

·专题9: 同位素新技术、新理论及新应用·

## 同位素在矿物晶格中分馏 与扩散微观机制的理论研究

梁光明, 张飞武\*

中国科学院 地球化学研究所, 矿床地球化学国家重点实验室, 贵阳 550002

Li 元素及其同位素( $^6\text{Li}$  和  $^7\text{Li}$ )近年来在地幔演化和俯冲带壳幔循环的地球化学示踪方面逐渐引起关注。Li 在地幔矿物结构中可以在晶格填隙位和取代空位 2 种位置上存在, 并且可能会以这 2 种机制在矿物中进行迁移扩散。为了在原子水平上理解 (1) Li 在矿物晶格中迁移的细节; (2) 由于 Li 的不同同位素之间的质量差异而导致的矿物晶格中不同缺陷位之间的动力学分馏情况; (3) Li 元素在上地幔和地幔转换带形成矿物中的分配, 及其在不同温压条件下的变化等重要的地球化学问题, 在本工作中, 我们以顽火辉石(Enstatite)为例, 开展了地球化学分子模拟计算。

顽火辉石( $\text{Mg, Fe} \text{SiO}_3$ )是地球上地幔圈层的重要组成矿物之一, 属辉石族的斜方辉石晶系。从成因上, 顽火辉石主要是岩浆作用的产物, 是基性、超基性岩的主要造岩矿物, 常与橄榄石、单斜辉石、尖晶石共生。在共生辉石相当中, 斜方辉石的 Li 同位素组成比共生的单斜辉石要重。我们计算了 Li 同位素在斜方辉石的 Mg 端元顽火辉石中的扩散机制, 其中包括 Li 元素分别通过金属空缺位或晶格填

隙位的扩散; 以及 Li 同位素在空位取代和填隙位上的分馏情况; 探讨了 Li 同位素在顽火辉石中由于扩散导致的同位素组成特征以及 Li 同位素在地幔矿物中分布等相关问题。

我们发现 Li 更容易以填隙位机制在顽火辉石晶格中迁移, 其迁移活化能比以取代空位机制迁移的活化能低大约 0.2 eV。Li 以取代空位机制迁移时一定程度上与 Li-Mg 交换速度, Mg 空位浓度等因素有关。我们还发现  $^7\text{Li}$  会更多的分馏在晶格的填隙位上, 而较轻的  $^6\text{Li}$  则会相对分馏进入 Mg 空位中。Li 同位素在矿物晶格中的这种分馏行为, 会致使共生矿物相间会存在 Li 同位素的组成差异。在低温条件下,  $^7\text{Li}$  会被更多的“受困”在填隙位上, 随着温度升高, 其移动性逐渐变强, 而  $^6\text{Li}$  的迁移速率一定程度上会受控于 Mg 空位的浓度。我们认为这种 Li 在地幔矿物晶体内部不同晶格位上分馏的行为是绝大多数幔源物质中 Li 同位素分馏的主要原因, 可用于解释浅部幔源岩石中低  $\delta^7\text{Li}$  的特征及冷却驱动的同位素分馏作用模型等科学问题。

基金项目: 青年千人计划项目(Y5CR064000)

第一作者简介: 梁光明(1992), 男, 硕士研究生, 主要从事 Li 同位素理论地球化学研究. E-mail: liangguangming@mail.gyig.ac.cn.

\* 通讯作者简介: 张飞武(1980-), 男, 研究员, 主要从事理论地球化学和矿物物理的计算研究. E-mail: zhangfeiwu@vip.gyig.ac.cn.