

FeOの高温高压相

High pressure and high temperature phase of FeO

佐多 永吉[1]

Nagayoshi SATA[1]

[1] 東大・物性研

[1] ISSP

地震学的な観測と高压実験との比較から、地球の外核の密度は純鉄と比較しておよそ10%軽く、鉄以外の軽元素を含むと考えられている。(例えば Birch 1963)酸素は、太陽系存在度も大きく、軽元素の候補の一つである。(例えば Ringwood 1977)しかしながら、常圧では酸素の溶融鉄に対する溶解度は少ないので高压下での溶解度の変化を調べるのが重要である。それに加えて、このような性質は溶解鉄と酸化物/珪酸塩が接していると考えられているコア-マントル境界での物質の反応にも大きな影響を与える。

FeOの高压相は金属の性質を持ち、酸素の溶融鉄への溶解度も大きくなると予想されている。高压相の構造は外熱式ダイヤモンドアンビルセル(DAC)を使った実験で観察されており(Fei and Mao 1994)、その構造をB8構造(NiAs構造)で説明している。しかし Martin et al. (1998)は同じX線回折パターンを通常のB8構造と逆B8構造を積み重ねた構造として説明している。また、計算機実験ではFeOの高压相は通常のB8構造よりも逆B8構造が安定であるという結果が得られていること(例えば Fang et al. 1999)や、通常のB8構造ならば金属であるが、逆B8構造であれば絶縁体であるとも予測されている(Mazin et al. 1998)ことから、より明確な観察が求められている。

本研究ではレーザー加熱 DAC を用いて、Fe_{0.910}の高温高压相の構造を調べる実験を行った。角度分散法を用いたX線回折実験はAdvanced Photon SourceにあるGeoSoilEnviroCARS beamline (13-ID-D)で行った(Shen et al. 2001)。試料と断熱材をより厚く保つためにステンレスで保持したボロンガasketを用いた。1500±150Kで等温圧縮していくと、137±5GPaにおいてB1構造(岩塩構造)からB8構造(NiAs構造)に転移した。また、123±6GPaでB8構造からB1構造に逆転移した。

高压相が通常のB8構造か逆B8構造かを調べるために、137GPa、1500Kで得られたパターンに対して、GSAS+EXPGUIプログラムを用いた解析を行った。図に観測データと通常のB8構造を仮定してフィッティングした結果を示す。このときバックグラウンドを除いた残差(Rwp)は0.0277であった。逆B8構造を仮定した場合、Rwpは2倍以上(0.0651)となった。このことは観察された高压相の構造が通常のB8構造であることを示唆している。

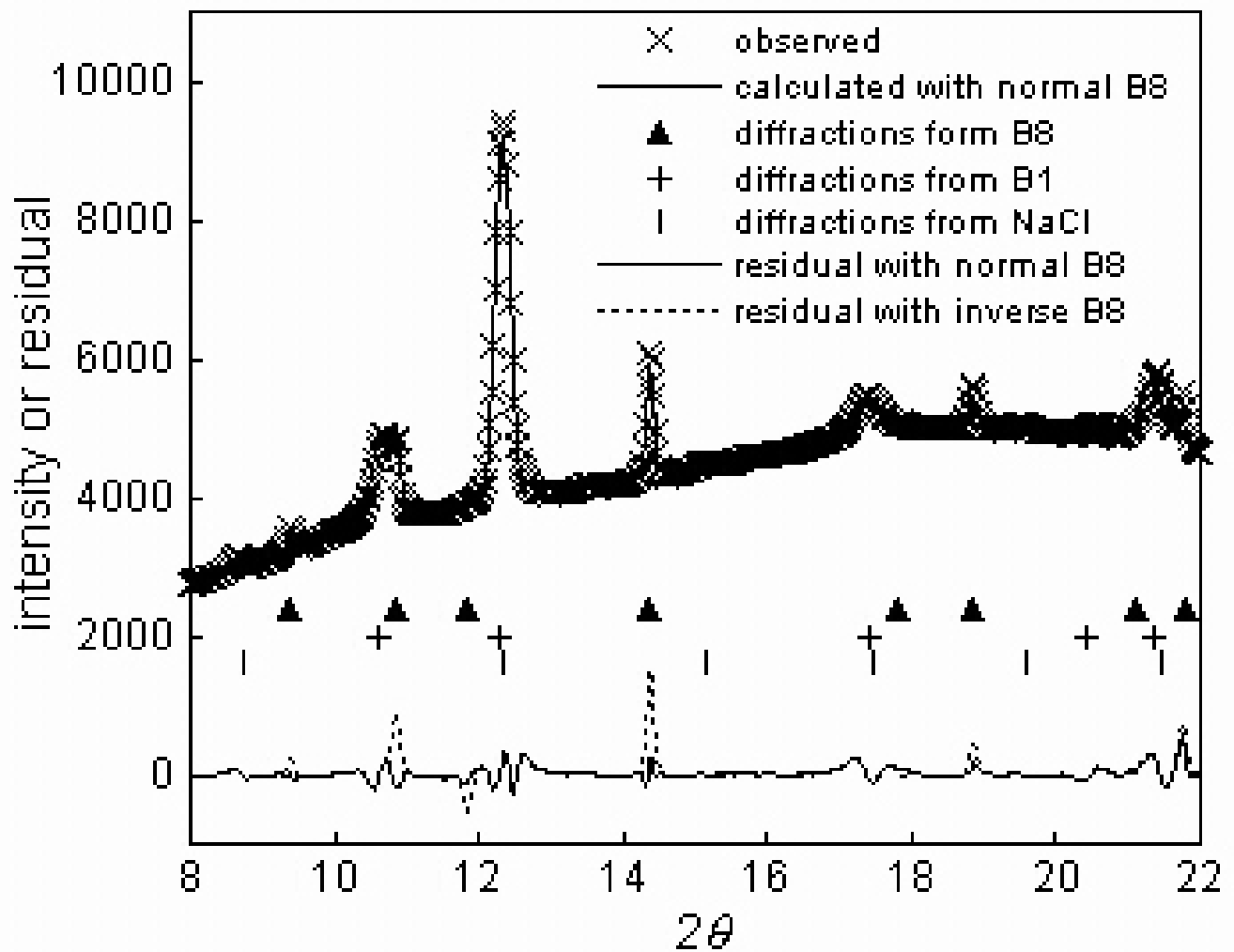
衝撃圧縮実験(例えば Jeanloz and Ahrens 1980)では、70GPaから100GPaにかけて密度の不連続が観測されている。この不連続がB1-B8構造相転移に対応するという解釈がある(例えば Fei and Mao 1994)。しかしながら、本研究で観察された転移圧は40GPa以上の差があり、この差を圧力または温度の観測誤差で説明するのは難しい。したがって、本研究の結果はこの解釈を指示しない。

B1-B8境界の温度、組成依存性に関する実験を現在行っているため、これらの結果も合わせて報告する予定である。

本研究はGuoyin Shen博士、Mark L. Rivers博士、Stephen R. Sutton博士 (Consortium for Advanced Radiation Sources, University of Chicago)の協力の下に行われた。

References:

F. Birch, *J. Geophys. Res.*, vol. 69, pp. 4377-4388, 1964.A. E. Ringwood, *Geochem. J.*, vol. 11, pp. 111-135, 1977.Y. Fei and H.-k. Mao, *Science*, vol. 266, pp. 1678-1680, 1994.I. I. Mazin, Y. Fei, R. Downs, and R. Cohen, *Am. Mineral.*, vol. 83, pp. 451-457, 1998.Z. Fang, I. V. Solovyev, H. Sawada, and K. Terakura, *Phys. Rev. B*, vol. 59, pp. 762-774, 1999.G. Shen, M. L. Rivers, Y. Wang, and S. R. Sutton, *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 72, pp. 1273-1282, 2001.R. Jeanloz and T. J. Ahrens, *J. R. astr. Soc.*, vol. 62, pp. 505-528, 1980.



The integrated 1D pattern ($\lambda = 0.4066 \text{ \AA}$) from x-ray diffraction for Fe_{0.91}O at 137 GPa and 1500 K. The GSAS and EXPGUI were used for fitting. If the inverse B8 phase is assumed instead of the normal B8 phase, the residual is larger at every diffraction lines of the B8 phase.