

高温高压下における金と MgO 圧力スケールの比較

Comparison between the Au and MgO pressure scales at high temperature and high pressure

松井 正典[1]

Masanori Matsui[1]

[1] 姫工大・理

[1] Fac. of Sci., Himeji Inst. of Tech.

Anderson ら(1989)による金の温度 - 圧力 - 体積状態方程式(EOS)は、高温における圧力スケールとして最近良く用いられている。Anderson らは金の EOS を、550K 以下の低温における金の弾性及び熱力学データの実測値に基づいて求めた。別に、Jamieson ら(1982)は、金の衝撃圧縮データ(高温高压)に基づいて、金の EOS を求めている。Anderson ら(1989)と Jamieson ら(1982)によるこれら 2 つの圧力スケールの差は、1500K、25GPa では 2.5GPa にも達するので、注意が必要である。

金に代わる圧力スケールの確立を目指して、Matsui ら(2000)は最近、分子動力学 (MD)法を用いた計算機シミュレーションにより、経験的ポテンシャルモデルに基づいて、MgO についての高精度な高温高压 EOS を求めた。一方、Inbar and Cohen(1995)は、非経験的ポテンシャルモデルを用いた MD シミュレーションにより、MgO の高温高压 EOS を求めている。我々はまず、これら 2 種の MgO 圧力スケールを詳細に比較した。その結果、全く性質の異なるポテンシャルモデルを用いているにも拘わらず、これら 2 種の圧力スケールが広範な温度圧力範囲に渡って、極めて良く一致することを見出した。即ち、温度 300-2000K、圧力 0-30GPa の範囲に渡って、両者の差は 0.5GPa 以内であった。このことは、Matsui ら(2000)による MgO スケールの信頼性を一層高めるものである。

Nishiyama ら(2001)は最近、SPring-8 のマルチアンビル装置を用いてパイロライトの高温高压 X 線その場観察実験を行った。そこでの圧力は、金と MgO の両方の圧力スケールを用いて測定された。今回我々は、Nishiyama ら(2001)のデータを用いて、金と MgO 圧力スケールに基づいた圧力値を詳細に比較した。その結果、1873K、約 20GPa において、金スケールは MgO スケールに比べて 1.4GPa 圧力を低く見積もりすぎることを見出した。