

专题 8: 地球深部物质物理化学属性和深部过程

氟磷灰石的高温拉曼光谱实验研究

翟双猛^{1*}, 薛卫红¹, 翟宽^{1,2}, 林忠成³

1. 中国科学院 地球化学研究所 地球内部物质高温高压重点实验室, 贵阳 550081; 2. 中国科学院大学, 北京 100049; 3. 台湾中央研究院地球科学研究所, 台北 115

磷灰石 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{X}$ ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{OH}$) 是最常见的磷酸盐矿物, 它作为副矿物广泛存在于岩浆岩、变质岩和沉积岩等岩石及一些矿床中。鉴于磷灰石在地质学和地球化学方面具有重要的意义, 前人对磷灰石开展了大量的研究工作。另一方面, 由于磷灰石具有独特的晶体结构, 在矿物学方面具有较强的理论意义和实际意义, 前人也开展了大量的磷灰石矿物学特征和物理化学性质研究工作, 包括磷灰石结构的高温高压稳定性(Murayama et al., 1986; Konzett and Frost, 2009; Konzett et al., 2012)、压缩性和热膨胀性(Trombe, 1973; Bauer and Klee, 1993; Brunet et al., 1999; Comodi et al., 2001a; Matsukage et al., 2004)、高压振动特性(Williams and Knittle, 1996; Comodi et al., 2001b)等。

最近, 我们在 80~1023K 温度范围内研究了氟磷灰石 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{F}$ 的高温拉曼振动光谱特征, 估算了不同拉曼振动模的温度效应, 并结合前人的相关研究结果计算了模式格里乃森参数及非谐性模式参数(见表 1), 进而探讨了氟磷灰石的非谐性。

表 1 氟磷灰石拉曼振动模的温度效应及模式格里乃森参数和非谐性模式参数

拉曼振动	温度效应($\times 10^2$)(cm^{-1}/K)	γ_{IP}	γ_{IT}	非谐性模式参数($\times 10^5$)(K^{-1})
$\nu_{3a}(\text{A}_g)$	-1.82(10)	0.453	0.437	-0.06
$\nu_{3a}(\text{E}_{2g})$	-1.40(16)	0.355	0.437	0.30
$\nu_{3b}(\text{A}_g)$	-1.34(8)	0.343	0.456	0.42
$\nu_{3c}(\text{E}_{1g})$	-1.41(9)	0.364	-	-
$\nu_{3b}(\text{E}_{2g})$	-1.34(5)	0.349	0.474	0.46
$\nu_1(\text{A}_g + \text{E}_{2g})$	-0.82(7)	0.229	0.428	0.74
$\nu_{4a}(\text{E}_{2g})$	-0.80(7)	0.349	0.372	0.09
$\nu_{4a}(\text{A}_g)$	-0.85(4)	0.377	0.335	-0.16
$\nu_{4b}(\text{A}_g)$	-0.27(4)	0.123	0.409	1.06
$\nu_{4b}(\text{E}_{2g})$	-0.30(3)	0.139	0.232	0.34
$\nu_{2a}(\text{E}_{2g})$	-0.41(4)	0.247	0.800	2.05
$\nu_{2b}(\text{E}_{1g})$	-0.50(3)	0.313	0.521	0.77
平均值		0.303	0.446	0.55

基金项目: 国家自然科学基金项目(批准号: 41372040)

第一/通讯作者简介: 翟双猛(1975-), 男, 研究员, 研究方向: 高温高压实验矿物学、地球化学。

E-mail: zhaishuangmeng@mail.gyig.ac.cn