

天然黝帘石原位高压 X 射线衍射和拉曼光谱

许金贵^{1,2}, 张波^{1,2}, 范大伟^{1,3}, 巫翔⁴, 周文戈¹, 谢鸿森¹

1. 中国科学院地球化学研究所地球内部物质高温高压院重点实验室, 贵阳 550002
2. 中国科学院大学, 北京 100049
3. 北京高压科学研究中心长春分中心, 长春 130012
4. 北京大学地球与空间科学学院, 北京 100871

摘要: 黝帘石属于绿帘石族矿物[Ca₂(Al,Fe)₃Si₃O₁₂(OH)], 产于各种不同地质环境(比如大陆碰撞带和俯冲带)的高压和超高压变质岩中。不同于其他绿帘石族矿物属于单斜晶系矿物, 黝帘石属于斜方晶系(空间群 *Pnma*)。本文采用金刚石压腔装置(DAC)结合同步辐射X射线衍射及拉曼光谱技术对天然黝帘石[Ca₂(Al_{2.71}Fe_{0.29})(SiO₄)(Si₂O₇)O(OH)]进行了原位常温高压实验研究, 以期增进对黝帘石在常温高压下的稳定性以及Fe含量的不同对于其弹性性质影响的认识。

原位常温高压X射线衍射实验在上海同步辐射装置(SSRF)的BL15U线站上完成。实验采用DAC高压装置结合单晶X射线衍射实验技术, 实验最高压力约为30 GPa, 衍射谱图采用黝帘石标准谱(JCPDS85-1631)进行指标化, 衍射斑点的位置用来计算其在不同压力下的晶胞参数。随着实验压力的升高, 所有的衍射晶面间距逐渐减小, 当压力达约15.2 GPa, 在衍射图谱上出现一新的衍射晶面信号(晶面间距 $d = 2.238\ 3\ \text{\AA}$), 并在之后的压力范围内一直存在。此外当压力达约22.6 GPa, 又有一晶面间距 $d = 2.689\ 6\ \text{\AA}$ 的新衍射信号出现, 并一直保持存在到最高压力。据此推断黝帘石在压力约15 GPa时存在结构的变化。同时, 在常温最高压力约为40 GPa条件下, 对黝帘石进行了拉曼光谱测量。随着实验压力的增加, 黝帘石的拉曼振动峰向着高波数方向移动, 在压力约为15.7 GPa, 低压下存在的波数为 $1\ 083\ \text{cm}^{-1}$ 和 $1\ 098\ \text{cm}^{-1}$ 的两个振动峰消失, 与此同时, 在波数为 $247\ \text{cm}^{-1}$ 、 $303\ \text{cm}^{-1}$ 、 $339\ \text{cm}^{-1}$ 、和 $379\ \text{cm}^{-1}$ 位置分别出现了新的拉曼谱峰, 其中, $339\ \text{cm}^{-1}$ 峰于27.6 GPa时消失, 其余新峰一直保持到实验最高压力值。因此, 本文推测天然黝帘石样品在15~16 GPa压力范围内存在有结构的变化。对于变化后的结构和性质还有待于进一步研究。

另外, 本文利用三阶Birch-Murnaghan状态方程拟合了发生结构变化前(0~14.4 GPa)的 p - V 数据, 得到 $V_0 = 908.1(9)\ \text{\AA}^3$ 、 $K_0 = 108(2)\ \text{GPa}$ 和 $K'_0 = 6.5(6)$, 其中 V_0 、 K_0 和 K'_0 分别表示零压晶胞体积、等温体积模量及其压力导数值。综合上述获得的实验结果并结合前人对黝帘石的研究成果, 本文探讨了含Fe量的不同对于黝帘石弹性性质以及晶体结构性质的影响。与不含Fe黝帘石的等温体积模量[Ca₂Al₃Si₃O₁₂OH](122.1(7) GPa, 123.4(4) GPa)以及低含Fe量的黝帘石[Ca₂Al_{2.88}Fe_{0.12}Si₃O₁₂OH]的体积模量(119.1(7) GPa)相比, 本次实验样品黝帘石[Ca₂(Al_{2.71}Fe_{0.29})(SiO₄)(Si₂O₇)O(OH)]的体积模量(108(2) GPa)明显偏小, 说明含Fe会增加黝帘石矿物的可压缩性, 并且, 含铁量越大其体积模量越小。

基金项目: 国家自然科学基金项目(41374107, 41274105)

联系方式: 许金贵, E-mail: xujingui1990@126.com。