

## 金の電子熱圧力と温度 圧力 体積状態方程式

## Electronic thermal pressure and T-P-V equation of state of gold

# 松井 正典[1], 島 信幸[2]

# Masanori Matsui[1], Nobuyuki Shima[2]

[1] 姫工大・理, [2] 姫工大院・理

[1] Fac. of Sci., Himeji Inst. of Tech., [2] Sci., Himeji Inst.

高温高压実験においては、広範な温度圧力領域にわたる高精度な圧力スケールの使用が不可欠である。高温では、Andersonら(1989)あるいはJamiesonら(1982)による金の圧力スケールが最近良く用いられている。しかしながら、両者とも、電子熱圧力の効果を全く考慮していないので、高温での使用に際しては注意が必要である。特に、Matsuiら(2000)により既に指摘されているように、Andersonら(1989)による金の圧力スケールは、金の550 K以下における実測の弾性データ、熱力学データに基づいて求められているので、電子熱圧力の効果が顕著になる高温では、圧力を系統的に低く見積もることが予想される。金の電子物性は自由電子モデルで良く近似できることが知られている。我々は今回、金の電子熱圧力を、uniform electron gasモデルを用いて、且つ交換相関ポテンシャルについては、random-phase近似(Kanhere et al., 1986)に基づいて、広範な温度圧力範囲について求めたのでその結果を報告する。

計算は $V/V_0 = 1.0, 0.88, 0.76, \text{ and } 0.64$  ( $V_0$ は常温常圧下での体積)のそれぞれについて、室温から20000 Kの範囲で行なった。ここでは、電子熱圧力を、各 $V/V_0$ における300 Kからの差として定義する。

体積一定下での電子熱圧力は、温度 $T$ の2乗にほぼ比例して増加すること、加えて、体積にはあまり依存しないことを見出した。格子の熱振動による熱圧力は、一般に、デバイ温度よりも高い領域(金のデバイ温度は170 K)では、温度の1乗に比例して増加するので、電子熱圧力の寄与は、温度増大と共に、ますます重要になる。 $V/V_0 = 1.0$ のとき、温度 $T = 2000, 5000, 10000$  Kにおける電子熱圧力はそれぞれ0.087, 0.549, 2.065 GPaであることを見出した。故に、温度2000~3000 Kでは、電子熱圧力の寄与は金ではあまり重要ではないとの結果を得たが、これは、Tsuchiya and Kawamura(2002)による金のバンド計算による結果と調和的である。

Irifuneら(1998)は、放射光を用いたマルチアンビル高温高压X線解析実験(SPring-8)により、Andersonら(1989)による金の圧力スケールに基づいてMg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>のポストスピネル相転移圧を決定した。その結果、求められた相転移圧が、地球マントル660 km不連続面での圧力値(23.4 GPa)と比べて約2 GPa低いと報告した。しかしながら、この結論は、Irifuneら(1998)がAndersonら(1989)による金の圧力スケールを使用したことによるもので、もしJamiesonら(1982)による金の圧力スケールを使用した場合は、上記相転移圧力値は、660 km不連続面での圧力値と良く調和的である(Onoら, 2001; Hiroseら, 2001)。Matsui and Nishiyama(2002)は、金とMgOの同時圧力測定に基づいて、圧力20~24 GPa、温度1873 Kにおいて、Andersonら(1989)による金の圧力スケールは、1.4(3) GPa圧力を低く見積もりすぎている可能性があるとして報告した。更に、Shimら(2002)は、金の衝撃圧縮データを、Takemura(2001)による、金の300 Kにおける静水圧縮データと組み合わせることにより、新たな金の圧力スケールを求めたが、それに基づいて、Andersonら(1989)による金の圧力スケールは、660 kmマントル不連続面付近の温度圧力条件下で、圧力を1.0 GPa低く見積もりすぎていると報告した。

今回の計算により、660 kmマントル不連続面付近の温度条件下(1800~1900 K)では、金における熱電子圧力の全熱圧力への寄与は極めて小さい(0.1 GPa以下)ことを見出された。故に、Andersonら(1989)による金の圧力スケールの誤差は、金の熱電子圧力の効果としては説明できず、金の状態方程式導出に際して彼らが使用した、熱物性パラメータ自身の誤差によるものと考えられる。Jamiesonら(1982)、Andersonら(1989)、及びShimら(2002)による金の圧力スケールの詳細な比較について報告する。