特集 —— 超高压カスケール研究の最前線 ——

高温における MgO, Au, 及び Pt 圧カスケール

MgO, Au, and Pt Pressure Scales at High Temperatures

松井 正典

Masanori MATSUI

We previously developed MgO, Au, and Pt pressure scales at high temperatures, without relying on any pressure scale. The MgO scale was obtained by MD simulations using semi-empirical potential models derived from the observed data of MgO at 0 GPa, including the volume thermal expansion, the temperature dependence of bulk modulus, and the elastic constants and their temperature and pressure derivatives. On the other hand, the Au and Pt scales were both derived using the Mie-Grüneisen-Debye type treatment based on the combined use of the observed data from shock compression, volume thermal expansion at 0 GPa, and temperature dependence of bulk modulus at 0 GPa from ultrasonic measurements. Based on simultaneous volume measurements of Au and MgO, Pt and MgO, and Au and Pt, previously reported using synchrotron X-ray diffractions at high temperatures and high pressures, it is found that our MgO, Au, and Pt scales are mutually very consistent over wide temperature and pressure ranges.

[equation of state, pressure scale, high temperature, Mie-Grüneisen-Debye treatment]

1. はじめに

近年の高温高压実験技術の著しい進歩により、地球中心核を想定した高温かつ超高压下 (364 GPa) における精度良い実験データが入手できるようになった。目下の大問題は、測定が行われている試料の温度圧力条件をいかに精度良く求めるかにある。たとえば、異なる圧力スケールによって求められた圧力値は、地球マントル遷移層から下部マントル最深部を想定した 20–130 GPa の圧力範囲に亘って、最大 15% もの差がある。実験を行なった際の圧力値の見積もりが、圧力スケールによってこのように大きく異なるという現状は、世界の高压・地球内部研究者が共通に抱える深刻な問題である。

温度一定の条件下で、体積弾性率と体積 (密度) の同時測定実験データに基づいて、使用した圧力スケールに一切よらない、絶対圧力測定が原理的には可能である。しかしながら、実験的な困難から、そのような絶対圧力の測定は、現在室温でのみ圧力 55 GPa までの値が報告されており[1]、高温にお

けるデータについては未知である。このような状況のもと、高温で良く用いられる圧力スケールの MgO, Au, Pt の 3 種について、放射光高温高压 X 線回折による同時体積測定に基づいた圧力スケール間のクロスチェックが行われている[2–5]。

我々は先に MgO について、MD シミュレーションを用いて、3000 K, 100 GPa に至る温度圧力条件下における T - P - V 状態方程式 (EOS) を求めた[6]。更に、Au と Pt のそれぞれについても、実測の衝撃圧縮データ等に基づいた Mie-Grüneisen-Debye モデルを用いて、温度 3000 K, 圧力 150 GPa に至る条件下における T - P - V EOS を求めた[4,7]。これら MgO, Au, Pt の 3 種の圧力スケールは、それぞれ全く独立に、加えて、従来の圧力スケールを一切使用せずに導かれた。故に本研究では、これら 3 種の圧力スケールの性質、高温高压下における同時体積測定データに基づいた互いのクロスチェック、MgO, Au, Pt 圧力スケールについての既存の圧力スケールとの比較などについて詳細に報告する。

2. MgO, Au, Pt 圧力スケールの導出について

2.1 MD シミュレーションによる MgO スケール

我々は先に MD シミュレーションを用いて T - P - V 状態方程式を求めた[6]が、得られた結果は当然用いた原子間ポテンシャルモデルに依存する。それらのポテンシャルモデルは、MgO についての実測の 1) 常温常圧下のモル体積、2) 常圧下 300~3000 K 付近までの熱膨張、3) 常温常圧下の弾性定数 (C_{11} , C_{12} , 及び C_{44}) 及びそれらの温度圧力依存、及び 4) 常圧下、300~1800 K の範囲における体積弾性率の温度依存データの全てを高精度で再現するとの条件を用いて経験的に求められた[6]。得られた 300 K での圧縮曲線は、衝撃圧縮データから求められたもの[8]と誤差 ($K=157(7)$ GPa, $K'=4.3(2)$) の範囲内で一致することが確かめられた。更にその後に行われた、Speziale *et al.* (2001) [9]による 300 K での 52 GPa までの圧縮曲線の実測データとも極めてよく一致することが明らかになった。なお、Speziale *et al.* は圧縮データを求める際に Mao *et al.* (1986) [10]によるルビー圧力スケールを用いている。同ルビースケールについては、近年、超高压下における圧力を低く見積もりすぎているとの議論がある[11,12]が、その差は、50 GPa では約 1 GPa 程度なので、今回の Speziale *et al.* が取り扱った圧力範囲では、あまり影響がない。なお室温でのルビー圧力スケールについては後に議論する。

2.2 Mie-Grüneisen-Debye モデルによる Au 及び Pt 圧力スケール

体積 V , 温度 T における Au, Pt (一般に金属) の圧力 $P(V, T)$ を次式により表した。

$$P(V, T) = P(V, 300 \text{ K}) + P_{\text{th}}(V, T) + P_e(V, T) \quad (1)$$

ここで、 $P(V, 300 \text{ K})$ は室温での P - V 圧縮曲線で、300 K, 0 GPa での体積弾性率 K_{0T} とその圧力微分 K'_{0T} を用いて Vinet の式[13]を用いて表すことができる。

$$P(V, 300 \text{ K}) = 3 \times K_{0T} \times (V/V_0)^{-2/3} \times (1 - (V/V_0)^{1/3}) \times \exp [1.5 \times (K'_{0T} - 1) \times (1 - (V/V_0)^{1/3})] \quad (2)$$

ここで V_0 は 300 K, 0 GPa での V である。(1)式の $P_e(V, T)$ は高温における電子熱圧力で、Tsuchiya

and Kawamura (2002)[14]により求めた。文献[14]によれば、 $P_e(V, T)$ は V に依存せず、 T のみの関数として表すことができる。(1)式の $P_{\text{th}}(V, T)$ は格子熱圧力で、 $(\partial P_{\text{th}}/\partial T)_V = (\gamma/V) C_V$ が一般に金属、非金属を問わず温度に依存しないので (例えば[15]を参照)、以下の式を用いて記述できる。

$$P_{\text{th}}(V, T) = (\partial P/\partial T)_V \times (T - 300) \quad (3)$$

$(\partial P_{\text{th}}/\partial T)_V = (\gamma/V) C_V$ における γ はグルナイゼンパラメータ、 C_V は定積熱容量でデバイモデル (デバイパラメータ Θ を含む) を用いて求めることができる。 γ の体積依存については次式を用いた。

$$\gamma = \gamma_0 (V/V_0)^q \quad (4)$$

ここで γ_0 は 300 K, 0 GPa における γ 値、 q はフィッティングパラメータである。また Θ は(5)式を用いて表される。

$$\Theta = \Theta_0 \exp [(\gamma_0 - \gamma)/q] \quad (5)$$

Table 1. The optimized EOS parameters of (a) Au and (b) Pt, compared with previous works.

(a) Au

Parameters	This study	refs. [12,19]	ref. [17]	ref. [20]
$V_0/\text{\AA}^3$	67.85 (Fix)	67.85	67.85	67.85
K_{0T}/GPa	167 (Fix)	167	167(3)	166.7(5.0)
K'_{0T}	6.0	6.0	5.26 ^a	5.72 ^a
Θ_0/K	170 (Fix)	170	170	170
γ_0	2.97 (Fix)	2.97	2.97(5)	2.95(43)
q	1.6	0.6(3)	1.0(1)	1.7(7)

^a K'_{0T} values for both Refs. [17] and [20] were reestimated here using the Vinet EOS.

(b) Pt

Parameters	This study	refs. [12,19]	ref. [3] ^b
$V_0/\text{\AA}^3$	60.38	60.38(1)	60.38
K_{T0}/GPa	273	277	273.5(10)
K'_{T0}	5.20	5.08(2)	4.86 ^a
Θ_0/K	230	230	230
γ_0	2.70	2.72(3)	2.75(3)
q	1.10	0.5(5)	$0.25 \times (V/V_0)^{15}$

^a K'_{0T} values for Ref. [3] was reestimated here using the Vinet EOS.

^b The parameter q in Ref. [3] was treated to be volume dependent as $q = q_0 \times (V/V_0)^{q_1}$ with $q_0 = 0.25$ and $q_1 = 15$ (10).

Table 2. Observed temperature-volume-pressure data by Matsui *et al.* (2009) [4] and Zha *et al.* (2008) [3], using the MgO scale by Matsui *et al.* (2000) [6] and the Pt scale by Matsui *et al.* (2009) [4].

T (K)	$V/V_0(\text{MgO})$	$V/V_0(\text{Pt})$	$P(\text{MgO})^a$ (GPa)	$P(\text{Pt})^b$ (GPa)	$P(\text{MgO})-P(\text{Pt})$ (GPa)
(a) From Matsui <i>et al.</i> (2009) [4]					
1500	0.9145 (3)	0.95218 (26)	24.46 (9)	24.44	0.02
1600	0.9183 (4)	0.95456 (45)	24.18 (16)	24.37	-0.19
1400	0.9143 (3)	0.95147 (20)	23.86 (8)	23.90	-0.04
1200	0.9112 (4)	0.94843 (25)	23.35 (10)	23.44	-0.09
1000	0.9088 (6)	0.94577 (29)	22.70 (16)	22.88	-0.18
300	0.8999 (5)	0.93717 (21)	21.04 (13)	20.94	0.10
1300	0.8532 (3)	0.90873 (41)	41.03 (11)	41.02	0.01
800	0.8463 (5)	0.90209 (35)	40.29 (18)	40.36	-0.07
900	0.8467 (2)	0.90281 (40)	40.78 (10)	40.78	0.00
1000	0.8476 (6)	0.90395 (27)	41.06 (21)	40.99	0.07
1100	0.8485 (5)	0.90478 (21)	41.37 (17)	41.36	0.01
1200	0.8489 (6)	0.90547 (45)	41.86 (21)	41.80	0.06
(b) From Zha <i>et al.</i> (2008) [3]					
300	0.9778	0.9886	3.8	3.2	0.6
300	0.8588	0.9075	33.4	34.0	-0.6
300	0.8170	0.8776	49.1	49.8	-0.7
300	0.7563	0.8306	79.2	81.2	-2.0
1300	0.9985	0.9999	6.4	7.7	-1.3
1300	0.9208	0.9524	21.7	22.8	-1.1
1300	0.8011	0.8679	61.6	63.1	-1.5
1300	0.7747	0.8512	74.5	73.8	0.7
1500	1.0007	1.0033	7.3	8.4	-1.1
1500	0.9103	0.9442	25.5	27.4	-1.9
1500	0.8019	0.8706	62.6	63.0	-0.4
1500	0.7795	0.8541	73.3	73.5	-0.2
1700	1.0027	1.0042	8.3	9.8	-1.5
1700	0.8525	0.9068	43.9	45.1	-1.2
1700	0.8010	0.8707	64.4	64.6	-0.2
1700	0.7799	0.8544	74.5	74.8	-0.3
1900	1.0016	1.0027	9.8	11.8	-2.0
1900	0.8714	0.9268	39.1	37.7	1.4
1900	0.8043	0.8769	64.2	62.5	1.7
1900	0.7797	0.8545	76.0	76.4	-0.4

^a Estimated based on the MgO pressure scale by Ref. [6].^b Estimated based on the Pt pressure scale by Ref. [4].

Θ_0 は 300 K, 0 GPa における Θ 値である。故に、任意の T , V における系の圧力 $P(V, T)$ は、6 つのパラメータ, V_0 , Θ_0 , K_{0T} , K'_{0T} , γ_0 , q を用いて記述することができる。このような取り扱いを Mie-Grüneisen-Debye モデルと呼ぶが、詳細については、文献[4,9,16-18]などを参照いただきたい。

これら 6 つのパラメータのうち、 V_0 については、

X 線解析により高精度な値が得られている。また Au については Θ_0 , K_{0T} , γ_0 において、Pt については Θ_0 においてほぼ統一的な文献値が存在する。故に、Au については、 K'_{0T} と q の 2 つのパラメータを、Pt については K_{0T} , K'_{0T} , γ_0 , q の 4 つパラメータを、実測のモル体積、熱膨張、体積弾性率の温度依存、衝撃圧縮データを可能な限り再現するとの条件

Table 3. Observed unit cell parameters of MgO and Au at high temperatures and high pressures by Hirose *et al.* (2008) [2], using the MgO scale by Matsui *et al.* (2000) [6] and the Au scale by Matsui (2010) [7].

T (K)	$a(\text{MgO})$ (Å)	$P(\text{MgO})^a$ (GPa)	$a(\text{Au})$ (Å)	$P(\text{Au})^b$ (GPa)	$P(\text{MgO})-P(\text{Au})$ (GPa)
300	4.12964 (58)	10.71	4.00755 (46)	10.31	0.40
300	4.05996 (47)	22.17	3.94795 (44)	21.79	0.38
300	3.98991 (45)	36.37	3.88790 (43)	36.62	-0.25
300	3.89763 (43)	60.05	3.81218 (42)	61.16	-1.11
300	3.89589 (43)	60.56	3.81201 (42)	61.22	-0.66
300	3.81984 (42)	85.42	3.75389 (40)	85.57	-0.15
300	3.76549 (41)	106.67	3.70978 (40)	107.92	-1.25
300	3.73469 (40)	120.20	3.68509 (39)	122.11	-1.91
300	3.69014 (39)	141.85	3.64819 (39)	145.85	-4.00
1600	3.86714 (21)	76.9	3.7930 (20)	76.8	0.1
1610	3.86779 (21)	76.7	3.7946 (9)	76.3	0.4
1720	3.86820 (18)	77.4	3.7951 (11)	76.8	0.6
1960	3.86944 (10)	78.6	3.7957 (11)	78.1	0.5
1340	3.7827	105.2	3.7237	106.8	-1.6
2330	3.7767	114.0	3.7254	112.1	1.9
1780	3.7727	112.1	3.7182	112.4	-0.3
1800	3.7713	112.8	3.7168	113.3	-0.5
1960	3.7723	113.5	3.7186	113.3	0.2
1970	3.7743	112.7	3.7207	112.3	0.4
2070	3.7692	115.4	3.7152	115.8	-0.4
2080	3.7683	115.8	3.7158	115.5	0.3

^a Estimated based on the MgO pressure scale by Ref. [6].^b Estimated based on the Au pressure scale by Ref. [7].

を用いて経験的に求めた[4,7]。得られたパラメータ値を Au, Pt についてそれぞれ Table 1a 及び b に示した。なお Table 1 には比較のためいくつかの文献値も併せて示した。

Table 1 に示されるように、また Matsui *et al.* (2009), Matsui (2010) [4,7]で既に述べたように、300 K での我々の Au 及び Pt の静水圧縮曲線 (Table 1a 及び b の K_{0T} と K'_{0T} を参照) は、修正ルビー圧力スケール[12]に基づく Dewale *et al.* (2004) [12]の圧縮曲線と極めてよく一致した。一方、Mao *et al.* (1986) [10]のルビー圧力スケールに基づく Shim *et al.* (2002) [17], Zha *et al.* (2008) [3]の圧縮曲線は、Au 及び Pt の両方とも、我々の結果に比べて、高圧でより圧縮されやすい (K'_{0T} が小さい; Table 1a 及び b を参照) ことが明らかになった。これらのことは、Mao *et al.* (1986) [10]のルビー圧力スケールが高圧で圧力を低く見積もりすぎているとの最近の議論[11,12]を強く支持するものである。

3. MgO, Au, Pt 圧力スケールの相対比較

3.1 MgO と Pt

Matsui *et al.* (2009) [4]は焼結ダイヤモンドをアンビル材として使用した川井式マルチアンビル高圧装置を用いた放射光高温高圧 X 線回折実験により、圧力 43 GPa, 温度 1600 K までの条件下で、MgO と Pt の同時体積測定を行った。Ref.[4]によるデータを用いて MgO と Pt 圧力スケール (それぞれ文献[6]及び[4]) を比較した結果、Table 2a に示されるように、測定した温度圧力範囲に亘って両圧力スケールは誤差の範囲内で一致した。また、Zha *et al.* (2008) [3]は内熱式ワイヤー加熱ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を使用した放射光高温高圧 X 線回折実験に基づいて、圧力 76 GPa, 温度 1900 K までの条件下で、MgO と Pt の同時体積測定を行っている。文献[3]のデータについても、Table 2b に示されるように、今回の MgO と Pt スケールに基づいた圧力値は良く一致し、両者の差は、測定が

Table 4. Observed unit cell parameters of Pt and Au at high pressures and 300 K by Akahama *et al.* (2002) [5], using the Pt scale by Matsui *et al.* (2009) [4] and the Au scale by Matsui (2010) [7].

$a(\text{Pt})$ (Å)	$P(\text{Pt})^a$ (GPa)	$a(\text{Au})$ (Å)	$P(\text{Au})^b$ (GPa)	$P(\text{Pt})-P(\text{Au})$ (GPa)
3.87125	12.08	3.99642	12.27	-0.19
3.82115	26.42	3.92803	26.35	0.07
3.80338	32.22	3.90423	32.26	-0.04
3.79032	36.75	3.88707	36.89	-0.15
3.77470	42.46	3.86783	42.48	-0.01
3.75805	48.94	3.84716	48.97	-0.03
3.74676	53.57	3.83323	53.65	-0.08
3.73714	57.66	3.82136	57.84	-0.18
3.72832	61.55	3.81192	61.31	0.24
3.69905	75.39	3.77730	75.18	0.21
3.68495	82.59	3.76042	82.63	-0.03
3.66838	91.55	3.74090	91.85	-0.30
3.66175	95.28	3.73271	95.92	-0.64
3.65190	100.99	3.72133	101.79	-0.80
3.64406	105.68	3.71236	106.59	-0.91
3.63738	109.78	3.70384	111.30	-1.53
3.63062	114.02	3.69620	115.65	-1.63
3.62476	117.79	3.68944	119.61	-1.82
3.61804	122.20	3.68252	123.75	-1.55
3.61137	126.68	3.67484	128.48	-1.80
3.60654	130.00	3.66883	132.27	-2.28
2.60103	133.84	3.66267	136.25	-2.41
3.59515	138.03	3.65636	140.41	-2.38

^a Estimated based on the Pt pressure scale by Ref. [4].

^b Estimated based on the Au pressure scale by Ref. [7].

行われた広範な温度圧力範囲 (300~1900 K, 3~80 GPa) に亘って最大 2.0 GPa であった。

3.2 MgO と Au

Hirose *et al.* (2008) [2]はレーザー加熱ダイヤモンドアンビルセルを用いた放射光 X 線回折により、温度 300~2330 K, 圧力 10~146 GPa に亘って、MgO と金の同時体積測定を行った。彼らが報告している MgO と金の体積値、温度条件を、MgO と Au スケール (それぞれ文献[6]及び[7]) に適用して求められた圧力値の比較を Table 3 に示した。Table 3 に示されるように、両者の圧力は、300 K, 140 GPa を超える圧力条件でのデータを除いて、広範な温度圧力条件において極めてよく一致し、両者の差は 1.9 GPa 以内であった。なお、300 K, 142~

146 GPa における 4.0 GPa の差 (Table 3 参照) の一部は、実験データの誤差、あるいは状態方程式のエラーによるものであろう。

3.3 Au と Pt

Akahama *et al.* (2002) [5]は室温下、ダイヤモンドアンビルセルを用いた放射光 X 線回折により、圧力 140 GPa までの Au と Pt の同時体積測定を行っている。彼らのデータを Au と Pt スケール (それぞれ文献[7]及び[4]) に適用した結果、Table 4 に示されるように、両者の圧力誤差は、圧力 140 GPa までの範囲で、最大 2.4 GPa であった。

MgO, Au, Pt 圧力スケール (文献[4,6,7]) はそれぞれ独立に、既存の圧力スケールには一切依存せずに求められた。にもかかわらず、それら 3 スケールが示す圧力値がこのように、広範な温度圧力範囲に亘って互いに良く一致した。このことは、これら 3 スケールの高い信頼性、有用性を示すものであろう。

4. 圧力スケールの比較

4.1 MgO

Fig. 1 は温度 300, 1000, 2000, 3000 K, 圧力 150 GPa までの条件下において、我々の MgO 圧力スケールを他の文献値と比較したものである。Jamieson *et al.* (1982) [21]の状態方程式 (EOS) は 300 K 及び 1000 K とともに奇妙な挙動を示している。Jamieson *et al.* は衝撃圧縮データを用いて、Mie-Grüneisen-Debye モデルに基づいて EOS を求めているが、この奇妙な挙動は、彼らが使用した EOS パラメータ (特に γ_0 と q) が不適切であることによるものである。我々の MgO スケールは、広範な温度圧力範囲にわたって、Dorogokupets & Oganov (2007) [22]による EOS と非常に良く一致しており、両者の差は 300~3000 K, 0~140 GPa の温度圧力範囲にわたって僅か 2 GPa 以内である。Speziale *et al.* (2001) [9]による EOS とともに良く一致しており、同温度圧力範囲で両者の差は 4 GPa 以内である。Tange *et al.* (2009) [18]の EOS との差は 300 K については 140 GPa で 3.4 GPa 程度であるが、温度の上昇とともに両者の差は増大し、3000 K, 140 GPa での差は 7.2 GPa にも達する (Fig. 1 参照)。この差の最も主な原因は、Tange *et al.* が EOS を求める際に Duffy and Ahrens (1993) [23]による高温の衝

Fig. 1. Pressure differences, $\Delta P = P - P(\text{MD})$, between the MD EOS [6] of MgO and the EOSs by Jamieson *et al.* (J) [21], by Speziale *et al.* (S) [9], by Dorogokupets and Oganov (D) [22], and by Tange *et al.* (T) [18], at selected temperatures of (a) 300 K, (b) 1000 K, (c) 2000 K, and (d) 3000 K.

Fig. 2. Pressure differences, $\Delta P = P - P(\text{present})$, between the present EOS [7] of Au and the EOSs by Tsuchiya (T) [24], by Dorogokupets and Oganov (DO) [22], by Takemura and Dewaele (TD) [26], by Heinz and Jeanloz (HJ) [20], by Shim *et al.* (SDK) [17], by Anderson *et al.* (AIY) [25], and by Hirose *et al.* (H) [2], at selected temperatures of (a) 300 K, (b) 1000 K, (c) 2000 K, and (d) 3000 K.

撃圧縮データをフィッティングに含めたのに対して、Matsui *et al.* (2000) [6]は、Duffy and Ahrens [23]によるデータは誤差が大きいとして、ポテンシャルモデルを求める際に同データを採用しなかったことによる。両者の差を検証するべく、より一層の高温における衝撃圧縮データの精密化が急務である。

Mie-Grüneisen-Debye タイプの取り扱いでは、グルナイゼンパラメータにどのような値を用いるかが極めて重要である。Tange *et al.* は最終的に $\gamma_0 = 1.44$ を得たが、この値は γ_0 についての熱力学値、 $\gamma_0 = (\alpha V K_S / C_p)_0 = 1.55$ (α , K_S , C_p はそれぞれ体積熱膨張率、断熱体積弾性率、定圧熱容量) から大き

Fig. 3. Pressure differences, $\Delta P = P - P(\text{present})$, between the present EOS [4] of Pt and the EOSs by Holmes *et al.* (H) [16], by Dorogokupets and Oganov (D) [22], by Dewaele *et al.* (DLM) [12], by Fei *et al.* (F) [19], and by Zha *et al.* (Z) [3], at selected temperatures of (a) 300 K, (b) 1000 K, (c) 2000 K, and (d) 3000 K.

くずれていることを指摘しておきたい。

4.2 Au

Fig. 2 は、温度 300, 1000, 2000, 3000 K、圧力 170 ~ 180 GPa までの条件下において、我々の Au 圧力スケールを他の文献値と比較したものである。Fig. 2 に示されるように、Dorogokupets & Oganov (2007) [22] の EOS は、広範な温度圧力範囲に亘って我々の EOS と極めて良く一致しており、両者の差は 300 ~ 3000 K, 0 ~ 180 GPa に亘って 1 GPa 以内である。Dorogokupets & Oganov [23] の EOS は、既存の種々の熱力学データ、熱弾性データ、衝撃圧縮データ等を用いて、20 以上の EOS パラメータを使用した熱力学解析により求められているのに対して、我々の EOS は、Table 1a に示された 6 つの EOS パラメータで求められていることを指摘しておきたい。Tsuchiya (2003) [24] は第一原理計算と準調和振動近似を組み合わせるにより Au の EOS を求めた。Tsuchiya [24] の EOS も我々の EOS と良く一致しており、両者の差は、Fig. 2 に示された温度圧力範囲に亘って、最大約 3 GPa である。Dorogokupets & Oganov [22], Tsuchiya [24], 我々の EOS の 3 者が、それぞれ全く異なった手法で求められているにも拘らず、このように、広範な温度圧力範囲に亘って、良く一致したことは、これら 3 種の EOS の信頼性を保証するものであろう。

一方、それら 3 種の EOS に比べて、Anderson *et al.* (1989) [25] 及び Shim *et al.* (2002) [17] による EOS は、高压で圧力を低く見積もり過ぎていること、逆に、Hirose *et al.* (2008) [2] の EOS は、高温高压下で圧力を高く見積もり過ぎていることを指摘しておきたい。

4.3 Pt

Fig. 3 に温度 300, 1000, 2000, 3000 K における我々の Pt 圧力スケールと他の文献値との比較を示す。Dewaele *et al.* (2004) [12], Fei *et al.* (2007) [19] の EOS は我々の EOS と非常によく一致しており、両者の差は、300 ~ 3000 K, 0 ~ 180 GPa に亘ってほぼ 2 GPa 以内である (Fig. 3 参照)。この一致の一因は、Fig. 3a に示されるように、300 K における我々の EOS が、先に述べたように修正ルビー圧力スケールに基づく Dewaele *et al.* [12] の圧縮データと極めて良く一致すること、そして Fei *et al.* [19] の EOS が、300 K における Dewaele *et al.* [12] の圧縮データを用いて求められていることによる。Dorogokupets & Oganov (2007) [22] の EOS も我々の EOS と全般的に良く一致しており、300 K における両者の差は、100 GPa で約 2 GPa, 180 GPa で 5 GPa 程度である (Fig. 3)。一方、Holmes *et al.* (1989) [16] の EOS は、高压下で圧力を益々高く見積もり過ぎる傾向がある。Zha *et al.* (2008) [3] によ

る EOS は 300 K において、高圧下で圧力を低く見積もりすぎるが、我々の EOS との差は、温度上昇とともに減少し、逆に 3000 K, 150 GPa では、Zha *et al.* [3] の EOS は我々の EOS に比べて若干高い圧力値を与える。

謝 辞

今回の論文の執筆を薦めてくださった本特集号編集委員会に感謝します。赤浜裕一氏には、Au と Pt についての未発表データを提供いただいた。またこの研究の一部は日本学術振興会科学研究費補助金 No. 19204054 により行われたことを付記する。

参考文献

- [1] C.-S. Zha, H.-K. Mao, R.J. Hemley: *Proc. Natl. Acad. Sci.*, **97**, 13494 (2000).
- [2] K. Hirose, N. Sata, T. Komabayashi, Y. Ohishi: *Phys. Earth Planet. Inter.*, **167**, 149 (2008).
- [3] C.-S. Zha, K. Mibe, W.A. Bassett, O. Tschauner, H.-K. Mao, R.J. Hemley: *J. Appl. Phys.*, **103**, 054908 (2008).
- [4] M. Matsui, E. Ito, T. Katsura, D. Yamazaki, T. Yoshino, A. Yokoyama, K. Funakoshi: *J. Appl. Phys.*, **105**, 013505 (2009).
- [5] Y. Akahama, H. Kawamura, A.K. Singh: *J. Appl. Phys.*, **92**, 5892 (2002).
- [6] M. Matsui, S.C. Parker, M. Leslie: *Am. Mineral.*, **85**, 312 (2000).
- [7] M. Matsui: *J. Phys.: Conf. Ser.*, **215**, 012197 (2010).
- [8] T.S. Duffy, R.J. Hemley, H.-K. Mao: *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 1371 (1995).
- [9] S. Speziale, C.-S. Zha, T.S. Duffy, R.J. Hemley, H.-K. Mao: *J. Geophys. Res.*, **106**, 515 (2001).
- [10] H.K. Mao, J. Xu, P.M. Bell: *J. Geophys. Res.*, **91**, 4673 (1986).
- [11] W. Holzapfel: *J. Appl. Phys.*, **93**, 1813 (2003).
- [12] A. Dewaele, P. Loubeyre, M. Mezouar: *Phys. Rev. B*, **70**, 094112 (2004).
- [13] P. Vinet, J. Ferrante, J.H. Rose, J.R. Smith: *J. Geophys. Res.*, **92**, 9319 (1987).
- [14] T. Tsuchiya, K. Kawamura: *Phys. Rev. B*, **66**, 094115 (2002).
- [15] O.L. Anderson: *Equations of State of Solids for Geophysics and Ceramic Science* (Oxford University Press, Oxford, 1995).
- [16] N.C. Holmes, J.A. Moriarty, G.R. Gathers, W.J. Nellis: *J. Appl. Phys.*, **66**, 2962 (1989).
- [17] S.-H. Shim, T.S. Duffy, K. Takemura: *Earth Planet. Sci. Lett.*, **203**, 729 (2002).
- [18] Y. Tange, Y. Nishihara, T. Tsuchiya: *J. Geophys. Res.*, **114**, B03208 (2009).
- [19] Y. Fei, A. Ricolleau, M. Frank, K. Mibe, G. Shen, V. Prakapenka: *Proc. Natl. Acad. Sci., U.S.A.*, **104**, 9182 (2007).
- [20] D.L. Heinz, R. Jeanloz: *J. Appl. Phys.*, **55**, 885 (1984).
- [21] J.C. Jamieson, J.N. Fritz, M.H. Manghnani: in *High-Pressure Research in Geophysics*, eds. S. Akimoto, M.H. Manghnani (Center for Academic Publications, Tokyo, Japan, 1982), pp. 27–48.
- [22] P.I. Dorogokupets, A.R. Oganov: *Phys. Rev. B*, **75**, 024115 (2007).
- [23] T.S. Duffy, T.J. Ahrens: *Geophys. Res. Lett.*, **20**, 1103 (1993).
- [24] T. Tsuchiya: *J. Geophys. Res.*, **108**, 2462 (2003).
- [25] O.L. Anderson, D.G. Isaak, S. Yamamoto: *J. Appl. Phys.*, **65**, 1534 (1989).
- [26] K. Takemura, A. Dewaele: *Phys. Rev. B*, **78**, 104119 (2008).

[2010 年 3 月 29 日受付, 2010 年 4 月 19 日受理]

© 2010 日本高圧力学会