

平成 25 年度日本鉱物科学会賞第 12 回受賞者

土屋 卓久会員 (愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター)



1972年6月生まれ。1995年大阪大学理学部物理学卒業。2000年大阪大学大学院理学研究科宇宙地球科学専攻博士後期課程修了。2001年日本学術振興会特別研究員PD。2004年ミネソタ大学博士研究員。2005年愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター助教授。2009年愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター教授。2014年東京大学地震研究所客員教授。2014年フランス共和国パリ天文台客員教授。

受賞題目:「第一原理計算による理論高圧鉱物物性学の開拓」

受賞理由

土屋卓久会員は、第一原理シミュレーションを主要な手法として、理論高圧鉱物物性とも称される鉱物科学の新たな分野を開拓してきた。固体物性理論を中心とする高い物理学のバックグラウンドのもと、高度な計算手法の開発とともに、地球惑星深部科学の最先端の問題に正面から取り組み重要な成果をあげている。我が国におけるこの分野の文字通り第一人者であるとともに、国際的にもトップランナーの1人として大きな注目を集めている。主要な業績は以下のとおりである。

1) 高温高圧下での圧力標準物質の状態方程式の確立

高圧下での圧力スケールとして用いられてきたAuの状態方程式において熱圧力の効果を定量的に見積もり、新たな状態方程式を確立した。この状態方程式は国際的にも「Tsuchiya Scale」と称され、高温高圧実験分野の研究における標準的圧力スケールとなっている。また、新たな解析手法の開発に基づき、MgOやPtについても新しい状態方程式を提案した。

2) MgSiO₃ポストブリッジマナイト (ポストペロブスカイト) 構造と物性の予測

世紀の発見とも称されるポストブリッジマナイト相の実験的発見と並行して、その結晶構造モデルおよび弾性的性質、また高温高圧下での安定性を明らかにした。候補者のこの一連の研究を一つの契機に、国内外において地球深部科学分野における第一原理計算の重要性が認識され、この分野のその後の発展において重要な貢献をおこなった。

3) 高温高圧下における鉱物中Feスピン転移の解明

下部マントル領域におけるFeの電子スピン状態変化の温度圧力依存性、またその密度や弾性的性質などに及ぼす影響を予測した。特にフェロペリクレス中のFeスピン転移に関して、実験結果と極めて調和的な結果を得るとともに、MgSiO₃ブリッジマナイトやポストブリッジマナイト中のFeのスピン状態について重要な予測を行った。

4) 多成分系の相転移・物性のシミュレーション

多成分系である現実の地球構成物質の挙動を明らかにするため、取扱いの困難な強い電子相関を有するFe-O系や、Alなどを含む成分の固溶効果のシミュレーション技術を開発し、地震学的観測データと対比することにより、下部マントルの化学組成や沈み込むプレート関連物質の挙動に対して理論的制約を行った。

5) 中心核のFeの物性と構造予測

内核に対応する圧力下での金属Feの結晶構造の推定を行い、実験結果と調和的なhcp構造が安定であることを示した。一方で、内核に対応する5000度程度の高温下では、Feの乱層構造が安定である可能性を指摘した。また外核に対応する温度圧力条件下で液体Fe及びFe+軽元素合金の状態方程式、弾性特性を計算し、外核に含まれる軽元素の候補や量の制約を進めている。この領域での定量的実験は現状では困難であり、今後の技術開発に基づく実験的検証が期待される。

6) 超々高圧下での鉱物相転移とスーパーアースの内部構造予測
地球内部の圧力をはるかに越える、テラパスカル領域でのシミュレーションに基づき、SiO₂の新しい高圧相を発見し、そのスーパーアース内部での存在可能性を指摘した。また、同じ構造がTiO₂においてはより低い圧力で実現することを予測し、実験分野の研究者との共同研究によりこのことが証明された。本研究は理論と実験のコラボレーションによる成果の見事な例として、大きな注目を集めた。

7) 高圧相の熱伝導度の見積もりとマントル-核境界の温度構造の制約

第一原理シミュレーションを熱伝導度などの輸送量の計算に応用する技術開発を行い、実験的には困難な、最下部マントル領域におけるブリッジマナイトやポストブリッジマナイトの熱伝導度を予測した。これらの計算結果は低圧下での実験値をよく再現し、実験に匹敵する精度が得られていると考えられている。この結果に基づき、最下部マントルにおける熱流量が、核からのそれに比べて予想以上に小さいという重要な問題が提示された。

以上の研究成果はProc. Natl. Acad. Sci., Phys. Rev. Lett., J. Geophys. Res.などインパクトファクターの高い雑誌に、多くの論文として公表されている。この結果、ISI-Thomsonの「New Hot Paper」やAmerican Mineralogist誌の「Notable Article」に選ばれている。また、「日本高圧力学会奨励賞」、「日本粘土学会論文賞」、「文部科学大臣表彰若手科学者賞」などを受賞するとともに、2011年には四国では初めて「日本学術振興会賞」を受賞している。

以上のように、候補者は新たな第一原理計算技術の開発とその応用による、理論高圧鉱物物性の開拓において顕著な業績をあげてきた。また、2013年からは我が国を代表して、鉱物科学分野の国際誌Phys. Chem. Mineralsの編集委員も務めており、この分野の発展において国際的にも重要な役割を果たしている。候補者のこのような鉱物科学分野における多大な業績と貢献は、日本鉱物科学会学会賞受賞候補者としてふさわしいと判断される。

主要論文

1. T. Tsuchiya (2003) First-principles prediction of the P-V-T equation of state of gold and the 660-km discontinuity in Earth's mantle. J. Geophys. Res., 108, 2462.
2. T. Tsuchiya, R. C. Aracás, and J. Tsuchiya (2004) First principles determination of the phase boundaries of high-pressure polymorphs of silica. Geophys. Res. Lett., 31, L11610.
3. T. Tsuchiya, J. Tsuchiya, K. Umemoto, and R.M. Wentzcovitch (2004) Phase transition in MgSiO₃ perovskite in the Earth's lower mantle. Earth Planet. Sci. Lett., 224, 241-248.
4. T. Tsuchiya, J. Tsuchiya, K. Umemoto, and R.M. Wentzcovitch (2004) Elasticity of post-perovskite MgSiO₃. Geophys. Res. Lett., 31, L14603.
5. T. Tsuchiya, R.M. Wentzcovitch, C.R.S. da Silva, and S. de Gironcoli (2006) Spin transition in magnesiowüstite in Earth's lower mantle. Phys. Rev. Lett., 96, 198501.
6. J. Tsuchiya and T. Tsuchiya (2008) Post-perovskite phase equilibria in the MgSiO₃-Al₂O₃ system. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 105, 19160-19164.
7. K. Kawai and T. Tsuchiya (2009) Temperature profile in the lowermost mantle from seismological and mineral physics joint modeling. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 106, 22119-22123.
8. T. Tsuchiya and J. Tsuchiya (2011) Prediction of a hexagonal SiO₂ phase affecting stabilities of MgSiO₃ and CaSiO₃ at multimegabar pressures. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 108, 1252-1255.
9. H. Dekura, T. Tsuchiya, and J. Tsuchiya (2013) Ab initio lattice thermal conductivity of MgSiO₃ perovskite as found in Earth's lower mantle. Phys. Rev. Lett., 110, 025904.
10. H. Ichikawa, T. Tsuchiya, and Y. Tange (2014) The P-V-T equation of state and thermodynamic properties of liquid iron. J. Geophys. Res., 119, 240-252.