

α - β 石英相变的应变参数计算及其地质意义*

周文戈¹, 谢鸿森¹, 赵志丹², 周 辉³, 郭 捷¹

(1. 中国科学院地球化学研究所高温高压地球动力学实验室, 贵州贵阳 550002;

2. 中国地质大学(北京)地矿系岩石室, 北京 100083;

3. 北京大学地质系, 北京 100871)

摘要: 利用已有的 α 和 β 石英压缩性、热膨胀性、弹性及相变温度压力资料, 计算了 α - β 石英相转变时, α 和 β 石英的晶胞参数。依据虎克定律以及高压下 β 石英的弹性参数, 估算了 α - β 石英相转变时的应变、应力和应变能。结果表明, 在 0~1.1 GPa 条件下, 随着压力升高, α - β 石英相变的线应变介于 -0.006~0.005 之间, 体应变介于 -0.016~0.012 之间, 应力介于 -0.46~0.14 GPa 之间; 应变能介于 965~2760 kJ/m³ 之间。当压力为 0.5 GPa 左右时, α - β 石英相变的应变、应力和应变能均达到最小值。在此基础上, 讨论了壳内大规模酸性岩浆活动引起的 α - β 石英相变对壳内岩石的作用。

关键词: α - β 石英相变; 应变; 应力; 应变能

中图分类号: O521+.2 **文献标识码:** A

1 引言

SiO₂ 在高温高压下至少有 11 个相: α 石英、 β 石英、 α 鳞石英、 β 鳞石英、 α 方石英、 β 方石英、柯石英、斯石英、后斯石英相、非晶相和流体相^[1]。其中比较常见和具有较大地质意义的是 α 石英、 β 石英、柯石英、斯石英和后斯石英相。它们随压力的升高、温度的变化, 依次稳定于地球内部的不同部位^[2]。 α 石英是地壳中最常见的矿物。前人已经较为深入地研究了 α 和 β 石英的压缩性、弹性、及相变温度压力^[3-14]。本研究在系统收集前人资料的基础上, 计算了 α - β 石英相转变过程中的自发应变、应力和应变能, 讨论了地壳内大规模酸性岩浆活动引起的 α - β 石英相变, 及其对地壳内岩石力学性质的影响。

2 晶体相变过程中应变参数计算的理论

晶体由外界条件(如温度、压力、氧逸度等)的变化而引发结构相变时, 其晶胞参数将会发生改变, 由此将会引发晶体的应变, 这就是相变过程中的应变。因此, 相变过程中的应变, 本质上是由于外力造成晶体内部结构的改变引起的。决定相变过程中的应变的主要因素有: (1) 相变前后晶体的晶胞参数; (2) 外界的物理化学环境。

2.1 晶体相变的应变

晶体相变前后两相(高对称相和低对称相)都是三斜晶系的情况, 是描述晶体相变的一般形式, 也是晶体对称性最低而结构最复杂的相变。此类相变过程中应变的计算公式, 可适用于其它对称形式晶体的相变过程。取笛卡儿坐标系 x, y, z, y 平行于结晶轴的 b 轴, z 平行于(001)晶面的法线方向, x 垂直

* 收稿日期: 2002 04 22; 修回日期: 2002 06 24

基金项目: 国家自然科学基金(10032040, 49904005); 中国科学院知识创新工程重要方向项目(KJ CX2-SW- No. 3)

作者简介: 周文戈(1967-), 男, 博士, 副研究员。

于 y 和 z 。 x 轴的正方向服从右手法则。这样取定坐标系后, 应变张量的元素如下^[15]

$$e_1 = \frac{a \sin \gamma}{a_0 \sin \gamma_0} - 1 \quad (1)$$

$$e_2 = \frac{b}{b_0} - 1 \quad (2)$$

$$e_3 = \frac{c \sin \alpha \sin \beta^*}{c_0 \sin \alpha_0 \sin \beta_0^*} - 1 \quad (3)$$

$$\frac{1}{2} e_4 = \frac{1}{2} \left[\frac{c \cos \alpha}{c_0 \sin \alpha_0 \sin \beta_0^*} - \frac{b \cos \alpha_0}{b_0 \sin \alpha_0 \sin \beta_0^*} + \frac{\cos \beta_0^*}{\sin \beta_0^* \sin \gamma_0} \left(\frac{a \cos \gamma}{a_0} - \frac{b \cos \gamma_0}{b_0} \right) \right] \quad (4)$$

$$\frac{1}{2} e_5 = \frac{1}{2} \left(\frac{a \sin \gamma \cos \beta_0^*}{a_0 \sin \gamma_0 \sin \beta_0^*} - \frac{c \sin \alpha \cos \beta^*}{c_0 \sin \alpha_0 \sin \beta_0^*} \right) \quad (5)$$

$$\frac{1}{2} e_6 = \frac{1}{2} \left(\frac{a \cos \gamma}{a_0 \sin \gamma_0} - \frac{b \cos \gamma_0}{b_0 \sin \gamma_0} \right) \quad (6)$$

在上述公式中, $e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6$ 为应变张量元素, a, b, c, α 和 γ 为一定温度压力条件下高对称形式的晶胞参数, a_0, b_0, c_0, α_0 和 γ_0 为同条件下的低对称形式的晶胞参数。 β^* 和 β_0^* 为倒易晶格角。在每一相中必须用同一单位晶胞。

2.2 晶体相变的应力和应变能

在任意温度压力条件下, 弹性变形过程中, 晶体的应力 (σ) 和应变 (e) 关系由广义 Hooke 定律给出^[16]

$$\sigma_i = C_{ik} e_k + \beta_i T \quad (7)$$

$$\beta_i = - C_{ij} \alpha_j \quad (8)$$

式中: C_{ik} 为弹性劲度 (GPa), T 为绝对温度 (K), β_i 为热模量 ($\text{GPa} \cdot \text{K}^{-1}$), α_j 为热膨胀系数 (K^{-1})。

储存在变形晶体中的应变能 (G) 为^[15]

$$G = \frac{1}{2} \sum_{i,k} C_{ik} e_i e_k \quad (9)$$

3 α — β 石英相变的应变、应力和应变能

当 α 石英转变为 β 石英时, 矿物由三方晶系转变为六方晶系。对于 α 石英有: $a_0 = b_0, \alpha_0 = \beta_0^* = 90^\circ, \gamma_0 = 120^\circ$, 对于 β 石英有 $a = b, \alpha = \beta^* = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ ^[17]。那么, 方程 (1)~(6) 给出

$$e_1 = e_2 = a/a_0 - 1, e_3 = c/c_0 - 1, e_4 = e_5 = e_6 = 0 \quad (10)$$

因此, 如果知道了 α — β 石英相变的温度压力条件, 知道了 α 和 β 石英晶胞参数随温度和压力的变化趋势, 那么就可以估算 α — β 石英相变时的线应变。更进一步地, 如果还同时知道 β 石英的弹性劲度, 就可以估算 α — β 石英相变时的应力和应变能。

3.1 α — β 石英相变的温度和压力

在高温高压下, 用差热分析研究 α — β 石英相变由来已久^[18~21]。但已发表的 α — β 石英相变界线并不一致。Shen 等用激光干涉法 (Laser Interferometry) 在常压 ~ 1.1 GPa、最高温度 850 °C 的条件下, 研究了 α — β 石英相变, 给出了新的 α — β 石英相变界线^[22]

$$T = 847.3 + 0.2559p - 6.406 \times 10^{-6} p^2 \quad (11)$$

式中: T 为相变温度 (K), p 为相变压力 (MPa)。

3.2 α 石英压缩特性

早在 1923 年, Adams 和 Williamson 就进行了 α 石英的静态压缩实验。随着技术水平的提高, Bridgman, McWhan, Vaidya 等先后研究了 α 石英的静态高压压缩性质^[6~11]。固体物质在高压下将被

压缩^[23,24]。在此,将 Olinger, Jorgensen, d' Amour 和 Levien 等的实验数据^[8~11]进行拟合,得到 α 石英的晶胞参数随压力变化的方程

$$a_{p,T_0}/a_{p_0,T_0} = 0.999048 - 8.22236 \times 10^{-3}p + 2.16614 \times 10^{-4}p^2 \quad (12)$$

$$c_{p,T_0}/c_{p_0,T_0} = 0.998982 - 5.73778 \times 10^{-3}p + 2.16519 \times 10^{-4}p^2 \quad (13)$$

a_{p,T_0} 、 c_{p,T_0} 分别为温度 $T_0 = 300$ K、压力 p (GPa) 时,结晶轴 a 和 c 的长度(0.1 nm); a_{p_0,T_0} 、 c_{p_0,T_0} 分别为温度 $T_0 = 300$ K、压力 $p_0 = 0.1$ MPa 时,结晶轴 a 和 c 的长度(0.1 nm)。

目前,还没有 β 石英压缩特性的实验报道,假设 β 石英压缩特性与 α 石英压缩特性相同。

3.3 α 和 β 石英的热膨胀性

常压下, α 石英的热膨胀性已经有过相当深入的研究,而对 β 石英热膨胀性的研究相对较少^[13]。最新的关于 α 和 β 石英晶胞参数的热膨胀性质的研究是由 Carpenter 给出的^[4]。利用 Carpenter 的实验数据,可以得到 α 和 β 石英晶胞参数随温度的变化曲线。

对于 α 石英

$$a_{p_0,T} = 4.90751 - 7.26812 \times 10^{-6}T + 1.03131 \times 10^{-7}T^2 \quad (14)$$

$$c_{p_0,T} = 5.40331 - 1.29437 \times 10^{-5}T + 7.36945 \times 10^{-8}T^2 \quad \text{对于 } \beta \text{ 石英}$$

$a_{p_0,T} = 4.03321 \times 10^{-6}T + 4.99496$ $c_{p_0,T} = -5.60512 \times 10^{-6}T + 5.46369$ 三方和六方晶系晶体的热膨胀系数为^[25]: $\alpha_1 = \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6 = 0$ 。 α_1 和 α_2 是平行于结晶轴 a 和垂直于结晶轴 a 和 c 方向的热膨胀系数, α_3 是平行于结晶轴 c 方向的热膨胀系数。由 Carpenter 等的数据可得^[4]:

对于 α 石英

$$\alpha_1 = \alpha_2 = 1.15106 \times 10^{-5} - 6.91563 \times 10^{-8}T + 3.3096 \times 10^{-10}T^2 - 5.20166 \times 10^{-13}T^3 + 2.83907 \times 10^{-16}T^4 \quad (18)$$

$$\alpha_3 = 4.00334 \times 10^{-5} - 2.17967 \times 10^{-8}T + 1.15511 \times 10^{-10}T^2 - 1.70314 \times 10^{-13}T^3 + 9.02171 \times 10^{-17}T^4 \quad (19)$$

对于 β 石英

$$\alpha_1 = \alpha_2 = -7.0448 \times 10^{-13}T + 8.07517 \times 10^{-7} \quad (20)$$

$$\alpha_3 = -1.00696 \times 10^{-12}T - 1.02594 \times 10^{-8} \quad (21)$$

3.4 α 和 β 石英的弹性劲度

表 1 列出了 α 石英和 β 石英的弹性劲度及其对温度压力的偏导数。 α 石英弹性劲度来源于 Bass^[26], 其对压力的偏导数来自 McSkimin^[5], 对温度的偏导数来自 Ohno^[14], β 石英的弹性劲度及其相关数据来自 Carpenter 等^[4]。目前,还没有 β 石英弹性劲度对压力的偏导数的数据报道,为此,假定 β 石英弹性劲度对压力的偏导数与 α 石英的相同。

4 α - β 石英相变的应变参数计算结果

由公式(11)确定不同压力下, α - β 石英相变的温度;将所获得的温度压力值代入公式(12)~(17),可以获得不同温度压力条件下 α 和 β 石英的晶胞参数(a 和 c);将获得的 α 和 β 石英的晶胞参数值代入公式(10),可以计算出 α - β 石英相变的线应变(见图 1)。同时,依据公式(22)可以计算出 α - β 石英相变的体应变(V_s)(见图 2)^[15]

$$V_s = (1 + e_1)^2(1 + e_3) - 1 \quad (22)$$

由图 1 可知:随压力增高,线应变由正值变为负值。当 $p < 0.55$ GPa 时, $e_1 > 0$, 当 $p < 0.45$ GPa 时, $e_3 > 0$ 。当 $p < 0.5$ GPa 时,体应变大于 0(见图 2)。也就是说, $p < 0.5$ GPa 时, α 石英的体积小于 β 石英的体积;当 $p > 0.5$ GPa 时, α 石英的体积大于 β 石英的体积。

依据公式(20)、(21)可获得任意温度条件下 β 石英的热膨胀系数,同时,利用表 1 中的数据 and 公式(7)~(9)能够计算出 α - β 石英相变的应力和应变能,见图 3、图 4。

表 1 α 石英和 β 石英的弹性劲度及其随温度压力变化系数

Table 1 Elastic stiffnesses and their coefficients of temperature and pressure for α - and β -quartz

α -quartz				β -quartz				
Elastic stiffness	C_{ij}^0 /(GPa)	$(\partial C_{ij}/\partial p)_T$	$(\partial C_{ij}/\partial T)_p$ /(GPa·K ⁻¹)	Elastic stiffness	C_{ij}^0 /(GPa)	$(\partial C_{ij}/\partial p)_T$	A_{ij}	K_{ij}
C_{11}	86.6	3.28	-0.0115107	C_{11}	142.0	3.28	-232.0	-0.63
C_{33}	106.1	10.84	-0.0354547	C_{33}	129.1	10.84	-149.0	0.60
C_{44}	57.8	2.66	-0.0198703	C_{44}	37.0	2.66	0	0
C_{12}	6.7	8.66	-0.0345437	C_{12}	40.5	8.66	-232.0	-0.63
C_{13}	12.6	5.97	-0.0178525	C_{13}	55.1	5.97	-190.5	-0.61
C_{14}	-17.8	1.93	-0.000589117	C_{14}	0	1.93	0	0
$C_{11}=C_{22}, C_{14}=C_{56}, C_{55}=C_{44}, C_{66}=(1/2)(C_{11}-C_{12}),$ $C_{23}=C_{13}, C_{24}=-C_{14}, C_{15}=C_{16}=C_{25}=$ $C_{26}=C_{34}=C_{35}=C_{36}=C_{45}=C_{46}=0$				$C_{11}=C_{22}, C_{14}=C_{56}, C_{55}=C_{44}, C_{66}=(1/2)(C_{11}-C_{12}),$ $C_{23}=C_{13}, C_{24}=-C_{14}, C_{15}=C_{16}=C_{25}=$ $C_{26}=C_{34}=C_{35}=C_{36}=C_{45}=C_{46}=0$				
$C_{ij}=C_{ij}^0+(\partial C_{ij}/\partial p)_T \times p+(\partial C_{ij}/\partial T)_p \times (T-298)$				$C_{ij}=C_{ij}^0+(\partial C_{ij}/\partial p)_T \times p+A_{ij} T-T_c ^{K_{ij}}$ T_c is the equilibrium transition temperature.				

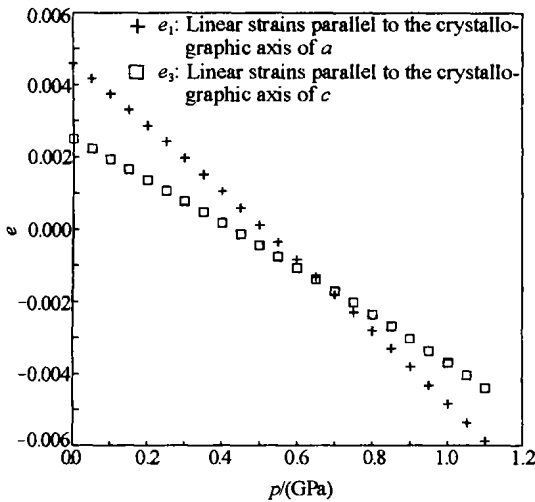


图 1 0~1.1 GPa, $\alpha \rightarrow \beta$ 石英相变时的线应变
Fig. 1 Linear strains for $\alpha \rightarrow \beta$ quartz transition at 0~1.1 GPa

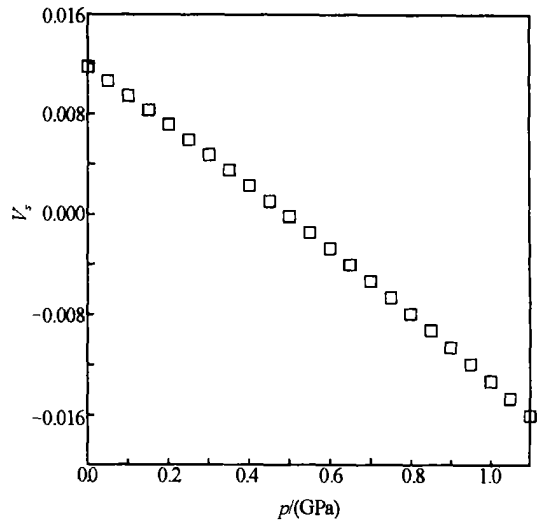


图 2 0~1.1 GPa, $\alpha \rightarrow \beta$ 石英相变时的体应变
Fig. 2 Volume strains for $\alpha \rightarrow \beta$ quartz transition at 0~1.1 GPa

由图 3 可以看出,随着压力升高, α - β 石英相变的应力由正值变为负值。当 $p > 0.45$ GPa 时, $\sigma_1 < 0$, 当 $p > 0.35$ GPa 时, $\sigma_3 < 0$ 。也就是说,当 $p > 0.45$ GPa 时,应力方向发生了改变,即由沿晶体结晶轴向其外侧,转变为沿晶体结晶轴向其内侧。在 $p < 1.0$ GPa 条件下, σ_1 和 σ_3 分别小于 0.30 GPa 和 0.39 GPa。

由图 4 可以看出, 随着压力升高, α - β 石英相变的应变能由大逐渐变小, 当 $p = 0.5 \text{ GPa}$ 时, 达到最小值, 之后又逐渐增大。当 $p > 0.85 \text{ GPa}$ 时, 随着压力增大, 应变能增大较为迅速, 在 $p = 1.1 \text{ GPa}$ 时, 达到 2760 kJ/m^3 。

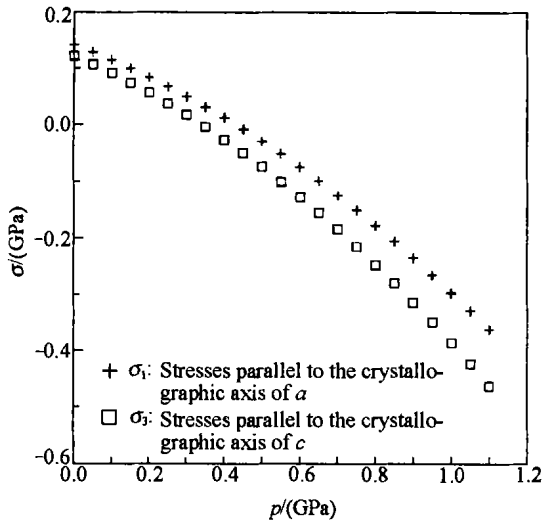


图 3 0~ 1.1 GPa, $\alpha \rightarrow \beta$ 石英相变时的应力
Fig. 3 Stresses for $\alpha \rightarrow \beta$ quartz transition at 0~ 1.1 GPa

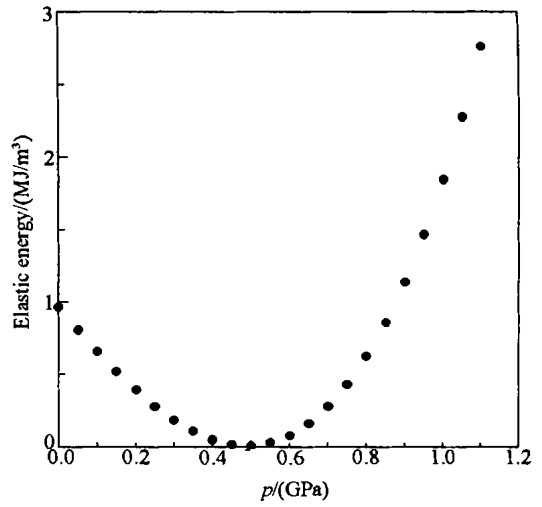


图 4 0~ 1.1 GPa, $\alpha \rightarrow \beta$ 石英相变时的应变能
Fig. 4 Elastic energy for $\alpha \rightarrow \beta$ quartz transition at 0~ 1.1 GPa

5 α - β 石英相变的地质意义

对于稳定的大陆地壳而言, 其地温曲线在 α 石英的稳定区^[27], 见图 5(a), 因此地壳中的石英主要是 α 石英。如果存在较为强烈的热扰动, 石英才有可能以 β 石英的形式存在, 见图 5(b), 所以, 强烈的地壳岩浆活动是形成 β 石英的主要原因之一。

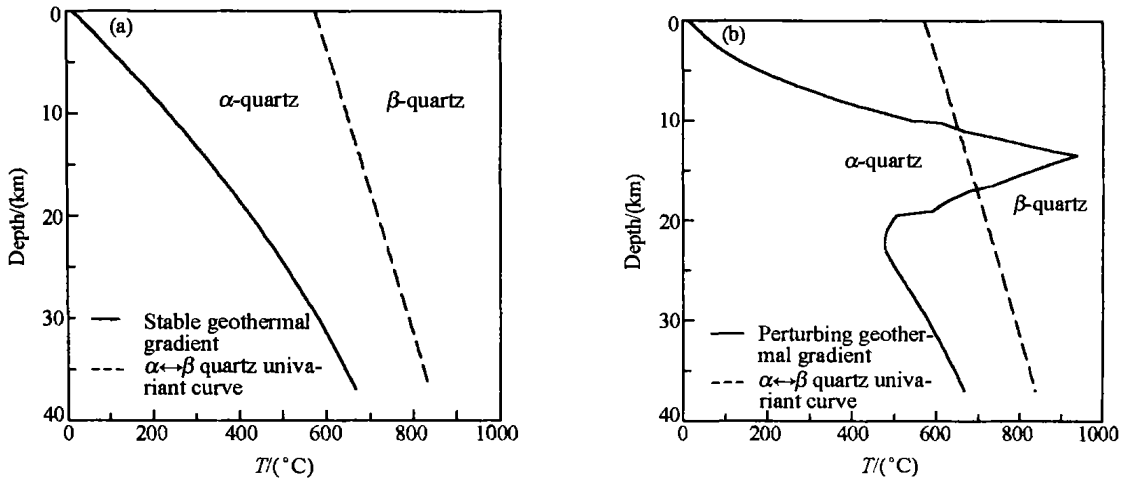


图 5 大陆地壳的地温曲线及 α - β 石英单变线

- (a) 位于 α 石英稳定区的稳定地温曲线;
- (b) 越过 α - β 石英单变线, 进入 β 石英稳定区的扰动地温曲线

Fig. 5 Geothermal gradient of continental crust and the univariant curve for α - β quartz transition

- (a) Stable geothermal gradient of continental crust, which lies in the region of α quartz;
- (b) Perturbing geothermal gradient of continental crust, which crosses

the α - β quartz univariant curve to the region of β quartz

如果大规模的酸性岩浆侵位深度为 15~ 35 km(大致相当于 0.5~ 1.0 GPa), 围岩中的石英将转变为 β 石英, 由于 $p > 0.5$ GPa 时, α 石英的体积大于 β 石英的体积, 因此围岩的体积缩小。由于 α - β 石英相变叠加在围岩上的应力小于 0.39 GPa(见图 3), 那么, 由于 α - β 石英相变带来的差异应力小于 0.39 GPa, 远远小于围压 0.5~ 1.0 GPa 时, 岩石破裂的差异应力值约为 1.2~ 2.4 GPa^[28]。另一方面, 岩浆结晶将形成 β 石英。当岩体冷却时, 岩体和围岩的体积总体上将减小。但当岩体和围岩冷却至 β - α 石英相变点温度时, 岩体和围岩中将发生 β - α 石英相变, 这时岩体和围岩的体积将膨胀, 造成原来存在的微裂隙闭合, 不利于岩浆期后热液的运移和矿物质的沉淀。

如果大规模的酸性岩浆侵位深度小于 15 km, 围岩中的石英将转变为 β 石英, 由于 $p < 0.5$ GPa 时, α 石英的体积小于 β 石英的体积, 因此围岩的体积将膨胀。这时, α - β 石英相变带来的差异应力小于 0.07 GPa, 仍然远远小于围压 0.1~ 0.5 GPa 时, 岩石破裂的差异应力值约为 0.4~ 1.2 GPa^[28]。岩浆结晶同样形成 β 石英。当岩体冷却时, 岩体和围岩中将发生 β - α 石英相变, 岩体和围岩的体积将进一步缩小, 造成原来存在的微裂隙的扩张, 这将为岩浆期后热液的运移和矿物质的沉淀提供空间。因此, 从我们的计算结果来看, 侵位深度小于 15 km 的中酸性岩浆将更有利于成矿。

必须指出的是, 在前面的计算中, 我们作了以下假设: (1) 由常温常压状态到高温高压状态过程中, α 和 β 石英晶胞参数的变化, 与它们先经历常压高温状态, 然后再达到高温高压状态的变化相同。(2) β 石英压缩特性与 α 石英压缩特性相同。(3) 压力对 β 石英热膨胀系数的影响可以忽略。(4) β 石英弹性劲度对压力的偏导数与 α 石英的相同。从理论上说, 这些假设可能是合理的, 但应该强调的是, 它们必须通过实验检验。因此, 目前的计算结果也有待于进一步的实验证实。

参考文献:

- [1] Heaney P J. Structure and Chemistry of the Low- Pressure Silica Polymorphs [A]. Heaney P J, Prewitt C T, Gibbs G V. Silica Physical Behavior, Geochemistry and Materials Applications. Reviews in Mineralogy [C]. Chelsea, Michigan: BookCrafters Inc, 1994. 1- 40.
- [2] Hemley R J, Prewitt C T, Kingma K J. High Pressure Behavior of Silica [A]. Heaney P J, Prewitt C T, Gibbs G V. Silica Physical Behavior, Geochemistry and Materials Applications. Reviews in Mineralogy [C]. Chelsea, Michigan: BookCrafters Inc, 1994. 41- 118.
- [3] LePage Y, Calvert L D, Gabe E J. Parameter Variation in Low Quartz between 94 and 298 K [J]. J Phys Chem Solids, 1980, 41: 721- 735.
- [4] Carpenter M A, Salje E K H, Graeme Barber A, et al. Calibration of Excess Thermodynamic Properties and Elastic Constant Variations Associated with the α - β Phase Transition in Quartz [J]. Am Mineral, 1998, 83(1): 2- 22.
- [5] Mckimin H J, Andreatch P, Thurston R N. Elastic Moduli of Quartz Hydrostatic Pressure at 25 °C and - 195. 8 °C [J]. J Appl Phys, 1965, 36(5): 1624- 1632.
- [6] McWhan D B. Linear Compression of α Quartz to 150 kbar [J]. J Appl Phys, 1967, 38: 347- 352.
- [7] Vaidya S N, Bailey S, Pasternack T, et al. Compressibility of Fifteen Minerals to 45 Kilobars [J]. J Geophys Res, 1973, 78: 6893- 6898.
- [8] Olinger B, Halleck P M. The Compression of Quartz [J]. J Geophys Res, 1976, 81(32): 5711- 5714.
- [9] Levien L, Prewitt C T, Weidner D J. Structure and Elastic Properties of Quartz at Pressure [J]. Am Mineral, 1980, 65: 920- 930.
- [10] Jorgensen J D. Compression Mechanisms in α Quartz Structures—SiO₂ And GeO₂[J]. J Appl Phys, 1978, 48(11): 5473- 5478.

- [11] d' Amour H, Denner W, Schulz. Structure Determination of α Quartz up to 68×10^8 Pa [J]. Acta Crystallogr, 1979, B35: 550- 555.
- [12] Pelous J, Vacher R. Thermal Brillouin Scattering in Crystalline and Fused Quartz from 20 to 1000 °C [J]. Solid State Commun, 1976, 18: 657- 661.
- [13] Ackermann R J, Sorrell C A. Thermal Expansion and the High Low Transformation in Quartz. I . High Temperature X-Ray Studies [J]. J Appl Cryst, 1974, 7: 461- 467.
- [14] Ohno I. Temperature Variation of Elastic Properties of α Quartz up to the α - β Transition [J]. J Phys Earth, 1995, 43: 157- 169.
- [15] Carpenter M A, Salje E K H, Graeme Barber A. Spontaneous Strain as a Determinant of Thermodynamic Properties for Phase Transitions in Minerals [J]. Eur J Mineral, 1998, 10: 621- 691.
- [16] ZHONG Wei fang, PI Dao hua. Advanced Elasticity [M]. Wuhan: Huazhong University of Technology Press, 1993. 119- 122. (in Chinese)
钟伟芳, 皮道华. 高等弹性力学 [M]. 武汉: 华中理工大学出版社, 1993. 119- 122.
- [17] PAN Zhao lu. Crystallography and Mineralogy (I) [M]. Beijing: Geological Press, 1984. 71- 92. (in Chinese)
潘兆麟. 结晶学及矿物学(上册) [M]. 北京: 地质出版社, 1984. 71- 92.
- [18] Coe R S, Paterson M S. The α - β Inversion in Quartz: A Coherent Phase Transition under Nonhydrostatic Stress [J]. J Geophys Res, 1969, 74: 4921- 4948.
- [19] Cohen L H. High Low Quartz Inversion: Determination to 35 Kilobars [J]. J Geophys Res, 1967, 72(16): 4245- 4251.
- [20] Koster van Groos A F, Ter Heege J P. The High Low Quartz Transition up to 10 Kilobars Pressure [J]. J Geol, 1973, 81: 717- 724.
- [21] Mirwald P W, Massonne H J. The Low-High Quartz and Quartz Coesite Transition to 40 kbar between 600 °C and 1600 °C and Some Reconnaissance Data on the Effect of NaAlO_2 Component on the Low Quartz Coesite Transition [J]. J Geophys Res, 1980, 85: 6983- 6990.
- [22] Shen A H, Bassett W A. The α - β Quartz Transition at High Temperatures and Pressures in a Diamond Anvil Cell by Laser Interferometry [J]. Am Mineral, 1993, 78: 694- 698.
- [23] YAN Zur tong. An Approximate Relation between Cubical Thermal Expansion Coefficient of Solids and Pressure [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2000, 14(4): 251- 256. (in Chinese)
严祖同. 固体热膨胀系数与压强关系的一个近似公式 [J]. 高压物理学报, 2000, 14(4): 251- 256.
- [24] WANG Xin, CU I Qi liang, PAN Yue wu, et al. Pressure Effect on Lattice Distortions of $\text{La}_{0.3}\text{Bi}_{0.2}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2001, 15(1): 60- 63. (in Chinese)
王欣, 崔启良, 潘跃武, 等. 压力对 $\text{La}_{0.3}\text{Bi}_{0.2}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$ 中晶格畸变的影响 [J]. 高压物理学报, 2001, 15(1): 60- 63.
- [25] CHEN Gang, LIAO Li fan. Physical Foundation of Crystal [M]. Beijing: Scientific Press, 1992. 591- 614. (in Chinese)
陈纲, 廖理凡. 晶体物理学基础 [M]. 北京: 科学出版社, 1992. 591- 614.
- [26] Bass J D. Elasticity of Minerals, Glasses, and Melts [A]. Ahrens T J. Mineral Physics and Crystallography. A Handbook of Physical Constants [Z]. Washington D C: American Geophysical Union, 1995. 49.
- [27] GAO Shan, ZHANG Ben ren. Radioactivity of Rocks in the Qinling Orogenic Belt and Adjacent Areas and the Current Thermal Structure and State of the Lithosphere [J]. Geochimica, 1993, (3): 241- 252. (in Chinese)
高山, 张本仁. 秦岭造山带及其邻区岩石的放射性及岩石圈的现代热结构与热状态 [J]. 地球化学, 1993, (3): 241- 251.
- [28] CHEN Rong. Mechanical Properties of Crustal Rocks—Theoretical Foundation and Experimental Method [M]. Beijing: Seismic Press, 1988, 38- 50. (in Chinese)
陈蓉. 地壳岩石的力学性能——理论基础与实验方法 [M]. 北京: 地震出版社, 1988. 38- 50.

CALCULATION OF THE STRAIN, STRESS AND ELASTIC ENERGY FOR α - β QUARTZ TRANSITION AND ITS GEOLOGICAL SIGNIFICANCE

ZHOU Wen ge¹, XIE Hong sen¹, ZHAO Zhi dan², ZHOU Hui³, GUO Jie¹

- 1. Laboratory of Geodynamic under High Temperature and Pressure, Institute of Geochemistry, Chinese Academy of Sciences, Guiyang 550002, China;*
- 2. Department of Geology, China University of Geosciences (Beijing), Beijing 100083, China;*
- 3. Department of Geology, Beijing University, Beijing 100871, China)*

Abstract: The variations of the lattice parameters of α - and β -quartz at high pressure and high temperature were calculated with the compressional and thermoelastic properties of α - and β -quartz. Combined the data of α - β quartz transition experiments with the results from calculation, the lattice parameters of α - and β -quartz at their transition pressure and temperature were determined firstly. Then, the strains, stresses and elastic energies for α - β quartz transformation were evaluated according to Hooke's law. The results indicate that at the pressure of 0~ 1.1 GPa, the linear strains vary within - 0.006~ 0.005, the volume strains within - 0.016~ 0.012, the stresses within - 0.46~ 0.14 GPa, and the elastic energies within 965 ~ 2760 kJ/m³. At about 0.5 GPa, the strains, stresses and elastic energies achieved their minimum values. Based on the calculated results, the effect of the α - β quartz transformation on the wall rock in the crust during the acid magma intrusion is discussed.

Key words: α - β quartz transition; strain; stress; elastic energy