんらん石のすべり面が変化することが知られていたが、この変化は水素配置の変化により説明できることがわかった。最後に、第 3 章で求められた Opx の水素配置を元に、Opx のすべり面に与える水の効果を予想している。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1 copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ (T2R2) にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。
Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

(博士課程)
Doctoral Program

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻 : Department of	地球惑星科学	専攻	申請学位 (専攻分野) : Academic Degree Requested	博士 (理学)	Doctor of ()
学生氏名 : Student's Name	櫻井 萌		指導教員 (主) : Academic Advisor(main)	高橋 栄一	
			指導教員 (副) : Academic Advisor(sub)	廣瀬 敬	

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

In order to understand behavior of hydrogen in the Earth's upper mantle (reviewed in Chapter 1), water partitioning of water between orthopyroxene and olivine have been studied experimentally at pressures of 1.5–6 GPa and a temperature of 1573 K under low-water concentrations similar to the Earth's mantle conditions using Kawai-type multi-anvil and piston-cylinder apparatus (Chapter 2).

DFT (density function theory) calculations of hydrogen substitution in enstatite were carried out and the results were compared with the IR spectra obtained by experiments. These results indicate that hydrogen prefers substitutions along with Al³⁺ and this explains the reason why Al in enstatite enhances the water solubility of Opx (Chapter 3).

To investigate behavior of hydrogen under high pressure conditions, in-situ IR high pressure experimental method was developed using diamond anvil cell that are applicable for upper mantle nominally anhydrous minerals with very small amount of water (100~1000 ppm). Using this technique, polarized IR spectra parallel to crystal axis of synthesized forsterite were obtained under high pressure for the first time. Large shift of some OH bond above 4 GPa and separation of OH band were observed. In addition, I have calculated the electronic state in forsterite using the DFT to explain observed peak shifts during compression. Hydrogen substitution mechanism in Si site can explain observed IR spectra shift by first-principle calculation. (Chapter 4).

Finally, I discussed the behavior of hydrogen in the Earth's upper mantle based on the results in the preceding Chapters. From direct comparison of the vibrational frequencies measured by the FT-IR methods (Chapter 2) and simulated by the first-principles methods (Chapter 3), I developed a method to determine hydrogen positions in nominally anhydrous minerals. Based on determined hydrogen position of forsterite (Chapter 4) together with all experimental and theoretical inferences obtained through preceding chapters, I tried to explain why water changes the slip system of olivine. (Chapter-5).

備考 : 論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意 : 論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).