

## MgOの弾性波速度測定, 高圧X線回折測定から決定された 'Self-consistent PVT 状態方程式'

### Self-consistent PVT equation of state of MgO

# 河野 義生 [1]; 肥後 祐司 [2]; 井上 徹 [1]; 入船 徹男 [1]  
# Yoshio Kono[1]; Yuji Higo[2]; Toru Inoue[1]; Tetsuo Irifune[1]

[1] 愛媛大・地球深部研; [2] JASRI  
[1] GRC, Ehime Univ.; [2] JASRI

高圧X線その場観察実験において, 圧力決定は最も重要な問題の1つであり, その結果生じる相転移境界圧力や状態方程式の不確定性の原因となっている. 高圧X線その場観察実験では圧力標準物質の格子体積よりPVT状態方程式を用いて圧力が決定される. しかしながら, 過去に数多くの研究者により圧力スケールの提案がなされているものの, 試料圧力の直接的な決定がなされていないため, 完全なPVT状態方程式の決定にはいたっていないのが現状である. 固体の状態方程式は, 0圧力の等温体積弾性率( $KT_0$ )とその圧力依存性( $KT'$ ), そして格子体積の関数であり, すなわち等温体積弾性率( $KT$ )と格子体積を独立的かつ同時に決定することにより, 試料の圧力を直接決定することが可能となる. 近年, 高圧X線回折実験と弾性波速度測定またはブリリアン散乱測定を組み合わせ, 独立的かつ同時に格子体積と断熱体積弾性率を決定することにより, 試料の圧力を決定する方法が報告されている. しかしながら, これまでの研究では室温の圧縮のみを対象としており, 高温の状態方程式を研究した例はない. 本研究では, 高温高圧条件下において, MgO多結晶体の弾性波速度測定, X線回折実験を同時に行い, MgOについて 'Self-consistent PVT 状態方程式' を決定した.

高圧X線回折実験, 弾性波速度測定は, SPring-8のBL04B1ビームラインで行った. 超音波法による試料中の弾性波伝搬時間測定とX線ラディオグラフィーによる試料長の測定を同時に行い, 各温度圧力条件下における弾性波速度を決定した. また同時にMgO試料のX線回折測定より格子体積を決定した.

解析過程において, まず実験により得られた弾性波速度, 密度から断熱体積弾性率( $K_s$ )を決定する.  $K_s$ と $KT$ は, 熱膨張率とグリュナイゼンパラメーターを用いた関数で表すことが可能である. 一方, 有限歪の方程式を用いると,  $KT$ の体積依存性は,  $KT_0$ と $KT'$ により表される. そのため, 上記2式を連立することにより, 実験により決定した $K_s$ と格子体積から $KT_0$ と $KT'$ を決定することが可能である. この方法における一番の問題点は, 熱膨張率とグリュナイゼンパラメーターの体積依存性の表現方法である. 本研究では, グリュナイゼンパラメーターは0圧力の値とその体積依存性 $q$ を用いて表した. 一方, 熱膨張率については $KT$ の温度依存性( $KT/T$ )を用いた表現とデバイモデルからの計算の2種類のテストを行った. デバイモデルからの計算においては,  $q$ がPVT状態方程式の決定に非常に重要な役割を果たす. 本研究では,  $q$ を最適化するために, 0圧力下での熱膨張率(Dubrovinisky & Saxena, 1997)を使用した. 解析の後, 圧力はそれぞれ高温のBirch-Murnaghan状態方程式と300KのBirch-Murnaghan状態方程式+デバイモデルから決定した.

高温のBirch-Murnaghan状態方程式の結果では, 測定範囲付近の温度圧力条件下では一見PVT状態方程式が成り立っているように見られる. しかしながら, Duffy and Ahrens (1993)による衝撃圧縮実験から得られたPVTデータを比較すると, 3000K以下では近い値をとるが, それ以上の高温では明らかに異なる結果を示した. また測定範囲よりもはるかに高い温度もしくは圧力条件下において, 高温における体積が低温よりも小さくなる結果となり, PVT状態方程式が成立していないことが明らかとなった. 一方, 300KのBirch-Murnaghan状態方程式+デバイモデルによるPVT関係では, 高温のBirch-Murnaghan状態方程式で得られたようなPVT関係が破綻する現象は確認されなかった. このPVT状態方程式と衝撃圧縮実験結果を比較すると, 衝撃圧縮実験の最大温度圧力条件(196 GPa, 3663 K)まで非常に良い一致を示し, 本研究で決定した状態方程式が非常に高圧高温条件下においても成立することが明らかとなった.

本研究で決定したPVT状態方程式は, 過去の研究と異なり, どの圧力標準物質にも依存していない. また現在報告されている独立的にPVT関係が決定可能なデータ(0圧力での熱膨張率, 衝撃圧縮実験によるPVTデータ)を満たしており, 現状のデータからは最も信頼の高いMgOのPVT状態方程式であると考えられる. そのため, このPVT状態方程式を用いることにより, 圧力スケールの問題から決着のついていないマントルにおける重要な相転移(例えば, ポストスピネル相転移やポストペロプスカイト相転移など)の圧力が決定されることが期待される.