

直至核幔边界的 Mg_2SiO_4 成分熔体 剪切粘滞度的平衡分子动力学研究

The Shear Viscosity of Mg_2SiO_4 Melt Under the Core-Mantle Boundary Conditions Using Equilibrium Molecular Dynamics

张毅刚 聂高众

Zhang Yigang and Nie Gaozhong

(中国科学院地质研究所, 北京, 100029)

(*Institute of Geology, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100029*)

摘要 熔体的粘滞度极大地影响熔体的各种动力学行为。虽然有一些有关酸碱性熔体粘滞度的数据,但涉及地球更深部过程的基性和超基性熔体的粘滞度的数据很少。本项研究利用平衡分子动力学方法研究 Mg_2SiO_4 成分熔体温度从 2169K 到 5595K, 压力从 10^5 Pa 到 135GPa 的粘滞度, 所获得的粘滞度数据介于 Urbain et al. (1982) 和 Ivanov and Stengelmeyer (1982) 的实验数据之间, 比 Shaw (1972) 和 Persikov (1990) 的经验方程高大约 0.6 个对数单位。研究结果表明该熔体的粘滞度随温度的变化比酸碱性岩浆要小得多, 在大约 10^5 Pa 条件下随温度有如下关系式:

$$\log \eta(\text{Pa} \cdot \text{s} \times 10^{-1}) = \frac{4.215 \times 10^3}{T(\text{K})} - 2.699$$

Mg_2SiO_4 熔体粘滞度随压力的增加而线性增加。这与前人关于聚合程度低的液体的行为一致。在 5500K 左右, 从 10^5 Pa 到 135GPa, 它的粘滞度大约变化一个数量级。这与酸碱性熔体相比也是较小的。本项研究获得的粘滞度与压力的关系如下:

$$\eta(\text{Pa} \cdot \text{s} \times 10^{-1}) = 7.267 \times 10^{-1} P(\text{GPa} \times 10^{-2}) + 4.158 \times 10^{-3}$$

总之, Mg_2SiO_4 熔体粘滞度的温度和压力效应均大大小于酸碱性熔体。分子动力学方法是获得目前实验还很难达到的温压条件下熔体动力学性质的唯一途径。

Abstract Shear viscosity controls the dynamic behaviors of melts. Although many viscosity data exist for acidic alkaline melts, there are few viscosity data for basic and ultra-basic melts at very high temper-

• 1998-07-06 收稿, 1998-07-22 改回。

本文为国家杰出青年基金(49725205)和国家科技部攀登项目(93-预-39)资助研究成果之一。

第一作者简介: 张毅刚, 男, 1962年生, 研究员, 岩石学专业。

atures and pressures. These data are especially important for our understanding of dynamic processes in the very deep Earth. In the present study the equilibrium molecular dynamics method is used to obtain the viscosity of Mg_2SiO_4 melt in the temperature range from 2169K to 5595K and pressure from 10^5 Pa to 135 GPa. The potential model used is from Belonoshko and Dubrovinsky (1996). Direct integration of Green-Kubo formula is used for obtaining shear viscosity (Allen and Tildesley, 1987). The control parameters for molecular dynamics simulation are as follows: single time step = 0.0002ps, total time step = 24ps, equilibration period = 4ps. The cutoffs were chosen according to Fincham (1993). To have an idea about the influence of these control parameters on the calculated viscosity, we have made 7 molecular dynamics runs all at 3000K and 2.700 g/cm^3 . These 7 runs give us an averaged viscosity of $0.0051 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ with a standard deviation of 0.0017. The shear viscosity data obtained in the present study are in between the experimental data of Urban et al. (1982) and Ivanov and Stengelmeyer (1982), and are higher than the empirical formula of Shaw (1972) and Persikov (1990) by about 0.6 log unit. It is shown that the viscosity of Mg_2SiO_4 melt has a much smaller variance with temperature compared with acidic alkaline-type melt. At about 10^5 Pa, the relationship between viscosity and temperature for the Mg_2SiO_4 melt is as follows:

$$\log \eta(\text{Pa} \cdot \text{s} \times 10^{-1}) - \frac{4.215 \times 10^3}{T(\text{K})} = 2.699$$

with the correlation coefficient $R^2=0.837$. The viscosity of Mg_2SiO_4 melt is positively and linearly correlated with pressure. This type of behavior is, as previous investigations have noticed, similar to ionic and highly depolymerized liquids. There is a viscosity change of about one order of magnitude from 10^5 Pa to 135GPa at about 3500K, which is also smaller compared with acidic alkaline-type melts. The relationship between shear viscosity and pressure obtained in the present study is as follows,

$$\eta(\text{Pa} \cdot \text{s} \times 10^{-1}) = 7.267 \times 10^{-5} P(\text{GPa} \times 10^{-1}) + 4.158 \times 10^{-3}$$

with the correlation coefficient $R^2=0.925$.

Molecular dynamics is the only method available at present stage to obtain melt viscosity at ultra-high temperatures and pressures.

主题词: 分子动力学; 粘滞度; Mg_2SiO_4 熔体

Key words: Molecular dynamics; Viscosity; Mg_2SiO_4 melt

分类号: P578.94; P589.1

Classific. code: P578.94; P589.1

1 引言

在熔体的许多性质中, 熔体的剪切粘滞度是最重要的性质之一。该性质控制了涉及熔体的动力学过程, 如熔体的上升、结晶分异以及熔体与地幔和地壳的相互作用。探讨各种不同成分的熔体在不同温度和压力下的粘滞度一直是国际上的热点研究项目 (Stebbins et al., 1995)。

常压和高温下获得熔体粘滞度有多种实验技术, 而同时达到高温和高压下的实验技术只

有下降球 (falling sphere) 方法, 并且压力范围受活塞筒式高温高压釜的限制, 在进行粘滞度研究时需使用较大的装样容器, 压力最多达到 2GPa。下降球方法仅适合于高粘滞度熔体的研究。对于低粘滞度熔体由于下降球速度太快, 不能进行准确测量, 所获得的粘滞度误差较大。所以大部分的工作都是针对高粘滞度的酸性岩浆, 而针对粘滞度较小的基性和超基性岩浆的研究很少。实际上许多深部地质过程均涉及到基性和超基性岩浆。近期核幔边界的 D'' 层的研究成为热点研究项目 (Lay et al., 1998)。D'' 层在整个地球动力学过程中起着极其重要的作用。它可能既是下插板块被埋葬的地方, 也可能是上升地幔热柱的源 (Kesson et al., 1998; Williams et al., 1998)。地震波谱和实验岩石学的研究表明, 核幔边界可能存在有熔体 (Kendall and Silver, 1996; Williams and Garnero, 1996; Revenaugh and Meyer, 1997; Zerr et al., 1998), 并且其成分接近于 Mg_2SiO_4 (Belonoshko and Dubrovinsky, 1996)。我们需要了解超高压下这些熔体的性质, 以探讨地球深部与这些深源岩浆密切相关的各种动力学过程。这就迫使我们寻找一种方法来研究高温高压下基性和超基性岩浆的粘滞度。其中分子动力学方法是可以选择的方法之一。

前人利用分子动力学方法研究熔体的粘滞度大部分是采用间接的方法, 即利用分子动力学获得熔体的扩散系数, 然后利用 Stokes-Einstein 或 Eyring 公式得到粘滞度 (Poe et al., 1998; Stein and Spera, 1995)。这种间接方法存在两个方面的问题。一是上述两个公式的适用性, 粘滞度与扩散系数是否具有这两个公式描述的相互关系。二是这两个公式中的参数选择, 即 Stokes-Einstein 公式中的表述扩散粒子大小的参数 (size parameter) 和 Eyring 公式中的扩散跳跃距离 (distance of diffusive jump)。这两个参数与熔体中扩散和粘滞流的机制有关。也可以利用分子动力学方法获得原子的配位 (configuration), 通过分析聚合程度 (polymerization) 与温度和压力的关系来得出粘滞度与温压的关系 (Kubuchi and Lasaga, 1991)。这种方法较粗略, 无法获得粘滞度与温度和压力的具体关系式。直接通过积分 Green-Kubo 公式获得熔体粘滞度的工作有针对 $MgO-SiO_2$ 系统的 Wasserman et al. (1993) 和针对 $Na_2O \cdot SiO_2$ 成分的 Ogawa et al. (1990) 研究。Belonoshko and Dubrovinsky (1996) 利用分子动力学方法研究了 $MgO-SiO_2$ 系统的液相线和状态方程。他们所使用的分子间相互作用势能是通过回归该系统低温低压下的各种实验数据获得的。

在以上背景下, 本项研究利用分子动力学方法研究 Mg_2SiO_4 成分熔体的剪切粘滞度, 探讨该熔体的剪切粘滞度与温度和压力的具体关系式, 并将结果与已有的实验数据和经验公式相比较。通过研究我们发现 Mg_2SiO_4 成分熔体的剪切粘滞度随温度的增加而降低, 降低程度远远低于酸性岩浆粘滞度; Mg_2SiO_4 成分熔体的粘滞度随压力的增加而简单增加。

2 模拟技术

分子动力学模拟过程中最基本的假设是模拟所使用的势能够代表原子或分子之间的相互作用力。具体模拟方法和模拟参数的选取对最后获得较好的粘滞度值也起着非常重要的作用。下面我们首先详细讨论本项工作中势能的选取, 然后给出本项工作中使用的截取距离、分子数、单步时间间隔和总步长。这些均是影响最后所计算的粘滞度正确性的因素。本项研究采用直接计算的方法, 即通过积分剪切应力自相关函数来获得熔体的剪切粘滞度。它的基础

是 Green-Kubo 理论。具体的计算方法和讨论请参见 Allen and Tildesley (1987) 以及郭永贵和张毅刚 (1998)。

本项工作中我们选取了 Belonoshko and Dubrovinsky (1996) 关于 Mg_2SiO_4 的势能 (以下简称 BD 势能)。具体形式如下:

$$U_{ij} = q_i q_j / R_{ij} + \epsilon_{ij} f(\rho_i + \rho_j) \exp[(r_i + r_j - R_{ij}) / (\rho_i + \rho_j)] \\ + \sqrt{(1 - \epsilon_{ij})} D_{ij} \{ \exp[-2a_{ij}(R_{ij} - R_{i,j0})] \\ - 2 \exp[-a_{ij}(R_{ij} - R_{i,j0})] \} + C_{ij} / R_{ij}^6$$

其中 i 和 j 为相互作用的两个离子, q 为有效电荷, ρ 和 r 为 Gilbert 型互斥势能参数, f 为 $1 \text{ kcal} / \text{Å} \cdot \text{mol}$, D , a 和 R_0 为 Morse 势能参数, C 为 van der Waals 常数, ϵ 为键离子性 (bond ionicity):

$$\epsilon_{ij} = q_i q_j / z_i z_j$$

其中 z 为真实电荷。利用 Belonoshko and Dubrovinsky (1996) 得出 Si、Mg 和 O 的有效电荷为: $q_{(Si)} = 2.3801$, $q_{(Mg)} = 1.1905$, $q_{(O)} = -1.1905$ 。

BD 势能参数的获得只使用了低温低压下 $MgO-SiO_2$ 系统端元组份 (SiO_2 和 MgO) 的结构参数、等温体积弹性模量、体积热膨胀系数和热容系数, 用该势能预测的 Mg_2SiO_4 的摩尔体积在 10^5 Pa 和高温下介于 Saxena and Shen (1992) 和 Lange and Carmichael (1990) 的值之间, 相对差别均小于 10%。选取该势能的原因还有它较大的温度和压力适用范围, 它被用于研究常温常压直至核幔边界条件 ($300 \text{ K} \sim 9000 \text{ K}$, $10^5 \text{ Pa} \sim 100 \text{ GPa}$) 下固体和熔体的性质。相对于前人研究 $MgO-SiO_2$ 系统所使用的势能模式 (如 Kubicki and Lasaga, 1991), BD 势能在其它性质方面也有较好的预测能力。这是我们选择该项势能研究 Mg_2SiO_4 成分熔体直至核幔边界温度和压力条件下粘滞度的重要原因。本研究使用的 Mg_2SiO_4 熔体参数见表 1。

表 1 Mg_2SiO_4 的 BD 势能参数

Table 1 Parameters of BD potential for Mg_2SiO_4 melt

参数	ϵ_{ij}	P_{ij}	r_{ij}	D_{ij}	A_{ij}	R_{ij0}	C_{ij}
O-O	0.35432	0.36614	4.35200	9.822	1.0984	1.17956	12.78778
O-Mg	0.35432	0.27874	3.29380	14.400	1.6200	1.99000	0.00000
O-Si	0.35432	0.40640	3.54707	29.881	1.9032	1.82710	0.00000
Mg-Mg	0.35432	0.19134	2.23560	0.000	2.1416	2.80044	0.00000
Mg-Si	0.35432	0.31900	2.48887	0.000	2.4248	2.63754	0.00000
Si-Si	0.35432	0.44666	2.74214	0.000	2.7080	2.47464	0.00000

如同郭永贵和张毅刚 (1998) 的讨论, 在势能确定后, 与分子动力学有关的模拟参数的选取就成为重要的因素。具体的参数包括系统中的分子数、单步长、总步长和截取距离。本

项研究比较了 96、192 和 288 个 Mg_2SiO_4 分子, 所获得的结果类似。这样系统中将分别有 672、1344 或 2016 个离子。Stein and Spera (1996) 认为当系统中原子数大于 1000 时动力学性质变化不大, 而这些性质在原子数为 400~600 时被高估 10%~100%, 并且具有不稳定性。Wasserman et al. (1993) 和 Ogawa et al. (1990) 在使用 Born-Mayer 势能研究熔体粘滞度时均认为所获数据与系统大小有关。本项研究 96、192 和 288 个分子所获得的 SSACF (剪切压力自相关函数) 归一化以后的曲线形态比较类似, 所获得的粘滞度也类似, 表明 96 个分子已经足够用来计算粘滞度。通过预模拟实验反复比较, 确定最后使用的单步长为 0.0002ps, 总步长为 120000 步, 其中用于系统达到平衡的时间为 20000 步。截取距离分成几种, 第一个是真实空间, 第二个是倒易空间, 第三个是计算艾瓦尔德 (Ewald sum) 求和法中的 α 参数。其中 α 决定了运动方程的收敛速度。Fincham (1993) 提出了一个选择这些参数的普遍方法, 优化的 α 由下式给出:

$$\alpha = \sqrt{\pi} \left(\frac{t_R}{t_F} \frac{N}{V^2} \right)^{\frac{1}{6}}$$

其中 t_R 和 t_F 分别是在真实空间和倒易空间中计算某一值所费的计算机时间。如果该值最后收敛到某一精度 $\epsilon = \exp(-P)$, 则在真实空间和倒易空间的截取距离分别由下二式给出:

$$r_c = \frac{\sqrt{P}}{\alpha}$$

$$k_c = 2\alpha \sqrt{P}$$

有关积分过程中剪切应力自相关函数的截取方法与误差分析与郭永贵和张毅刚(1998)类似。作为估计所计算粘滞度误差的一个例子, 在温度为 3000K 和密度为 $2.7\text{g}/\text{cm}^3$ 条件下, 分别进行了 7 项不同模拟条件下粘滞度的计算 (表 2)。所得粘滞度平均值为 $0.0053\text{Pa} \cdot \text{s}$, 标准偏差为 $0.0017\text{Pa} \cdot \text{s}$ 。

3 结果与讨论

在温度为 2169K~5595K, 压力为 10^5Pa ~ 135GPa 的条件下获得了 Mg_2SiO_4 成分熔体的粘滞度 (表 2)。图 1 为常压 (约 10^5Pa) 下粘滞度与温度的关系。在温度从 2169K~5485K 粘滞度大约有 1 个数量级的变化。通过回归, 我们的模拟结果给出了粘滞度和温度的如下关系式:

$$\log \eta(0.1\text{Pa} \cdot \text{s}) = \frac{4.215 \times 10^3}{T(\text{K})} - 2.699$$

该方程的相关系数 $R^2=0.837$ 。

Urbain et al. (1982) 用旋转杯方法 (rotating cup method, Bochriss and Lowe, 1953) 实验获得了近似 Mg_2SiO_4 成分 ($\text{SiO}_2=34.9\text{mol}\%$, $\text{MgO}=65.1\text{mol}\%$) 熔体的粘滞度。Ivanov and Stengelmeyer (1982) 用振动粘度计测量了纯橄岩成分熔体的粘滞度。我们用平衡分子动力学获得的粘滞度介于上述两个实验结果之间。比 Shaw (1972) 和 Persikov (1990) 经验方程略高 0.6 对数单位 (图 1)。Wasserman et al. (1993) 用 Born-Mayer 型势能和直接积分法,

使用 750~1250 个离子, 在 5GPa, 3500K~4250K 之间, 研究了 MgO-SiO₂ 系统 (MgO=20mol%~80mol%) 的粘滞度。他们的结果与本项研究非常类似。

表 2 Mg₂SiO₄ 成分熔体平衡分子动力学模拟实验结果

Table 2 Equilibrium molecular dynamics simulation results for Mg₂SiO₄ melt

温度 (K)	密度 (g/cm ³)	分子数	总步长	单步长	粘滞度 (Pa·s)
2991	2.7000	96	100000	0.0005	0.0043
3871	2.5400	96	100000	0.0005	0.0021
2169	2.8300	96	100000	0.0005	0.0190
5543	4.8971	96	120000	0.0002	0.0110
5440	4.5000	96	120000	0.0002	0.0072
5662	4.2377	96	120000	0.0002	0.0056
5475	3.8652	96	120000	0.0002	0.0040
5595	3.3498	96	120000	0.0002	0.0024
5485	2.2800	96	120000	0.0002	0.0014
2619	2.7586	96	120000	0.0002	0.0057
5176	2.3148	96	120000	0.0002	0.0012
5188	4.5000	96	120000	0.0002	0.0064
3076	2.7000	96	120000	0.0002	0.0081
4103	2.5400	96	120000	0.0002	0.0032
5488	4.5000	96	120000	0.0002	0.0064
3070	2.7000	96	220000	0.0002	0.0067
5474	4.5000	192	120000	0.0002	0.0063
3050	2.7000	192	120000	0.0002	0.0038
3069	2.7000	96	220000	0.0001	0.0032
5482	4.8971	96	220000	0.0001	0.0120
2274	2.8300	192	120000	0.0002	0.0250
2613	2.7600	192	120000	0.0002	0.0068
3032	2.7000	288	120000	0.0002	0.0045
2988	2.7000	192	120000	0.0002	0.0065

如果将 SiO₂ 和 NaAlSi₃O₈ 的粘滞度和温度的关系 (Urbain et al., 1982) 与 Mg₂SiO₄ 进行对比 (图 2), 我们就会发现代表 Mg₂SiO₄ 粘滞度与温度相关性的那条直线的斜率非常小, 表明与 SiO₂ 和 NaAlSi₃O₈ 相比, 显然 Mg₂SiO₄ 熔体的粘滞度随温度变化较小。在温度变化到约 1300K 时, SiO₂ 粘滞度大约变化 20 个数量级。对于 NaAlSi₃O₈, 在温度变化大约 600K 时, 粘滞度变化 10 个数量级。而 Mg₂SiO₄ 粘滞度在温度变化达到 3300K 时, 粘滞度才变化一个数量级。不同熔体粘滞度随温度变化的差别非常大。

尽管许多理论及实验均表明粘滞度与温度的简单关系, 但熔体粘滞度与压力的关系却较为复杂。有关岩浆粘滞度与压力的关系, 前人已经有一些实验研究和较好的理论论述和总结

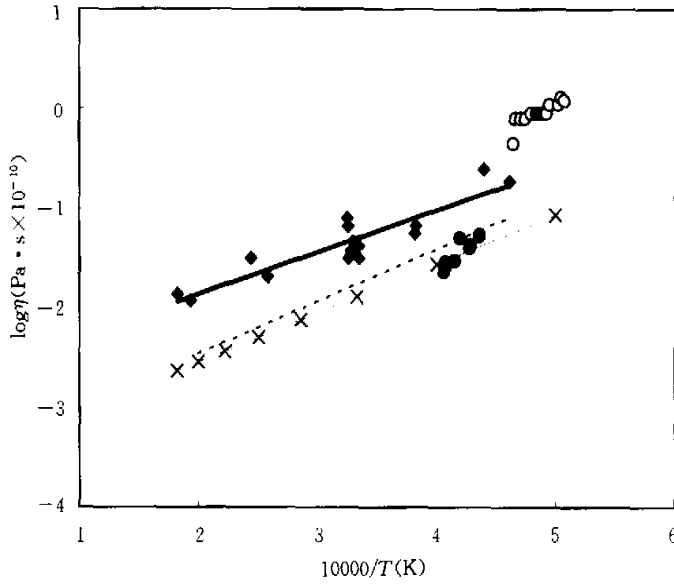


图1 约 10⁵Pa 下 Mg₂SiO₄ 成分熔体的粘滞度随温度的变化

图中实心菱形为本项研究所得结果；粗实线为对该结果的线性回归；空心圆为 Ivanov and Shtengelmeyer (1982) 关于纯橄岩的结果；实心圆为 Urban et al. (1982) 近 Mg₂SiO₄ 成分 (SiO₂=34.9mol%, MgO=65.1mol%) 熔体的结果；虚线为 Persikov (1991) 的经验公式；带叉的细实线为 Shaw (1972) 的经验公式

Fig.1 The relationship between viscosity and temperature at about 10⁵Pa for Mg₂SiO₄ melt. Filled diamonds represent data obtained in the present study, the thick line is the linear square fit of these data. Open circles are experimental data from Ivanov and Shtengelmeyer (1982) for dunite, filled circles from Urban et al. (1982) for the melt of composition SiO₂=34.9mol%, MgO=65.1mol%, dashed line is from empirical formula of Persikov (1991), and finally thin line with crosses from Shaw (1972)

(Persikov, 1991; Richet and Bottinga, 1995, Wolf and McMillan, 1995)。一般情况是低硅、聚合程度低的熔体其粘滞度与压力的关系类似于由离子组成的液体，即随压力的增加其粘滞度也增加。而高硅熔体随压力的增加其粘滞度反而减小。这只是一个很粗略的认识。大部分自然熔体在 2GPa 下都是粘滞度与压力成反比关系。一些熔体还展示了更复杂的情况，即粘滞度先随压力增加，然后随压力的增加反而减少。由于实验方法的限制和实验数据的缺乏，以上工作大部分是针对酸性岩浆得出的结论。本项工作研究了在温度约为 5500K 下，压力为 10⁵GPa~135GPa (核幔边界压力) Mg₂SiO₄ 的粘滞度 (图 3)。选取 5500K 是为了保证 Mg₂SiO₄ 在最高压力 (135GPa) 下仍处于熔体状态 (Holland and Ahrens, 1991; Belonoshko and Dubrovinski, 1996) 以便与相对低压的数据比较。模拟结果表明 Mg₂SiO₄ 的粘滞度随压力的增加而单调线性增加。具体关系式为：

$$\eta(\text{Pa} \cdot \text{s} \times 10^{-1}) = 7.267 \times 10^{-5} P(\text{GPa} \times 10^{-1}) + 4.158 \times 10^{-3}$$

该方程的相关系数 $R^2=0.925$ 。

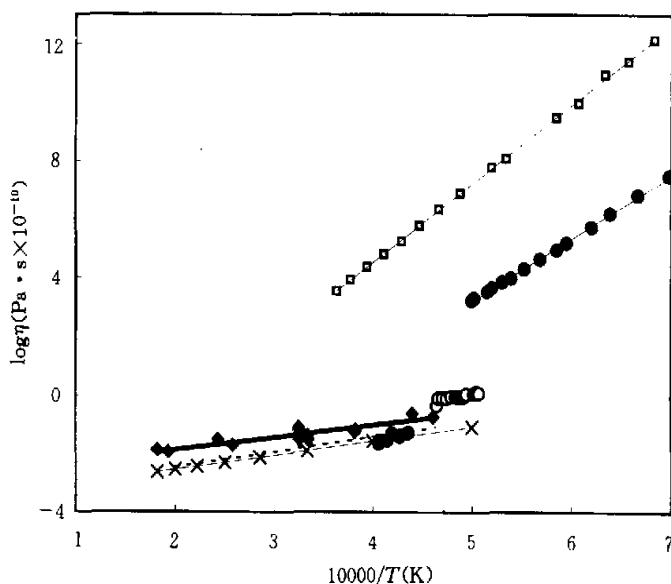


图2 Mg_2SiO_4 熔体粘滞度与 SiO_2 和 $NaAlSi_3O_8$ 对比

空方块为 SiO_2 的实验数据, 实心圆为 $NaAlSi_3O_8$ 的实验数据, 两者均来自于 Urbain et al. (1982); 代表 Mg_2SiO_4 熔体的符号同图 1

Fig. 2 Comparison of the viscosity of Mg_2SiO_4 melt with SiO_2 and $NaAlSi_3O_8$ melts

Open squares represent experimental data for SiO_2 , and filled circles for $NaAlSi_3O_8$, both from Urbain et al. (1982).

Symbols for Mg_2SiO_4 melt are similar as in figure 1

我们的模拟压力区间较大。在较高的固定温度和这样大的一个压力区间, 粘滞度有大约一个数量级的变化。与前人在相对低压的实验研究结果相比这种变化比较小 (Richet and Bottinga, 1995)。同时, 分子动力学方法获得的结果与上述关于低硅和聚合程度低的熔体粘滞度与压力的认识是一致的。Richet and Bottinga (1995) 根据对熔体构形熵 (configurational entropy) 的研究后认为对于聚合程度低的熔体, 高温下的压力效应会大于低温下。本项模拟实验的工作温度为 5500K, 在相对低的温度如 4000K 时, 粘滞度随压力的变化将会更小。未来分子动力学的研究将可以验证这一点。

4 结论

平衡分子动力学方法获得了 Mg_2SiO_4 熔体粘滞度随温度和压力变化的具体关系式。温度达到 5595K, 压力达到 135GPa。该成分熔体的粘滞度随温度的增加而降低, 但降低程度远远低于酸性岩浆。与压力呈现一种简单的正比关系, 而不同于一些酸性岩浆与压力呈现一种反比或更复杂的关系。温度和压力对 Mg_2SiO_4 粘滞度的效应均比酸性岩浆低很多。考虑到 Mg_2SiO_4 熔体较高度度的非聚合性, 离子之间堆积较密, 这一现象是合理的。

本项研究表明分子动力学方法可用于研究广泛温度和压力条件下基性和超基性熔体的粘

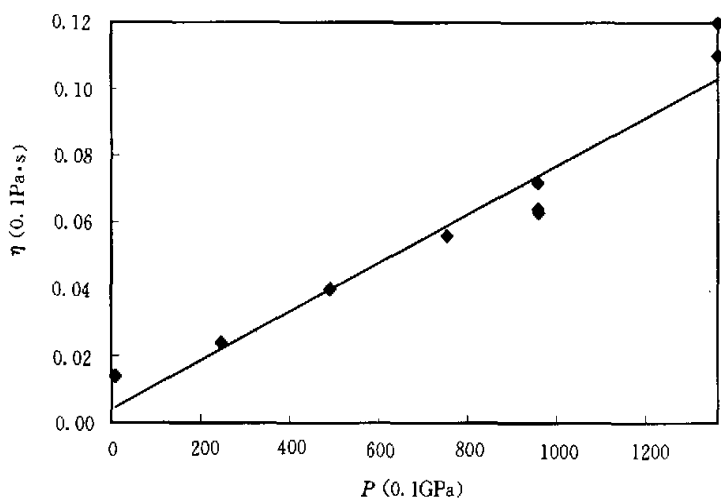


图3 本研究获得的 Mg_2SiO_4 熔体粘滞度与压力的相互关系

Fig. 3 The relationship between viscosity and pressure for Mg_2SiO_4 melt obtained in the present study

滞度。本工作小组正在利用分子动力学方法对 Mg_2SiO_4 熔体中 O、Mg 和 Si 的扩散系数进行研究。粘滞度帮助认识熔体上升过程中物理方面的动力学机制，元素的扩散系数将有助于我们认识熔体上升过程与地幔和地壳发生的元素交代化学动力学过程（如地幔交代和地壳混染）。这对认识地球浅部直至核幔边界涉及基性和超基性熔体的各种地球动力学过程具有重要意义。

作者谨此文纪念我国已故著名岩石学家吴利仁教授诞辰 75 周年。

致谢 感谢翟明国研究员、金成伟研究员、李永刚副研究员和郭永贵硕士在工作中给予的大量帮助。本项工作得到了国家杰出青年基金 (No49725205)，国家科技部攀登预选项目 (95-预-39) 的资助，在此向他们表示感谢。

参 考 文 献

- 郭永贵, 张毅刚. 1998. 高温高压下水的剪切粘滞度的平衡分子动力学计算. 岩石学报, 14 (1): 1~10
- Allen MP and Tildesley SK. 1987. Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, 385
- Belonoshko A B and Dubrovinsky L S. 1996. Molecular and lattice dynamics of the $MgO-SiO_2$ system using a transferable interatomic potential. Geochim. Cosmochim. Acta, 60 (10): 1645~1656
- Boekris J O M and Lowe D L. 1953. An electromagnetic viscometer for molten silicates at temperatures up to 1850°C. J. Sci. Instr., 30: 403~405
- Earle PS and Shearer PM. 1997. Observations of PKKP precursors used to estimate small-scale topography on the core-mantle boundary. Science, 277 (5326): 667~670

- Fincham D. 1994. Optimization of Ewald sum for large systems. *Molecular Simulation*, 13 (1): 1~9
- Holland K G and Ahrens T J. 1997. Melting of $(Mg, Fe)_2SiO_4$ at the core-mantle boundary of the Earth. *Science*, 275: 1623~1625
- Ivanov O K and Shtengel'meyer S V. 1982. Viscosity and crystallization temperature of ultramafic melts. *Geokhimiya*, 3: 330~337
- Kendall J M and Silver P G. 1996. Constraints from seismic anisotropy on the nature of the lowermost mantle. *Nature*, 381: 409~412
- Kesson S E, Gerald J D F and Shelly J M. 1998. Mineralogy and dynamics of a pyrolytic lower mantle. *Nature*, 393: 252~255
- Kubicki J D and Lasaga A C. 1991. Molecular dynamics of pressure and temperature effects on $MgSiO_3$ and Mg_2SiO_4 melts and glasses. *Phys. Chem. Mineral.*, 17: 661~673
- Lange R L and Carmichael I S E. 1990. Thermodynamic properties of silicate liquids with emphasis on density, thermal expansion and compressibility. In: *Modern Methods of Igneous Petrology; Understanding Magmatic Processes* (eds. J Nicholls and J K Russell), *Rev Mineral.*, 24: 25~64
- Lay T, Williams Q and Garnero E. 1998. The core mantle boundary layer and deep Earth dynamics. *Nature*, 392: 451~468
- Ogawa H, Shiraishi Y, Kawamura K and Yokokawa T. 1990. Molecular dynamics study on the shear viscosity of molten $Na_2O \cdot SiO_2$. *J. Non-Cryst. Solids*, 119: 151~158
- Persikov E S. 1991. The viscosity of magmatic liquids; Experiments, generalized pattern. A model for calculation and prediction. Applications. In: L L Perchuk and I Kushiro, (editors), *Physical Chemistry of Magmas, Advances in Physical Geochemistry*, 9: 1~40
- Poe BT, McMillan P F, Rubie DC, Chakraborty S, Yarger J, and Diefenbacher J. 1997. Silicon and oxygen self-diffusivities in silicate liquids measured to 15 Gigapascals and 2800 Kelvin. *Science*, 276 (5316): 1245~1248
- Revenaugh J and Meyer M. 1997. Seismic evidence of partial melt within a possibly ubiquitous low-velocity layer at the base of the mantle. *Science*, 277 (5326): 670~673
- Richet P and Bottinga Y. 1995. Rheology and configurational entropy of silicate melts. *Reviews in Mineralogy*, 32: 67~93
- Saxena S K and Shen G Y. 1991. Assessed data on heat capacity, thermal expansion, and compressibility for some oxides and silicates. *J. Geophys. Res.* 97 (B13): 19813~19825
- Shaw H R. 1972. Viscosities of magmatic silicate liquids; An empirical method of prediction. *Am. J. Sci.*, 272: 870~893
- Stein DJ and Spera F J. 1995. Molecular dynamics simulations of liquids and glasses in the system $NaAlSi_3O_8-SiO_2$; Methodology and melt structures. *Am. Mineral.*, 80: 417~431
- Stebbins J F, McMillan P F and Dingwell D B. 1995. Structure, Dynamics and Properties of Silicate Melts. *Reviews in Mineralogy*, vol32
- Urbain G, Bottinga Y and Richet P. 1982. Viscosity of liquid silica, silicates and aluminosilicates. *Geochim. Cosmochim. Acta*, 46: 1061~1072
- Wasserman E A, Yuen D, and Rustad J R. 1993. Compositional effects on the transport and thermodynamic properties of $MgO-SiO_2$ mixtures using molecular dynamics. *Phys. Earth Planet. Inter.*, 77: 189~203
- Williams Q and Garnero E J. 1996. Seismic evidence for partial melt at the base of the Earth's mantle. *Science*, 273: 1528~1530
- Williams Q, Revenaugh J and Garnero E. 1998. A correlation between ultra-low basal velocities in the mantle and hot spots. *Science*, 281: 546~549
- Wolf G H and McMillan P F. 1995. Pressure effects on silicate melt structure and properties. *Reviews in Mineralogy*, 32: 505~561
- Zerr A, Diegeler A and Boehler R. 1998. Solidus of Earth's deep mantle. *Science*, 281: 243~246