

ELASTISCHE ANOMALIEN BEI MINERALEN UNTER DRUCK

von

R. Miletich¹, R. J. Angel², S. Rath¹, M. Kunz^{1,3}, A. Friedrich¹, W. Schranz⁴ & A. Tröster⁴

¹Labor für Kristallographie

ETHZ, Ch-8092 Zürich, Schweiz

²Department of Geological Sciences

Virginia Polytechnic Institute, VA 24060 Blacksburg, USA

³Naturhistorisches Museum

Augustinergasse 2, CH-4001 Basel, Schweiz

⁴Institut für Experimentalphysik

Universität Wien, A-1090 Wien

Die elastischen Konstanten eines Materials, die den Zusammenhang zwischen externen mechanischen Kräften und der Deformation eines kristallinen Festkörpers beschreiben, zeigen normalerweise eine gleichmässige und annähernd lineare Entwicklung über einen weiten Bereich von Druck und Temperatur. Variationen in P und T können mitunter aber auch spontane, relativ drastische Änderungen der strukturellen Konfiguration auf atomarer Ebene bedingen. Materialien, die einer solchen Phasentransformation unterliegen, zeigen oft – bei Approximation ihrer Stabilitätsgrenzen – anormale Verhaltensweisen, die mitunter starke Variationen einzelner die Elastizität beschreibender Tensorkomponenten mit sich bringen [1]. Derartige Anomalien manifestieren sich durch betont nichtlineare Abhängigkeiten der Druck-entwicklung der elastischen "Konstanten" über einen gewissen P,T-Bereich in unmittelbarer Nähe der kritischen Übergangspunkte. Hinsichtlich temperaturinduzierter Phasenübergänge existiert eine Vielzahl an Beispielen experimentell belegter Anomalien [2], aber nur wenige sind für druckinduzierte Effekte bekannt [3], was primär auf die experimentellen Meßschwierigkeiten bei Hochdruckuntersuchungen zurückzuführen ist.

Mit den erzielten Fortschritten in der Hochdruck-Röntgendiffraktometrie [4] ist es nun möglich auf Basis hochauflösender Beugungsexperimente an Einkristallen in der Diamant-Stempelzelle extrem gute Datensätze statischer isothermaler Kompressibilität zu erzielen. In dieser Studie wurden von Mineralphasen, die bekannterweise einem druckinduzierten Phasenübergang unter hydrostatischen Bedingungen ≤ 100 kbar unterliegen, die statischen Kompressibilitäten untersucht, vor allem ihr Verhalten in unmittelbarer Nähe der Phasen-übergänge. Die Untersuchungen erfolgten an Pyroxenen, Akermannit, Titanit-Malayait, Cordierit, und Effenbergerit-Gillespit.

Das Versagen von konventionellen Modellen [5] zur Beschreibung der thermodynamischen Zustandsgleichung verlangt im Fall stark anomal elastischem Verhaltens einen neuen theoretischen Ansatz zur Beschreibung der Kompressibilität im kritischen Bereich des Übergangsdruckes P_c . Basierend auf einem erweiterten Modell der Landautheorie, in der die Beschreibung der freien Energie mit einem nichtlinearen Term für die Elastizität erstmals verwendet wird, konnten die experimentell bestimmte Datensätze erstmals physikalisch sinnvoll dem geringen Messfehler entsprechend präzise nachvollzogen werden [6]. Hinsichtlich der überraschenden Größenordnung, sowohl des Ausmasses die Kompressibilität betreffend (bis zu 300 % der "normalen" Entwicklung) als auch den vom anormalen Verhalten betroffenen Druckbereich soll auf die potentielle Bedeutung im Rahmen geophysikalischer Modellierungen verwiesen werden.

References

- [1] CARPENTER, M. A. & SALJE, E. K. H. (1998): *Eur. J. Mineral* 10, 693.
- [2] CARPENTER, M. A., SALJE, E. K. H., GRAEME-BARBER, A., WRUCK, B., DOVE, M. T. & KNIGHT, K. S. (1996): *Am. Mineral.* 83, 2 und KITYK, A., SOPRUNYUK, V. P., FUITH, A., SCHRANZ, W. & WARHANEK, H. (1996): *Phys. Rev. B* 53, 6337.
- [3] HAUSSÜHL, S. (1983): *Solid St. Comm.*, 46, 423.
- [4] MILETICH, R., ALLAN, D. R. & KUHS, W. F. (2001): *MSA Rev. in Min. and Geochem.* 41, 445 und ANGEL, R. J., DOWNS, R. T. & FINGER, L. W. (2001): *MSA Rev. in Min. and Geochem.* 41, 559.
- [5] ANGEL, R. J. (2001): *MSA Rev. in Min. and Geochem.* 41, 35 (2001) und ANDERSON, O. L. (1995): *Equations of State of Solids for Geophysics and Ceramic Sciences*, Oxford University Press, Oxford.
- [6] TRÖSTER, A., SCHRANZ, W. & MILETICH, R.: *Phys. Rev. Lett.* (submitted) und MILETICH, R., SCHRANZ, W. TRÖSTER, A., ANGEL, R. J. & FRIEDRICH, A.: *Science* (submitted)