

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 类地行星核幔边界处一个潜在的铬储库

李琼<sup>1,2</sup>, 杜蔚<sup>1,3\*</sup>, 杨晶<sup>4</sup>, 刘兆东<sup>5</sup>, 张一宁<sup>1</sup>, 陈佑纬<sup>1</sup>

1. 中国科学院 地球化学研究所, 关键矿产成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550081;

2. 中国科学院大学 地球与行星科学学院, 北京 101408;

3. 中国科学院 比较行星学卓越创新中心, 合肥 230026;

4. 中国科学院 地球化学研究所, 月球与行星科学中心, 贵阳 550081;

5. 吉林大学 综合极端条件高压科学中心, 长春 130012

月球样本的元素组成表明, 与球粒陨石相比, 月球的 V、Cr 和 Mn 含量较低。对现有实验数据的参数化拟合表明, Cr 和 V 的亏损可以用高温和相对还原条件下的核形成 ( $f_{O_2}$ -IW-2) 来解释, 但这个核应该含有一些轻元素, 如 S 和 C。另一方面, 月球岩石上富集的重同位素特征表明, 月球经历了挥发分的蒸发损失, 氧化条件下的蒸发被认为可以解释月球和地幔之间不同的 Cr 同位素组成。然而, 蒸发过程建议的温度远低于“大碰撞”的温度, 这使得月球的 Cr 组成及其核幔分异过程的细节尚不清楚。在这项研究中, 我们对顽火辉石球粒陨石 Sahara 97 096 进行了一系列高温高压实验, 以提高我们对还原条件下小行星核幔分异过程的理解, 并试图厘清 Cr 在核幔分异过程中的行为。实验结果表明: (1) 硅酸盐熔体的  $Cr_2O_3$  含量随温度的升高和氧逸度的降低而降低; (2) Cr 在金属液体和硅酸盐熔体之间的分配从 0.02 增加到约 1。更有趣的是, 我们在温度高于 1 450°C

的实验中观察到金属液体边缘形成铬铁矿, 这种铬铁矿在更高的温度 (~1 650°C) 和更高的压力 (5 GPa) 下是稳定的。顽火辉石球粒陨石 Sahara 97 096 的 Cr 含量 ( $3\ 175 \times 10^{-6}$ ) 与 CI 球粒陨石相当, 在“核”形成过程中硅酸盐熔体中的 Cr 含量下降, 但铬铁矿的形成进一步“消耗”了“幔”中的 Cr 含量 ( $1\ 800 \times 10^{-6}$ )。由于铬铁矿的形成需要  $Cr^{3+}$ , 因此在核-幔边界形成铬铁矿可能会导致幔中  $^{53}Cr$  的亏损。假设月球的核幔分异温度为 1 600°C 左右, 经历 0.1%~0.5% 铬铁矿的形成后, 最多可使原始月幔  $\delta^{53}Cr$  减少 0.04‰。但仍无法达到现今月幔平均  $\delta^{53}Cr$  值 (-0.22‰)。因此, 应考虑导致  $^{53}Cr$  丢失的其他机制, 例如在月球岩浆洋分异演化过程中尖晶石、石榴石等富 Cr 矿物的分离结晶等。

**关键词:** 核幔分异; 铬铁矿; 铬同位素; 类地行星; 顽火辉石球粒陨石

基金项目: 国家自然科学基金项目 (41773052, 41973058), 国家重点研发计划 (2024YFF0807500)。

第一作者简介: 李琼 (1998-), 女, 博士研究生, 研究方向: 实验岩石学. Email: liqiong@mail.gyig.ac.cn

\*通信作者简介: 杜蔚 (1980-), 女, 研究员, 研究方向: 实验岩石学与比较行星学. Email: duwei@mail.gyig.ac.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 高压下镓和锗在金属和硅酸盐中的分配及其对地球挥发分吸积的启示

吴正阳<sup>1</sup>, 景志成<sup>1\*</sup>, 蒲畅<sup>1</sup>, 高秀进<sup>1</sup>, 李金峰<sup>1</sup>, 杜治学<sup>2</sup>

1. 南方科技大学 地球与空间科学系, 广东 深圳 518055;

2. 中国科学院 广州地球化学研究所, 广州 510640

镓 (Ga) 和锗 (Ge) 作为中等挥发性亲铁元素, 它们在金属-硅酸盐熔体中的分配行为对于理解地核形成和挥发性物质吸积过程具有重要意义。在本研究中, 我们利用激光加热金刚石压砧装置, 在 22~70 GPa 和 3 728~4 740 K 的压力温度条件下进行了金属-硅酸盐分配实验, 以探究压力、温度和金属成分对 Ga 和 Ge 分配行为的影响。基于实验数据及文献数据的热力学建模表明, 随着压力和温度的升高, Ga 和 Ge 的亲铁性均减弱, 且 Ga 的亲铁性低于 Ge。拟合结果证实, 金属中硫 (S) 和硅 (Si) 的存在会降低 Ga 和 Ge 的亲铁性, 这与之前在相对低压低温条件下的研究结果一致。此外, 我们的研究还表明,

金属中的氧 (O) 对 Ga 和 Ge 的金属-硅酸盐分配行为具有相反的影响, 与之前的观点不同, O 会增加 Ga 的亲铁性, 但会降低 Ge 的亲铁性。结合 Ga 和 Ge 的分配行为, 我们进行了多阶段核形成模型的构建, 以探索能够重现地球硅酸盐部分 Ga、Ge 和 S 丰度的吸积情形和因素。结果表明, Ga 和 Ge 可能是在地球吸积的整个过程中持续被吸积, 而不仅仅是在地球质量增长的最后 10 %~20 % 的晚期阶段被吸积。

**关键词:** 金属-硅酸盐分配; 中等挥发性亲铁元素; 激光加热金刚石压砧; 高压; 地核形成

## • 专题 3: 早期地球演化 •

前寒武降温古海洋关键 N-Fe-S 生物地球化学耦合演化  
及其地质效应黄柳琴<sup>1</sup>, 蒋宏忱<sup>1</sup>, 董海良<sup>2\*</sup>

1. 中国地质大学(武汉)地质微生物与环境全国重点实验室, 武汉 430074;

2. 中国地质大学(北京)地质微生物与生物地球化学研究中心, 北京 100083

地球早期古海洋具有高温、低氧、富铁氨等还原物质等特殊的物理化学特征, 经历了长期的环境-微生物协同演化过程, 逐渐演变成常温、氧化的类现代环境。环境-微生物的协同演化伴随着古海洋中生命元素的主要赋存形态、生物地球化学转化过程、产生的地质记录/痕迹在不同地质历史时期发生系统性变化。例如, 海洋氮库从  $\text{NH}_4^+$  为主逐渐变成  $\text{NO}_3^-$  为主, 硫从局部分布的硫化层中  $\text{S}^{2-}$  为主氧化为广泛分布的  $\text{SO}_4^{2-}$ , 铁从溶解态  $\text{Fe(II)}$  氧化成含铁矿物(磁铁矿、赤铁矿等)并沉淀成大规模条带状铁建造(BIFs)。随着这些关键元素在古海洋中赋存状态和空间分布的变化, 它们在微生物作用下发生着复杂多变的耦合过程, 如表层水体中  $\text{NH}_4^+$  氧化形成  $\text{NO}_2^-/\text{NO}_3^-$  后, 在不同地质历史时期, 可被表层的有机质、下层的铁化水体中  $\text{Fe(II)}$  或硫化水体  $\text{S}^{2-}$  还原, 从而可能造成不同的地质效应和沉积记录。然而, 尽管目前有了些框架性认识, 但对环境-微生物协同演化驱动早期地球元素生物地球化学耦合循环演变的具体机制还存在很多未知之处, 如导致生物地球化学过程转变的关键环境因素节点、微生物代谢适应机制等。古海洋大幅度的降温过程(从高于  $70^\circ\text{C}$  降至常温)是驱动微生物群落和生物地球化学循环发生转变的一级影响因子, 以 N 为例, 由于不同氮转化微生物, 如氨氧化菌、亚硝酸盐氧化菌、反硝化菌等响应温度变化的敏感度不同, 不仅会导致不同时期(不同温度下)海洋氮库的组成、丰度的复杂变化, 也使得不同氮形态下与 Fe、C、S 等

耦合过程及产物发生变化。因此, 本研究通过利用不同温度的热泉微生物, 模拟海洋降温过程中微生物的自然演替, 分析硝化微生物及反硝化微生物作用下 N 产物随温度变化而发生的变化, 并进一步分析与  $\text{Fe(II)}$ 、 $\text{S}^{2-}$ 、有机质耦合情况下反硝化过程及产物的变化。结果表明, 高温( $>65^\circ\text{C}$ )下微生物硝化作用将  $\text{NH}_4^+$  主要转化为  $\text{NO}_2^-$ , 而低温( $<48^\circ\text{C}$ )则可完全氧化为  $\text{NO}_3^-$ , 从而形成随着古海洋温度降低, 氮库逐步从  $\text{NH}_4^+$  为主, 变成  $\text{NH}_4^+/\text{NO}_2^-/\text{NO}_3^-$  混合, 最后以  $\text{NO}_3^-$  为主的演替趋势。在这样的变化背景下,  $\text{NO}_3^-$  若通过异养反硝化作用(与有机氮耦合)还原, 其产物也经历高温以  $\text{NO}_2^-$  为主(尤其 $>55^\circ\text{C}$ )、低温以  $\text{N}_2$  为主的变化。与之相反, 若  $\text{NO}_3^-$  通过自养反硝化作用(与  $\text{S}^{2-}$  或  $\text{Fe(II)}$  耦合)还原, 则呈现出在高温下不易积累  $\text{NO}_2^-$ 、低温下易积累  $\text{NO}_2^-$  的趋势。进一步研究发现,  $\text{NO}_2^-$  以及  $\text{NO}_3^-$  在不同温度、化学条件(模拟古海洋富  $\text{HCO}_3^-$ 、Si 等)下氧化  $\text{Fe(II)}$  形成的矿物呈现出高温( $>45^\circ\text{C}$ )以磁铁矿、硅酸盐矿物等  $\text{Fe(II)}-\text{Fe(III)}$  混合价态铁矿物为主, 随着温度降低形成的主要铁矿物则演变针铁矿等  $\text{Fe(III)}$  矿物。这些认识为进一步精准刻画早期古海洋关键生命元素的赋存状态演变提供了实验数据支撑, 也为深刻理解地球早期生命演化和环境变迁提供重要科学依据。

**关键词:** 前寒武古海洋; 微生物-环境共演化; 氮-铁-硫生物地球化学耦合; 热泉; 条带状铁建造

基金项目: 国家自然科学基金项目(42192503, 42172340, 42202229, 42192500, 91951205)

第一作者简介: 黄柳琴(1987-), 副研究员, 研究方向: 地质微生物、微生物地球化学. Email: huanglq@cug.edu.cn

\*通信作者简介: 董海良(1965-), 教授, 研究方向: 地质微生物. Email: dongh@cugb.edu.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 波恩-奥本海默近似校正下的 C 和 O 同位素分馏

益西翁姆, 刘耘\*

中国科学院 地球化学研究所, 关键矿产与成矿预测全国重点实验室, 贵阳 550081

波恩-奥本海默近似 (BOA) 是量子化学计算中的核心假设, 但在处理轻原子、超快过程或强非绝热耦合体系时, 其适用性受到限制。同位素地球化学理论领域长期未对 C 和 O 同位素分馏的波恩-奥本海默近似造成的误差进行估算, 这是一个潜在的巨大缺陷, 因为在低温和常温下, 加了 BOA 的校正后的分馏结果, 会有大约 1~3 个 per mil 的差别, 对于某些需要精确的分馏参数的研究体系, 产生错误的解释。因此, 急需重新确定这个校正的贡献。目前, 国际上关于密度泛函理论 (DFT) 水平下的对角线波恩-奥本海默近似校正 (Diagonal Born-Oppenheimer Correction, DBOC) 的计算研究主要集中在非绝热效应的影响及其修正方法上。BOA 假设核与电子的运

动可分离, 但在涉及锥形交叉 (如电子态之间的简并) 或强非绝热耦合的体系中, 这一近似可能失效, 需引入校正项。在 DFT 框架下的 DBOC 计算是量子化学和计算化学领域的重要研究方向, 主要用于处理分子振动与电子态之间的耦合。近年来, 随着计算能力的提升和算法的优化, DBOC 的计算方法得到了显著改进, 并在有机分子、无机分子和生物大分子等体系中广泛应用。然而, 该领域仍存在一些争论与歧义, 例如在精度与效率之间的平衡、复杂体系中的适用性以及理论基础在某些特殊情况下的不足。

**关键词:** 波恩-奥本海默近似; 同位素分馏; 密度泛函理论

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42130114)

第一作者简介: 益西翁姆 (2000-), 硕士研究生, 研究方向: 理论与计算地球化学. Email: yixiwengmu@mail.gyig.ac.cn

\*通信作者简介: 刘耘 (1968-), 研究员, 研究方向: 理论与计算地球化学. Email: Liuyun@vip.gyig.ac.cn

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 富含金刚石的水星核幔边界：来自高温高压实验的证据

徐永江<sup>1</sup>, 林彦蒿<sup>1\*</sup>, 吴培衍<sup>1</sup>, Olivier Namur<sup>2</sup>, Yishen Zhang<sup>2</sup>,  
Bernard Charlier<sup>3</sup>

1. 北京高压科学研究中心, 北京 100193;

2. KU Leuven, Leuven 003001;

3. University of Liege, Liege 004000

MESSENGER 探测器确认水星的表面含有丰富的石墨, 这被认为是石墨从岩浆洋中上浮而形成, 说明在水星的早期演化过程中, 其内部处于碳饱和状态。因为水星的重力相对较低, 石墨被认为是水星岩浆洋结晶过程中唯一稳定的碳相。然而, 最新的模型对水星重力场的修正表明水星的核幔边界可能深度更深, 再加上硫对岩浆洋物理化学性质的潜在影响, 有必要重新评估水星内部的碳的存在状态。我们通过高温高

压实验、热力学模型和最新的行星物理模型重新评估了水星内部的碳的种型, 结果表明, 在高度还原的条件下, S 可以显著降低硅酸盐物质的液相线, 有助于金刚石在岩浆洋中保持稳定, 并沉淀在核幔边界; 另外, 固体金属内核的形成会导致金刚石从中结晶析出, 并上浮至核幔的边界处, 形成一个稳定的金刚石圈层。

**关键词:** 水星; 金刚石; 高温高压; 核幔边界

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 斜长石-玄武岩熔体间氢的非亨利行为

徐永江<sup>1</sup>, 徐永江<sup>1\*</sup>, 郑海燕<sup>1</sup>, Wim van Westrenen<sup>2</sup>

1. 北京高压科学研究中心, 北京 100193;

2. Vrije Universiteit Amsterdam, Faculty of Science, Earth Sciences, Amsterdam 1081 HV, Netherlands

月球斜长岩中的斜长石晶体被认为很可能直接结晶自月球岩浆洋 (LMO), 其元素和同位素组成为了解 LMO 的成分、形成年龄和演化过程的独特探针。然而, 月球斜长石的氢含量极低, 目前对极低氢含量条件下斜长石与熔体间氢分配行为的认识非常有限, 这导致对 LMO 氢含量的估算存在很大的不确定性。为了更好地量化月球条件下氢在斜长石-熔体间的分配系数, 我们开展了一系列高温实验。利用傅里叶变换红外光谱法 (FTIR) 对实验合成的斜长石及其共存熔体中的水含量进行了

分析, 结果表明: 当熔体水含量低于 300  $\mu\text{g/g}$  时, 斜长石-熔体间的氢分配系数 ( $D$ ) 为  $0.10 \pm 0.05$  至  $0.36 \pm 0.19$ , 这是迄今为止报道的最高值。结合已发表的分配系数数据, 我们发现  $D$  与熔体中氢含量之间存在很强的依赖性。这一发现表明, 其他矿物-熔体体系中的氢分配行为也可能不遵循亨利定律。因此, 在利用恒定氢分配系数来估算月球岩浆洋水含量时, 需要格外谨慎。

**关键词:** 斜长石; 月球; 岩浆洋; 氢; 分配系数

## • 专题 3: 早期地球演化 •

# 钒和硅同位素证据揭示月球形成巨大撞击驱动的 硅酸盐地球氧化

黄方<sup>1\*</sup>, 石震<sup>1</sup>, 张申扬<sup>1</sup>, 张宏罗<sup>2</sup>, 康晋霆<sup>1</sup>, 丁昕<sup>1</sup>

1. 中国科学技术大学 地球和空间科学学院, 合肥 230026;

2. 中国地质大学 (北京), 北京 100000

硅酸盐地球 (BSE) 的氧化还原状态对其宜居性和演化具有重要作用。全硅酸盐地球的氧逸度 ( $f_{O_2}$ ) 比其他类地行星和月球高出两个数量级以上, 但地球在吸积过程中如何实现显著氧化仍不清楚。本研究通过系统分析球粒陨石、月球和 BSE 的硅 (Si) - 钒 (V) 同位素组成分析发现: 月球形成的大撞击事件后, BSE 的氧逸度显著增加。具体表现为: BSE 与月球具有相同的  $\delta^{30}\text{Si}$  值, 均显著高于球粒陨石; 但 BSE 的  $\delta^{51}\text{V}$  为  $-0.91\text{‰}$ , 既高于球粒陨石 ( $-1.09\text{‰}$ ) 也高于月球 ( $-1.04\text{‰}$ )。基于高温高压实验确定的 V 同位素分馏系数进行的理论模拟显示: 原始地球与陨石及月球间的同位素差异可由还

原条件下的核幔分异解释。而地球与月球之间的  $\delta^{30}\text{Si}$  的高度相似性与  $\delta^{51}\text{V}$  的显著差异性则表明, 月球形成的大碰撞事件引发了氧化条件下的二次核幔分异过程。这一氧化过程很有可能源于忒伊亚撞击导致原始地球下地幔  $\text{Fe}^{3+}$  富集物质重新溶解于碰撞后的岩浆洋中, 进而引发氧化性物质的重新分布。由此证明, 月球形成撞击事件是塑造 BSE 高氧逸度的关键机制, 该过程从根本上重塑了地球的物质组成与演化路径。

**关键词:** 氧化性硅酸盐地球; 核幔分异; 钒-硅同位素

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 大碰撞引起的核幔角动量不均匀分布

毕榕熙\*

成都理工大学, 成都 610051

类地行星的自转主要由晚期大碰撞决定的。在大碰撞发生后, 类地行星可能会呈现核与幔之间的角动量分布不均匀。这种不均匀性可能会持续很长时间, 并显著影响行星的内部结构和早期演化。然而, 关于这一领域的研究仍然较少。我们采用了无网格有限质量 (MFM) 方法系统地模拟了大碰撞, 并与平滑粒子流体动力学 (SPH) 方法的结果进行了比较。使用的撞击参数涵盖了广泛的撞击角度、撞击体与总质量

比以及撞击速度。我们发现, 大撞击能够引发核与幔之间的角动量不均匀分布, 并导致差速旋转。通过 MFM 方法比 SPH 方法更好地捕捉了这一过程, 因为 MFM 方法避免了使用人工粘度。此类差速旋转可能会引起核幔边界 (CMB) 处的开尔文-亥姆霍兹不稳定性 (KHI), 进而导致地幔和地核物质的混合。

**关键词:** 大碰撞; 差速旋转; 核幔相互作用

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 超离子态 $\delta$ -AlOOH 及其稳定性的计算研究

何宇\*

中国科学院 地球化学研究所, 地球内部物质高温高压实验室, 贵阳 550081

通过使用从头算和深度学习势分子动力学模拟, 我们发现了  $\delta$ -AlOOH 在下地幔温压下转变为超离子态, 其特征是氧亚晶格中具有高度扩散性的质子。高度扩散的元素为系统提供了额外的熵, 从而导致了极高的热稳定性。我们的自由能计算表明, 脱水在能量和动力学上是不利的, 因此水在下地幔

条件下以超离子态存在并且有强的稳定性。本研究表明, 在地球历史中, 水可以稳定储存于地球深部下地幔。

**关键词:** 含水相; 超离子态; 第一性原理计算; 热稳定性

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## Stabilized Earth's cratons through episodic, felsic magmatism during Paleoarchean

袁禹\*

长江大学 地球科学学院, 武汉 430100

地球上最早的地壳物质可追溯至冥古代 ( $>4.0$  Ga), 然而地壳岩石-克拉通的 building block 主要形成于随后的古太古代 ( $\sim 3.6\sim 3.2$  Ga)。这些岩石如何得以大量保存不仅可以反映克拉通的稳定过程, 还对认识地球早期的构造样式和宜居性的形成具有重要启示。位于印度东部的 Singhbhum 克拉通保存了大量的古太古代 TTG 岩石, 是揭示这一前沿科学问题的理想对象。高精度 SIMS 锆石 U-Pb 年代学结果表明, 该克拉通内 TTG 岩石是周期性长英质岩浆活动的产物。此外, 不同期次锆石的 Hf 同位素、O 同位素和其他地球化学指标 (如 Eu 异常) 也呈现出周期

性的波动, 说明这些 TTG 岩石记录了交替出现的古老地壳再造和新生地壳生长事件。这些特征与全球其他克拉通内碎屑锆石的记录相一致, 可能反映了地幔翻转导致上浮岩石圈周期性熔融过程。因此, 周期性的长英质岩浆事件使得克拉通地壳逐渐获得刚性和浮力可能是地球上克拉通稳定的潜在机制。稳定克拉通的出现则为随后全球范围内的板块构造运动以及地球内-外部物质交换提供了基本前提。

**关键词:** 古太古代; 克拉通稳定; 锆石; SIMS; Singhbhum; 克拉通

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 地核形成的新机制：应力下的渗流

王林\*

中国科学院 地球化学研究所, 贵阳 550081

地核的形成机制决定了地幔和地核中亲铁元素和轻元素的丰度。前人研究表明, 在静水压条件下, 液态金属只能通过底辟作用或是在固体地幔中的巨大裂隙的运移形成地核。这些机制将会导致地幔和地核的不平衡。在本次研究中, 我们表明在应力存在的条件下, 渗流可以成为一个有效的地核形成机制。这种发生在颗粒大小尺度的核幔分异过程满足地核形

成的时间限制, 并且会导致下地幔和地核的部分平衡。因此, 地核在形成初期就可能已经富含轻元素, 而地幔中的中度亲铁元素的丰度也可以在这个过程中被提升到目前的数值。同时, 该模型中, 被困在地幔中的成核熔体也可以解释地幔中高亲铁元素的丰度。

**关键词:** 核幔分异; 渗流; 元素分配; 动力学

第一作者简介: 王林 (1989-), 研究员, 研究方向: 实验地球科学. Email: wldazuya@gmail.com

第二作者简介: 费英伟, 研究员, 研究方向: 实验地球科学. Email: yfei@carnegiescience.edu

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## Nuclear volume effects in kinetic isotope fractionation: A case study of mercury oxidation by chlorine species

刘耘<sup>1,2\*</sup>, 杨晨璐<sup>1</sup>

1. 成都理工大学, 成都 610059;

2. 中国科学院 地球化学研究所, 关键矿产成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550081

It is well-known that the equilibrium isotope fractionation of mercury (Hg) includes classical mass-dependent fractionations (MDFs) and nuclear volume effect (NVE) induced mass-independent fractionations (MIFs). However, the effect of the NVE on these kinetic processes is not known. The total fractionations (MDFs + NVE-induced MIFs) of several representative Hg-incorporated substances were selected and calculated with ab initio calculations in this work for both equilibrium and kinetic processes. NVE-induced MIFs were calculated with scaled contact electron densities at the nucleus through systematic evaluations of their accuracy and errors using the Gaussian09 and DIRAC19 packages (named the electron density scaling method). Additionally, the NVE-induced kinetic isotope effect (KIE) of Hg isotopes

are also calculated with this method for several representative Hg oxidation reactions by chlorine species. Total KIEs for  $^{202}\text{Hg}/^{198}\text{Hg}$  ranging from  $-2.27\text{‰}$  to  $0.96\text{‰}$  are obtained. Three anomalous  $^{202}\text{Hg}$ -enriched KIEs ( $\delta^{202}\text{Hg}/^{198}\text{Hg}=0.83\text{‰}$ ,  $0.94\text{‰}$ , and  $0.96\text{‰}$ , ) caused by the NVE are observed, which are quite different from the classical view (i.e., light isotopes react faster than the heavy ones). The electron density scaling method we developed in this study can provide an easier way to calculate the NVE-induced KIEs for heavy isotopes and serve to better understand the fractionation mechanisms of mercury isotope systems.

**Key words:** Nuclear volume effect; Kinetic fractionation; Hg isotopes; Ab initio calculations

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42130114)、中国科学院战略重点研究计划 (B) 项目 (XDB 41000000) 和国家航天局民用航天技术预研项目 (D020202)

第一作者简介: 杨晨璐 (1999–), 博士, 研究方向: 天体化学. Email: 1187878307@qq.com

\*通信作者简介: 刘耘 (1968–), 教授, 研究方向: 稳定同位素分馏的理论计算、计算地球化学和行星增生动力学研究. Email: liuyun@vip.gyig.ac.cn

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 核幔边界钨离子扩散性质的分子动力学研究

王涛\*

中国科学院 地球化学研究所, 地球内部物质高温高压院重点实验室, 贵阳 550081

W 同位素在萨摩亚、冰岛以及夏威夷地区存在负异常, 在前人研究发现可能的原因有三种, 通过数据的对比和理论研究, 最终将原因聚焦在核幔边界相互作用上, 其中较为重要的是核幔边界的扩散作用, 对于核幔边界的扩散作用解释并不完善, 为了了解早期地球核幔分异后重要金属元素 W 的地球化学行为。本文运用第一性原理的分子动力学模拟和深度势能分子动力学模拟, 主要解决两个问题: (1) 核幔边界上, W、Mg、O 在晶界、晶粒和熔体中的扩散作

用。(2) 由于地磁场的存在, W 作为高价态金属元素, 在极端条件或特定条件下其扩散作用会受到地磁场的影响。所以需要考虑地磁场对核幔边界 W 分配的影响。预期得到 W 在核幔边界的扩散性质, 进一步解释 W 同位素负异常的原因。除此之外探明地磁场与 W 扩散之间的关系。

**关键词:** 核幔边界; 扩散作用; 钨离子; 分子动力学模拟; 深度势能

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 碘的核幔分配及对异质增生的制约

张晟霖<sup>1</sup>, 李云国<sup>1\*</sup>, John Brodholt<sup>2</sup>, Lidunka Vočadlo<sup>2</sup>,  
万磊<sup>1</sup>, 郝记华<sup>1</sup>, 黄方<sup>1</sup>, 倪怀玮<sup>1</sup>

1. 中国科学技术大学 地球和空间科学学院, 合肥 230026;

2. University College London Department of Earth Sciences, London WC1E 6BT

洋中脊玄武岩 (MORB) 和洋岛玄武岩 (OIB) 具有截然不同的氙同位素特征, 其成因可以追溯到地球形成后不久的早期事件。具体来说, OIB 的  $^{129}\text{Xe}^*/\text{I}$ / $^{136}\text{Xe}^*\text{Pu}$  比 MORB 低, 这可能是由于异质吸积, 也可能是核幔分异导致的, 因为实验表明在更高的压力下, 碘会逐渐变得亲铁。然而, 碘的分配行为还受到地核中硫和氧含量的控制, 目前并未得到很好澄清, 这阻碍了利用 I-Pu-Xe 同位素体系对地球吸积过程的准确量化。因此, 我们通过第一性原理计算离定了不同 S 和 O 含量下硅酸盐熔体和液态铁合金之间碘的分配。

我们发现, 随着液态铁中 S 和 O 含量的增加, 碘虽然变得更为亲铁但它仍保持亲石性, 并且在地核可能的最大 S 和 O 含量下依然大部分进入硅酸盐中。因此, 地核的形成并不能将大量硅酸盐地球中的碘抽离出去, 这表明 MORB 和 OIB 源区之间的氙同位素差异主要来自于地球的异质吸积。进一步利用 I-Pu-Xe 同位素体系, 可以约束地球在后增薄层时期加入了 0.07 %~1.68 % 的 CI 物质或与之相当的碳质球粒陨石。

**关键词:** 碘; 分配系数; 核幔分异; 地球吸积

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42322201), 国家自然科学基金项目 (42173040)

第一作者简介: 张晟霖 (2003-), 硕士研究生, 研究方向: 早期地球。Email: zsl\_2020sgy@mail.ustc.edu.cn

\*通信作者: 李云国 (1985-), 教授, 研究方向: 计算矿物学, 计算地球化学。Email: liyunguo@ustc.edu.cn

• 专题 3: 早期地球演化 •

## Deciphering a complex Neoarchean-Paleoproterozoic collisional history between the Kaapvaal and Zimbabwe Cratons: new constraints from polyphase deformation of the Central Limpopo Belt, southern Africa

张健<sup>1\*</sup>, Guenther Brandl<sup>2</sup>, 赵国春<sup>1</sup>, 刘锦<sup>3</sup>, 赵辰<sup>4</sup>

1. The University of Hong Kong 地球科学系, 香港;

2. Council for Geoscience Limpopo Unit, Polokwane, South Africa 0700;

3. 吉林大学, 长春 130012;

4. 中国地质调查局沈阳地质调查中心, 沈阳 110034

The Limpopo Belt of southern Africa is a classical Paleoproterozoic orogenic belt that is believed to have resulted from the collision between the Kaapvaal and Zimbabwe Cratons. Previous studies have primarily focused on geochronology, petrology, and geochemistry of different rock assemblages, resulting in a general tectonic framework indicating at least two significant tectonothermal events from Mesoarchean to Paleoproterozoic. However, the spatial and temporal relationships between these events, as well as their overall structural patterns in the field, are poorly understood. The Central Limpopo Belt contains the best lithological exposures of different ages, making it the most promising area for detailed structural mapping and analysis, and for gaining a better understanding of these issues. Based on the detailed field-based structural analyses, four generations of deformation were identified. The earliest D1 deformation is characterized by the penetrative S1 foliations only preserved within the 3.6~3.4 Ga anorthosites that now occur sporadically as xenoliths or boudins in the highly deformed 2.9~3.3 Ga Sand River gneiss. S2 are penetrative gneissic foliations that were extensively developed in the Sand River gneiss and were intensively superimposed by subsequent deformations into tight to isoclinal folds. After restoration of their attitude, S2 foliations strike NW-SE and dip steeply to SW at high angles, indicating that the D2 deformation experienced a roughly NE-SW-oriented compression between 2.9~2.6 Ga. D3 deformation resulted from significant NW-SE-oriented

compression that intensively superimposed the earlier S2 fabrics into vertically inclined isoclinal folds and tectonites S3-L3. Strain measurements on these tectonites indicate that all pre-existing rock assemblages were stretched or sheared along the vertical orientation, resulting in the development of numerous sheath folds in the Sand River gneiss and 2.6~2.7 Ga Grey gneiss. Associated with the zircon ages from anatexis melts, the D3 deformation most likely occurred at 2.1~2.0 Ga. SHRIMP U-Pb zircon age dating recorded these two metamorphic ages of ~2.6 Ga and 2.0 Ga on a single zircon of the foliated Sand River gneiss. A regional large scale inclined open fold F4 gently refolded the D1-D3 fabrics and marked the final deformation of the Central Limpopo Belt, occurring sometime after ~2.0 Ga.

Detailed structural data of this study, in combination of available geochronological and metamorphic data lead us to propose that the ~2.65 Ga and ~2.0 Ga tectonothermal events occurred under different tectonic environments. The ~2.65 Ga tectonothermal event developed coevally with D2 deformation and high-grade metamorphism during the NE-SW collisional event. In contrast, the ~2.0 Ga tectonothermal event occurred during a NW-SE-oriented collisional event between the Kaapvaal and Zimbabwe Cratons, resulting in the formation of the major Limpopo tectonic linear belt seen today.

**Key words:** Archean; Limpopo Belt; Deformation; Structural evolution; Tectonics

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 基于太赫兹光谱的行星大气同位素分析

陈哲\*

成都理工大学 地球与行星科学学院, 成都 610059

行星大气的同位素组成是研究行星形成与演化的重要线索。本研究利用太赫兹光谱技术, 对行星大气中的关键同位素成分进行了高精度分析。太赫兹波段具有高分辨率和高灵敏度的特点, 能够有效探测行星大气中多种同位素的特征吸收谱线。通过对行星大

气中 H、C、O、N 等元素的同位素比值进行精确测量, 结合行星演化模型, 可以揭示行星在其形成与演化过程中所经历的物理化学变化。

**关键词:** 行星大气; 同位素; 太赫兹光谱

第一作者简介: 陈哲, 博士研究生, 研究方向: 行星地质学.

\*通信作者简介: 刘耘, 研究员, 研究方向: 早期地球.

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 北大别木子店地区新太古代两类 TTG 片麻岩的 岩石地球化学特征和成因指示

杨雄<sup>1\*</sup>, 高世新<sup>1</sup>, 王达<sup>1</sup>, 张兆峰<sup>1</sup>, 邱啸飞<sup>2</sup>, 刘耘<sup>1,3</sup>

1. 成都理工大学, 成都 610000;

2. 中国地质调查局武汉地质调查中心, 武汉 430000;

3. 中国科学院 地球化学研究所, 贵阳 550081

湖北省麻城市的木子店片麻岩杂岩体是目前报道的扬子克拉通内年龄最古老的地区(冥古宙碎屑锆石和始太古代 TTG 片麻岩), 是探讨扬子克拉通早期大陆地壳演化的理想场所。根据岩石全岩元素地球化学、锆石 U-Pb 年代学数据、锆石 Hf 同位素结果, 木子店片麻岩杂岩体在新太古代末期发生了强烈的构造-岩浆热事件, 形成了两类不同的 TTG 片麻岩: 第一类 TTG 片麻岩的锆石 Hf(*t*) 平均值范围在  $(-0.1 \pm 1.0)$  到  $(0.8 \pm 1.8)$ , 两阶段 Hf 模式年龄为

~3.0 Ga, 全岩元素地球化学指示其可能形成于俯冲板片部分熔融, 并且可能存在地幔楔的混染; 第二类 TTG 片麻岩的锆石 Hf(*t*) 平均值范围在  $(-26.7 \pm 5.2)$  到  $(-18.9 \pm 3.8)$ , 两阶段 Hf 模式年龄为 4.13~4.05 Ga, 全岩元素地球化学指示其可能形成于加厚下地壳的部分熔融, 且不存在地幔楔的混染。

**关键词:** 木子店; TTG 片麻岩; 新太古代; 锆石; 部分熔融

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 早期地幔冷却机制：基于多阶段冷却模型的新框架

何婷\*

中国科学院 地球化学研究所, 贵阳 550081

地球早期内部的热状态及其冷却过程对地球后续的地质演化至关重要。地球在形成初期经历了诸如月球形成的大碰撞、金属核心的分异、与早期月球的潮汐交互以及放射性元素衰变等剧烈事件, 这些过程导致地球最初处于极高的温度。然而, 尽管地球早期地幔的冷却机制对地球的早期演化具有关键意义, 现有的冷却模型仍存在较大的争议, 其合理性和适用性尚未得到充分验证。目前, 早期地幔热演化的参数化模型多基于单一构造机制 (如停滞盖层机制), 或依赖于板块构造理论的假设 (认为板块构造在约 35 Ga 前已开始存在)。然而, 这些假设在现代地质学中存在较大的争议, 其预测结果未必符合实际。基于此,

我们认为, 地幔冷却的过程应当发生在剧烈的岩浆海固化之后, 从一个非常高温的状态开始逐步降温。与单一标度定律的单阶段冷却模型不同, 我们提出了一种多阶段的冷却模型 (Episodic Multi-stage Cooling Model, EMCM)。这一新模型可能更贴近早期地幔的实际冷却过程, 能够解释地幔在约 35 Ga 前之前的冷却演化, 并与后期地幔热历史的已知约束相一致。通过该模型, 我们可以更为全面地理解地球早期地幔的热演化过程, 为进一步研究地球早期的地质演化提供更加可靠的理论框架。

**关键词:** 热演化; 参数化模型; 幕式冷却

基金项目: 中国科学院战略性先导科技专项 (B 类) 项目 (XDB41000000)

第一作者简介: 何婷 (1997-), 女, 博士研究生, 研究方向: 地球动力学数值模拟. Email: heting@mail.gyig.ac.cn

\*通信作者简介: 刘耘 (1968-), 男, 研究员, 研究方向: 同位素地球化学、天体化学. Email: liuyun@vip.gyig.ac.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 用量子蒙特卡洛方法计算模拟地球深部物质的状态和性质

刘之捷<sup>1</sup>, 刘耘<sup>1,2\*</sup>

1. 成都理工大学, 成都 610000;

2. 中国科学院 地球化学研究所, 关键矿产成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550081

自蒙特卡洛方法被应用于科学问题以来, 随着科学问题的深入推进, 对精度的要求越来越高, 其非常高的精度被给予了极大厚望, 量子蒙特卡洛能够通过量子力学的原理来准确模拟和描述系统的状态, 尤其是在涉及强关联和量子效应的复杂体系中具有独特的优势, 然而其巨大的算力需求让许多科学家望而却步, 随着算法(如神经网络)和计算机(如量子计算机)的发展, 量子蒙特卡洛(QMC)正变得可能。最新的实验和地球动力学计算发现, 金属液体在应力

作用下能在地幔中发生快速渗流, 这意味着经典的成核模型可能还不够完善。为此, 我们使用量子蒙特卡洛方法对地球深部物质的状态和性质进行计算, 通过模拟深部地幔物质在极端压力和温度条件下的行为, 可以更准确的描述其在地球内部的物理性质, 如熔点、密度、粘度以及其在不同应力状态下的流动特性。

**关键词:** 量子蒙特卡洛方法; 地球深部物质; 强关联和量子效应; 地幔; 极端压力和温度条件

基金项目: 国家重点研发计划资助(2024YFF0807500)

第一作者简介: 刘之捷(1989-), 男, 博士研究生, 研究方向: 计算地球化学, Email: popyulexue@163.com;

\*通信作者简介: 刘耘(1968-), 男, 研究员, 研究方向: 早期地球与行星科学, Email: Liuyun@vip.gyig.ac.cn

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 早期地球及火星条件下含 Mn (II) 碳酸盐的光化学氧化

郝记华<sup>\*</sup>, 郭继业, 黄方

中国科学技术大学 地球和空间科学学院, 合肥 230026

Mn 的氧化物是常见的地表强氧化剂, 在现代生物地球化学循环过程中发挥着不可或缺的作用。但是, 地球早期及行星无氧条件下, Mn 往往被认为会经历还原性风化, 形成富 Mn (II) 的早期水体或次生矿物(例如, 碳酸盐)。近些年, 有研究指出,  $\text{MnCO}_3$  可以发生无氧光化学氧化, 为早期风化贡献关键的氧化剂, 但自然界中 Mn (II) 往往以  $\text{CaCO}_3$  或  $\text{MgCO}_3$  晶格中的杂质形式存在。目前, 学界对于碳酸盐体系

中痕量 Mn (II) 掺杂的光化学活性还不明确。对此, 本次汇报将展示一些利用第一性原理计算获得的痕量 Mn (II) 掺杂导致的常见  $\text{Ca/MgCO}_3$  光化学活性转变的结果, 并且探讨本研究对于早期地球和火星宜居性以及潜在生命信号解读的启示意义。

**关键词:** 早期地球; 光化学; 锰; 碳酸盐; 产氧光合作用

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 另一种元素分配系数的计算方法: He 在 Fe 与 MgSiO<sub>3</sub> 间的分配

王杰<sup>1</sup>, 尹坤<sup>1\*</sup>, 刘耘<sup>1,2</sup>

1. 成都理工大学 行星科学国际研究中心, 成都 610059;

2. 中国科学院 地球化学研究所, 关键矿产成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550081

核幔分异是早期地球演化进程中最为关键的事件之一。在此过程里, 微量元素会依据各自的分配系数, 有选择性地进入地核或者地幔。然而, 从理论计算的角度获取这些分配系数, 面临着巨大的挑战。目前, 学界已有的计算方法主要有两相共存法、基于热力学积分的化学势相等法以及交换反应法。基于第一性原理的两相共存法, 由于体系中存在界面, 且元素在两相中的扩散速率存在差异, 往往会产生较大不确定度。而当下的化学势相等法采用了理想混合熵近

似, 交换反应法则假设活度系数为 1。此外, 这些方法对相同体系所得出的分配系数存在较大差异。本研究构建了另一种计算方法。使用该方法, 获得了核幔边界条件 (4 000 K、5 000 K 和 135 GPa) 下, He 在 Fe 和 MgSiO<sub>3</sub> 熔体之间的分配系数。结果显示, 本研究所得数据与多数已报道的数据相近。这说明该计算方法在早期地球研究领域具有巨大的潜力。

**关键词:** 分配系数; 理论计算; 核幔分异

第一作者简介: 王杰 (1996-), 博士 (在读), 研究方向: 计算地球化学. Email: wjie0128@163.com

\*通信作者简介:

尹坤 (1982-), 副研究员, 研究方向: 行星物质热力学计算. Email: yinkun@cdut.edu.cn

刘耘 (1968-), 研究员, 研究方向: 理论及计算地球化学. Email: Liuyun@vip.gyig.ac.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 矿物与气体之间 Xe 稳定同位素平衡分馏: 来自第一性原理计算的制约

刘璇, 李春辉\*

成都理工大学 地球与行星科学学院, 行星科学国际研究中心, 成都 610059

Xe 是惰性气体, 其化学性质十分稳定, 但是地球大气中 Xe 的丰度与同位素分馏表现出双重反常现象: 若以球粒陨石成分为基准进行归一化, 除氙(Xe)外, 所有稀有气体均呈现“轻元素丰度低于重元素”的规律(例如, 空气中的 Ne/Ar 比值低于球粒陨石中的 Ne/Ar 比值)。这种元素丰度差异伴随轻稀有气体(Ne、Ar、Kr)更显著的同位素分馏(例如, Ne 的同位素分馏程度高于 Ar)。作为较重的稀有气体, Xe 的丰度却显著低于更轻的 Kr(即大气中的 Xe/Kr 比值远低于球粒陨石, 大气 Xe/Kr 是球粒陨石的 1/24), 与“重元素更易保留”相悖。且 Xe 的同位素分馏程度(40%/amu)远超其他稀有气体(Kr 仅为 8%/amu)。这一现象也被称为 Xe 悖论。前人研究认为在地球圈

层分异的岩浆洋阶段, 随着橄榄石和长石从地球岩浆洋中分离结晶出来, 轻 Xe 同位素释放到大气中并丢失, 因此上地幔呈现重 Xe 同位素富集的特征。为了验证前人通过高温高压实验获得的 Xe 同位素分馏系数是否达到了热力学平衡, 本工作通过第一性原理计算详细解释了在岩浆洋结晶分异过程中 Xe 同位素的分馏机制。本文研究证实了前人的实验数据, 即橄榄石和长石与 Xe 气体之间确实存在可观的同位素分馏。因此, 地球岩浆洋在控制地球挥发性元素和同位素组成上起了重要作用。

**关键词:** 地球 Xe 悖论; 第一性原理计算; 岩浆洋

第一作者简介: 刘璇(1999-), 硕士研究生在读, 研究方向: 同位素分馏计算. Email: liuxuan19990328@163.com

\*通信作者简介: 李春辉(1975-), 副研究员, 研究方向: 类地行星形成演化及其挥发性元素起源的研究, 侧重宇宙化学和稳定同位素地球化学. Email: lichunhui@cdut.edu.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 早期地幔的热边界层性质和动力学效应

章清文

中国科学院地球化学研究所, 关键矿产成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550081

早期地幔是岩浆洋固化后形成的冥古宙、太古宙的硅酸盐主体, 未充分分异。它的地幔动力学涉及地幔的热-构造-(化学)特征、驱动因素及其相互关系和演化。早期地幔通过对流传热, 提供重要热源, 也控制地幔熔融、地壳形成和驱动(前)板块构造。本研究聚焦于早期地幔的动力学特征及其演化过程, 旨在探讨早期地幔对流的活跃程度、岩石圈的性质以及地幔冷却的机制。通过对地幔对流强度的衡量指标——瑞利数(Rayleigh number)的分析, 结合热边界层理论和数值模拟方法, 揭示了早期地幔对流的活跃性及其对地球演化的影响。研究表明, 早期地幔的对流强度可能较大, 瑞利数可达  $10^7 \sim 10^9$ , 远高于现代地幔对流的瑞利数( $10^7 \sim 10^8$ )。这种活跃的对流导致了边界层的变薄、地幔柱的细化以及岩石圈的变薄, 从而加速了地幔

的散热和熔融过程。此外, 早期地幔的热状态和热收支状况对理解地幔冷却路径具有重要意义。然而, 现有理论与地质记录之间存在矛盾, 如早期地幔热演化的“热突变危机”和富集储库的存在与活跃对流的 inconsistency。为解决这些困境, 提出了“波动式”冷却路径的假说, 并强调了进一步观测和理论研究的必要性。未来的研究将集中在推进理论研究、开发模拟算法和程序以推进数值模拟, 并借助多学科知识的融合, 以推进对高瑞利数对流、湍流和二相流等复杂问题的量化。这些研究将有助于深化对早期地幔动力学特征及其演化机制的理解, 为地球科学领域提供新的理论和方法。

**关键词:** 早期地幔; 热边界层; 地幔冷却; 壳幔分异; 前板块构造

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## Differentiation of Enstatite chondrite-like planetesimals and planetary embryos

李琼, 杜蔚\*

中国科学院 地球化学研究所, 关键矿产成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550081

Enstatite chondrites (E-chondrite) exhibit isotopic signatures remarkably consistent with those of Earth, suggesting their potential as analogous materials to the building blocks of our planet 1, 2, 3. The impactors similar as E-chondrites that contributed to the accretion of the proto-Earth are believed to have undergone differentiation<sup>4, 5</sup>. However, the differentiation of planetesimals requires a mechanism for metal segregation, which is challenging given the small size of planetesimals and the absence of gravity triggered permeable flow. Partial melting of silicates may be necessary for this process. The high melting temperature of  $\text{MgSiO}_3$  raises doubts about whether the heat sources from short-lived decay systems are sufficient to melt the E-chondrite-like planetesimals. This study present high pressure melting experimental results on Enstatite chondrite Sahara 97 096 and computerized tomography analyses of metal segregation

under various conditions. Thermodynamic calculations indicate that heating by the decay of the  $^{26}\text{Al}$ - $^{26}\text{Mg}$  system can sufficiently increase temperatures to melt over 20 % of the silicate in Sahara 97 096, thereby initiating metal-silicate segregation. We infer that the parent body of Sahara 97 096 was likely smaller than 12 km, where efficient heat conduction kept the planetesimal cold enough to avoid thermal metamorphism. Impactors contributing to the accretion of the proto-Earth should have been larger, potentially undergoing “core-mantle” differentiation. Large planetary embryos, comparable in size to the Moon, are expected to have formed a core and a magma ocean very early in their history and would have cooled down subsequently.

**Key words:** Enstatite Chondrite; the building blocks of the Earth; High pressure and high temperature experiment; differentiation

• 专题 3: 早期地球演化 •

## Acasta 片麻岩的长短寿命 Sm-Nd 同位素体系解耦

王达<sup>1\*</sup>, 刘耘<sup>1,2</sup>

1. 成都理工大学 行星科学国际研究中心, 成都 610059;

2. 中国科学院 地球化学研究所, 贵阳 550081

地球上太古代早期岩石记录的 Hf-Nd 同位素特征分别指示了地球早期地壳两种截然不同的演化历史 (早期地球的 Hf-Nd 悖论)。近期关于这个问题开展的研究认为这是由于早太古代岩石在形成后经历了复杂的变质和热作用, 导致富集稀土的副矿物分解和结晶并伴随开放系统的行为, 使全岩的长周期 Sm-Nd 同位素无法精确示踪古老岩石的源区。于是这引发了一个问题: 由于冥古宙的地质历史重度依赖短衰变周期的 Sm-Nd 体系 ( $^{146}\text{Sm}$ - $^{142}\text{Nd}$ ), 古老岩石中潜在的 Sm-Nd 同位素开放系统行为是否会影响

$^{142}\text{Nd}$  同位素异常的记录? 基于这个问题我们选取了一套世界上最古老的岩浆岩, 4.0~3.7 Ga 加拿大 Acasta 片麻岩样品, 并对其受到强烈 Sm-Nd 同位素扰动的磷灰石单矿物进行了高精度的  $^{142}\text{Nd}$  同位素分析。结果显示, 磷灰石的短寿命  $^{142}\text{Nd}$  同位素体系并未受到明显的扰动, 这意味着在古老岩石中存在  $^{142}\text{Nd}$ - $^{143}\text{Nd}$  的解耦,  $^{142/143}\text{Nd}$  协同演化的同位素模型可能无法准确记录冥古宙壳幔分异的年龄与模式。

**关键词:**  $^{142}\text{Nd}$ ; 冥古宙; 早期地球

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 扬子克拉通北缘古元古代岩浆事件及构造背景: 锆石 U-Pb 年代学和地球化学特征

卢山松<sup>1</sup>, 凌文黎<sup>2\*</sup>, 邱啸飞<sup>1</sup>, 段瑞春<sup>1</sup>

1. 中国地质调查局武汉地质调查中心(中南地质科技创新中心), 武汉 430205;

2. 中国地质大学(武汉)地质过程与矿产资源国家重点实验室, 武汉 430074

古元古代是全球地质历史上重要的构造-岩浆事件峰期之一, 包括超大陆的形成和裂解。目前, 虽然在超大陆重建方面取得了一定的进展, 但对于其形成和演化历史仍然存在争议。位于扬子克拉通西北缘陕南汉中碑坝地区, 出露了以后河杂岩为代表的前寒武纪基底岩系。本次研究对后河杂岩开展了系统的同位素年代学和元素地球化学研究。后河杂岩经历了高角闪岩相-麻粒岩相高级变质, 对其进行的锆石微区原位 U-Pb 同位素定年结果表明, 其原岩形成于  $(2086 \pm 10) \text{ Ma} \sim (2119 \pm 10) \text{ Ma}$ , 四件锆石样品  $^{207}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$  的加权平均年龄为  $(2106 \pm 26) \text{ Ma}$ , (MSWD=2.3), 与全球范围内 Columbia 超大陆的聚合时间相当。后河杂岩的原岩为钠质钙碱性 I 型中酸性岩岩, 相对富集大离子亲石元素, 亏损高场强元素, 具有岛弧岩浆岩的特点。样品的  $\varepsilon_{\text{Nd}}$  值范围为  $-2.7 \sim -3.1$ , 两阶段亏损地幔 Nd 同位素模式年龄( $t_{2\text{DM}}$ )为  $2.26 \sim 2.63 \text{ Ga}$ 。较高的  $\varepsilon_{\text{Nd}}$  值以及与形成年龄相近

的模式年龄都指示, 后河杂岩主要为新生地壳岩石部分熔融形成, 但部分花岗闪长质岩石的源岩含有部分较老的地壳物质。后河杂岩的地球化学特征显示其形成于活动大陆边缘, 其成因与洋壳俯冲过程中板片发生断离有关。结合样品正的  $\varepsilon_{\text{Nd}}$  值及缺乏太古宙继承锆石的特点, 本研究认为后河杂岩可能代表了统一扬子克拉通形成前在洋壳基础上发展进来的独立微陆块, 并将其命名为“碑坝微陆块”。结合已有的扬子克拉通古元古代变质及岩浆事件的研究成果, 本研究认为后河杂岩所属的碑坝微陆块与扬子陆核区可能于  $\sim 2.0 \text{ Ga}$  发生了碰撞造山事件。该碰撞事件使得碑坝微陆块与扬子陆核拼合, 促使扬子陆块完成了克拉通化, 并可能为 Columbia 超大陆聚合事件的组成部分。

**关键词:** 后河杂岩; 地球化学; 古元古代; 扬子陆块克拉通化; Columbia 超大陆

基金项目: 国家自然科学基金项目(40873017, 40673025)

第一作者简介: 卢山松(1986-), 高级工程师, 研究方向: 同位素地球化学. Email: lushansong@mail.cgs.gov.cn

\*通信作者简介: 凌文黎(1962-), 教授, 研究方向: 同位素地球化学. Email: wlling@cug.edu.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 分子内同位素分馏：地球早期研究的新线索？

刘琪\*

中国科学院 地球化学研究所，关键矿产成矿与预测全国重点实验室，贵阳 550081

近年来，多类陨石样品的分析表明，地外天体普遍携带丰富的有机化合物，包括氨基酸、多环芳烃及含氮杂环分子等。随着分析技术的突破，分子内同位素分馏研究为追溯有机物的形成机制与演化路径提供了全新视角，这一进展正在重塑我们对生命起源和太阳系早期物质循环的认知。传统同位素分析侧重于分子整体的同位素组成，而分子内同位素分析技术通过解析同位素在分子内特定位置（position-specific isotope analysis, PSIA）或团簇分布（clumped-isotope）的特征，能够区分不同合成路径的“同位素指纹”。例如，碳质球粒陨石中检测到的羧酸类分子内  $\delta^{13}\text{C}$  分馏特征，揭示了其可能通过星际介质中光化学反应或

低温水岩相互作用形成。这些发现对理解地球早期演化具有双重意义：一方面，外源性物质通过陨石、彗星等载体持续输入原始地球，可能补充了地表 C、N、S 等生命必需元素的库存；另一方面，内同位素特征揭示的分子形成温度、辐射环境等信息，为重建太阳系的演化提供了独立约束。因此，建立更系统的同位素分馏分析技术，拓展对多硫、多氧内同位素以及非质量分馏特征的分析能力，势必可以扩展我们对整个太阳系演化（包括地球早期演化）的理解。

**关键词：**内同位素分馏；分子特征位点；团簇同位素

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 地幔热状态与氧化还原状态演化历史

张方毅\*

中国科学院 海洋研究所, 深海极端环境与生命过程研究中心, 山东 青岛 266071

地幔氧逸度 ( $f_{O_2}$ ) 控制着地幔来源熔体的氧逸度, 进而通过火山脱气作用调节大气组成。因此研究地幔氧逸度的演化历史对我们认识地壳和大气成分演化规律有着至关重要的意义。然而, 地幔氧逸度的长期演化仍存争议。本研究通过整合约 38 Ga 前至今的地幔柱来源科马提岩、苦橄岩及亏损地幔来源玄武岩的综合数据集, 揭示了地幔热力学状态与氧化还原状态的协同演化规律。研究结果表明, 无论是地幔柱来源还是亏损地幔来源的熔体, 其太古宙时期的氧逸度均显著低于后太古宙时期。地幔来源熔体氧逸度随

时间升高的现象, 与地幔潜能温度和熔融深度的系统性降低呈现显著相关性。通过将氧逸度归一化至恒定参考压力 (即潜能氧逸度), 本研究发现自冥古宙以来, 地幔柱与亏损上地幔的氧逸度基本保持稳定。这些结果表明, 长期的地幔冷却作用降低了熔融深度, 提高了地幔来源熔体的氧逸度, 从而促进了大气的氧化作用。

**关键词:** 氧逸度; 潜能温度; 早期地球; 大气成分演化

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 机器学习恢复太古宙 TTG 片麻岩的形成压力

芦登岗, 刘佳\*, 栾志康, 周靖钧, 雷天婷, 杨凯龙

浙江大学, 杭州 310058

TTG 片麻岩是太古代大陆地壳的主要组成部分, 了解他们的熔融压力条件有助于深入认识早期大陆地壳的性质和地球动力学起源。然而, 由于其源岩的不确定性和分离结晶作用的影响, 太古代 TTG 片麻岩的完整熔融压力历史仍不清楚。随着机器学习在地球科学领域的应用, 其为探究压力与成分之间的复杂关系提供了一种有效的方法。结合相平衡模拟, 我们开发了一种基于机器学习的压力计算工具, 利用主量元素恢复太古代 TTG 片麻岩的熔融压力。该工具具有高精度、批处理能力等优点, 并考虑了分离结晶作用, 其可以用于全球数据库以估算岩石的熔融压力。我们首先将模型应用于世界上最古老的岩石

~4.03 Ga 前的加拿大 Acasta 片麻岩, 结果表明它们主要在低压条件下形成 ( $<0.5$  GPa), 厚度约为 20~30 km, 类似于现今冰岛的地壳厚度。此外, 我们将模型进一步应用于全球太古代 TTG 片麻岩, 发现高压型 TTG ( $\geq 1.5$  GPa) 在约 3.8 Ga 首次出现, 并在 3.4 Ga 后显著增加。这些结果与前人计算地壳厚度的变化相一致。考虑到地幔环境温度和双变质带等指标的同步变化, 我们认为全球性板块构造可能在约 3.4 Ga 开始启动。

**关键词:** 太古宙 TTG; 熔融压力; 机器学习; 太古代动力学演化

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42373044)

第一作者简介: 芦登岗 (1998-), 博士研究生, 研究方向: 早期地球演化. Email: ldg@zju.edu.cn

\*通信作者简介: 刘佳 (1985-), 研究员, 研究方向: 地球内部挥发分. Email: liujia85@zju.edu.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 贵州福泉寒武系牛蹄塘组的元素地球化学特征及意义

林丽<sup>\*</sup>, 庞艳春

成都理工大学 沉积地质研究院, 成都 610059

贵州福泉地区寒武系底部牛蹄塘组多金属层位富集大量的管状化石。元素地球化学特征表明, 该层位的地球化学特征有别于其上下层位: 牛蹄塘组 Ba 等微量元素含量、Sr/Ba 比值、Th/U 比值特征表明, 多金属层层位的样品具有热水成因的沉积岩或沉积物特征; 稀土元素的测试结果显示, 本区多金属层位处的样品出现了明显的正 Eu 正异常值, 具有典型热水沉积特征; 在  $K_2O-Rb$  图上投点结果表明, 沉积时期的古海洋环境中有火山物质的混入; 牛蹄塘组中的磷质含量由下到上是递减的, 磷矿岩段和多金属层中

的磷质含量最高; V/Cr 比值、V/(V+Ni) 比值显示, 牛蹄塘组沉积时期海水中的氧含量是变化的, 由缺氧-贫氧-氧化的沉积环境, 甚至局部时间段出现短暂的富氧条件。因此, 推测牛蹄塘组沉积早期, 区域上存在深部热液活动, 带来了丰富的微量元素, 而局部时间的充氧事件为生物的牛蹄塘组生物的出现带来了较好的氧气条件。

**关键词:** 贵州; 寒武系, 牛蹄塘组; 元素地球化学

基金项目: 国家自然科学基金项目 (41971108)

第一作者简介: 林丽 (1965-), 教授, 研究方向: 生物成矿. Email: linli@cdut.edu.cn

\*通信作者简介: 林丽 (1965-), 教授, 研究方向: 生物成矿. Email: linli@cdut.edu.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 类地行星早期大气的多组分逃逸模拟

王子琦<sup>1</sup>, 刘耘<sup>1\*</sup>, 周游<sup>2</sup>, 刘亦煊<sup>2</sup>

1. 中国科学院 地球化学研究所, 贵阳 550081;

2. 成都理工大学, 成都 610051

流体动力学逃逸对早期行星表层的物质储库以及热演化过程有着不可忽视的影响。在太阳系演化早期, 年轻太阳的极紫外 (EUV) 辐射通量可高出现今太阳水平两个数量级。类地行星大气吸收年轻太阳的高能 EUV 辐射, 发生流体动力学逃逸。流体动力学逃逸过程会导致剧烈的大气物种丢失率, 等同、甚至高于碰撞事件; 与此同时, 大气逃逸过程本身带走地表热量的功率, 可能显著高于同时期的热辐射。

水蒸汽作为类地行星大气参与流体动力学逃逸的典型物种之一, 在类地行星增生末期, 为岩浆洋冷凝去气过程所大量释放、扩散进入高层大气。大量的水蒸汽吸收高能 EUV 辐射发生光解、进而逃逸。这一逃逸过程被认为是造成金星大气失控温室

效应的主导机制, 导致金星在过去漫长的地质时间中演化出了如今的高温地表。而地球则被认为, 冥古宙时期原始水海洋的形成, 及时终止了这一剧烈的大气水逃逸过程, 为形成我们现今的宜居环境创造了条件。

大气氢的剧烈逃逸会“拖拽 (drag)”其它更重的大气组分一同发生逃逸。因而, Ne、Ar 等原本不易发生逃逸的大气重组分, 会随富氢高层大气一同发生向星际空间的逃逸。这一过程导致的非放射成因惰性气体同位素质量分馏过程, 为我们通过数值模拟回溯早期大气的流体动力学逃逸场景提供了制约。

**关键词:** 行星大气; 大气逃逸

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2024YFF0807500)

第一作者简介: 王子琦 (1999-), 硕士研究生, 研究方向: 行星大气逃逸. Email: wangziqui@mail.gyig.ac.cn

\*通信作者简介: 刘耘, 研究员, 研究方向: 稳定同位素分馏的理论计算、计算地球化学和行星增生动力学. Email: liuyun@vip.gyig.ac.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 水诱导的地幔反转与第一次大氧化事件

吴忠庆\*

中国科学技术大学 地球和空间科学学院, 合肥 230026

跟生命和板块运动一样, 大陆也是地球所特有的。岛弧模型和地幔柱的洋底高原模型是大陆起源的两个主流模型。相比较岛弧模型, 地幔柱模型能更好地解释太古宙大陆的特征, 但该模型在回答太古宙陆壳源区富水这一关键特征上遇到了困难。我们提出的水诱导的地幔反转模型比较好地解决了这个困难, 同时还能解释太古宙多个未解之谜, 包括浅部地幔的氧化。水诱导的地幔反转描述了地球早期由岩浆洋演化导致的特殊深部水循环。在地幔发生整体熔融的情况下, 高压下的物性研究表明结晶的地幔浮在岩浆洋中部, 将岩浆洋分成外面和基底两个岩浆洋。由于下地幔矿物含水能力低, 随着岩浆的结晶, 最初含一定量水的基底岩浆洋越来越富水, 水降低了基底岩浆洋的密度, 当水富集到一定程度后, 基底岩浆洋的密度不再比上覆地幔高, 基底岩浆洋会出现重力失稳而形成地幔反转(超级地幔柱), 该反转将水带到地球浅部, 促进大陆和克拉通地幔岩石圈等的形成。因此太古宙大陆是基底岩浆洋演化的产物, 当地幔反转耗尽基底岩浆洋后, 太古宙型的大陆不再产生, 太古宙末期对应着大

陆形成机制的转变期, 水诱导的地幔反转可以自然地解释为什么太古宙前后的大陆有完全不同的特性。

水诱导的地幔反转不仅能形成大陆, 同时还能促成浅部地幔的氧化, 是第一次大氧化事件的关键驱动力。高压下硅酸盐熔体中的二价铁会发生歧化反应, 生成的铁进入地核后, 基底岩浆洋富集三价铁。水诱导的地幔反转将富含三价铁的物质带到地球浅部, 氧化上地幔。大陆的形成和上地幔氧逸度的变化都是水诱导的地幔反转的效应, 它们在时间和空间上是相关的, 这种相关性确实得到了地质数据的支持。该图像也能解释太古宙末期是上地幔氧逸度变化最快的时期, 地幔反转下大量大陆在太古宙末期形成, 上地幔变得越来越氧化, 在水诱导的地幔反转这个关键驱动力及其它地质和生物过程的共同作用下, 地球最终在太古宙结束后不久诱发了第一次大氧化事件, 地球的大气出现可观的氧气。

**关键词:** 第一性原理计算; 早期地球; 前板块构造; 高温高压物性; 熔体

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 北大别木子店地区~3.5 Ga TTG 片麻岩的识别及其地质意义

高世新<sup>1\*</sup>, 杨雄<sup>1</sup>, 王达<sup>1</sup>, 邱啸飞<sup>2</sup>, 刘耘<sup>1,3</sup>

1. 成都理工大学, 成都 610059;

2. 中国地质调查局武汉地质调查中心, 武汉 430000;

3. 中国科学院 地球化学研究所, 贵阳 550081

北大别构造带位于扬子克拉通北缘, 是其造山带的重要组成部分, 被认为可能代表了下地壳及其部分熔融的产物。本文对木子店地区出露的太古宙 TTG 片麻岩进行了全岩元素地球化学、锆石 U-Pb 年代学和 Lu-Hf 同位素分析, 目的在于揭示其成因机制, 为扬子克拉通地壳演化提供新的证据。研究结果显示, 新识别出的 TTG 片麻岩年龄为~3.5 Ga, 锆石 Hf ( $t$ ) 平均值为 $-4.7 \pm 3.3$ , 两阶段 Hf 模式年龄为 $(4.12 \pm 0.2)$  Ga, 表明木子店~3.5 Ga TTG 片麻岩可能是由更

加古老的地壳物质改造形成的。本文新识别出的 TTG 片麻岩与崆岭杂岩最古老岩石的对比结果显示, 木子店地区 TTG 片麻岩的形成时代老于崆岭杂岩, 且岩石类型也存在明显差异, 表明扬子克拉通可能由各自独立的微陆块古陆核组成, 并且木子店片麻岩杂岩可能是比崆岭杂岩更加古老的结晶基底。

**关键词:** 木子店; TTG 片麻岩; 地壳物质; 崆岭杂岩

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 金属-硅酸盐分异过程的计算模拟研究

钟忞翰<sup>1</sup>, 高才洪<sup>1\*</sup>, 刘耘<sup>1,2</sup>

1. 成都理工大学 行星科学国际研究中心, 成都 610059;

2. 中国科学院 地球化学研究所, 关键成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550081

核幔分异是类地行星早期演化中最为关键的地球化学分异事件之一, 其动力学过程直接决定了行星圈层结构(金属核-硅酸盐幔)的形成。精确厘定核幔分异的物理化学条件(如温度、压力、氧逸度等), 是重建行星早期岩浆洋演化模型的基础。然而, 目前对金属熔体从硅酸盐熔体中的分离机制(如迁移速率、相界面行为)及其主导控制因素(温度、压力梯度、熔体粘度)仍缺乏系统性研究。为此, 本研究基于第一性原理分子动力学模拟, 以整体地球成分(Bulk Earth)为初始体系, 构建了原子级精度的高温高压熔体模型, 通过系统模拟不同温压条

件下金属-硅酸盐熔体的相分离动力学过程, 定量研究了核幔分异的临界温压条件(如液相分离阈值、分异速率与温压的函数关系)。研究表明: 岩浆洋的冷却速率可能是控制金属核形成时间的核心参数; 行星初始成分的氧逸度差异或为类地行星核幔分异程度及圈层结构分异提供关键解释; 该模型框架可进一步拓展至火星、月球等太阳系天体的演化差异性研究, 为行星形成理论的普适性约束提供新的数值工具。

**关键词:** 核幔分异; 岩浆洋演化; 相变

第一作者简介: 钟忞翰, 本科生, 研究方向: 地球化学, Email: 1992931930@qq.com

通信作者简介: 高才洪, 副研究员, 研究方向: 同位素地球化学, Email: gaocaihong@cdut.edu.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

# 黄铁矿微量元素重建埃迪卡拉纪陡山沱组 甲烷异常释放事件

陈 燊\*

长江大学 地球科学学院, 武汉 430000

海底甲烷水合物储量巨大, 在其失稳并释放出异常多数量甲烷的过程中, 甲烷的厌氧氧化过程会在海洋沉积物中产生一系列沉积学、元素地球化学和同位素地球化学变化, 并留下相应的地质记录。同时, 作为超级温室气体的甲烷也会很大程度的影响地球气候变化。在漫长的地质历史演化过程中, 地球曾经历过多次大大小小的冰期-间冰期旋回, 海平面的下降引起的静压力降低有可能触发多次古海洋甲烷水合物的失稳。因此, 厘清甲烷事件在地质历史时期的记录以及所带来的环境影响, 将为全球气候变暖起到“以古示今”的重要启示作用。黄铁矿作为硫酸盐驱动甲烷厌氧氧化作用 (SD-AOM, sulfate-driven anaerobic oxidation of methane) 的重要自生矿物之一, 能够稳定保存于地层之中并记录其形成时周围的孔隙水化学条件。甲烷释放后的一系列微生物参与的地球化学过程对某些营养型微量元素有着特定的需求, 而这些特征性微量元素将被记录于同时形成的黄铁矿之中。为探索黄铁矿微量元素作为甲烷释放指示指标的运用, 本研究前期通过印度洋安达曼海和我国南海神狐海域样品黄铁矿微

量元素和 Ni 同位素数据, 发现由于 SD-AOM 中的逆产甲烷作用对 Ni 和 Co 的需求, 使其富集在随后沉积的黄铁矿中, 因此, SD-AOM 主导产生的黄铁矿富集 Ni 和 Co。黄铁矿 Ni 同位素测试发现 AOM 主导产生的黄铁矿拥有更低的 Ni 同位素值, 验证了 AOM 主导产生的黄铁矿记录了逆产甲烷作用这一推论。本研究后续将该指标进一步运用于古海洋中, 通过华南青林口剖面埃迪卡拉系陡山沱组样品的黄铁矿微量元素数据, 发现并恢复了三次甲烷释放事件, 分别出现在陡山沱组底部、中部和顶部。可能与 Marinoan 和 Gaskiers 冰期海平面下降导致气体水合物失稳有关。黄铁矿微量元素揭示的甲烷信号与剖面内局部发现的极低碳同位素组成高度吻合, 证实该方法可作为古甲烷释放事件的有效示踪指标。该研究对理解古海洋甲烷释放调控机制、海洋氧化还原波动、大气氧含量演变及生物演化具有新启示。

**关键词:** 黄铁矿; 微量元素; 甲烷水合物; AOM; 埃迪卡拉纪

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 核幔分异过程中成核金属熔体的成分演化

蒲畅<sup>1</sup>, 景志成<sup>1\*</sup>, 高秀进<sup>1</sup>, 吴正阳<sup>1</sup>, 杜治学<sup>2</sup>

1. 南方科技大学, 广东 深圳 518055;

2. 中国科学院 广州地球化学研究所, 广州 510640

通过比较全硅酸盐地球 (BSE) 和 CI 碳质球粒陨石中的 Mg/Si 比值, 发现地球上地幔中 Mg 和 Si 的含量可能存在一定的亏损。这一缺失的 Mg 和 Si 元素可以通过以下几种机制解释: (1) 这两种元素具有一定的挥发性, (2) 在地幔-地核分异过程中, Mg 和 Si 同时溶解进入到地核内, 或 (3) 下地幔中可能存在一些富含这些元素的隐藏储库。为了探讨这些可能性, 我们利用多面顶大压机和激光加热金刚石压腔实验系统, 在 2~100 GPa 和 2000~5300 K 的温度和压力条件下, 开展了高温高压条件下 Si、O 和 Mg 的金属-硅酸盐分配实验。通过结合我们的实验数据与前人研究成果, 我们建立了一个自洽的热力学模型, 该模型同时考虑了金属熔体中 Si、O

和 Mg 之间的元素相互作用。利用该模型, 我们可以更精确地计算成核金属熔体在核幔分异过程以及随后可能发生的冷却阶段中轻元素的分配和演化情况。我们的实验结果表明, 在核形成过程中大量的 Si 和 O 可能从岩浆洋中进入到成核金属熔体内, 随后这些高温的金属熔体在下沉穿过低温的固体地幔时以 SiO<sub>2</sub> 的形式析出。然而, Mg 在成核金属熔体中的显著溶解需要在大型天体撞击时, 岩浆洋达到显著高温平衡的条件下才可能发生。这些发现为探讨地球深部主量元素 Si, O 和 Mg 的分布和演化提供了重要的实验和理论依据。

关键词: 核幔分异; 岩浆洋; 元素分配

第一作者简介: 蒲畅, 博士研究生, 研究方向: 高温高压实验矿物物理. Email: 11930803@mail.sustech.edu.cn

\*通信作者简介: 景志成, 副教授, 研究方向: 地球与行星内部物理. Email: jingzc@sustech.edu.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 早期地壳-地幔的形成与演化

刘鹏<sup>1\*</sup>, 崔夏红<sup>2</sup>, 李潮峰<sup>1</sup>, 彭澎<sup>1</sup>, 郭敬辉<sup>1</sup>

1. 中国科学院 地质与地球物理研究所, 北京 100029;

2. 河北地质大学, 石家庄 050031

冥古宙时期地球圈层的分异和演化过程极大影响了随后地壳、地幔、大气的成分演化和物质演化, 但受限于地球早期的高热流环境、强烈的陨石轰击, 以及复杂的变质变形作用的叠加, 与这一时期相关的一系列涉及地球早期地壳-地幔的形成机制、早期地幔-地壳的最终命运等本源问题也一直众说纷纭、未有定论。考虑到早期锆石 Lu-Hf 等长周期放射性同位素并未记录可信的 Lu-Hf 同位素亏损的信号, 有学者提出至少在 38 Ga 以前地幔仍呈球粒陨石质特征, 即地球早期不可能有亏损地幔和大陆地壳的存在。但基于 Lu-Hf 等长周期放射性同位素反演地幔演化过程, 其中的一个重要假设是这些锆石所赋存的地壳具有短暂的居留年龄, 即岩浆从地幔分离出来之后, 其 Lu-Hf 同位素未经长期演化, 就很快被锆石记录下来, 但冥古宙-始太古代的镁铁质地壳常常可以在封闭体系下保存超过 10 Ga, 因此这一假设并不成立。加之锆石所对应的源区常呈富集特征, Lu-Hf 等长周期同位素体系往往并不能很好地揭示早期地幔和地壳的形成和演化规律。近二十年来灭绝核素  $^{146}\text{Sm}$ - $^{142}\text{Nd}$  体系的数据日渐增多, 以此为依据, 迄今学界共提出多种理论用以揭示冥古宙地幔-地壳的最终命运, 如 (1) 太古宙晚期均一化模式, (2) 冥古宙地壳快速生长-快速循环模式, 和 (3) 冥古宙地幔长期封闭隔离模式。然而, 以往所使用的数据中, 中太古代明显缺失, 严重依赖始太古代数据, 而始太

古代数据又强烈不均一。对这些大量的始太古代数据进行分析显示, 其标准偏差 (2S.D.) 与标样数据的标准偏差高度正相关, 且一些极高正异常的  $^{142}\text{Nd}$  数据并未在随后的研究中得到复现, 因此始太古代高度变化的  $^{142}\text{Nd}$  值可能仅仅是测试分析所致, 并不能可信地指示早期地幔的高度不均一性。针对明显缺失的中太古代数据, 通过对华北克拉通冀东地区的 3.1 Ga 斜长角闪岩进行了  $^{142}\text{Nd}$  分析, 更新后的全球数据并未表现出  $^{142}\text{Nd}$  异常随时间逐渐减小的趋势。因此  $^{142}\text{Nd}$  和  $^{143}\text{Nd}$  数据分布更可能指示: 冥古宙亏损地幔可从 4.4 Ga 一直封闭保存至 2.7 Ga, 在此期间不受或较小受到地幔对流均一化的影响。考虑到华北克拉通曹庄地区, 北大西洋克拉通 Saglek、Isua 地区, Abitibi 等地区的幔源岩石具有相近的  $^{142}/^{143}\text{Nd}$  演化规律, 这可能指示它们起源于相同的冥古宙亏损地幔源区。由于多数古老幔源岩石由  $^{142}\text{Nd}$  和  $^{143}\text{Nd}$  联合限定的地幔亏损时间均在 4.4 Ga 前后, 且部分岩石所对应的地幔源区 Lu-Hf 和 Sm-Nd 体系明显解耦, 而下地幔布里奇曼石是目前已知的唯一可以造成 Hf-Nd 体系解耦的硅酸盐矿物, 因此冥古宙亏损地幔的形成可能与 4.4 Ga 前后形成月球的大碰撞导致的岩浆海事件有关。

**关键词:** 冥古宙; 亏损地幔; 灭绝核素; 华北克拉通;  $^{142}\text{Nd}$

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 分子云中氮同位素分馏的理论计算

薛江<sup>\*</sup>, 李春辉

成都理工大学 地球与行星科学学院, 成都 610059

氮元素有两种稳定的同位素： $^{14}\text{N}$  和  $^{15}\text{N}$ 。在地球大气中  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  为 272,  $\delta^{15}\text{N} = 0$  (以地球大气为标准), 地球地幔的值约为  $\delta^{15}\text{N} = -5\text{‰}$ , 并且现今太阳系内几乎所有硅酸盐储库的  $\delta^{15}\text{N}$  分布在地球大气值附近。太阳风中的  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  为  $200 \pm 55$ , 基于太阳风推断的原太阳星云气体的估计值  $\delta^{15}\text{N} = (-390 \sim -370)\text{‰}$ , 在较大范围内局部星际云的  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  比值可以达到 400, 基于对彗星 HCN 分子的光谱分析, 推断彗星的  $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$  比值为  $323 \pm 46$ , 木星大气的  $\delta^{15}\text{N} = (-375 \pm 160)\text{‰}$ , 在一些星际固体尘埃颗粒 (IDPS) 中发现了相比于地球值 (SMOW 样品) 更大的  $\delta^{15}\text{N}$  值,  $\delta^{15}\text{N} = 480\text{‰}$ 。人们推测造成太阳系中如此大的 N 同位素比值差异的原因之一可能是不同含 N 分子

在分子云中分馏导致的, 这可能反映了早期分子云中 N 同位素组成的不均一性。然而, 现有文献对分子云条件下的 N 同位素理论分馏计算探讨较少, 并缺乏对超冷条件下 Urey 模型的必要校正, 即核自旋校正、振动-旋转耦合校正、振动非谐校正、DBOC 能量校正以及针对  $\text{NH}_3$  分子的翻转劈裂校正等多种情况。将上述因素全部纳入考虑后, 我们获得了分子云中常见含 N 分子的同位素分馏因子, 即 RPFR 值。我们计算的同位素分馏值可能会为大量的天文学观测测量的分子云中含 N 分子的同位素比值做出重要参考。

**关键词:** 分子云; 含氮分子分馏; Urey 模型; 超冷条件

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 地表起伏驱动地球气候与环境长周期变化

曹晓斌<sup>1\*</sup>, 武广辉<sup>1</sup>, 李广伟<sup>2</sup>, 李高军<sup>2</sup>, 王孝磊<sup>2</sup>

1. 南京大学 国际同位素效应研究中心, 地球科学与工程学院, 南京 210023;

2. 南京大学 地球科学与工程学院, 南京 210023

冰期(或雪球地球)与大气氧化是地球演化史上最具变革性的事件,深刻塑造了其宜居性与生物圈演化。尽管已有大量研究,但这些事件背后的驱动机制仍存争议。有趣的是,冰期与大气氧化在时间上呈现关联性,但二者的关系却鲜有探讨。本文提出“地表起伏(continent ruggedness)”概念,并建立了一种定量评估地球古地表起伏及其对气候环境影响的新方法。研究表明,地表起伏的增加会促进沉积作用、侵蚀过程、化学风化和有机碳埋藏,从而增强 CO<sub>2</sub> 封存与 O<sub>2</sub> 积累,为冰期与大气氧化创造了有利条件。具体而言,我们的重建结果显示,古元古代早期与新

元古代晚期具有比其他地质历史时期更高的地表起伏,这有助于解释雪球地球事件、大氧化事件及新元古代氧化事件的发生。在显生宙时期,地表起伏总体维持较高水平,在晚古生代出现一个峰值,这可能触发了晚古生代冰期与氧化事件。相反,中元古代整体呈现较低的地表起伏,仅在该时期中期出现一个峰值,这为“boring billion”及中元古代氧化事件提供了新的解释视角。这些发现表明,地表起伏是驱动地球表层气候与环境长期演变的关键因素。

**关键词:** 冰期; 雪球地球; 大气氧化; 地表起伏

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 高温高压下 H 的核量子效应

张一宁<sup>1</sup>, 高才洪<sup>2</sup>, 刘耘<sup>1,2\*</sup>

1. 中国科学院 地球化学研究所, 关键矿产成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550082;

2. 成都理工大学 行星科学国际研究中心, 成都 610059

针对以 H 为代表的含大量轻元素的系统, 核量子效应 (Nuclear Quantum Effects, NQE) 被认为是分子模拟计算与实验观测间偏差的核心原因之一。近二十多年来, NQE 的算法与模拟技术得到了迅猛发展, 已然进入理论与计算化学的主流, 并应用到了地学研究中。以往的 NQE 研究重点关注常压常温与低温体系, 但近年来对于冰的高温高压实验研究发现其

表现出的各类异常性质和行为与 NQE 直接相关。因此, 为进一步明确 NQE 在高温高压下的行为, 本研究采用路径积分分子动力学结合深度势能的方法对以冰为代表的含 H 物质在高温高压开展模拟计算研究。

**关键词:** 核量子效应; 路径积分分子动力学; 深度势能

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42130114)

第一作者简介: 张一宁 (1995-), 博士后, 研究方向: 同位素效应的理论计算与地学应用. Email: zhangyining@mail.gyig.ac.cn

\*通信作者简介: 刘耘 (1968-), 研究员, 研究方向: 同位素分馏理论. Email: Liuyun@vip.gyig.ac.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 太古宙俯冲作用演化的数据驱动型研究

刘纯韬, 叶辰阳, 张舟\*

浙江大学 地球科学学院, 杭州 310058

俯冲作用的演化是地球构造演变的关键环节。然而, 关于俯冲带及其伴随的岩浆活动是否起始于太古宙或元古宙, 学术界一直存在争议。弧玄武岩是俯冲带中重要的岩浆产物, 通常由俯冲板片释放的熔/流体交代的地幔楔部分熔融产生。因此, 弧玄武岩具有亏损高场强元素和富集大离子亲石元素等地球化学特征。这些特征被广泛用于判别弧玄武岩, 并追溯古老的俯冲作用。然而, 这种过于简化的元素-构造分类方法准确率低, 不适用于识别古俯冲作用。针对这一科学问题, 本研究通过构建高维度的机器学习模型来区分弧玄武岩与非弧玄武岩。该模型综合了多种地球化学数据, 包括 Nb/La、Ti、U/Nb、Nb 和 Pb/Nd 等元素比值, 判别准确性达到 95 %。

本研究进一步将该模型用于识别太古宙弧玄武岩。研究表明, 不同克拉通的弧岩浆活动存在显著时间差异。在早太古代, 弧岩浆活动分布于少数克拉通中, 如格陵兰、西澳大利亚的皮尔巴拉以及卡普瓦尔克拉通。从中晚太古代开始, 弧岩浆的分布逐渐扩展至全球多个克拉通, 这一现象表明这一期间地球构造体制可能经历了从停滞盖层构造到移动构造的重要转变。本研究通过数据驱动型研究方法探究了太古宙俯冲作用的演化历史, 为理解地球早期构造演化提供了新的视角。

**关键词:** 太古宙俯冲作用; 玄武岩; 地球化学大数据; 机器学习

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42072066)

第一作者简介: 刘纯韬 (1994-), 博士后, 研究方向: 地球化学大数据. Email: c.-t.liu@zju.edu.cn

\*通信作者简介: 张舟 (1986-), 研究员, 研究方向: 地球化学大数据. Email: zhangzhou333@zju.edu.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 早期地球氧气起源: 矿物-水界面氧元素交换机制

吴逍, 何宏平\*, 朱建喜, 林莽

中国科学院 广州地球化学研究所, 广州 510640

氧气 ( $O_2$ ) 是生命代谢和发育的必须物质, 在地球早期生命起源与进化过程中发挥关键作用, 氧气的化学起源是当前地球科学与宜居行星探测的热点前沿之一. 我们首次采用同位素示踪技术解剖了矿物-水界面自由基反应, 发现石英等矿物表面的活性化学基团 ( $\equiv SiO^\bullet$ ,  $\equiv SiOO^\bullet$ ) 可与水反应并高效生成过氧化氢 ( $H_2O_2$ ) 和氧气,  $H_2O_2$  和  $O_2$  中的氧原子主要源自矿物表面基团 ( $\equiv SiOO^\bullet$ ), 仅少量源自  $H_2O$ , 氧原子在矿物-水-大气三相界面上发生快速交换. 在机械外力作用下, 硅酸盐矿物-水界面可以不断释放

活性氧, 而且这种作用广泛存在于风化剥蚀, 河流冲刷, 构造运动等地质过程中, 构成早期地球非生物氧化剂的重要来源, 并促使早期生命进化以适应氧化环境. 这项研究颠覆了“地球初始氧来源于  $H_2O$  分解”的传统认识, 揭示了新的产氧化学机制和氧元素地球化学循环方式, 为认识宜居行星岩石圈, 水圈, 大气圈和生物圈的协同演化提供了重要依据.

**关键词:** 早期地球; 矿物;  $O_2$ ; 氧同位素示踪; 氧交换

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42472063, 42202037)

第一作者简介: 吴逍 (1991-), 博士后, 研究方向: 矿物表面物理化学. Email: wuxiao@gig.ac.cn

\*通信作者简介: 何宏平 (1967-), 研究员, 研究方向: 矿物学. Email: hehp@gig.ac.cn

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 基于动态多维决策的小行星采矿目标优选方法

蒲秀浪<sup>1</sup>, 刘耘<sup>1,2\*</sup>

1. 成都理工大学 地球与行星科学学院 行星科学国际研究中心, 成都 610000;
2. 中国科学院 地球化学研究所, 关键矿产成矿与预测全国重点实验室, 贵阳 550081

针对地球不可再生资源加速枯竭的严峻挑战, 行星矿产资源开发已成为深空探测的战略焦点。小行星因富含铂族金属 (PGMs)、铁镍合金及稀有矿物被视为关键目标天体。然而, 如何从数以百万计的小行星中筛选出高开采价值目标仍面临挑战。现有筛选方法虽已考虑目标天体的轨道参数 (如倾角、偏心率和速度增量  $\Delta v$ )、物质组成 (如光谱分类: M/S/C 型)、发射窗口优化及经济回报率等静态参数及法律伦理约束, 仍存在以下显著局限: (1) 资源评估不明确性: 受限于光谱/雷达数据分辨率不足及样品数据匮乏, 难以量化资源种类、品位及赋存形态等; (2) 技术整合滞后性: 未充分考虑以核能推进的小型化探测器和人工智能 (AI) 自主勘探导航等颠覆性技术突破对任务成本与可行性的指数级提升潜力; (3) 多学科建模碎片化: 轨道动力学、资源经济学与工程约束等

参数缺乏系统性耦合机制。为此, 本研究拟提出小行星采矿目标动态多维决策支持系统 (Dynamic Multidimensional Decision Support System for Asteroid Mining Target Selection, DMDSS-AMTS), 通过多源数据融合 (如光谱、雷达和陨石)、经济价值建模 (如金属当量系数)、工程风险分级 (如尺寸大小、风化层厚度和自转周期)、技术演化预测 (如蒙特卡洛模拟) 及多准则决策优化 (如 AHP-熵权法), 创新性构建 “资源-技术-决策” 动态耦合模型, 突破传统静态参数筛选的局限性。DMDSS-AMTS 系统可为未来小行星采矿任务的目标遴选与规划提供决策支持, 相关工作持续推进中。

**关键词:** 小行星; 太空采矿; 动态多维决策; 人工智能 (AI); 原位资源利用 (ISRU)

基金项目: 国家重点研发计划资助 (2024YFF0807500)

第一作者简介: 蒲秀浪 (1997-), 博士研究生, 研究方向: 矿物学、岩石学、矿床学. Email: 1334501926@qq.com.

\*通信作者简介: 刘耘 (1968-), 研究员, 研究方向: 理论及计算地球化学. Email: Liuyun@vip.gyig.ac.cn.

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 早期地壳岩浆成分及磷元素丰度的演化： 来自锆石-熔体分配实验的新约束

尚升<sup>1</sup>, 林彦蒿<sup>1\*</sup>, Wim van Westrenen<sup>1,2</sup>, Fraukje M. Brouwer<sup>2</sup>

1. 北京高压科学研究中心, 北京 100193;

2. 荷兰阿姆斯特丹自由大学地球科学系, Amsterdam 081 HV  
Netherlands

锆石是地球早期地质过程的最古老见证者,其微量元素和同位素组成是了解冥古宙和太古宙地壳演化条件的主要窗口。针对早期地壳成分演化、构造体制转变时间及生命起源元素供给能力等重大科学问题,本研究通过高温分配实验与全球锆石大数据分析相结合,系统解析磷(P)元素在锆石-熔体体系中的分配行为及其对岩浆成分演化的约束。结合 4 792 颗天然锆石的微量元素数据库,建立了实验分配系数约束下的岩浆成分演化历史。本研究通过锆石-熔体分配实验,定量研究了 P 含量对锆石-熔体分配系数的影响,重点关注铝(Al)、锂(Li)和 P 的分配系数。实验结果表明,锆石中 P 含量显著改变 Al 和 Li 等关键元素的分配行为,其中铝分配系数( $D_{Al}$ )与锆石 P 含量呈线性正相关( $\log D_{Al}=0.0008C_P-2.87$ ), Li 分配系数( $D_{Li}$ )呈负相关( $\log D_{Li}=-0.0019C_P-1.41$ ),而 P 本身的分配系数以及其他微量元素的分配系数与 P 含量无关。基于实验结果,我们重新评估了冥古宙岩浆的铝饱和指数(ASI)以及 P 和 Li 含量。研究表明,冥古宙-早太古宙(>3.6 Ga)岩浆铝饱和指数 ASI 普遍低于 1.0 (均值  $0.85 \pm 0.15$ ),较前人模型低

0.5,表明早期岩浆源区以火成岩原岩为主。首例过铝质岩浆(ASI>1.1)出现于 3.6 Ga,标志着沉积物熔融事件在此后启动,为板块构造体制转变提供了精确的时间约束,支持了从以垂直运动为主的构造模式向伴随沉积物部分熔融的水平构造模式的转变发生在该时间之后的假说。进一步分析发现,古岩浆 Li 浓度计算值高达  $(1000\sim 2500) \times 10^{-6}$ ,远超现代陆壳均值( $\sim 20 \times 10^{-6}$ ),暗示太古宙锆石中 Li 可能经历后期低温改造或流体作用的影响;与此形成对比的是,岩浆 P 含量  $(1900\sim 400) \times 10^{-6}$  自 4.4 Ga 以来保持稳定,其浓度与现代地壳相当,表明早期地壳已具备维持生命起源所需的 P 元素持续供给能力。本研究通过实验岩石学与大数据的交叉验证,为理解早期地球岩浆成分演化提供了新的视角,揭示了 P 在早期地球地壳中的丰度及其对岩浆成分的潜在影响,为探索早期地球的构造模式和生命起源提供了重要线索。

**关键词:** 锆石-熔体分配; 铝饱和指数; P 丰度; 早期地壳演化

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 超热地核的产生与地磁场的启动

周游\*

成都理工大学 地球与行星科学学院, 成都 610059

探究行星如何冷却是地球和行星演化的一个基本问题。对类地行星而言, 通常所有重要的地质现象都由行星内部的热量驱动, 包括板块俯冲、地幔对流、地表火山活动以及大型矿床的形成等。当行星完全冷却后, 所有地质活动也随之停止。最近的一系列深空探测成果表明, 行星冷却速率的复杂性超出了以往的理解。嫦娥五号的样本显示, 月球正面的热演化历史可能延续至 20 Ga, 而背面的火山活动历史可能长达 2.807 Ga (误差 $\pm 0.03$  Ga), 甚至可能达到 1.2 Ga。火星 InSight 任务的地震数据显示, 火星的核心至今未完全固化, 可能仍存在底部岩浆洋。这些发现提示我们需要重新审视类地行星的热演化历史。本研究系统

模拟了地球增生晚期的所有重大碰撞事件, 包括碰撞角度、速度和碰撞体的质量。本研究得出以下发现: (1) 大规模碰撞事件可导致超热地核的形成; (2) 地核内部的热量分布不均, 自然在地幔边界形成一个热边界层; (3) 这一热边界层的散热过程影响了地磁场的启动。我们产生了以下发现: (1) 大碰撞事件会造成超热地核的形成; (2) 热量在地核内部的分布也是不均匀的, 会在地幔边界天然形成一个热边界层; (3) 热边界层的散热过程影响了地磁场的启动。

关键词: 超热地核; 大碰撞; 地磁场

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 双羧酸在化学演化中的关键作用

蚁瑞钦\*

中国科学院 广州地球化学研究所, 广州 510640

生命的起源是自然科学中尚未解开的重大科学谜题, 长期以来备受关注。根据化石和地球化学证据, 生命至少在 35 Ga 前 便已出现在地球上, 而构成生命的基本有机物质则必然在更早时期形成。理解这些生命必需分子的来源及其如何进一步演化成生物大分子, 是生命起源研究的核心问题之一。目前, 科学界对生命所需有机物的来源存在两种主要观点: 一是认为这些有机分子可以在早期地球环境中通过化学合成生成; 另一种观点则认为, 关键的有机物可能并非源自地球, 而是由地外天体 (如陨石、彗星、星际尘埃) 输送至地球, 为生命的萌发提供原始原料。例如, Murchison 碳质球粒陨石 的研究表明, 其中含有大量与生命起源相关的有机物, 包括 氨基酸、碱

基和糖类物质。然而, 陨石所携带的有机物如何在原始地球环境中进一步演化, 最终形成生物大分子并催生原始生命, 仍然是一个未解之谜。值得注意的是, Murchison 陨石中的糖类物质并非传统的单糖, 而是其氧化产物—糖酸。目前, 关于糖酸在生命起源过程中的作用仍缺乏系统研究, 特别是它们如何在原始环境中参与关键生物大分子的合成与自组装。本报告将重点介绍糖酸中双羧酸在原始地球环境中如何参与早期遗传物质的形成, 并进一步考察其手性特性对分子聚合和自组织过程的影响, 探讨双羧酸在生命起源中的潜在作用。

**关键词:** 生命起源; 聚合反应; 手性特性

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 伽利略卫星热演化分异: 多源数据下的比较行星学研究

刘吉鑫<sup>1</sup>, 刘耘<sup>1,2\*</sup>

1. 成都理工大学 地球与行星科学学院, 成都 610059;

2. 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, 贵阳 550081

木星的伽利略卫星 (Io、Europa、Ganymede、Callisto) 在共享木星潮汐场与相近形成年龄的条件下, 却呈现热状态极端分异。木卫一 (Io) 的持续剧烈火山活动 (热通量  $>2 \text{ W/m}^2$ ) 与木卫四 (Callisto) 热演化停滞形成鲜明对比, 这种显著差异使其成为探究行星热力学演化及宜居性的天然研究对象。然而, 早期 Galileo 任务对 Callisto 和 Ganymede 重力场的测量精度有限 (惯性矩误差  $\pm 0.03$ ), 导致内部结构模型在冰岩混合度 (Callisto 未分化 vs 分层) 与潮汐耗散效率上存在显著多解性。本研究整合 Juno 重力场数据、伽利略号热红外观测数据以及 JUICE/Europa Clipper 任务前瞻模型, 运用比较行星学方法, 深入剖析潮汐耗散、冰层传导与放射性衰变这三种关键机

制之间的竞争关系, 揭示它们是如何驱动伽利略卫星热演化路径的分化, 旨在为理解木星卫星系统的热演化机制提供更为精确且全面的理论依据。未来, JUICE 与 Europa Clipper 任务将通过协同观测, 进一步深化我们对伽利略卫星热演化历史的理解。JUICE 任务将对木星的三颗冰卫星 (Europa、Ganymede、Callisto) 进行详尽观测, 聚焦 Ganymede 的海洋、磁场与宜居性; Europa Clipper 任务则专注于 Europa 冰壳、次表层海洋与生命潜力, 两者将共同提供关于木星系统内冰冻卫星的宝贵数据。

**关键词:** 伽利略卫星热演化分异; 潮汐耗散机制; 冰层热输运耦合; 多源数据同化

基金项目: 国家重点研发计划资助 (2024YFF0807500)

第一作者简介: 刘吉鑫 (1996-), 博士研究生, 研究方向: 行星地质学. Email: liujx@stu.cdut.edu.cn

\*通信作者简介: 刘耘 (1968-), 教授, 研究方向: 计算地球化学. Email: Liuyun@vip.gyig.ac.cn

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 地球超级地幔柱中铝的富集

曹徐岩, 胡清扬\*

北京高压科学研究中心, 北京 100193

我们在 25~123 GPa 压力范围内利用金刚石对顶砧成功合成了富铝布里奇曼石。实验表明, 随着压力升高,  $\text{Al}^{3+}$  对布里奇曼石中晶格阳离子的取代效应逐渐增强: 当压力超过 66 GPa 时, Al 几乎占据了阳离子的一半, 在核-幔边界温压条件下, 其晶体化学组成演化为  $(\text{Mg}_{0.5}\text{Al}_{0.5})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{0.5})\text{O}_3$ 。理论计算发现, 布里奇曼石的两个阳离子位点都有利于  $\text{Al}^{3+}$  耦合取代。在 123 GPa 和 2 400 K, 观察

到钙钛矿与后钙钛矿相共存, 后钙钛矿相可以安全地保留到环境压力。核-幔边界处铝大量的富集可能会降低硅酸盐矿物的热导率, 从而增强地幔对流中的局部热点效应, 形成维持超级地幔柱所需的临界热异常。

**关键词:** 富铝布里奇曼石; 核幔边界; 超级地幔柱

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42150101)

第一作者简介: 曹徐岩 (1996-), 博士研究生, 研究方向: 材料科学与工程. Email: xuyan.cao@hpstar.ac.cn

\*通信作者简介: 胡清扬 (1987-), 研究员, 研究方向: 高温高压岩石学. Email: qingyang.hu@hpstar.ac.cn

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 固体中原子扩散的同位素效应理论 及其地球科学应用研究

李雪芳<sup>1</sup>, 刘耘<sup>2,1\*</sup>

1. 中国科学院 地球化学研究所, 贵阳 550081;

2. 成都理工大学, 成都 610059

固体中同位素扩散效应对揭示地球内部物质迁移机制和限定地质过程时间尺度具有重要意义。本研究系统阐述了固体中原子扩散同位素效应的理论及其在扩散年代学与核幔边界物质研究中的应用。基于量子力学和统计力学, 建立了部分间隙扩散与空位扩散类型中同位素效应的精确理论, 突

破了传统近似处理的局限性。而且通过第一性原理计算, 我们可以定量计算矿物中原子或离子扩散的同位素效应。

**关键词:** 固体扩散; 同位素效应; 下地幔; 第一性原理计算

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42173021), 国家重点研发计划资助项目 (2024YFF0807500)

第一作者简介: 李雪芳 (1981-), 副研究员, 研究方向: 计算地球化学. Email: lixuefang@mail.gyig.ac.cn

\*通信作者简介: 刘耘 (1968-), 研究员, 研究方向: 计算地球化学. Email: liuyun@vip.gyig.ac.cn

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 光解离过程对土卫六大气氮同位素的限制

王浩天\*

中国科学院 地球化学研究所, 贵阳 550081

厘清土卫六大气初始 N 同位素比值和演化方式可以帮助还原更全面理解泰坦大气的起源与演化。本研究通过结合大气动力学逃逸与光解离理论计算方法, 还原了更全貌的土卫六大气中 N 同位素的非质量逃逸分馏的过程, 为后续研究土卫六起源演化提供

的同位素信号支持。

**关键词:** 光解离; 大气动力学逃逸; 理论计算; 非质量分馏

• 专题 3: 早期地球演化 •

## 面向地球内部物质凝聚态性质的高效数据生成： 基于 LLM 代理的自动化计算框架

黄俊鑫，李春辉<sup>\*</sup>

成都理工大学 行星科学国际研究中心，成都 610051

在获取地球内部物质在极端温压条件下的热力学、弹性及输运性质数据方面，传统研究手段存在计算资源消耗高、数据生成效率低等问题，本文提出了一种基于大型语言模型（LLM）驱动的自主研究代理框架。该框架通过设计 LLM 自动化代理系统，融合自动化实验规划、第一性原理计算流程优化与智能数据验证机制，实现从物质建模、参数选择、量子力学模拟到数据整合的全流程自主化。系统采用分层任务分解策略，基于文献智能分析生成地球凝聚态部分的热力学条件假设，并通过动态优化算法自主调度计算资源，显著提

升第一性原理计算工具的计算效率与数据可靠性。与传统人工驱动方法相比，LLM 代理通过自动化错误修正与多尺度验证机制，显著提升数据集生成效率，同时通过迁移学习策略预期实现对稀有矿物相性质的准确预测。这一创新方法不仅可以为地球深部物质演化模型提供高置信度基础数据，也可以为行星科学领域的大规模模拟研究开辟智能化数据生产的范式。

**关键词：**生成式大语言模型；第一性原理计算；地球

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## Mesoarchean–Neoarchean coupled crust–mantle differentiation followed by gravity-driven lithospheric delamination and subduction initiation in the North China Craton

刘建辉\*

中国地质科学院地质研究所, 北京 100037

The geodynamic regime that formed Archean silicic continental crust is unclear. The episodic Archean TTGs (tonalite–trondhjemite–granodiorite rocks) and associated granitoids, with emplacement ages of ca. 2.9, 2.7, and 2.5 Ga, occurred in the Jiaobei Terrane, North China Craton (NCC), provide a continuous record of the formation of the Mesoarchean–Neoarchean silicic continental crust. To investigate the crust–mantle differentiation, crustal reworking and recycling, and geodynamic regime associated with formation of the Mesoarchean–Neoarchean silicic continental crust, we undertook zircon U–Pb dating and Hf–O isotope, and whole-rock major and trace element analysis of Archean TTGs and associated granitoids. The episodic Archean TTGs and juvenile crust coexisted spatially–temporally in the Jiaobei Terrane, indicating Mesoarchean–Neoarchean synchronous differentiation of crust and mantle. In addition, the ca. 2.9 and 2.7 Ga TTGs have an identical Mesoarchean juvenile crustal source and similar mantle-like zircon  $\delta^{18}\text{O}$  values, whereas the ca. 2.5 Ga TTGs were derived mainly from younger Neoarchean juvenile crust, indicating removal and replacement of the Mesoarchean juvenile lower crust. Some ca. 2.5 Ga TTGs, granitic gneisses, and sanukitoids have markedly higher zircon  $\delta^{18}\text{O}$  values compared with mantle  $\delta^{18}\text{O}$  values, which are indicative of Neoarchean supracrustal recycling.

Consequently, we can constrain the geodynamic processes responsible for the formation of the Mesoarchean–Neoarchean silicic continental crust in the Jiaobei Terrane, NCC. Episodic hot upwelling mantle (or plume)–lithosphere interactions at ca. 2.9, 2.7, and 2.5 Ga resulted in coupled crust–mantle differentiation, which produced the TTGs, juvenile crust, and dense lower crustal restites. Subsequently, lithospheric delamination triggered by gravitational instability occurred followed by continental uplift, subduction of altered oceanic crust, and upwelling of asthenosphere and mantle-derived mafic melts. This resulted in extensive anatexis and metamorphism with anticlockwise P–T paths in the middle to lower crust at ca. 2.5 Ga. Furthermore, following the large-scale melting and cooling of the mantle, a thick, stable, cratonic lithosphere had likely developed by the end of the Neoarchean. The geodynamic processes during the Mesoarchean–Neoarchean were diverse, and episodic hot upwelling mantle (or plume)–lithosphere interactions could have been responsible for the formation of Archean silicic continental crust in the Jiaobei Terrane, NCC.

**Key words:** Archean silicic continental crust; Archean TTGs; Archean geodynamic regime; North China Craton; supracrustal recycling

## • 专题 3: 早期地球演化 •

## 类地行星岩浆冷却过程金属相形成机制

莫冰<sup>1</sup>, 朱丹<sup>2,3,4\*</sup>, 刘耘<sup>2,3,4</sup>

1. 中国科学院 地球化学研究所, 月球与行星科学研究中心, 贵阳 550081;

2. 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, 贵阳 550081;

3. 中国科学院 比较行星学卓越创新中心, 合肥 230001;

4. 成都理工大学 行星科学国际研究中心, 成都 610051

金属铁在类地行星玄武岩中很常见, 比如灶神星和月海玄武岩。地幔的整体氧逸度约为 $\Delta IW-2$ , 因此金属相也可能稳定地存在早期地球的玄武岩中。不过类地行星玄武岩金属相形成机制至今不清楚。目前假说认为是玄武岩演化过程 FeO 活度的变化, 导致玄武岩金属铁的饱和。本研究根据化学动力学理论, 和玄武岩中 FeO 和 O 传输性质的差异,

提出玄武岩中金属形成的氧化还原反应动力学模型, 并通过计算定量解释月海玄武岩中的金属铁成因, 并为月球基地原位高效制氧, 提供化学动力学理论支撑。

**关键词:** 金属铁; 玄武岩; 化学动力学; 早期地球; 月球