

LuK-tutkielma
53510
Helsingin yliopisto
Fysikaalisten tieteiden laitos
Geofysiikan osasto

MAAN RAKENTEEN TUTKIMINEN TIMANTTIPURISTIMEN AVULLA

Suvi Heinonen
012599321

Ohjaaja: Annakaisa Korja
Jätetty tarkistettavaksi: 09.08.2007
Hyväksytty: 21.08.2007

ABSTRAKTI

Maan rakenteen selvittämiseen tarvitaan seismisten mittausten lisäksi laboratoriokokeita. Timanttipuristimen (DAC, Diamond Anvil Cell) avulla pystytään simuloimaan Maan sisäosien paineita. Käyttämällä epäelastista röntgen- tai Brillouin sirontaa voidaan määrittää akustisten aaltojen nopeus tutkittavassa näytteessä. Seismisten nopeuksien epäjatkuvuudet Maan vaipassa johtuvat mineraalien faasimuutoksista. D''-kerroksen seismisesti anomaaliset piirteet ovat seurausta MgSiO₃:n faasimuutoksesta perovskiitista post-perovskiittirakenteeseen. Maan ytimessä on todennäköisesti hcp-raudan ja nikkelin lisäksi myös piitä ja happea.

Sisällysluettelo

1. JOHDANTO	1
2. AINEEN RAKENNE.....	2
2.1. Aineen rakenne ja röntgendiffraktio	2
2.2 Paineen vaikutus aineen rakenteeseen	4
3. SEISMISTEN AALTOJEN ETENEMINEN VÄLIAINEESSA	5
3.1 Seismiset aallot	5
3.2. Fononit	6
4. TIMANTTIPURISTIMEN TOIMINTAPERIAATE	7
5. MAAN RAKENNE	10
5.1 Maan vaippa.....	11
5.2. D" kerros	14
5.3. Ydin.....	19
6. JOHTOPÄÄTÖKSET.....	24

1. JOHDANTO

Maan sisäosista saadaan tietoa geofysikaalisilla mittauksilla. Seismisten mittausten perusteella on saatu selville Maan sisäosien nopeusjakauma. Pelkkä nopeusjakauma ei aseta yksiselitteisiä rajoituksia Maan syvyyksien mineraalikoostumukselle, joten seismisen aineiston tulkintaan tarvitaan myös laboratoriomittauksia. Etenkin elastisten parametrien tunteminen on tärkeää, kun luodaan mallia Maan mineraalikoostumukselle.

Maan sisäosien paineita voidaan simuloida timanttipuristimen (DAC, Diamond Anvil Cell) avulla. Timanttipuristimella pystytään saavuttamaan Maan ytimen paine, 300 GPa. Sähkömagneettinen säteily kulkee esteettömästi timanttien läpi kaikilla aallonpituuksilla. Tämä mahdollistaa röntgendiffraktion käytön mineraalin kidehilassa tapahtuvien muutosten tutkimisessa. Timanttipuristimeen asetettua näytettä voidaan lisäksi kuumentaa laserin avulla, jolloin pystytään simuloimaan paitsi paine- myös lämpötilaoloja Maan sisäosissa.

Helsingin yliopiston röntgenfysiikan osasto on syksyllä 2006 hankkinut Diacell OmniDAC-LT –laitteen (valmistajan kotisivu www.easylab.co.uk). Laitteella on mahdollista saada aikaan yli 100 GPa:n paineita riippuen käytettävien timanttien kärkien poikkileikkauksesta. Jos puristimen timanttialasinten kärjen halkaisija on 150 μm on näytekammion koko tyypillisesti 50 μm . Yleensä mittauksissa käytettävät näytteet jauhetaan hienoksi pulveriksi (raekoko alle 5 μm), mutta myös yksittäisiä kiteitä on mahdollista käyttää. Röntgenfysiikan osaston omistamalla laitteella on tutkittu muun muassa paineen vaikutusta sideriitin (FeCO_3) magneettisiin ominaisuuksiin (pers. kom. Aleks Mattila). Rautaa sisältävien ferroprikaasien ja silikaattiperovskiittien magneettisten ominaisuuksien muuttuminen paineen vaikutuksesta kiinnostaa myös geofysikoita, koska ne vaikuttavat suoraan Maan vaipan ominaisuuksiin. Tämän työn painopiste on kuitenkin DAC:n avulla määritetyissä seismisissä nopeuksissa. Diacell OmniDAC-LT –laitteessa näytettä ei pystytä kuumentamaan, joten se ei myöskään sovellu suoraan Maan vaipan olosuhteiden simuloimiseen.

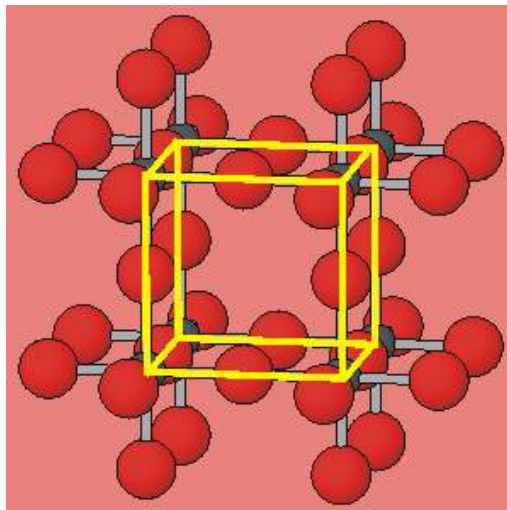
Tässä työssä käsitellään ensin aineen rakennetta ja paineen vaikutusta siihen. Kappaleeseen 3 on koottu perustietoa seismisistä aalloista ja aineen kimmovakioista. Lisäksi esitellään fononin käsite, joka on oleellinen timanttipuristimella tehtyjen akustisten aaltojen nopeusmittausten kannalta. Peruskäsitteiden jälkeen kerrotaan lyhyesti DAC:n toimintaperiaate ja esitellään DAC:lla tehtyjä tutkimuksia Maan sisäisestä rakenteesta.

2. AINEEN RAKENNE

2.1. Aineen rakenne ja röntgendiffraktio

Kiinteiden aineiden fysikaaliset ominaisuudet riippuvat ainoastaan aineen alkuainekoostumuksesta sekä atomien keskinäisestä järjestyksestä ja etäisyydestä toisiinsa. Edellä mainitut ominaisuudet määrittelevät sekä atomien välille muodostuvien sidosten tyypit että aineen kiderakennetta. Kiinteät aineet voidaan luokitella kiteisiin ja amorfisiin aineisiin. Toisin kuin kiteisellä, amorfisilla aineilla ei ole säännöllisesti toistuvaa kiderakennetta. Kiteisessä aineessa jaksollisesti toistuvaa, pienintä mahdollista rakennetta kutsutaan alkeiskopiksi (kuva 1). Aineen voidaan ajatella muodostuvan vierekkäisistä ja päällekkäisistä alkeiskopeista. Alkeiskopin koko ja rakenne sekä sen sisältämien atomien keskinäinen järjestys määräävät kiteen muodon. (www.crystal.vt.edu).

Kivet koostuvat mineraaleista, jotka puolestaan ovat kiteisessä olomuodossa olevia kemiallisia yhdisteitä. Mineraalit voivat kuulua alkeiskopin muodon perusteella yhteen seitsemästä järjestelmästä: kuutiollisiin, tetragonisiin, trigonisiin, heksagonisiin, rombisiin, monokliinisiin tai trikliinisiin kiteisiin. Jokaisessa kiderakennuksessa on sille tyypilliset hilavakiot (sivujen pituudet) ja niiden väliset kulmat. (www.kiviopas.fi).



Kuva 1. Pienin aineessa toistuva rakenneyksikkö on alkeiskoppi.

Kuva: www.crystal.vt.edu

Kiinteän aineen rakennetta voidaan tutkia röntgendiffraktiolla (X-Ray Diffraction, XRD). Rakennetutkimuksissa käytettävän röntgensäteilyn aallonpituus on tyypillisesti 0.5–2.5 Å. Ångström ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$) on hiukkasfysiikassa yleisesti käytetty yksikkö, joka vastaa suuruusluokaltaan atomien välisiä etäisyyksiä kiinteässä aineessa. Röntgendiffraktio perustuu sähkömagneettisen säteilyn aaltoluonteeseen: aallot taittuvat ja heijastuvat kohdatessaan fysikaalisilta ominaisuuksiltaan eroavia rajapintoja. Kiteisessä aineessa periodinen hilarakenne aiheuttaa heijastuneita tasoaaltoja, joiden interferenssiä tutkimalla päästään käsiksi atomien välisiin etäisyyksiin kiteessä. Interferenssi tarkoittaa kahden tai useamman, vaihe-eroltaan vakion aallon yhdistymistä superpositioperiaatteen mukaisesti. Interferenssi on destruktiivinen eli vaimentava mikäli sähkömagneettiset aallot ovat eri vaiheissa ja konstruktivinen eli vahvistava aaltojen ollessa samassa vaiheessa (Tipler et al., 2003).

Kiteistä ainetta tutkittaessa havaitaan konstruktivinen interferenssi, mikäli kidehilojen (alkeiskoppien) välimatka on käytettävän aallonpituuden monikerta. Jokaiselle eri kidejärjestelmälle on johdettavissa yhtälöt, joista voidaan määrittää diffraktiokulmat. Diffraktiokulmat määräytyvät Braggin lain mukaan,

$$\lambda = 2 \frac{d}{n} \sin(\theta), \quad (1)$$

missä λ on röntgensäteilyn aallonpituus [m], d on kidehilojen välinen etäisyys [m], n on positiivinen kokonaisluku ja θ on aallon heijastuskulma.

Diffraktiokuvioita tulkittaessa on otettava huomioon erilaisia fysikaalisia parametreja. Aineen hilarakenteen vaikutusta diffraktiopiikkien intensiteettiin kuvaa rakennetekijä, joka on riippuvainen sekä heijastavan tason suunnasta että tason atomien sirontatekijöistä. Sirontatekijä kuvaa atomin kykyä heijastaa röntgensäteilyä. Alkeiskopin tilavuus ja koko määräävät heijastuneiden röntgensäteiden suunnan (Tipler et al., 2003).

2.2. Paineen vaikutus aineen rakenteeseen

Kun aine altistetaan suurelle paineelle, sen fysikaaliset, kemialliset ja rakenteelliset yleispiirteet muuttuvat. Paine määritellään pinta-alan ja siihen kohdistuvan voiman avulla

$$P = \frac{F}{A}, \quad (2)$$

missä P on paine [$\text{N}/\text{m}^2 = \text{Pa}$], F on voima [N] ja A on pinta-ala [m^2].

Pascal [Pa] on paineen SI-järjestelmän mukainen yksikkö, mutta monet tutkimustulokset on esitetty bareina ($1 \text{ Pa} = 0.00001 \text{ bar}$). Litostaattinen paine syvyydellä z voidaan laskea yksinkertaisella kaavalla

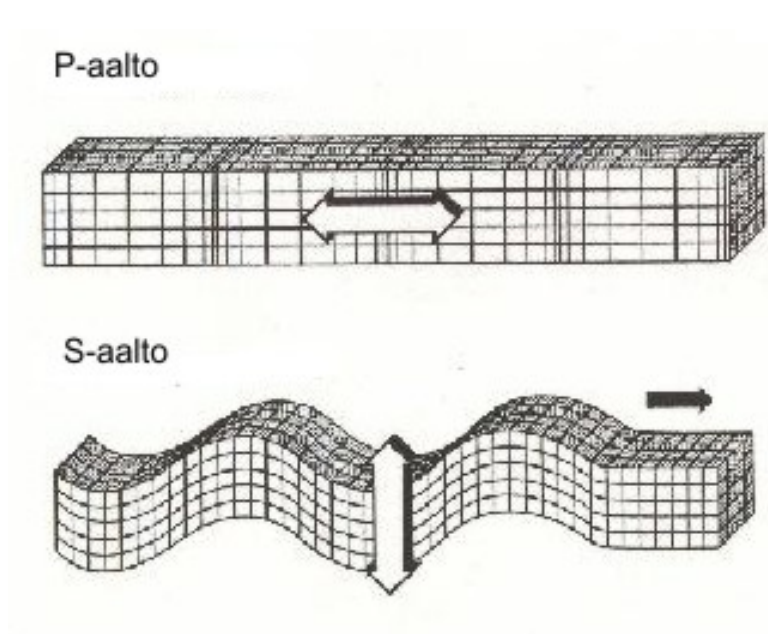
$$p(z) = p_0 + \int_0^z g \cdot \rho(z) dz, \quad (3)$$

missä p_0 on paine syvyydellä 0 [Pa], g on maan vetovoimakiihtyvyys [m/s^2] ja $\rho(z)$ on tiheys syvyydellä z [kg/m^3]. Normaali ilmanpaine on noin 100 kPa, Mariaanien haudan pohjalla 11 kilometrin syvyydessä paine on 0.1 GPa ja Maan ytimessä yli 6300 kilometrin syvyydessä 300 GPa. Paineen kasvun ensisijainen vaikutus kiinteään materiaan on sen atomien välisten etäisyyksien lyheneminen materiaalin tilavuuden pientyessä. Rakenteelliset muutokset vaikuttavat useisiin fysikaalisiin ominaisuuksiin kuten sähkön- ja lämmönjohtavuuteen, viskositeettiin ja sulamispisteeseen. Fysikaaliset muutokset voivat olla sekä jatkuvia että epäjatkuvia. Epäjatkuvat muutokset fysikaalisissa ominaisuuksissa johtuvat usein faasimuutoksista. Faasimuutoksella tarkoitetaan tässä atomien uudelleen järjestäytymistä kiinteässä tilassa suuren paineen tai lämpötilan vaikutuksesta, jolloin mineraalin kiderakenne muuttuu. Paineen ja lämpötilan kasvaessa riittävän suuriksi materiaali saattaa menettää kiderakenteensa eli sulaa. Maan kamaran yleisissä mineraaleissa, oksideissa ja silikaateissa, on havaittu tapahtuvan faasimuutoksia suurissa paineissa. Esimerkiksi kvartsissa (SiO_2) normaalissa ilmanpaineessa yhtä piiatomia ympäröi neljä happiatomia, mutta paineen kasvaessa 8 GPa:n suuruiseksi rakenne muuttuu stishoviittirakenteeseen, jossa yhtä piiatomia ympäröi kuusi happiatomia (www.loto-eng.com).

3. SEISMISTEN AALTOJEN ETENEMINEN VÄLIAINEESSA

3.1 Seismiset aallot

Aineessa etenee kahdenlaisia seismisiä runkooaltoja; P- ja S-aaltoja. P-aallot ovat pitkittäistä aaltoliikettä, jossa väliaine vuoroin laajenee ja vuoroin puristuu kasaan. S-aallot ovat poikittaista aaltoliikettä, jossa väliaineen tilavuus pysyy koko ajan samana. Tämä kappale perustuu Fowlerin (2005) kirjaan *The Solid Earth*.



Kuva 2. P-aallot ovat pitkittäistä ja S-aallot poikittaista aaltoliikettä.
Kuva: www.bonznstonz.com

P- ja S-aaltojen nopeus riippuu väliaineen fysikaalisista ominaisuuksista. P-aallot etenevät kaikissa väliaineissa S-aaltoja nopeammin. P-aaltojen nopeudelle α pätee

$$\alpha = \sqrt{\frac{K + \frac{4}{3}\mu}{\rho}} \quad (4)$$

Vastaavasti S-aaltojen nopeudelle β voidaan kirjoittaa

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} \quad (5)$$

missä K on puristuvuuskerroin, μ on leikkausmoduli ja ρ on tiheys.

Puristuvuuskerroin K määritellään paineen kasvun ja sen aiheuttaman tilavuuden muutoksen suhteena. Leikkausmoduli μ kertoo, kuinka voimakkaasti kappale vastustaa leikkausjännitystä eli kappaleen muodon muuttamiseen tarvittava voima yksikköpinta-alaa kohden. Koska nesteissä ei voi esiintyä leikkausjännitystä, S-aallot eivät etene niissä. Myös Youngin moduli ja Poissonin suhde ovat yleisesti käytettyjä kimmovakioita, jotka voidaan johtaa K :n ja μ :n avulla.

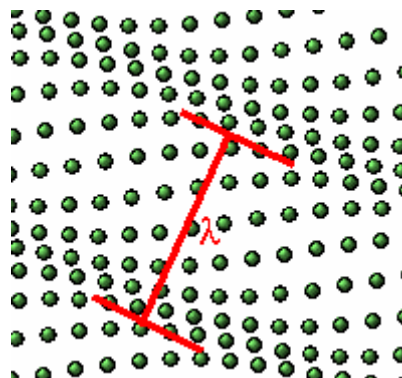
Maan tiheys kasvaa syvyyden funktiona ja tiheyden kasvaessa myös kimmovakioiden μ ja K arvot kasvavat. Kimmovakioiden arvot kasvavat suhteessa nopeammin, kuin tiheys, joten myös seismisten aaltojen nopeus kasvaa syvyyden funktiona. Yleensä seismisten aaltojen nopeuden ja väliaineen tiheyden välille pätee Birch'in laki

$$v = a\rho + b \quad (6)$$

missä v on aallon nopeus [m/s], a ja b ovat kokeellisia vakioita ja ρ on aineen tiheys [kg/m^3].

3.2. Fononit

Fononien teoria löytyy mm. Burns'in (1985) sekä Tilerin ja Llewellynin (2003) oppikirjoista. Atomien sisältämän termisen energian takia aineeseen kohdistettu voima aiheuttaa kidehilan värähtelyjä. Värähtelyt saavat aikaan mekaanisia aaltoja kiteeseen, jotka kuljettavat lämpöä ja ääniaaltoja kiteen läpi. Kvanttimekaniikassa tällainen aaltopaketti tunnetaan fononina. Fononin lyhyin mahdollinen aallonpituus on kiteen atomien etäisyys toisistaan tasapainotilassa (kuva 3). Vastaavasti kuin fotonit ovat valon energiakvantteja, fononit ovat mekaanisen värähtelyenergian kvantteja. Fotonien tapaan fononeilla on sekä aalto- että hiukkasluonne. Fononit vaikuttavat useisiin kiinteän aineen fysikaalisiin ominaisuuksiin, kuten sähkön- ja lämmönjohtavuuteen sekä ääniaallon nopeuteen aineessa.



Kuva 3. Fononin aallonpituus. Kuva:www.wikipedia.org

Jos kiteen alkeiskoppi muodostuu vain yhdestä atomista, havaitaan aineessa vain akustisia fononeita. Mikäli alkeiskopissa on useampia atomeja, havaitaan myös optisia fononeita. Akustisten fononien amplitudi, suunta ja vaihe ovat samat koko kidehilassa. Niiden taajuudet laskevat aallonpituuden kasvaessa ja ne vastaavat ääniaallon etenemisestä kiteessä. Akustiset fononit jaetaan pitkittäis- (LA) ja poikittaisfononeihin (TA) aaltoliikkeen tyyppin mukaan LA-fononit vastaavat P-aallon ja TA-fononit S-aallon nopeutta aineessa.

Fononidisversiolla tarkoitetaan fononien taajuuden ja aaltovektorin suhdetta toisiinsa. Yleisesti dispersiolla tarkoitetaan fysiikassa väliaineen taitekertoimen riippuvuutta saapuvan säteilyn aallonpituudesta. Fononidispersio voidaan laskea suoraan kvanttimekaniikan keinoin tai olettamalla atomin siirtymän tasapainoasemasta olevan lineaarisesti riippuvainen atomiin vaikuttavasta voimasta. Fononidisersion mittaamiseen voidaan käyttää esimerkiksi epäelastista röntgen sirontaa (IXR, Inelastic X-ray Scattering). Mittausmenetelmä perustuu fotonien ja fononien vuorovaikutukseen, joka aiheuttaa muutoksia sironneen valon energiaan ja sirontakulmaan. Energian muutos eli impulssi on sidoksissa hiukkasen paikkaan. Monikiteiselle näytteelle tehdyt IXR-mittaukset antavat suunnallisesti keskiarvoistetun pitkittäisten akustisten aaltojen nopeuden (eli P-aaltojen nopeuden). Yksikiteiselle aineelle IXR-kokeilla saadaan elastiset modulit ja tietoa faasimuutoksesta (Fiquet et al., 2004). Myös epäelastinen Brillouin sironta on hyvin käytetty menetelmä DAC:lla tehdyissä tutkimuksissa. Brillouin sironta tapahtuu, kun väliaineessa kulkeva valo kohtaa tiheysvaihteluita ja muuttaa kulkusuuntaansa. Tiheysvaihtelut voivat olla akustisten moodien (fononien) tai lämpötilagradienttien aiheuttamia. Fononista sironneen fotonin energiamuutosta kutsutaan Brillouin siirtymäksi. Siirtymä ja fononin energia ovat yhtäsuuret, joten Brillouin sironnalla pystytään mittaamaan fononien sisältämää energiaa.

4. TIMANTTIPURISTIMEN TOIMINTAPERIAATE

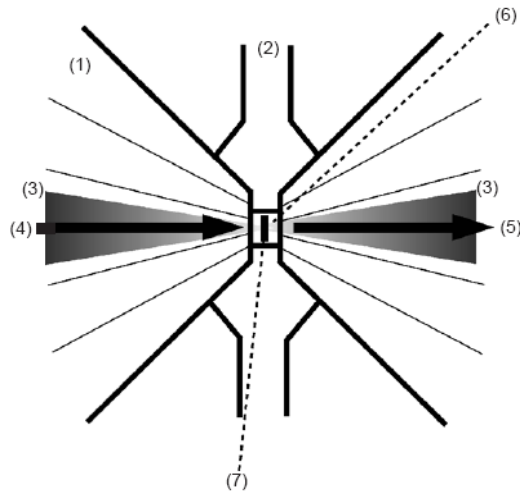
Timanttipuristimen (DAC, Diamond Anvil Cell) avulla on mahdollista mitata korkean paineen alla tilavuuden ja tiheyden vaihteluja sekä muutoksia kiderakenteessa ja sulamisessa. Timanttipuristimessa kahden tarkkaan hiotun, jalokiviluokan timanttialasimen väliin asetetaan näyte, jota puristetaan mekaanisesti alasinten väliin (kuva 4). Kokeissa tarvittavat ainemäärät ovat hyvin pieniä, käytettävien näytteiden koko mitataan mikrogrammoissa. Useimmiten näyte on yksittäinen kide tai hienojakoista jauhetta. Timantit ovat paras mahdollinen aine korkeiden

paineiden tuottamiseen, koska ne eivät lujuutensa ansiosta hajoa tai deformoidu korkeissakaan paineissa. Lisäksi sähkömagneettinen säteily kulkee esteettömästi timanttien läpi sekä optisella, että röntgensäteilyn alueella. (Akella, 1996).



Kuva 4. DAC-laitteissa tarkasti hiotut timantit asetetaan metallilevyjen avulla samalle akselille.
www.crystal.vt.edu

DAC:n toimintaperiaate on hyvin yksinkertainen: suureen pinta-alaan kohdistettu pienehkö voima muutetaan pieneen alaun kohdistuvaksi suureksi voimaksi (ks. yhtälö 1). Tällöin DAC:n timanttialasinten välissä olevaan näytteeseen kohdistuu suuri paine. Kokeen alussa varmistetaan, että timantit ovat täsmälleen samalla akselille siten, että ne ovat myös täsmälleen yhdensuuntaisia. Jos timantit ovat eri linjassa keskenään, ne porautuvat välissä olevan näytteen läpi. Näyte asetetaan timanttien väliin renium- tai teräslevyssä, johon on näytettä varten porattu halkaisijaltaan n. 30-150 μm leveä aukko. Näytteen lisäksi aukkoon lisätään usein nestemäistä, kaasumaista tai kiinteää paineenvälittäjäainetta, jonka tarkoitus on tasoittaa paine-eroja mittauksen aikana. Paineita voidaan kalibroida aukossa olevan paineilmaisimen, esimerkiksi rubiinisirun tai Pt- tai Au-pulverin avulla. Aukossa olevan paineilmaisimen tilavuus saadaan selville röntgensäteiden avulla ja havaittua tilavuutta voidaan verrata tunnettuihin tilavuus-paine suhteisiin tietyn paineen varmistamiseksi (Akella, 1996). Kuvassa 5 on kaavio tyypillisestä DAC koejärjestelystä.



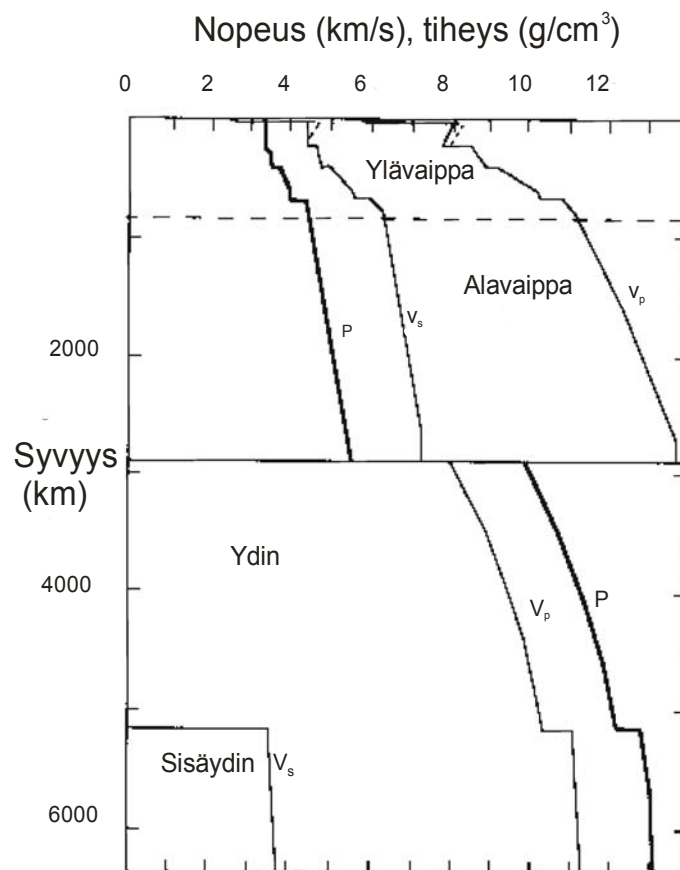
Kuva 5. Kaaviokuva korkean paineen ja lämpötilan röntgensironna systeemistä. 1) timanttialasimet, 2) Re-levy, 3) laser, jolla näytettä lämmitetään, 4) lähetetty röntgensäde, 5) taittunut röntgensäde, 6) paineenvälittäjäaine (esim. argon), 7) näyte.
Kuva: Ono et al, 2001.

Näytteen kiderakenteen selvittämiseksi ohjataan monokromaattista (vain yhtä aallonpituutta sisältävää) röntgensäteilyä timanttien sekä näytteen läpi ja muodostuva diffraktiokuvio rekisteröidään. Kuvion diffraktiopiikkien avulla saadaan selville aineen atomien väliset etäisyydet. DAC:n korkeassa paineessa näytteen kiderakenteen muutokset näkyvät diffraktiokuvion muutoksina. Timanttipuristimen aiheuttama paine työntää tutkittavan näytteen atomeja lähemmäs toisiaan, jolloin aineen fysikaaliset ominaisuudet muuttuvat. Maan vaipan mineraalit ovat jatkuvasti suuressa paineessa ja timanttipuristimen avulla pyritään tutkimaan mineraalien ominaisuuksia niiden luonnollisessa tilassa. (<http://www.crystal.vt.edu/crystal/roughguide.html>)

Maan sisäosissa paineen kasvaessa myös lämpötila kasvaa. Timanttipuristinta käytettäessä näytettä voidaan lämmittää laserin avulla (LHDAC, Laser Heated Diamond Anvil Cell). Yleensä LHDAC:lla tehtävissä diffraktiomittauksissa laser kohdistetaan muutaman kymmenen mikrometrin alueelle levymäisen näytteen keskiosaa, jolloin lämpötilagradientin vaikutus näytteen säteittäissuunnassa minimoituu. Näytteen akselisuunnassa voi kuitenkin olla jopa 100 K/ μm suuruisia lämpötilagradientteja. Paineenvälittäjäaineet pienentävät paitsi paine- myös lämpötilaeroja näytteessä. Yleisimpiä lämpötilagradientin pienentämiseen käytettyjä paineen välittäjäaineita ovat Argon (Ar), Helium (He), NaCl ja Al_2O_3 (Irifune et al., 2005).

5. MAAN RAKENNE

Maa koostuu kerroksista, jotka eroavat toisistaan sekä kemiallisesti että fysikaalisesti. Maan kuori on mantereiden kohdalla noin 30–80 km paksu, merellä 5-10 km. Mantereinen kuori koostuu pääasiassa silikaateista, merellinen kuori mafisista mineraaleista. Suurimmaksi osin magnesiumsilikaateista koostuva vaippa jatkuu noin 2900 km syvyyteen. Vaipan yläosissa P-aaltojen nopeus ylittää arvon 8.1 km/s, kun se kuoressa on tavallisesti 6-7 km/s. Ylävaippa on rakenteeltaan hyvin heterogeeninen, mikä näkyy myös seismisissä nopeuksissa. Noin 400 km ja 670 km syvyydessä havaitaan 5-7 % kasvu sekä P- että S-aaltojen nopeuksissa. Alavaipan pohjalla on noin 100–150 km paksu D''-kerros, jossa havaitaan poikkeavia arvoja seismisissä nopeuksissa. Noin 5100 km syvyydelle jatkuva nestemäinen ulkoydin sisältää raudan lisäksi pieniä määriä nikkeliä, happea ja rikkiä. Maan sisäytimen uskotaan olevan kiinteää rautanikkeliseosta (Fowler, 2005). Maan nopeusjakauma syvyyden funktiona on esitetty kuvassa 6.



Kuva 6. Maan nopeus- ja tiheysjakauma. S-aallot eivät etene nestemäisen ulkoytimen alueella. Alkuperäinen kuva eqseis.geosc.psu.edu

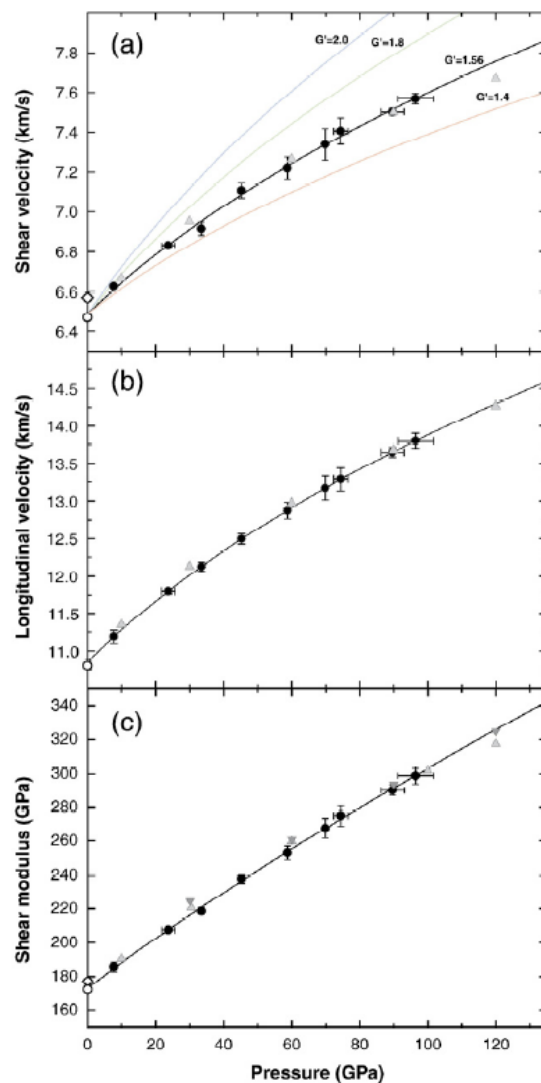
Käsitys Maan sisäosien koostumuksesta perustuu suurelta osin seismisten mittausten avulla saatuun tietoon. Mineraalin elastisten ominaisuuksien tunteminen on oleellista seismisen aineiston tulkitsemiselle ja ymmärtämiselle. Seismisten mallien oikea tulkinta edellyttää tietoa kemiallisesta koostumuksesta, mineralogiasta ja lämpötilasta tutkittavalla syvyydellä. Mineraalien elastiset parametrit ovat avainasemassa määrittäessä edellisiä ominaisuuksia Maan syvyyksien paineissa (Fiquet et al., 2004).

5.1 Maan vaippa

Maan vaippa jaetaan koostumuksen ja seismisten aaltojen etenemisen perusteella kahteen osaan, ylä- ja alavaippaan. Ylävaipan alueella seismisten aaltojen nopeudet kasvavat nopeasti ja ne kohtaavat useita epäjatkuvuuspintoja. Peridotiittisessa ylävaipassa dominoiva mineraali on oliviini (Lowrie, 1997). Syvyyden ja paineen kasvaessa vaipan mineraalien rakenteissa tapahtuu muutoksia. Oliiviinityyppinen kidehila muuntuu tiiviimpään spinellityyppiseen kidehilaan noin 400 kilometrin syvyydellä. Syvyysvälillä 400–650 km β -spinelli muuntuu γ -spinelliksi. Ylävaipan alarajalla 670 kilometrin syvyydellä spinelli muuntuu perovskiitiksi. Vaipan syvempien osien koostumus tunnetaan vielä melko huonosti. Yleisesti pidetään hyvin todennäköisenä, että alavaippa koostuu pääasiassa raudan ja magnesiumin oksideista sekä rauta-magnesiumsilikaateista. Toisin kuin ylävaipassa, alavaipassa ei ole seismisiä epäjatkuvuuksia. Noin 2900 km syvyydessä silikaateista koostuva vaippa muuttuu nestemäisestä raudasta koostuvaksi ulkoytimeksi. (Lowrie, 1997)

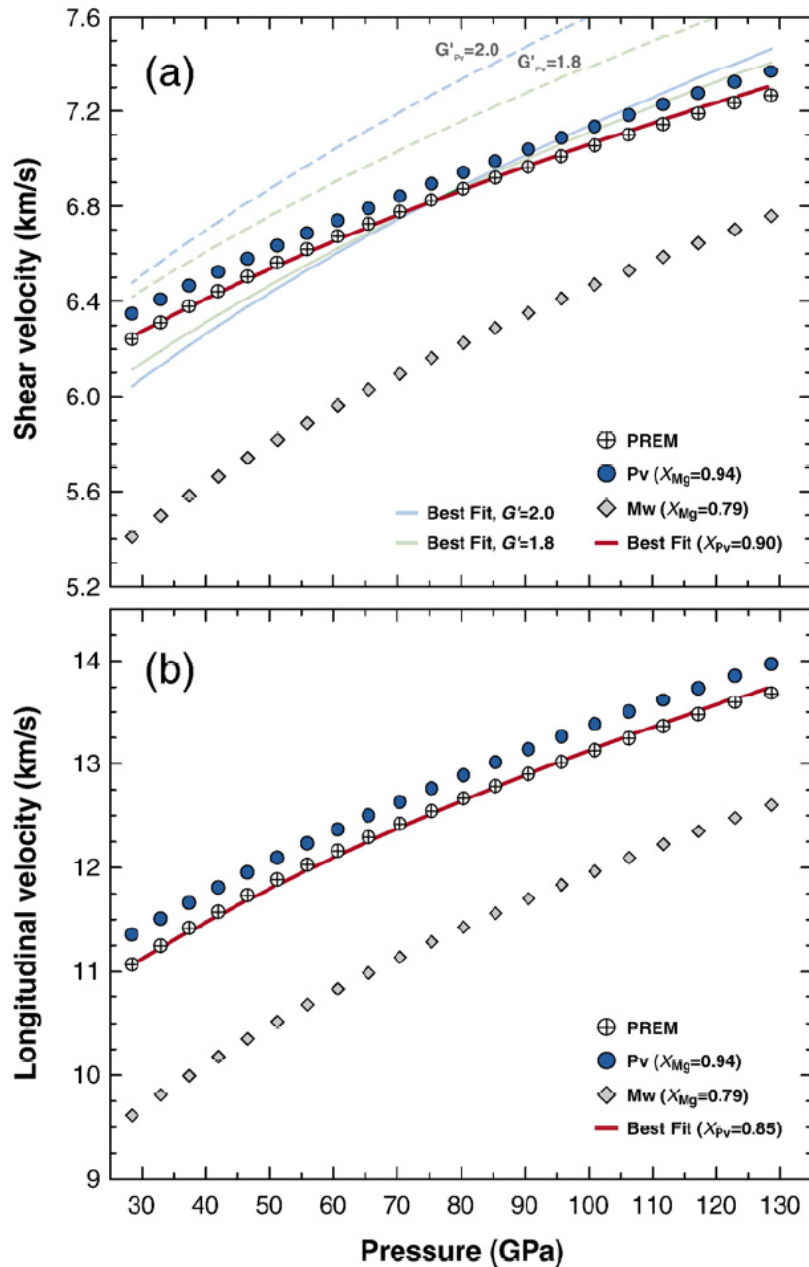
Murakami et al. (2007a) mittasivat ääniaaltojen nopeutta MgSiO_3 -perovskiitissa vaipan paineissa Brillouinin sirontakokeilla. Brillouinin spektri rekisteröitiin monikiteiselle MgSiO_3 -perovskiitille yhdeksällä paineella 8–96 GPa väliltä kolmen eri kokeen aikana. Jokaisella mittauspaineella näytettä hehkutettiin laserin avulla 45–60 minuuttia paineen tasaamiseksi ja faasimuutoksen loppuunsaattamiseksi. Faasin tunnistukseen ja näytteen kiteytymisen varmistamiseen käytettiin Raman spektroskopiaa. Saadakseen monikiteiselle näytteelle isotrooppisen akustisten nopeuksien keskiarvon Murakamin (2007a) tutkimusryhmä mittasi 10 Brillouinin spektriä näytteen eri osista. Ryhmä vaihtoi myös näytteen suuntaa ja laserin polarisaatiota eri kokeiden välillä. Kokeen aikana ei havaittu kiteiden keskittynyttä suuntautumista tai kasvua korkeissa paineissa tapahtuneen hehkutuksen aikana.

Murakami et al. (2007a) mittaamissa Brillouinin spektreissä näkyvät terävät piikit MgSiO_3 -perovskiitin poikittaisen aallon (S-aallon) akustiselle moodille kaikissa mittauspaineissa. MgSiO_3 -perovskiitin pitkittäisten aaltojen (P-aaltojen) akustiset moodit peittyivät timantin poikittaismoodin alle. Leikkausmoduli G määritettiin sovittamalla kolmannen asteen Eulerin yhtälö mitattuihin S-aallon nopeuksiin paineen funktiona. Leikkausmodulin arvoksi saatiin $G=172.9(\pm 15)$ GPa. Leikkausmodulin painederivaatalle 0 Pa:n paineessa saatiin $G'=1.56(\pm 4)$. P-aallon nopeudeksi määritettiin normaalipaineessa $V_P=10.85 (\pm 3)$ km/s käyttämällä mittauksilla saatuja S-aallon nopeuksia ($V_S=6.49 (\pm 3)$ km/s) ja aiempia tutkimuksia. P- ja S-aaltojen nopeudet paineen funktiona on esitetty kuvassa 8.



Kuva 7. Akustisten aaltojen nopeuksien ja leikkausmodulin profiilit MgSiO_3 -perovskitissa paineen funktiona 300 K:n lämpötilassa (mustat pallot). Kuvassa a) on S-aallon nopeus, b) P-aallon nopeus, c) leikkausmoduli. Kolmannen asteen Eulerin sovituksia on esitetty mustalla viivalla. Valkoiset pallot ja timantit ovat aikaisempia tutkimustuloksia, sininen, vihreä ja oranssi viiva ovat S-aallon nopeudet, kun $G'=2.0$, $G'=1.8$ ja $G'=1.4$. Ylös ja alas osoittavat kolmiot ovat teoreettisia tuloksia 0 K ja 298 K lämpötiloissa (Murakami et al., 2007a).

Tulostensa perusteella Murakami et al. (2007a) laskivat akustisten aaltojen nopeudet alavaipan adiabaattiselle geotermille MgO-SiO₂-FeO-systeemissä. Laskuissa oletettiin, että alavaippa koostuu (Mg,Fe)SiO₃-perovskiidin ($X_{Mg}=0.94$) ja (Mg,Fe)O megnesiowustiitin ($X_{Mg}=0.79$) seoksesta. X_{Mg} on magnesiumin mooliosuus komponentissa, eli $X_{Mg}=\text{MgO}/(\text{MgO}+\text{FeO})$. Lasketut akustisten aaltojen nopeudet on esitetty kuvassa 8.



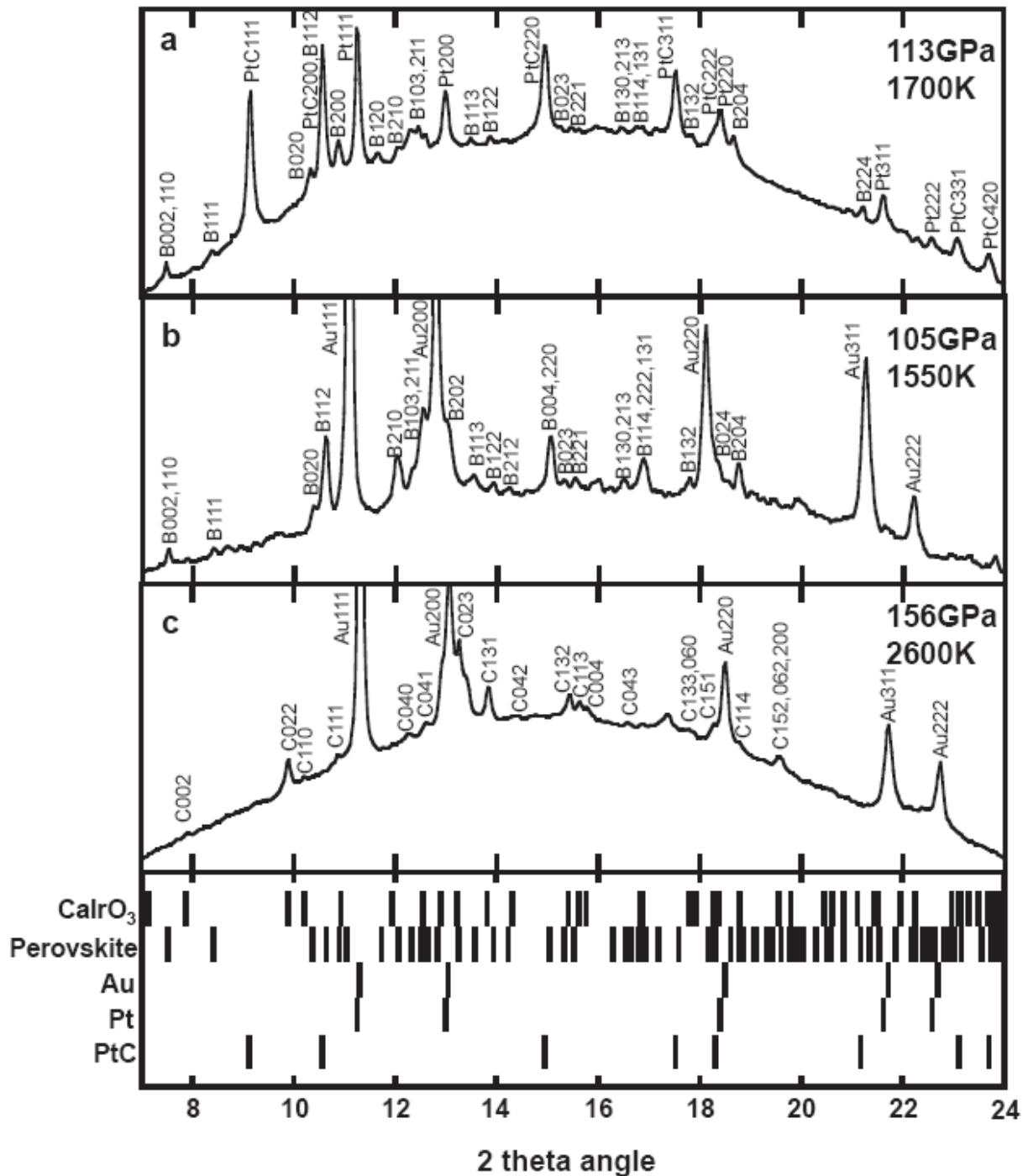
Kuva 8. Lasketut (a) S- ja (b) P-aaltojen nopeusprofiilit perovskiidissa ja megnesiowustiitissa paineen funktiona. Laskemissa on huomioitu myös vaipan geotermi ja alavaipan seisminen malli- Siniset pallot- (Mg,Fe)SiO₃ perovskiidin ($X_{Mg}=0.94$), harmaat timantit – (Mg,Fe)O megnesiowustiitti ($X_{Mg}=0.79$), ristit – seisminen malli alavaipalle (PREM), vaalean sininen katkoviiva – S-aallon nopeus perovskiidissa, kun $G'=2.0$, vaalean vihreä katkoviiva - S-aallon nopeus perovskiidissa, kun $G'=1.8$. Edellisten optimaaliset sovitukset on piirretty vaalean sinisellä ja vihreällä viivalla (Murakami, 2007).

5.2. D'' kerros

Maan ytimen ja vaipan välissä on 150–200 kilometriä paksu D'' kerros, jossa havaitaan voimakkaita seismisiä anomalioita. D''-kerroksen alueella perusaaltojen nopeusgradientit ovat hyvin pieniä, jopa negatiivisia. Kerroksessa on havaittu seismisten nopeuksien lateraalista vaihtelua, joka on verrattavissa mantereiden ja merien sijaintiin. Lisäksi subduktiovyöhykkeiden alapuoliset alueet näkyvät kerroksessa seismisesti nopeina (kylminä) vyöhykkeinä. Vastaavasti niin sanottujen hot spottien alla seismiset nopeudet ovat hitaita (Lowrie, 1997). Viimeaikoina tutkijat ovat havainneet D'' kerroksessa myös sähkönjohtavuuden poikkeavuuksia. D''-kerroksen ominaisuuksia on pyritty selittämään faasimuutosten, osittaisen sulamisen, kemiallisen heterogeenisuuden, mineralogisen anisotropian ja konvektion avulla. Mikään teorioista ei kuitenkaan ole osoittautunut kiistattomaksi (Ono et al., 2005).

Rautaoksidin (Fe_2O_3) on havaittu muuttuvan romboedrinen ilmeniittirakenteesta ortorombiseen perovskiitti kiderakenteeseen suurissa paineissa. Yli 60 GPa:n paineissa Fe_2O_3 kiteisiin syntyy ortorombinen CaIrO_3 -tyyppinen, eli post-perovskiittirakenne. Mineralogit ja petrologit uskovat, että vaipan alaosat koostuvat pääasiassa ortorombisesta magnesiumperovskiitista (MgSiO_3), joka sisältää rautaa (Fe) ja alumiinia (Al). Lisäksi alavaipassa on pieniä määriä Fe_2O_3 :a. Oganov et al. (2001) ja Ono et al. (2005) havaitsivat, että MgSiO_3 :lle tapahtuu samankaltainen faasimuutos perovskiitista postperovskiittirakenteeseen korkeissa paineissa kuin Fe_2O_3 :lle. MgSiO_3 :n faasimuutos vastaa painetta D'' kerroksen seismisten epäjatkuvuuksien syvyydellä. MgSiO_3 :n sisältämien epäpuhtauksien (esim. FeO , Fe_2O_3 , Al_2O_3), vaikutusta faasimuutoksen paineeseen ei vielä tarkalleen tiedetä

Ono ja Oganov (2001) käyttivät laserilla lämmitettävää timanttipuristinta (LHDAC) ja synkrotronisäteilyä tutkiessaan KLB-1 -peridotiitin ja MgSiO_3 :n faasimuutosta ortorombisesta perovskiitista post-perovskiittirakenteeseen. Lisäksi he tutkivat mahdollisten epäpuhtauksien vaikutusta faasimuutosta vastaavan paineen suuruuteen. Kuvassa 9 on esitetty röntgendiffraktiokuvio MgSiO_3 :lle korkeissa eri paineissa.



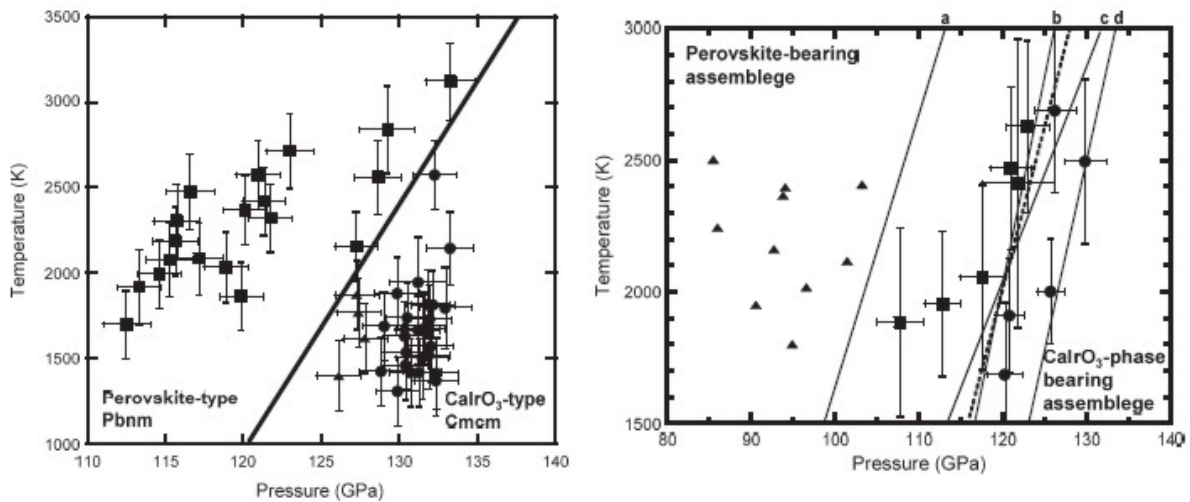
Kuva 9. Esimerkkejä havaitusta röntgendiffraktiokuvioista MgSiO_3 :lle korkeissa paineissa. Ylimmässä kuvassa a) on ortorombisen petrovskiittifaasin aikaansaama diffraktiokuvio 113 GPa paineessa ja 1700 K lämpötilassa, kuvassa b) sama faasi 105 GPa paineessa ja 1550 K lämpötilassa. Kuvassa c) on MgSiO_3 :n CaIrO_3 tyyppinen faasi 156 GPa paineessa ja 2600 K lämpötilassa. Alimmassa kuvassa on esitetty jokaisen faasin diffraktiopiivan laskettu asema. Kuvan a) tapauksessa näyte on sekoitettu platinapulveriin, muissa on käytetty kultaa. Diffraktiopiikit on nimetty seuraavasti: B – ortorombinen perovskiitti, C – CaIrO_3 tyyppinen faasi, Pt – platina, Au – kultaa, PtC – Platinakarbidi (Ono et al., 2005).

Kuvan 8a PtC-koodilla merkityt diffraktiopiikit ovat Onon ja Oganovin mukaan platinakarbidin aiheuttamia. Kun näytettä ja siihen sekoitettua platinajauhetta lämmitettiin laserilla, platina reagoi timanttialasinten pinnalla olleen hiilen kanssa. Käytettäessä kultaa painekalibranttina vastaavia piikkejä ei havaittu. Kuvassa 10 on esitetty tulokset MgSiO_3 :n ja KLB-1 -peridotiitin faasimuutokselle paineen ja lämpötilan funktiona. Faasimuutokset voidaan kirjoittaa lineaaristen yhtälöiden avulla

$$P_{\text{MgSiO}_3} = 130(\pm 3) + 0.0070(\pm 0.0030) \cdot (T - 2500) \quad (7)$$

$$P_{\text{KLB-1}} = 124(\pm 4) + 0.008(\pm 0.005) \cdot (T - 2500) \quad (8)$$

missä P on paine [GPa] ja T on lämpötila [K]. Mittausten virherajat on annettu sulkeissa. D'' -kerroksen yläpuolisten epäjatkuvuuksien keskimääräinen syvyys on 2700 km, mikä vastaa 125 GPa:n painetta, joten faasimuutos Mg-perovskiidista CaIrO_3 -tyyppiseen rakenteeseen tapahtuu todennäköisesti 2600 K lämpötilassa.



Kuva 10. Ensimmäisessä kuvassa on esitetty ortorombisen perovskiitin (pallot) ja post-perovskiitin (neliöt) stabiiliusalueet käyttäen hyödyksi platinan tilanyhtälöä. Viiva on MgSiO_3 :n ortorombisen perovskiitti- ja CaIrO_3 -tyypin (eli post-perovskiitin) välinen faasiraja. Toisessa kuvassa on ortorombisen perovskiitin ja post-perovskiitin stabiiliusalueet KLB-1 peridotiitissa hyväksikäyttäen kullan tilanyhtälöä. Neliöt ovat KLB-1 peridotiitin rautaa (Fe) ja nikkeliä (Ni) sisältävän Mg-seoksen stabiiliusalueita, pallot KLB-1 peridotiitin CaIrO_3 -tyypin stabiiliusalueita. Kolmiot ovat aikaisemmissa tutkimuksissa saatuja tuloksia. Katkoviiva on edellisten välinen faasimuutosraja. Oikeanpuoleisessa kuvassa: viiva a) LDA laskelmat, b) seismiset havainnot, c) GGA laskelmat, d) kokeelliset tulokset puhtaalle MgSiO_3 :lle (Ono et al., 2005).

Oganov ja Ono esittivät jo vuonna 2004 *Nature*ssa julkaistussa tutkimuksessaan teoreettisten laskelmien perusteella, että MgSiO_3 :lla esiintyy post-perovskiidirakenne (CaIrO_3) D'' -kerroksen paineissa. Oganov ja Ono käyttivät simuloinneissa paikallista tiheysapproksimaatiota (LDA, local density approximation) ja yleistettyä gradientti approksimaatiota (GGA, generalized gradient approximation). Simulointien tulokset on esitetty kuvassa 10. Onon ja Oganovin teoreettiset laskelmat ja kokeellinen tutkimus MgSiO_3 :n faasimuutoksesta ovat sopusoinnussa keskenään.

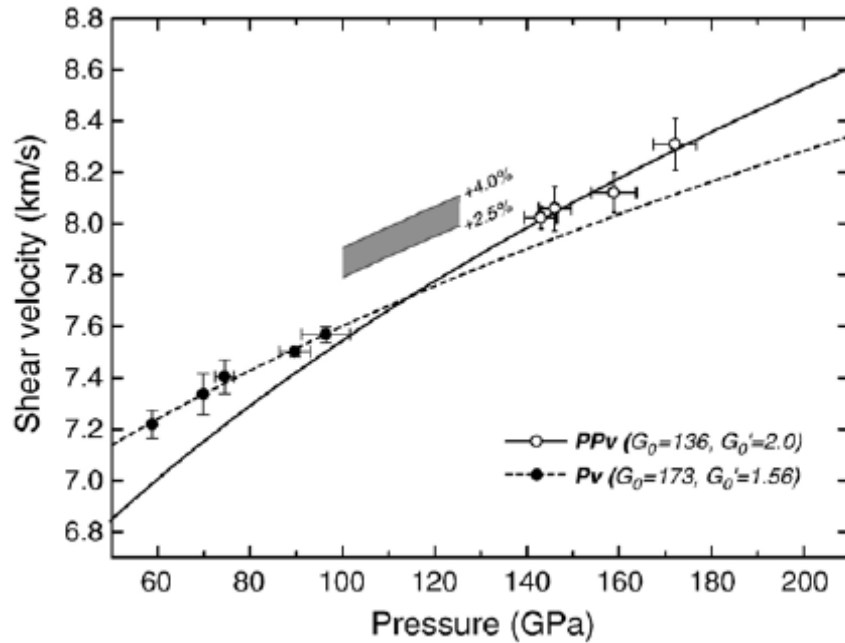
Faasimuutos perovskiidista post-perovskiidirakenteeseen aiheuttaa vaipassa 1.1 % epäjatkuvuuden tiheydessä. Tätä vastaava S-aallon nopeuden hyppäys MgSiO_3 :ssa on 1.4 %. P-aallon nopeudelle epäjatkuvuus puhtaassa MgSiO_3 :ssa on vain 0.3 %. Tämä antikorraatio P- ja S-aaltojen välillä voidaan Onon ja Oganovin (2004 ja 2005) mukaan selittää faasimuutoksen avulla.

MgSiO_3 :n post-perovskiidin kiteillä on voimakas elastinen anisotropia, koska CaIrO_3 -tyyppinen kidehila muodostaa levymäisiä rakenteita. Nämä kerrokset voivat toimia liukupintoina D'' -kerroksen konvektiiviselle virtaukselle. Horisontaalisen virtauksen alueella CaIrO_3 -tyypin rakenteelle saadaan

$$\frac{v_{SH}}{v_{SV}} = 1.029 > 1, \quad (9)$$

eli horisontaali suunnassa polarisoituneet S-aallot liikkuvat nopeammin, kuin vertikaalisuunnassa polarisoituneet. Vastaavasti ylöspäin suuntautuvan konvektiivisen virtauksen alueella $v_{SH} < v_{SV}$. Seismologisissa malleissa $v_{SH} > v_{SV}$ D'' -kerroksessa. Nopeusero on noin 1 % luokkaa, joten CaIrO_3 -rakenteelle saatu S-aaltojen nopeusero on yhteneväinen seismisten tulosten kanssa. Post-perovskiidin avulla pystytään selittämään useita seismisiä piirteitä, joten on hyvin todennäköistä, että CaIrO_3 -tyypin rakenne on D'' -kerroksen pääkomponentti (Oganov et al., 2004, Ono et al., 2005).

Murakami et al. (2007b) mittasivat ääniaallon nopeutta MgSiO_3 :n post-perovskiidin rakenteessa Brillouinin sironnalla. MgSiO_3 -näyte puristettiin 172 GPa paineeseen ja sitä hehkutettiin infrapunaserillä timanttipuristimessa. Kokeen toteutus oli hyvin samankaltainen, kun Murakamin et al. (2007a) aiemmassa tutkimuksessa MgSiO_3 :lle 96 GPa paineessa. Kuten aiemmassakin kokeessa, myös tällä kertaa MgSiO_3 :n post-perovskiidirakenteen LA-moodit peittyivät timantin akustisten moodien alle, joten P-aallon nopeutta ei pystytty määrittämään. Tutkimuksessa saadut post-perovskiidifaasin S-aallon nopeudet on esitetty kuvassa 11.



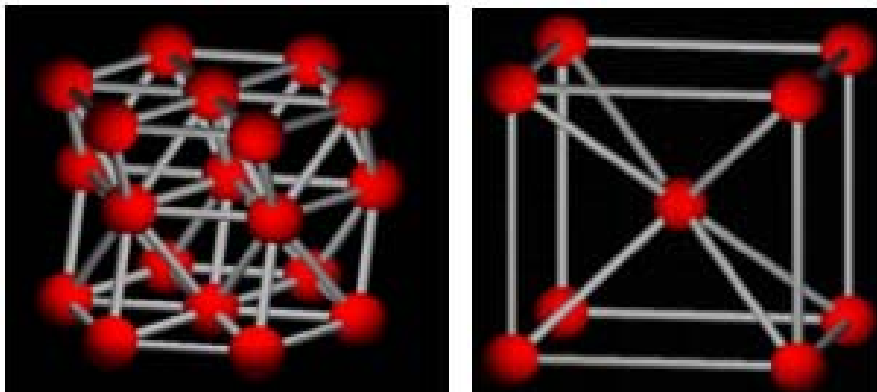
Kuva 11. MgSiO₃:n perovskiitti ja post-perovskiittifaasien S-aallon nopeudet paineen funktiona 300 K läpötilassa. Valkoiset pallot – Murakami et al. (2007b) tulokset post-perovskiittifaasille, mustat pallot – Murakami et al., (2007a) tulokset perovskiittifaasille, musta viiva – Eulerin sovitus perovskiitille, katkoviiva – Eulerin sovitus post-perovskiitille. Harmaa alue on S-aallon nopeudessa tapahtuva 2.5-4.0 % hyppäys. (Murakami et al., 2007b)

Murakami et al. (2007b) saivat MgSiO₃:n post-perovskiitti muodon leikkausmoduliksi $G_0=136$ ja sen painederivaataksi $G'_0=2.0$ normaalipaineessa. Arvot sopivat hyvin teoreettisiin laskelmiin, vaikkakin niiden virherajat ovat verrattain laajat aineiston pienuuden vuoksi. S-aallon nopeus postperovskiitissa kasvaa perovskiittia nopeammin yli 115 GPa:n paineissa (kuva 11). Tutkimuksessa käytetyssä suurimmassa paineessa (172 GPa) S-aaltojen nopeuden ero on 2 %. Seismologisten tutkimusten mukaan D''-kerroksessa tapahtuu tyypillisesti noin 2.75 % nopeushyppäys. Murakami et al. (2007b) mukaan MgSiO₃:n isokemiallinen faasimuutos perovskiitista post-perovskiittiin ei voi aiheuttaa D''-kerroksen nopeushyppäystä. Kuten Ono et al. (2004), myös Murakami et al. (2007b) esittävät, että seismisten aaltojen nopeuskontrasti aiheutuu post-perovskiitin kidehilojen järjestäytymisestä tiettyyn suuntaan (LPO, lattice preferred orientation).

5.3. Ydin

Nykyinen käsitys Maan rautaisesta sisäytimestä perustuu seismisten nopeuksien ja tiheyslaskelmien lisäksi ajatukseen, että Maan ja meteoriittien koostumus ovat verrannollisia toisiinsa yhteisen syntyhistorian takia. Siten alkuaineiden yleisyys planeetallamme tulisi vastata meteoriittien alkuainesuhteita. Meteoriitit jaetaan kivi- ja rautameteoriitteihin. Kivimeteoriittien uskotaan vastaavat vaipan koostumusta ja rautameteoriittien ytimen. Jos näin on, sisäytimestä tulisi olla noin 5 % nikkeliä. Ulkoydin on todennäköisesti rautaseosta, jossa on noin 10 % kevyempiä alkuaineita, esimerkiksi nikkeliä, happea, rikkiä, vetyä, piitä tai hiiltä (Fowler, 2005).

Rauta voi esiintyä joko bcc (body-centered cubic eli koppikeskeinen hila), fcc (face-centered cubic eli tahkokeskeinen hila) tai hcp (hexagonal close-packed) rakenteisena. Kiderakenteiden nimeäminen perustuu atomien sijoittumiseen alkeiskopissa. Kuvassa 12 on esitetty kaaviokuva bcc- ja hcp- rakenteista. Kaksi ensiksi mainittua kiderakennetta ovat todennäköisesti epästabiileja ytimen paineessa, mutta hcp-rakenteen pitäisi olla stabiili. Puhtaasta raudasta koostuva ydin olisi liian raskas, joten ytimessä esiintyy hyvin todennäköisesti myös jotain rautaa kevyempää alkuainetta. Epäpuhtaudet mahdollistavat myös bcc-faasin esiintymisen ytimessä (Fowler, 2005).



Kuva 12. Raudan hcp- ja bcc-rakenteet.

Kuva: www.intute.ac.uk

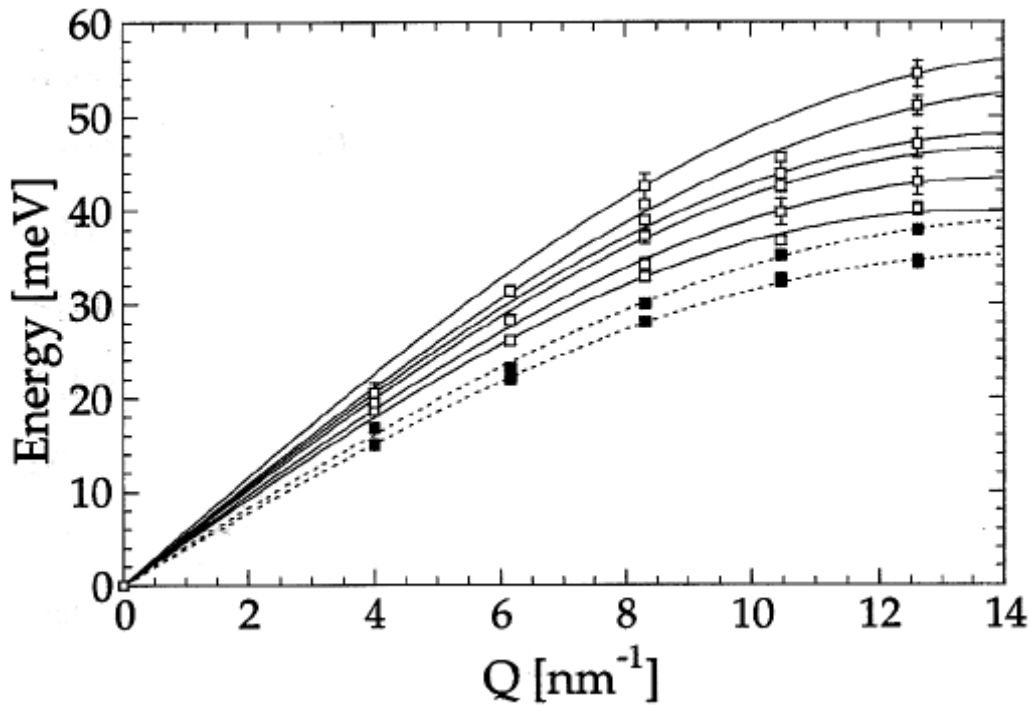
Raudan eri faasien elastisten vakioiden tunteminen on oleellista globaalien seismisten nopeusmallien kehittämisen kannalta. Fiquet et al. (2001) mittasivat hcp-raudan pitkittäisten akustisten fononien dispersiota epäelastisella röntgensironnalla (IXS). Kokeen energioresoluutio oli meV:n luokkaa, mikä mahdollisti akustisten nopeuksien määrittämisen suoraan akustisten fononien energian dispersiosta. Monikiteinen rautajauhe puristettiin timanttipuristimessa 19–110 GPa:n

paineisiin. Kokeessa ei voitu käyttää yksikiteistä näytettä, koska se olisi ollut mahdotonta saada säilymään faasimuutoksessa bcc-rakenteesta hcp-rakenteeseen 12–15 GPa:n paineessa.

Fiquetin (2001) ryhmä laski impulssimuutoksen (Q) kaavan X avulla.

$$Q = 2k_0 \sin \frac{\theta_s}{2}, \quad (10)$$

missä k_0 on törmäävän hiukkasen aaltovektori ja θ_s sen sirontakulma. Spektri rekisteröitiin samanaikaisesti viidellä eri impulssimuutoksen arvolla ($Q = 4, 6.16, 8.31, 10.46, 12.62 \text{ nm}^{-1}$). Raudan bcc-rakenteelle tehtiin mittauksia normaalissa, 0.2 ja 7 GPa:n paineissa. Hcp-rakenteelle mittaukset tehtiin kuudella eri paineella (19, 28, 45, 55, 64 ja 110 GPa). Pitkittäis- eli LA fononien dispersiokäyrät eri paineilla on esitetty kuvassa 13.



Kuva 13. Raudan LA fononien dispersiokäyrät eri paineilla. Mustat neliöt ja katkoviivat ovat bcc-rakenteelle tehdyt mittaukset 0.2 ja 7 GPa paineissa. Avoimet neliöt ja yhtenäiset viivat hcp-rakenteelle tehdyt mittaukset 19, 28, 45, 55, 64 ja 110 GPa:n paineissa (Fiquet et al, 2001).

Fiquetin et al. (2001) käyttämä IXS menetelmä mahdollistaa vain LA fononien keskiarvoisesti suuntautuneiden dispersiokäyrien määrittämisen. Tämän takia koe on hyvin herkkä kiteiden taipumukselle suuntautua tietyllä tavalla. Raudan kiteet ovat satunnaisesti järjestäytyneitä alle 40 GPa:n paineissa, mutta yli 50 GPa:n paineissa kiteiden c-akselit pyrkivät asettumaan samansuuntaisesti timanttipuristimen puristusakselin kanssa. P-aaltojen nopeus 45° kulmassa c-

akseliin nähden on tutkimusten mukaan noin 18 % suurempi, kuin ab-tasossa tai c-akselin suunnassa. Fiquetin ryhmän mittausten mukaan akustisten fononien epäelastinen sirona tapahtuu suurimmaksi osaksi ab-tasossa, joten tutkimuksessa saadut P-aaltojen nopeudet saattavat olla oikeita arvoja pienempiä.

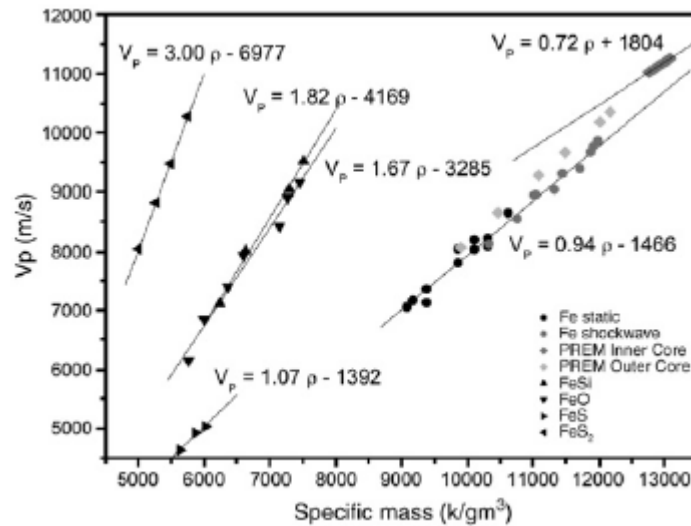
Taulukossa 1 on esitetty Fiquetin et al. (2001) tulokset P-aaltojen nopeudelle raudassa suurissa paineissa. Seismisten aaltojen nopeus raudan hcp-rakenteessa noudattaa tulosten perusteella Birchil lakia, mikä mahdollistaa nopeuksien johtamisen myös korkeammille paineille. Fiquetin ryhmän saamat nopeudet ovat kuitenkin liian suuria seismiseen aineistoon verrattuna, joten maan sisäytimen on koostuttava hcp-rautaa keveämmästä aineesta. Tämän aineen tiheyseron hcp-rautaan nähden on 4-5 %.

Taulukko 1. Akustisen ääniaallon nopeudet bcc- ja hcp-raudassa 298 K lämpötilassa. Kaksi ensimmäistä arvoa on mitattu bcc-rakenteelle, muut hcp-rakenteelle. (Fiquet et al., 2001)

P (GPa)	V_p (km/s)
0.2	5.91 ± 0.06
7 ± 0.1	6.30 ± 0.06
19 ± 0.3	7.06 ± 0.10
28 ± 0.5	7.36 ± 0.18
45 ± 0.9	7.80 ± 0.20
55 ± 1.2	8.03 ± 0.24
64 ± 1.5	8.22 ± 0.25
110 ± 2	8.80 ± 0.44

Badro et al. (2007) mittasivat P-aaltojen nopeuksia wustitissä (FeO), troiliitissa (FeS), rikkikiisussa (FeS₂) ja rautasilikaatissa (FeSi) epäelastisella röntgensironnalla. Maan ytimen olosuhteita pyrittiin simuloimaan LHDAC:n avulla. Kuten edellisessäkin tutkimuksessa P-aaltojen nopeus määritettiin mittaamalla LA-fononien dispersiota viidellä impulssimuutos arvolla väliltä 4-12 nm⁻¹. FeO-, FeS₂- ja FeSi-näytteille mitattiin röntgensironnalla kuvio huoneenlämmössä 90 GPa:n paineeseen saakka. FeS näytteelle tehtiin mittauksia paineissa 4-13.5 GPa ja lämpötiloissa 375–610 K. Badro et al. (2007) käyttivät hyödykseen aikaisempia tutkimustuloksia puhtaan hcp-raudan P-aaltojen nopeuksille. He eivät kuitenkaan hyödyntäneet kaikkia tuloksia, koska yli 78 GPa:n paineessa rautakiteissä havaitaan elastista anisotropiaa, eli P-aaltojen nopeus on kulmariippuvainen.

Badron ryhmän tutkimuksissa selvisi, että ytimen paineissa vakioitiheydellä lämpötilan vaikutus pitkittäisen ääniaallon nopeuteen on hyvin pieni. Siten Birch'in laki pätee ytimen olosuhteissa hcp- ja bcc-raudalle. Sen sijaan lämpötilalla havaittiin olevan merkittävä vaikutus P-aaltojen nopeuteen hieman pienemmissä paineissa.



Kuva 14. Fe-, FeS-, FeO-, FeS₂- ja FeSi-näytteille mitatut P-aaltojen nopeudet tiheyden funktiona. Jokaiselle aineelle on määritetty Birch'in lain vakiot a ja b (Badro et al., 2007)

Kuvassa 14 on esitetty Badron et al. (2007) laskemat P-aaltojen nopeudet tutkituissa näytteissä. Laskennassa käytetyt tiheydet määritettiin mittaamalla röntgendiffraktiolla jokaisen komponentin moolisuhteet näytteessä jokaisella paineella. Kuvasta 14 on havaittavissa, että Birch'in laki pätee kaikille näytteille mittauspaineissa. Taulukossa 2 on esitetty näytteille mitatut tiheydet ja niitä vastaavat nopeudet.

Taulukko 2. Mitatut tiheydet ja P-aallon nopeudet raudan seoksille (Badro et al., 2007).

ρ (kg/m ³)	+/-	V_P (m/s)	+/-
<i>Fe</i>			
9084	33	7055	49
9382	34	7363	52
9861	32	7802	62
10107	54	8032	72
10315	58	8222	90
9084	35	7059	49
9175	35	7169	57
9382	30	7137	57
9861	35	8042	72
10107	46	8197	82
10315	60	8085	89
10621	58	8654	121
<i>FeO</i>			
5770	39	6150	49
6000	40	6850	58
6360	34	7400	66
6600	48	7930	73
7270	56	8910	88
7147	62	8430	93
7450	54	9160	110
<i>FeSi</i>			
6239	28	7121	70
6630	28	8013	96
7293	34	9043	127
7507	33	9515	152
<i>FeS</i>			
5640	46	4630	79
5870	54	4920	113
6020	66	5030	126
<i>FeS₂</i>			
5010	11	8042	88
5277	14	8824	124
5492	21	9476	133
5757	32	10278	144

Maan ytimen rautaseoksessa on noin 5 % nikkeliä (Ni), jolla ei kuitenkaan ole suurta merkitystä ääniaallon nopeuteen raudassa. Nikkelin vaikutus on merkityksetön myös ytimessä mahdollisesti olevien kevyempien alkuaineiden ja niiden määrän suhteen. Badron et al. (2007) laskelmien perusteella sisäytimen tulisi sisältää 10 p-% (painoprosentti) rikkiä, jotta Maan sisäytimen tiheys- ja nopeusprofiilit toteutuisivat. Lisäksi FeS-seoksen kimmomodulin tulisi olla hyvin alhainen, mikä pehmentäisi sisäydintä oleellisesti. Myös FeS₂-ydin todetaan tutkimuksessa mahdottomaksi.

Sisäydin voi Badron laskelmien perusteella sisältää korkeintaan yhden painoprosentin rikkiä, kun otetaan huomioon myös rikin kondensaatio ja haihtumislämpötilat. Jakautumiskerroin kuvaa alkuaineen differentiaalista liukoisuutta seoksen kiinteän ja nestemäisen muodon välillä. Hapella on

hyvin suuri jakautumiskerroin ($D=400$) raudan nestemäisen ja kiinteän olomuodon välillä, joten sitä ei voi esiintyä suuria määriä sisäytimessä. Piille ja rikille kerroin on pieni ($D=1.2$). Badron et al. (2007) päätyivät esittämään, että sisäytimessä on 2.3 p-% piitä ja pieni määrä happea (0.1 p-%). Tällöin ulkoytimessä on piitä 2.8 p-% ja happea 5.3 p-%. Badron et al.(2007) malli Maan ytimen koostumukselle on esitetty taulukossa 3. Taulukossa esitetty malli on yhteensopiva sekä petrologisten, seismisten, geokemiallisten että kosmokemiallisten mallien kanssa.

Taulukko 3. Badron et al. (2007) tulokset Maan ytimen sisältämille rautaa kevyemmille alkuaineille.

Alkuaine	Mineraali	Alkuaineen osuus mineraalissa (paino-%)	Purisuvuus	Osuus sisäytimestä (paino-%)	Osuus ulkoytimestä (paino-%)
Si	FeSi	2.3	1.28	2.3	2.8
O	FeO	1.6	1.33	0.1	5.3
S	FeS	9.7	2.51	0	0
S	FeS ₂	3.6	1.0	0	0

6. JOHTOPÄÄTÖKSET

Seismiset nopeusjakaumat ja tiheyslaskelmat tarvitsevat tulkintavaiheessa tuekseen laboratoriomittauksia. Erityisesti elastisten parametrien määrittäminen on Maan rakenteen selvittämisen kannalta tärkeää. Timanttipuristimen ja röntgendiffraktion avulla pystytään tekemään suoria mittauksia mineraalien rakenteesta Maan syvyyksien paineissa. Paineen kasvaessa aineen atomit painuvat lähemmäs toisiaan, jolloin sen fysikaaliset ominaisuudet muuttuvat. Mineraaleissa tapahtuu faasimuutoksia, jolloin sen atomit järjestäytyvät uudella tavalla. Lämmitämällä näytettä laserilla pystytään mittauksiin ottamaan mukaan myös lämpötilan vaikutus aineen rakenteeseen. Epäelastinen röntgensironnan ja Brillouin sironnan avulla mitataan näytteen fononien energiaa, jolloin pystytään määrittämään akustisten aaltojen nopeus näytteessä. Aineissa esiintyy pitkittäis- ja poikittaisfononeita, jotka vastaavat P- ja S-aallon nopeuksia.

Maan vaippa jaetaan koostumuksen ja seismisten aaltojen nopeuksien perusteella ylä- ja alavaippaan. Ylävaipassa havaitaan useita seismisiä epäjatkuvuuksia, joiden uskotaan johtuvan oliviinin faasimuutoksista. Alavaipassa ei samankaltaisia seismisiä epäjatkuvuuksia havaita. DAC:lla tehdyt tutkimukset akustisten aaltojen nopeudesta MgSiO₃:ssa ja Maan seisminen malli

ovat sopusoinnussa keskenään vaipan syvyyksillä. Timanttipuristimella tehtyjen tutkimusten mukaan MgSiO_3 muuttuu alavaipan paineissa perovskiittirakenteesta post-perovskiittiin. Tämä faasimuutos tapahtuu D'' -kerroksen syvyyttä vastaavassa paineessa. D'' -kerros on ulkoytimen ja alavaipan välissä oleva vyöhyke, jossa seismisten aaltojen käyttäytyminen eroaa muusta alavaipasta. Erikoisten ominaisuuksiensa takia D'' -kerros on viime vuosina ollut aktiivisen tutkimuksen kohteena. MgSiO_3 :n post-perovskiittirakenne muodostaa levymäisiä silikaattikerroksia, jotka voivat toimia liukupintoina konvektiivisille virtauksille. Tästä seuraa D'' -kerroksessa havaittavien horisontaali- ja vertikaalisuunnassa polarisoituneiden S-aaltojen nopeusero.

DAC:lla on tutkittu myös Maan ytimen mahdollista koostumusta. Nykyisen käsityksen mukaan sisäydin on kiinteää rauta-nikkeliseosta, jossa on myös pieniä määriä rautaa kevyempiä alkuaineita. Nestemäisessä ulkoytimessä on raudan lisäksi 10 % jotakin kevyempää alkuainetta. Rauta voi esiintyä ytimessä hcp- tai bcc-muodossa. Eri rakenteiden elastisten vakioiden tunteminen on tärkeää ytimen nopeusmallin kehittämisen kannalta. DAC:lla tehtyjen tutkimusten mukaan hcp-raudan kiteet pyrkivät suuntautumaan tietyllä tavalla yli 50 GPa:n paineissa. Suuntautumisen seurauksena seismisten aaltojen nopeudet rautakiteessä ovat anisotrooppisia. Tutkimuksissa puhtaalle raudalle on saatu seismiseen aineistoon verrattuna liian korkeita seismisiä nopeuksia, joten ytimessä on oltava myös rautaa kevyempiä alkuaineita. Badro et al. (2007) esittävät, että Maan ytimessä on raudan lisäksi 2.3 p-% piitä ja 0.1 p-% happea. Ulkoytimessä piin osuus on 2.8 p-% ja hapen osuus 5.3 p-%.

Timanttipuristin on tällä hetkellä paras mahdollinen laite suurten, stabiilien paineiden tuottamiseen, jotka vastaavat Maan sisäosien paineita. Helsingin yliopiston Röntgenfysiikan osaston omistamaa DAC-laitetta voitaisiinkin käyttää hyväksi myös geofysikaalisissa tutkimuksissa, esimerkiksi tutkittaessa Suomessa paljastuneina olevia vaipan mineraaleja ja niiden faasimuutoksia korkeissa paineissa. Vaipan olosuhteiden optimaalinen simuloiminen edellyttäisi kuitenkin LHDAC-laitteen hankkimista, jotta tutkimuksissa voitaisiin huomioida myös Maan sisäosien korkeat lämpötilat.

KIRJALLISUUSVIITTEET

Akella, J., 1996. The Diamond Anvil Cell: Probing the Behavior of Metals under Ultrahigh Pressures. *Science & Technology Review* March.

Badro, J., Fiquet, G., Guyot, F., Gregoryanz, E., Ocelli, F., Antonangeli, D., d'Astuto, M., 2007. Effect of light elements on the sound velocities in solid iron: Implication for the composition of Earth's core. *Earth and Planetary Science Letters* 254, 233-238.

Burns, G., 1985. *Solid State Physics*. Academic Press Inc.

Fiquet, G., Badro, J., Guyot, F., Requard, H., Krisch, M., 2001. Sound Velocities in Iron to 110 Gigapascals. *Science* 291, 468-471.

Fiquet, G., Badro, J., Guyot, F., Bellin, Ch., Krisch, M., Antonangeli, D., Requardt, H., Mermet, A., Farber, D., Arcane-Ruddle, C., Zhang, J., 2004. Application of inelastic X-Ray scattering to the measurements of acoustic wave velocities in geophysical materials at very high pressure. *Physics of the Earth and Planetary Interiors* 143-144, p. 5-18.

Fowler, C.M.R., 2005. *The Solid Earth: An Introduction to Global geophysics*. Cambridge University Press.

Lowrie, W., 1997. *Fundamentals of Geophysics*. Cambridge University Press.

Irifune, T., Isshiki, M., Sakamoto, S., 2005. Transmission electron microscope of the high-pressure form of magnesite retrieved from laser heated diamond anvil cell. *Earth and Planetary Science Letters* 239, p. 98-105.

Murakami, M., Sinogeikin, S.V., Hellwig, H., Bass, J., Li, J., 2007a. Sound velocity of MgSiO₃ perovskite to Mbar pressure. *Earth and Planetary Science letters* 256, p. 47-54.

Murakami, M., Sinogeikin, S., Bass, J., Sata, N., Ohishi, Y., Hirose, K., 2007b. Sound velocity of MgSiO₃ post-perovskite phase: A constraint on the D'' discontinuity. *Earth and Planetary Science*

Letters 259, p. 18-23.

Oganov, A., Ono, S., 2004. Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of MgSiO_3 in Earth's D''-layer. *Nature* 430, p. 445-448.

Ono, S., Oganov, A., 2005. In situ observations of phase transition between perovskite and CaIr_3 -type phase in MgSiO_3 and pyrolitic mantle composition. *Earth and Planetary Science Letters* 236, p. 914-932.

Tipler, P., Llewellyn, R., 2003. *Modern Physics*, 4th edition. W.H.Freeman and Company.

www.crystal.vt.edu/crystal/roughguide.html

www.kiviopas.fi

www.loto-eng.com