

赵亚娟 张毅刚 郭光军 Keith REFSON. 2004. 钙长石成分熔体粘滞度和自扩散系数压力效应的分子动力学研究. 737-746

钙长石成分熔体粘滞度和自扩散系数压力效应的分子动力学研究

[赵亚娟](#) [张毅刚](#) [郭光军](#) [Keith REFSON](#)

中国科学院地质与地球物理研究所, 中国科学院地质与地球物理研究所, 中国科学院地质与地球物理研究所, Laboratory, Chilton, Didcot, Oxfordshire OX11 0QX, UK 北京100029, 北京100029, 北京100029

基金项目: 基金委优秀群体项目(40221402)资助

摘要:

用分子动力学方法,研究了1999 K下,压力由23 MPa上升到15183 MPa的过程中,CaAl₂Si₂O₈和粒子自扩散系数的压力效应。在此基础上,探讨压力对剪切粘滞度与粒子自扩散系数之间关系的影响;结果表明,粒子自扩散系数的压力效应与熔体结构有很强的相关性;压力的挤压效应阻碍了粒子的扩散,而Si⁴⁺扩散过程,两种相反的作用相互抵消,造成的结果是在0~5 GPa范围内,Si⁴⁺,O²⁻和Al³⁺等网络离子扩散明显;当压力继续增大时,挤压效应占了主导,导致自扩散系数值快速减小。Ca²⁺作为网架修饰离子,扩散系数小于5 GPa时,粒子自扩散系数的大小关系是:D_{Ca}>D_{Al}>D_O>D_{Si}。系统粘滞度随压力的增加而增大,当压力小于域值时,一定范围内BO含量的变化不会对粘滞度产生很大的影响,超过域值,BO含量的微小增加会使粘滞度急剧增加。Eyring方程的关键是方程中粒子跳跃距离的确定,本研究发现,Si⁴⁺和O²⁻的跳跃距离可以通过系统中NBO的含量,结合Eyring方程有效进行不同压力下的计算。

关键词: [钙长石成分熔体](#) [粘滞度](#) [自扩散系数](#) [跳跃距离](#) [压力](#)

最后修改时间: 2003/11/12

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)