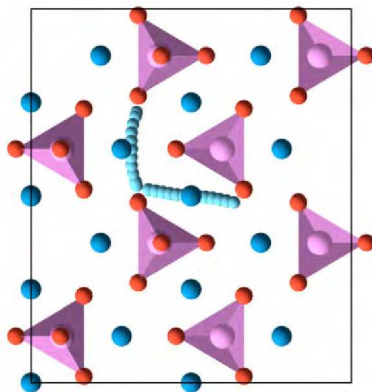


# 量子化学计算研究稳定同位素的分馏与扩散 ——以 Li 同位素在橄榄石中扩散为例

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, 贵州 贵阳 550002)

Li 是自然界最轻的金属元素, 它的稳定同位素  ${}^6\text{Li}$  (天然丰度约 7.5%) 和  ${}^7\text{Li}$  (天然丰度约 92.5%) 两个同位素是自然界相对质量差异最大的金属元素。地球上不同的岩石储库具有不同的 Li 同位素组成。作为一种快速发展的新兴非传统稳定同位素地球化学方法, Li 同位素地球化学示踪研究已经广泛应用于地球科学的各个领域, 用来推断地球上矿物的演化过程。



一个新的前沿研究是高温高压下固体中元素和同位素的扩散以及形成的同位素动力学分馏。我们首次在地学领域, 从理论地球化学量子力学的角度计算研究了 Li 同位素在橄榄石中扩散分馏的细节。我们发现 Li 是在橄榄石硅氧四面体间隙中沿着 S 型路径扩散 (如图)。在该过程中, 由于  ${}^7\text{Li}$  和  ${}^6\text{Li}$  的质量差异, 造成动力学分馏。并且发现该过程与地质环境温度有密切关系, 当温度从 300 K 升温到 3000 K 时, Li 同位素的分馏系数从 87.1‰ 骤降到 1.0‰。文章发表在地学权威刊物 GCA 上。这种研究方法可以应用到各种其它矿物里面的同位素扩散分馏中。

## 参 考 文 献:

F. Zhang, K. Wright, 2012. Lithium defects and diffusivity in forsterite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 91: 32-39.

基金项目: “青年千人计划”项目 (批准号: Y5CR064000)

作者简介: 张飞武, 男, 1980 年生, 研究员, 主要从事理论地球化学领域计算研究. E-mail: zhangfeiwu@vip.gyig.ac.cn