

· 成岩成矿机理的实验与计算地球化学约束 ·

天然辉锑矿的热状态方程研究

范大伟¹, 魏舒怡^{1,3}, 刘景², 李延春², 周文戈¹, 谢鸿森¹

1. 中国科学院 地球化学研究所 地球深部物质与流体作用地球化学实验室, 贵阳 550002;
2. 中国科学院 高能物理研究所, 北京 100049; 3. 中国科学院 研究生院, 北京 100049

辉锑矿是锑的最重要矿石矿物, 也是一种典型的中低温矿物。关于辉锑矿的研究大部分侧重于其晶体结构性质的研究。对于高温高压下天然辉锑矿状态方程的研究却很少有人涉及, 特别是对于天然辉锑矿热状态方程的研究更是未见报道。因此, 本文采用同步辐射能量色散 X 射线衍射(EDXD)技术对天然辉锑矿进行了原位高温高压结构研究, 以期获得辉锑矿在高温高压下结构的变化情况。实验样品为采自江西九江驼背山矿区的天然辉锑矿, 呈铅灰色, 其杂质含量小于 1%, 根据电子探针分析结果计算其晶体化学式为 Sb_2S_3 。在实验之前, 先用玛瑙研磨将样品研磨至小于 $5\ \mu\text{m}$, 烘干备用。

辉锑矿原位高温高压同步辐射实验在中国科学院高能物理研究所的北京同步辐射实验室(BSRF)的高压站完成。实验采用金刚石对顶砧高压装置。金刚石砧面直径为 $500\ \mu\text{m}$, 高压密封垫片采用经过预压的 T301 不锈钢片, 厚度为 $200\ \mu\text{m}$ 。样品室直径为 $200\ \mu\text{m}$ 。传压介质为 16:3:1 的甲醇、乙醇

和水的混合物, 压力标定物质采用 Pt。加热装置为采用直径为 $0.3\ \text{mm}$ 的 NiCr 电阻丝缠绕的电炉子, 并用 NiCr-NiSi 热电偶测量实验温度, 实验中温度控制精度为 $\pm 2^\circ\text{C}$ 。每个数据点在开始采集之前的恒温 $600\ \text{s}$ 。实验采用能量色散 X 射线衍射技术, 固定 2θ 为 13.084° 。入射 X 射线光束大小约为 $50\times 15\ \mu\text{m}$, 根据 Pt 的状态方程来标定实验压力。

根据三阶 Birch-Murnaghan 状态方程, 即

$$P = (3/2) K_0 [(V_0/V)^{7/3} - (V_0/V)^{5/3}] \times \{1 + (3/4)(K'_0 - 4)[(V_0/V)^{2/3} - 1]\}$$

其中 V_0 、 K_0 、 K'_0 分别为零压晶胞体积、等温体积模量及其压力导数。并结合温度的影响因素, 即 $K_T = K_0 + (\partial K/\partial T)_P(T-300)$, $\alpha_T = \alpha_0 + \alpha_1 T$, 对实验结果进行 P - V - T 状态方程拟合。拟合得到了辉锑矿的体弹性模量 $K_0 = 27.7 \pm 1.1\ \text{GPa}$, 体弹性模量的压力导数 $K'_0 = 3.2 \pm 0.1$, 体弹性模量的温度导数 $(\partial K/\partial T)_P = -0.015 \pm 0.006\ \text{GPaK}^{-1}$, 热膨胀系数 $\alpha_0 = 2.9 \pm 0.6 \times 10^{-4}\ \text{K}^{-1}$ 。

基金项目: 大科学装置联合基金(编号: 10979053); 贵州省科学技术基金(编号: [2010]2231); 中国科学院“优秀博士学位论文、院长奖获得者科研启动专项资金”(2010)