

专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 ·

布里基曼石的稳定性以及深下地幔低波速异常体的成因

张莉^{1*}

1. 北京高压科学研究中心 上海分中心, 上海 201203

太平洋和非洲板块位于深度 2000 千米以下的大型低剪切波速省 (LLSVPs) 是下地幔最显著的结构特征, 而且超级地幔柱起源于地幔底部的低剪切波速区 (French and Romanowicz, 2015), 地表的热点位置与深下地幔 LLSVPs 之间的垂直对应关系进一步表明了核幔边界过程可能控制地表的重大地质事件 (Thorne 等, 2004; Burke 等, 2008)。布里基曼石($\text{Mg, Fe}(\text{Fe, Al, Si})\text{O}_3$) 是下地幔的主要组成矿物, 同时下地幔是重要的潜在储水库, 然而我们对于水和高温高压如何影响矿物性质以及深下地幔结构知之甚少。通过多晶 X 射线衍射技术分离多相体系中各个矿物相的亚微米晶

粒, 结合对回收样品的化学分析, 我们可以获取高温高压条件下地幔体系的矿物组成 (Zhang 等, 2022)。当温度和压力达到下地幔 2300 千米深度以下的条件时, 含水体系中的布里基曼石中二价铁稳定, 而同等温度压力条件下干燥体系中布里基曼石的二价铁发生歧化反应并导致其贫铁 (Zhang 等, 2024)。该实验结果揭示了深下地幔发生化学分层以及形成横向不均一结构的矿物学成因。

关键词: 高温高压实验; 矿物物理; 布里基曼石; 下地幔; 深部水循环

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42150103)

通讯作者简介: 张莉 (1980-), 研究员, 研究方向: 高温高压矿物学. Email: zhangli@hpstar.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

下地幔主要矿物的含水量的高温高压实验研究

刘兆东^{1*}, 陈陆瑶¹, 许文良¹

1. 吉林大学 综合极端条件高压科学中心, 长春 130012

水是影响地球气候、环境和宜居性的重要挥发分, 对地球表层地质活动、板块构造和深部动力过程都起着至关重要的作用。水在地球内部的存储一直是地球科学领域的前沿科学问题。现有研究表明地球的上地幔含水量较少(低于 100×10^{-6}), 地幔过渡带至少部分区域是富水的(0.1%~1%)(Ohtani, 2015, 2020), 天然超深样品也发现了含水林伍德石、冰-VII 等, 更深部的下地幔是地球内部体积和质量最大的圈层, 从地表以下 670 公里一直延伸到 2890 公里, 下地幔温压条件极为苛刻, 天然样品非常稀少, 带来了诸多挑战, 下地幔是否含水, 含多少水, 如何存储和循环一直悬而未决。下地幔主要名义无水矿物的含水量的研究强烈依赖于高温高压实验技术的发展。特别是大腔体压机的高温高压实验技术直接决定是否可以合成大尺寸、高品质的下地幔单晶矿物, 能否满足精确的含水量实验分析表征与研究。我们发展适用于大尺寸单晶

矿物合成的大腔体压机超高温高压关键技术, 在富水环境下, 在 17~32 GPa 和 1700~2000 K 合成大尺寸、不含流体包裹体的单晶(Mg, Fe)(Si, Al) O_3 布里奇曼石、石榴石、 SiO_2 斯石英、刚玉和方镁石, 系统的研究这些矿物的含水量随压力和温度的变化关系, 发现(Mg, Fe)(Si, Al) O_3 布里奇曼石、刚玉和方镁石是基本不含水的, SiO_2 斯石英和石榴石是富水的, 当石榴石和斯石英共存时, 水会主要进入到斯石英晶体中; 同时, 我们合成了新晶体结构的 phase H 固溶体; 研究结果进一步表明地幔岩的下地幔顶部 660~800 km 主要是干的, 以 Al- SiO_2 斯石英和石榴石为主要成分的大洋玄武岩可以将水带入下地幔, 为理解地球内部水的存储和分布提供重要数据支撑。

关键词: 水; 下地幔; 高温高压; 布里奇曼石; 石榴石

基金项目: 国家自然科学基金项目(42272041)

第一作者简介: 刘兆东(1986-), 教授, 研究方向: 地球深部物质科学与高压材料 E-mail: Liu_zhaodong@jlu.edu.cn

*通信作者简介: 刘兆东(1986-), 教授, 研究方向: 地球深部物质科学与高压材料 E-mail: Liu_zhaodong@jlu.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

从俯冲带中 CaCO_3 到 MgCO_3 的转化认识碳的深地输运机制

张馨月¹, 毛竹^{1*}

1. 中国科学技术大学 地球和空间科学学院, 合肥 230026

碳是影响生命生存及地球宜居性的关键挥发性元素, 每年有可高达 52 兆吨的碳伴随俯冲板片进入地球内部。碳酸盐矿物被认为是地球内部碳的主要载体, 可被俯冲洋壳携带至过渡带甚至下地幔, 对地幔熔融、金刚石形成等一系列地质过程产生重要影响。然而, 碳酸盐矿物在地球内部的存在形态、存在条件及其对地幔主要组成的硅酸盐矿物的影响仍存在争议。早期辉石与碳酸钙体系的实验表明, 在高压下碳酸钙会与辉石反应逐渐转换为白云石并最终菱镁矿的状态稳定 (Kushiro, 1975), 然而, 近期的研究指出, 菱镁矿在下地幔底部会再次转变为碳酸钙 (Lv 等, 2021)。此外, 更有实验表明, 碳酸盐化的俯冲

洋壳在 300~700 公里深度可能产生部分熔融, 阻碍碳酸盐向深地幔的输运, 进一步表明地球内部的碳输运过程极为复杂 (Thomson 等, 2016)。在本项研究中, 我们利用多面砧大腔体压机技术, 在地幔过渡带温压条件下, 探讨了不同成分洋中脊玄武岩对地幔碳输运的影响。实验结果表明, 温度和洋中脊玄武岩成分对碳在地球内部的存在形式具有重要影响。本项研究有助于理解地幔中碳的赋存状态, 并为解释相关地球物理异常提供重要依据。

关键词: 俯冲板片; 碳酸盐; 温度效应; 成分影响

第一作者简介: 张馨月 (1998-), 博士研究生, 研究方向: 高温高压矿物学. Email: zxy0331@mail.ustc.edu.cn

*通信作者简介: 毛竹 (1982-), 教授, 研究方向: 高温高压矿物学. Email: zhuma@ustc.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

龙岗火山群东区火山的橄榄岩包体的晶体粒度分布与分形特征

王亚楠¹, 刘永顺^{1*}, 聂保锋¹, 周淑媛¹, 薛晨莉¹, 冯玮霞¹, 孙玉菁¹, 江姗¹

1. 首都师范大学 资源环境与旅游学院, 北京 100048

龙岗火山群位于吉林省靖宇县、辉南县的龙岗山脉中段, 大地构造上属于中朝克拉通北缘, 受宽甸—龙岗—敦化深断裂控制。区内火山沿着北东向、北西向和近东西向三组盖层断裂分布。前人对龙岗火山群的部分著名火山(如金龙顶子、大龙湾、龙泉龙湾、大椅山等)的火山学、岩石学、地球化学、地幔岩石学做了大量研究, 但对其东区火山(如南山、双山子、大旺山、李太山、东山、陶小山等)涉及甚少。东区火山主要是斯通博利式喷发类型, 其中南山、大旺山、陶小山等含有大量幔源包体(包括尖晶石二辉橄榄岩、含金云母的尖晶石二辉橄榄岩等), 这些幔源包体为认识地球深部地幔物质组成、结构、演化及动力学过程提供了直接途径。目前, 地幔包体的研究多侧重于从物质组成角度来研究, 而从结构定量化角度来探索地幔组成、结构及其演变动力过程, 尚很薄弱。本研究基于晶体粒度分布(CSD: Crystal Size Distribution)与分形(Fractal)理论, 以野外火山地质考察、室内显微岩相学研究为基础, 开展了初步的橄榄岩包体的定量岩相结构研究, 以期揭示龙岗东区火山群的深部地幔的复杂演变机制和过程。研究结果表明: (1) 龙

岗火山群东区火山的尖晶石二辉橄榄岩的橄榄石属于镁橄榄石; 斜方辉石属于斜顽辉石; 单斜辉石属于透辉石和顽透辉石; 尖晶石属于镁(铁)铝尖晶石。(2) 橄榄岩中的橄榄石与单斜辉石晶体粒度与数量密度在一定范围内呈现较好的幂律关系, 且幂律指数 $G\tau$ 相近(注: $G\tau$ 代表晶体平均生长速度 G 与晶体平均生长时间 τ 的乘积), 橄榄石幂律指数范围为 2.02~2.54, 单斜辉石幂律指数为 1.98~2.25, 这反映了龙岗火山群东区地幔橄榄岩结构相对均一、结晶动力学相似。对于橄榄石和单斜辉石而言, 其 CSD 曲线既有小于一定粒度处向下弯曲的(橄榄石的转折点在 0.25 mm 处, 单斜辉石的转折点在 0.5 mm 处), 又有呈现线性递减趋势的。(3) 橄榄岩中橄榄石与单斜辉石在一定范围内呈现分形特征。五组橄榄石晶体分形维数为 1.108~1.153 ($\Delta D=0.045$), 反映其晶体形态相对简单、边界较平滑。五组单斜辉石晶体分形维数为 1.169~1.305 ($\Delta D=0.136$), 反映其晶体形态相对橄榄石的边界更复杂。

关键词: 龙岗火山群东区; 橄榄岩包体; 晶体粒度分布; 分形理论; 定量岩相结构

基金项目: 国家自然科学基金项目(41372343, 40872062)

第一作者简介: 王亚楠(2001-), 硕士研究生, 研究方向: 岩石学和火山学.Email: 18264505703@163.com

*通讯作者简介: 刘永顺(1966-), 副教授, 研究方向: 岩石学、火山学、地质流体力学和地质系统复杂性.Email: cnu901@126.com

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

下地幔布里奇曼石的高温高压变形实验研究

管隆莉¹, 巫翔^{1*}

1. 中国地质大学(武汉)地质过程与成矿预测全国重点实验室, 武汉 430074

地震波各向异性对了解地球内部的动力学过程有深远的意义。研究表明在地球下地幔(660~1200 km)俯冲板片附近观察到了明显的地震波各向异性。布里奇曼石(bridgmanite)作为下地幔最主要的组成矿物, 具有强烈的弹性各向异性特征, 其晶格优选方位(LPO)可能是导致下地幔地震波各向异性的重要因素之一。为了进一步确定布里奇曼石在变形过程中形成的 LPO, 我们使用 D111 型高温高压流变仪, 在约 25 GPa 和 1700~2000 K 的温压条件下, 对布里奇曼石集合体进行了单轴压缩和简单剪切变形实验。实验结果表明, 布里奇曼石的变形组构与温度具有明显相关性, 低于 1800 K 时, 变形组构为 (100) <010>; 高于 1800 K 时,

变形组构为 (010) <100>。结合布里奇曼石的 LPO 及对应弹性常数计算出的波速各向异性表明, 变形的布里奇曼石样品波速具有较强的 P 波方位各向异性和 S 波极化各向异性, 各向异性的强度在组构转变后降低。当水平地幔流动发生时, 两种变形组构对应的水平极化剪切波的速度均大于垂直极化剪切波的速度, 且与下地幔主要俯冲带附近观测到地震波各向异性大小方向一致。我们的研究结果揭示了下地幔地震波各向异性的起源, 为下地幔的地幔流动方向提供了重要指示。

关键词: 下地幔; 布里奇曼石; 高温高压实验; 变形; 地震波各向异性

基金项目: 国家自然科学基金项目(42225202), 中国博士后科学基金(2024M753018)

第一作者简介: 管隆莉, 博士后, 研究方向: 深部矿物流变学性质研究, Email: guanlongli@cug.edu.cn

*通信作者简介: 巫翔, 教授, 研究方向: 高压矿物学领域, Email: wuxiang@cug.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

高温高压条件下超声波波速测量以及 熔融前现象的实验研究

刘超¹, 刘永刚^{1*}, 张飞武¹

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

地震波作为探测地球内部结构的核心手段,其物理解读高度依赖于对地幔-地核矿物体系弹性及非弹性性质的精确表征。本研究依托多面体大腔体压机技术平台,创新性地发展出高温高压耦合环境下(无需同步辐射光源辅助)同步获取矿物样品弹性波速与空间尺度的原位测量方法。该技术突破为深部地球物质弹性研究提供了新型实验手段。基于此方法学创新,本研究聚焦地球内核地震波速异常这一重大科学问题。现实验和震观测表明,内核温压条件下金属铁的剪切波速较传统外推值低约 14.9%,泊松比异常增高 10%,这与现有矿物物理模型存在显著偏差(Martorell 等, 2015)。针对该异常现象,学界已提出多种理论假说:包括轻元素赋存态(H/O/Si)、部分熔融机制、预熔融效应以及超离子态相变等(He 等, 2022; Hirose 等, 2021; Martorell 等, 2013)。本研究以预熔融理论为切入点,通过精密控制实验验证该

机制对地震波速异常的贡献。鉴于六方密堆积(hcp)结构铁在超高压(约 330 GPa)和高温(约 6000 K)极端条件下超声波测量的技术瓶颈,本研究采用晶体结构相似但实验可行性更高的金属镁作为类比体系。本次实验的条件为 3 GPa 和 300~1100 K。实验首次定量揭示预熔融相变对弹性性质的显著影响:横波(V_s)和纵波(V_p)波速分别出现 14.5%和 4.0%的非线性衰减,同时伴随泊松比 13.3%的异常增幅。通过建立内核物质状态方程与地震观测数据的交叉验证,我们证实了预熔融效应可以解释内核波速异常。需要指出的是,类比实验体系与真实内核环境仍存在量级差异(压力差两个数量级,温度差五倍),因此仍需开展更高压力和温度的实验。

关键词: 高温高压; 超声波速测量; 熔融前现象; 地球内核; 波速异常

基金项目: 国家自然科学基金(42174225); 中国科学院特别研究助理项目

第一作者: 刘超, 博士后, 研究方向: 实验地球物理学, Email: liuchao@mail.gyig.ac.cn

通讯作者: 刘永刚, 研究员, 研究方向: 实验物理学, Email: liuyonggang@mail.gyig.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

水诱导的地幔反转导致太古宙强磁场

吴忠庆^{1*}, 王冬¹

1. 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海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 (Wu 等, 2023), 包括太古宙强磁场。

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, 基底岩浆洋越来越富水, 最终出现重力失稳而形成地幔反转, 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。

水诱导的地幔反转下, 下地幔底部高温的岩浆洋被相对冷的硅酸盐矿物替换, 加速地核的冷却, 增强核幔边界的热通量, 诱发了太古宙的强磁场。因此太古宙的强磁场跟太古宙大陆的形成是水诱导的地幔反转的两个不同效应。大陆大约 36 亿年前之后变得越来越多, 并在太古宙末期达到高峰, 这意味着 36 亿年前之后, 地幔反转越来越频繁, 核幔边界的热通量越来越大, 并在太古宙末期达到最大值, 如此得到的热通量能很好地解释太古宙的强磁场。水诱导的地幔反转改变了地球的质量分布, 因而有可能形成真极移, 因此 30 多亿年前的古纬度变化并不一定是由于板块运动, 也有可能源于水诱导的地幔反转形成的真极移。

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 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

水致晶粒粗化揭示 LLSVP 长期稳定新机制

吕一夫¹, 费宏展^{1*}

1. 浙江大学 地球科学学院, 杭州 310058

大型低剪切波速省 (LLSVP) 作为下地幔最主要的非均质结构, 其动力学稳定性对理解地幔对流模式与行星演化历史具有重要意义。尽管热点与大火成岩省的古位置重建显示 LLSVP 已稳定存在 ≥ 540 Ma (Torsvik 等, 2010; Torsvik, 2019), 但其高温特性导致的黏度弱化与有限的密度异常难以解释其在地幔对流作用下的长期稳定性 (Davies 等, 2015)。本研究聚焦 LLSVP 主要矿物相布里奇曼石,

通过多面砧高温高压实验定量约束了水对颗粒生长动力学的影响规律。实验结果表明, 微量的水即可显著促进颗粒生长, 使得 LLSVP 在高温的负效应下仍可保持远高于周围地幔的黏度。这样的黏度差异为 LLSVP 抵抗强烈地幔对流而长期存续提供了关键稳定机制。

关键词: 水; 布里奇曼石; 颗粒生长; LLSVP

第一作者简介: 吕一夫, 博士研究生, 研究方向: 高温高压矿物物理. Email: lyuyifu@zju.edu.cn

*通信作者简介: 费宏展, 研究员, 研究方向: 矿物物理, 地球动力学, 高温高压实验技术. Email: feihongzhan@zju.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

高温高压下水-盐物性研究及其地球和行星科学意义

李新阳^{1*}

1. 吉林大学 高压与超硬材料全国重点实验室, 长春 132100

水是地球和冰行星内部的重要组成部分, 水在极端温压条件下会与氨、甲烷、氯化钠、氯化钾等物质形成“盐冰”或水合物。理解水合物在高温高压下的物理化学性质, 例如, 密度、速度、相结构、热力学稳定性有利于理解冰行星内部组成。本次报告将汇

报, 氨-水、氯化钾-水、氯化钠等二元体系在高温高压下的实验研究。研究结果帮助解释地球深部金刚石包裹体以及冰行星内部速度结构、星幔对流成因。

关键词: 水; 高温高压; 矿物物理

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

斜方辉石的相变对深俯冲板片矿物组成的约束

许金贵^{1*}, 范大伟¹, 周文戈¹

1. 中国科学院地球化学研究所, 贵阳 550081

俯冲板片是地球内部各圈层间物质和能量交换的重要载体, 对其物质组成的精细解析是揭示地球内外圈层联动机制的关键所在。在浅部, 俯冲板片主要由三种岩石组成: 上层为玄武岩, 中间层为方辉橄榄岩, 下层为二辉橄榄岩。俯冲板片在进入深部地幔的过程中, 板片内部的温度和压力不断增大, 矿物组合也随之发生变化。如果板片内部物质始终处于热力学平衡状态, 那么根据实验岩石学相平衡研究结果, 我们可以得到这三种岩石的矿物组成随深度的变化关系。然而, 现有的地球动力学模拟研究发现, 板片内部不同岩石单元的温度有很大差异。已有的实验研究表明, 在板片向下俯冲的过程中, 在其内部的低温区域, 物质并未达到热力学平衡, 而是处于亚稳态。方辉橄榄岩是板片内部温度最低的区域, 因此它是亚稳

态矿物最可能存在的区域。因此, 为了更好地约束深俯冲板片的物质组成, 需要研究方辉橄榄岩组成矿物在高温高压条件下的亚稳态相变。方辉橄榄岩的主要矿物为橄榄石和斜方辉石。目前, 对亚稳态橄榄石的研究已比较深入。但是, 已有的实验研究还不足以约束斜方辉石在高温高压条件下的相变。因此, 本文在深俯冲板片内部对应的温度和压力条件下, 研究了斜方辉石的相变, 并获得了 0~40 GPa 压力范围内亚稳态斜方辉石相变与成分的关系。基于这些数据结果, 我们进一步约束了上地幔及过渡带深度范围内深俯冲板片的主要矿物组成。

关键词: 斜方辉石; 相变; 俯冲板片; 高温高压实验

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

水在毛钙硅石中的赋存与化学作用

白承禾¹, 胡清扬^{1*}

1. 北京高压科学研究中心, 上海 201203

毛钙硅石是下地幔中含量第三大的矿物, 也是海洋地壳物质沉积的主要矿物相之一, 其含水量也会直接影响下地幔水化学的规模。而目前有关毛钙硅石中水的赋存形式与存储形式仍存在较大争议, 氢的取代机制也有待进一步研究。本文使用金刚石对顶砧技术, 选择硅酸钙作为原始样品, 在 25 GPa 的压力条件下进行激光加热到 2000 K, 合成出毛钙

硅石, 进一步运用原位 XRD、拉曼光谱等实验方法, 比较无水硅酸钙与毛钙硅石在晶胞体积、晶体结构等方面的区别, 从而推测氢的取代机制与其含水量。

关键词: 金刚石对顶砧; 激光加热; 毛钙硅石; 下地幔含水矿物

第一作者简介: 白承禾 (2002-), 硕士研究生, 研究方向: 高温高压矿物学. Email: chenghe.bai@hpstar.ac.cn

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

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

基于机器学习力场的地核多元轻元素组成研究

陈千禧¹, 蒋佳俊¹, Muir Joshua Martin Richard¹, 张飞武^{1*}

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 550000

地核的轻元素组成是地球科学领域长期悬而未决的核心科学问题之一。这一问题的根源是, 纯铁和铁镍合金的物理性质无法完全解释地球内核的地震观测结果。因此地核中必然存在一定比例的轻元素, 但轻元素的组成仍是未解之谜。现有研究表明, 铁合金中需要包含至少两种轻元素才能重现密度和地震波速特征。然而, 关于轻元素组合的系统性研究仍然十分有限。传统的第一性原理计算方法在进行弹性性质计算时存在显著的计算资源瓶颈。这种局限性使得相关研究往往局限于最多两种轻元素组合的探索, 同时在模拟时间尺度上也受到限制。为突破传统方法的局限性, 本研究创新性地将机器学习力场 (Machine Learning Force Field, MLFF) 与分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 模拟相结合, 构建了一个兼具计算效率与精度的新型计算框架。该框架在保持与第一性原理计算相当的精度的同时, 显著提升了计算效率和扩展了模拟时间尺度。基于这一创新方法, 我们全面调查了 5 种常见的地核轻元素 (氢、碳、氧、硫和硅) 对六方密排铁 (hcp-Fe) 弹性性质及密

度的影响。研究特别关注了这些轻元素在地核极端条件下的赋存形式和相互作用机制。基于固溶体模型的计算结果揭示了新的发现: 与观测地震波和密度匹配的二元、三元轻元素组合解显著增加, 而三元以上的组合解数量更为可观。这一现象主要归因于在地核极端条件下氢、碳和氧呈现的超离子态特征, 与传统的替代机制相比, 这种特殊的赋存状态能够显著降低铁的剪切波速, 从而更好地解释地震观测数据。基于上述结果, 本研究表明, 在考虑超离子态的情况下, 内核的弹性性质和密度对其轻元素组成并未形成严格的约束条件, 因为多种轻元素组合均能同时满足这些观测指标。这一认识打破了传统观点认为地核成分受严格物理条件限制的固有思维, 为地核成分研究开辟了新的思路。未来需要将轻元素在固态内核和液态外核之间的分配行为及含不同轻元素的铁合金熔点等条件作为约束, 以建立更加精确的地核成分模型。

关键词: 地球内核; 机器学习力场; 超离子态; 轻元素组成

基金项目: 国家重点研发计划资助 (2024YFF0807500), 国家自然科学基金项目 (42403035), 国家博士后科学基金 (2024 M753196), 贵州省科技计划项目 (ZK 2024-standard-669) 和贵州省科技基金 (ZK 2021 - 205)。

第一作者简介: 陈千禧 (2000- 至今), 博士研究生, 研究方向: 计算矿物物理。Email: chenqianxi@mail.gyig.ac.cn

*通信作者简介:

张飞武 (1980- 至今), 研究员, 研究方向: 理论地球化学和计算矿物物理。Email: zhangfeiwu@mail.gyig.ac.cn

Muir Joshua Martin Richard (1985- 至今), 研究员, 研究方向: 理论地球化学和计算矿物物理。Email: j.m.r.muir@mail.gyig.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

Fe₃N 的高压结构与输运性质研究

庄毓凯^{1*}

1. 四川大学, 成都 610065

幔源超深金刚石包裹体的证据表明下地幔存在一定比例的 Fe₃N。目前对 Fe₃N 高温高压性质的了解还比较匮乏。本研究利用同步辐射 X 射线衍射, 同步辐射穆斯堡尔谱、金刚石压腔 (DAC) 结合激光加热等多种先进技术系统研究了 Fe₃N 的高温高压结构与输运性质。结果表明 Fe₃N 在高压下失去了磁性,

对地球电磁场影响微弱, 而氮元素的掺杂可以明显的降低铁的电/热导率, 对下地幔热力学演化具有一定贡献。

关键词: 同步辐射; 高温高压实验; 金刚石压腔; 激光加热; 电导率

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

橄榄岩熔体的超低黏度及其对类地行星 岩浆洋动力学的启示

黄东洋^{1*}

1. 北京大学, 北京 100871

类地行星表面岩浆洋的动力学过程主要受硅酸盐熔体输运性质的调控, 而因受到实验和模拟条件的限制, 目前学界对后者随成分、温压而改变的研究尚局限于简单端元的熔体体系或较低的温压条件。本研究通过第一性原理分子动力学模拟, 对硅酸盐地球的近似成分, 即橄榄岩熔体的黏度在全地幔熔融的温度、压强条件下进行系统计算, 以探究其输运性质在岩浆洋不同深度处的变化。我们发现:

1. 具有极低聚合度的橄榄岩熔体的黏度随压强单调递增, 有别于 MgSiO_3 及玄武岩熔体黏度对压强的异常响应;

2. 低聚合度导致橄榄岩熔体的低黏度, 可接近室温下水的黏度, 为所有硅酸盐地球候选成分之最低。

低黏度的硅酸盐熔体将提高岩浆洋的对流效率、极大促进其结晶分异作用, 进而在地球形成早期为地幔不均一性设置初始条件。此外, 该研究重新强调了岩浆洋物理性质对化学成分的依赖, 为理解行星形成的高能过程中化学成分所扮演的角色提出不同视角。

关键词: 黏度; 橄榄岩熔体; 岩浆洋; 第一性原理分子动力学

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

地球内核中超离子物相的热力学研究

孙阳^{1*}

1. 厦门大学 物理系, 福建 厦门 361005

超离子态是一种独特的物质相,其特征是在固态晶格中存在类似液体的离子运动。近期研究揭示了多种轻元素在地球内核条件下可形成超离子态。理解超离子相与液态铁合金在极端高温高压下的热力学平衡,对于揭示地球内核的化学成分、物理性质及其演化过程至关重要。然而,精确计算超离子态的自由能仍面临诸多挑战。本报告提出了一种计算模拟方法,可用于计算 铁-轻元素体系在地球内核边界附近的

第一性原理吉布斯自由能,并构建超离子-液态相平衡相图。基于该方法,我们厘清了超离子相在不同晶体结构中的热力学稳定区间,并揭示了超离子态对地核中氧分布的影响,从而为深入理解地核物质的固液热平衡提供了定量研究框架。

关键词: 地核; 超离子态; 轻元素; 第一性原理计算; 分子动力学模拟

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42374108, T2422016)

通讯作者简介: 孙阳 (1990-), 教授, 研究方向: 矿物物理、凝聚态物理. Email: yangsun@xmu.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

基于拉曼、布里渊的磷灰石弹性以及光谱学的研究

王登磊¹, 毛竹^{1*}

1. 中国科学技术大学 中国科学技术大学地球和空间科学学院, 合肥 230000

磷灰石 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{Cl}, \text{OH})$ 广泛存在于太阳系的岩石体中, 作为磷等挥发物的寄主发挥着重要作用。文献报道了它的密度结构等信息, 而对它的弹性性质却少有研究。实验上, 因实验技术的限制, 获得单晶磷灰石的弹性特性是困难的。由于它们的六方结构, 磷灰石有五个独立的弹性常数。前人利用第一性原理和超声波技术测定了氟磷灰石的弹性刚度, 研究结果表明磷灰石弹性各向异性不强, 并且在文献中有限的计算结果显示出很大的分散。然而, 人们对地幔条件下的磷灰石结构知之甚少。因

此, 对磷灰石进行布里渊散射以及拉曼散射实验, 研究其弹性、结构等物理性质对于理解地球内部物质结构具有重要意义。

在本项研究中, 我们结合布里渊散射和拉曼散射技术研究了含氟磷灰石在常温常压下的弹性结构以及常温高压的拉曼光谱学特征等信息。实验数据很好地约束了磷灰石的结构和弹性性质, 为研究 F、Cl 等挥发分在地球内部的运输提供了较好的约束。

关键词: 磷灰石; 弹性常数; 拉曼光谱学

第一作者: 王登磊 (1998-), 博士在读, 研究方向: 磷灰石的物性探究。Email: 1553354208@qq.com

通信作者: 毛竹 (1982-), 教授, 研究方向: 地球内部极端高温和高压下研究物质的物理性质。Email: zhumao@ustc.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

高压下 CoTiO_3 钛铁矿中电荷转移诱导的费米共振现象

亓文明¹, Qingyang Hu^{1*}

1. 北京高压科学研究中心, 上海 201203

钛铁矿是地球表面火成岩和变质岩中常见的副矿物, 特别是钛铁矿因其弱磁化特性的影响而备受关注。钛铁矿不仅是研究月幔层结构演化的重要矿物, 还在火成岩和变质岩的氧化还原反应中发挥重要作用。以往的研究表明, 电荷转移效应使钛铁矿的电导率显著提高。从地球和月球科学的角度来看, 如果地幔或月幔中存在富含钛铁矿的基底层, 这种由电荷转移引起的高导电性可能会影响地球或月球磁场的传播。为深入探讨 CoTiO_3 钛铁矿在室温高压条件下的

结构和电子特性, 本研究利用拉曼光谱研究了 CoTiO_3 钛铁矿在地幔压力下的晶格动力学及电荷转移行为。研究发现, CoTiO_3 钛铁矿在压力下表现出类似于 FeTiO_3 钛铁矿中因电荷转移而引起的费米共振现象。此外, 本研究还为其他钛铁矿矿物在地幔压力下的电荷转移行为提供了新的见解。

关键词: 钛铁矿; 高压; 拉曼; 电荷转移; 费米共振

基金项目: 国家自然科学基金项目 (T2425016; 42150101)

第一作者简介: 亓文明 (1993), 博士研究生, 研究方向: 高压物理. Email: wenming.hp@outlook.com

*通信作者简介: 胡清扬 (1987), 研究员, 研究方向: 高压地学. Email: qingyang.hu@hpstar.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

外地核条件下液态铁的密度和声速研究

甘波¹, 李俊², 张友君^{1*}

1. 四川大学 原子与分子物理研究所, 成都 610065;

2. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621999

铁是地核的主要成分, 液态铁在高压高温 (p - T) 条件下的物理性质对于揭示地核的成分、结构及动力学过程至关重要。然而, 在实验室中模拟外核的极端环境并精确测量熔融介质的物理性质仍面临挑战。目前, 激光加热金刚石压腔静高压实验已能够在约 120 GPa 和 4500 K 条件下测量液态铁的密度, 但与外核的温压条件仍存在差距。尽管冲击波动高压实验已成功测量数百 GPa 压力下熔融铁的密度 (ρ) 和纵波声速 (VP), 但其冲击温度的精确约束仍然不足。基于此, 我们利用瞬态辐射高温计精确测定了熔融铁在 ~365 GPa 下的冲击温度。结合已有的冲击波实验数据, 我们建立了液态铁沿 Hugoniot 的 p - T - ρ -VP 关系,

并通过热力学修正获得了液态铁沿地核绝热线的密度和声速。研究表明, 外核相对于液态铁表现出显著的密度亏损和声速过剩, 且密度亏损随深度增加, 而声速过剩随深度减小。在内-外核边界处, 基于 PREM 模型的外核密度亏损和声速过剩分别达到 8.74% 和 2.00%。这些差异无法通过单一轻元素的加入同时解释, 表明外核可能含有多种轻元素, 这些元素对液态铁的声速具有不同的影响。这一发现为外核的化学组成及其地球动力学过程提供了新的关键约束。

关键词: 液态铁; 高温高压; 外地核; 密度; 波速

基金项目: 国家自然科学基金项目 (41971108, 42402041)

作者简介: 甘波 (1994-), 男, 助理研究员, 主要从事冲击波物理与地球物理研究. E-mail: ganbo325@stu.scu.edu.cn

通信作者: 张友君 (1986-), 男, 博士, 研究员, 主要从事高压物理与地球物理研究. E-mail: zhangyoujun@scu.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

Explore the dynamics of a super-Earth: the composition and thermal convection of the silicate mantle

耿延雷¹, 胡清扬^{1*}

1. 北京高压科学研究, 上海 200120

We investigate the compositional and thermal convective dynamics of super-Earth silicate mantles through first-principles thermodynamic modeling and high-pressure phase diagram construction using the CALYPSO algorithm. Our phase predictions reveal that dense silicate phases (e.g., MgSiO_3 perovskite and CaSiO_3 post-perovskite) stabilize in the lower mantle, with their occurrence frequency showing a sensitive dependence on planetary mass (M^*). These phase transitions significantly modify mantle rheology and thermal transport properties, as quantified through ab initio-derived viscosity and thermal conductivity tensors. Three-dimensional mantle convection simulations

demonstrate that ascending plume dynamics undergo a critical transition at $M^* \gtrsim 3M_\oplus$, where spherical geometry induces flow inhibition and thermal boundary layer thickening. Our analysis further highlights how adiabatic temperature gradients and phase boundaries interact to control mantle cooling rates and the formation of stagnant lid regions. These insights establish a framework for reconciling theoretical models with seismic and thermal emission observations of exoplanets, particularly those in the super-Earth mass regime.

关键词: super-Earth silicate mantles; CALYPSO; MgSiO_3 ; CaSiO_3

第一作者简介: 耿延雷 (1998–), 博士 (在读), 研究方向: 高温高压矿物学. Email: gengyl24@mails.jlu.edu.cn

*通信作者简介: 胡清扬 (1987–), 研究员, 研究方向: 高温高压矿物学. Email: qingyang.hu@hpstar.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

Melt fraction at the 410 km dehydration melting layer

陈娟¹, 俞红玉¹, 徐放¹, 张宝华¹, 费宏展^{1*}

1. 浙江大学, 杭州 310058

地幔过渡带 (MTZ) 是连接上地幔和下地幔的纽带, 地幔过渡带 (410~660km) 中的瓦兹利石、林伍德石等主要矿物的水含量高达 1%~2%, 远远大于上地幔主要矿物 (橄榄石+辉石+石榴石) 的水溶解度。因此, 在 410 km 深度, 即 MTZ 和上地幔边界随着瓦兹利石相变成橄榄石发生脱水熔融, 形成部分熔融层。本项目利用大腔体多面砧压机通过高温高压实验系统地研究了含水橄榄岩在上地幔底部温压条

件下 (13 GPa, 1800 K) 的相平衡关系。实验结果显示, 410 km 部分熔融层产生的熔体含量可达 10% 以上, 远高于通过地震波速模型推测的 0.7%。即 MTZ 顶部脱水熔融产生的熔体含量足以形成熔体通道, 促使熔体不断向上迁移至软流圈, 从而使得软流圈底部甚至整个软流圈达到熔体饱和状态。

关键词: 地幔过渡带; 部分熔融; 熔体比例

第一作者: 陈娟 (1998-) 博士研究生, 研究方向: 高温高压矿物物理. Email: c.chenjuan@zju.edu.cn

*通信作者: 费宏展 (1986-) 研究员, 研究方向: 高温高压矿物物理. Email: feihongzhan@zju.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

金刚石穿插双晶的晶体形态特征及成因研究

孙凯悦¹, 何明跃^{1*}

1. 中国地质大学(北京) 珠宝学院, 北京 100080

金刚石晶体的不同形态特征反映了其生长条件, 并为揭示金刚石的形成过程提供了重要信息。金刚石双晶仅产生于晶体生长阶段, 且仅通过网状变形的形式形成, 这对金刚石的物理性质具有重要影响。然而, 由于样品稀少, 尤其是穿插双晶样品, 目前对其形态特征及成因的研究较少。本次研究主要通过扫描电子显微镜(SEM)、显微计算机断层扫描技术(Micro-ct)及阴极发光技术(CL)对 6 颗来自刚果共和国地区产出的天然金刚石穿插双晶样品进行了晶体形态与表面微形貌特征观察, 并探讨其成因过程。肉眼观察结果显示样品呈立方体晶体, 粒度普遍较小(2~3 mm), 半透明-不透明, 颜色呈灰白、棕褐及浅黄色。SEM 结果显示所有样品均表现为互为双晶位的两个或多个立方体晶体相互穿插生长, 晶体表面具有明显的溶蚀痕迹。双晶界线在扫描电镜下呈折线状, 进一步放大观察可呈裂沟状深入晶体内部, 并伴随着

平直生长纹结构。Micro-ct 结果显示, 样品内部存在大量空洞及流体包体, 且发育纤维状生长层, 指示其形成于高驱动力条件下的快速结晶过程。CL 图像分析表明, 金刚石穿插双晶位的形成涉及两种模式: 即成核阶段初期, 两晶粒以双晶位形式存在以及在晶体生长过程中碳原子层的发生异向堆叠模式。综合实验结果, 根据晶体宏观形态特征差异, 建立了三种类型的金刚石穿插双晶理论形态模型, 分别是: ①<111>共轴型; ②<100>同心镶嵌型; ③双晶位基底(100)面出露型。此外, 还观察到混合型孪晶结构, 即在穿插双晶样品中存在接触双晶界, 表明金刚石孪晶生长过程的复杂性, 涉及晶体结晶习性的转变, 证实双晶类型的非独立性演化机制。

关键词: 金刚石; 双晶; 穿插双晶; 晶体形态; 形成过程

国家自然科学基金项目(42073008)

第一作者简介: 孙凯悦(1997-), 博士研究生, 研究方向: 矿物学, 宝石学。Email: 1415052413@qq.com

*通信作者简介: 何明跃(1963-), 教授, 研究方向: 矿物学, 宝石学。Email: hemy@cugb.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

利用含 Al 和 H 斯石英的相变揭示中下地幔 小尺度地震散射体的复杂深度分布

于英鑫¹, 毛竹^{1*}

1. 中国科学技术大学 地球和空间科学学院, 合肥 230026

地震学观测结果表明, 在中下地幔的深度范围内广泛存在着具有明显低剪切波速度异常的小尺度散射体, 并且这些散射体具有复杂的深度分布特征。其中, 70%以上的小尺度散射体出现在 700~1300 km 的深度范围, 约 20%的地震散射体分布在 1300~1900 km 的深度, 然而只有不到 10%的散射体在深于 1900 km 的深度范围内被观察到。俯冲洋壳中游离的二氧化硅相从具有金红石结构的斯石英向具有 CaCl_2 型结构的后斯石英的转变被认为是导致这些地震散射体的主要成因。然而, 端元 SiO_2 的这种后斯石英相变预计将发生在沿正常地温梯度约 1800 km 的深度范围处, 这比绝大多数观测到的地震散射体要深。尽管先前的研究结果指出 Al 和 H 的掺入可以有效的降低后斯石英相变

的压力, 但 Al 和 H 含量以及温度对后斯石英相变压力的影响还缺乏必要的实验约束。基于上述问题, 本研究利用外加热的金刚石对顶砧及同步辐射 X 射线衍射技术及拉曼光谱技术详细研究了化学成分和温度的变化如何影响后斯石英相变压力。我们的研究表明, 当固定 SiO_2 中 H/Al 比为 1/3 的情况下, Al 含量从 0 到 0.07 a.p.f.u 的变化可以合理的解释环太平洋地区观测到的地震散射体从 800 到 1900 km 深度范围内的复杂分布。这些结果加深了我们对中下地幔地震散射体的复杂特征及其相应的动力学过程的认识。

关键词: 含铝和氢斯石英; 相变; 小尺度散射体; 下地幔; 高温高压

第一作者简介: 于英鑫 (1999-), 博士研究生, 研究方向: 高温高压矿物学. Email: yingxinyu@mail.ustc.edu.cn

*通信作者简介: 毛竹 (1982-), 教授, 研究方向: 高温高压矿物学. Email: zhumao@ustc.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

高温高压下 Fe_3P 的结构变化和热力学性质

李静¹, 孙宁宇¹, 于英鑫¹, 毛竹^{1*}

1. 中国科学技术大学 地球和空间科学学院, 合肥 230026

地核主要由铁 (Fe) 合金和相当数量的镍 (Ni) 以及多种轻元素组成, 如硅 (Si)、硫 (S)、氧 (O)、碳 (C) 和氢 (H)。在这些元素中, 磷 (P) 虽然可能相对较少, 但在地核形成过程中具有重要的意义。P 是亲铁元素之一, 估计在地核中的浓度为 0.2%~0.5% (McDonough, 2003; McDonough and Sun, 1995)。由于其相对高的浓度, 地核可以被视为 P 的最大储集层。内核中, P 的赋存形式主要为 Fe_3P 或 $\text{Fe}_3(\text{S}, \text{P})$ (Gu 等, 2014; Stewart and Schmidt, 2007)。在环境条件下, Fe_3P 具有四方晶体结构 (空间群 Γ_4 , $Z=8$), 与 Fe_3S 同构。因此, 在极端高压条件下, Fe_3P 的行为将有助于揭示行星核心中 P 的储存和转化机制。此前已有大量研究采用 X 射线衍射技术获得了 Fe_3P 在高压下的结构演变, 研究结果表明, Fe_3P 约在 10~30 GPa 的压力范围内会发生从高自旋到低自旋的转变, 从 Γ_4 相变到未知结构, 伴随着体积坍

塌及 c/a 的变化。然而, 针对这个自旋转变, 前人的实验结果仍然存在较大的争议, 导致对 Fe_3P 在高温高压下的行为的理解不够一致。因此, 为了深入了解 Fe_3P 在高温高压下的结构演变及其相关物理性质, 我们需要更好的实验探索不同实验条件下 Fe_3P 的行为, 进一步明确其相变机制以及自旋状态的变化对其物理特性的影响。在本项研究中, 我们利用金刚石对顶砧结合同步辐射 X 射线衍射, 研究了粉晶状态下 Fe_3P 在 0~128 GPa、300~1700 K 条件下的稳定性及热力学状态方程。通过总结和对比前人研究结果, 我们发现 Fe_3P 在 20~25 GPa 发生了自旋转变, 实验同时确定了 Fe_3P 的体积模量、密度和体波波速。这将为理解行星内核中 P 的储存和演化提供更为全面的理论依据和实验支持。

关键词: 高温高压; 自旋转变; 热力学状态方程

李静 (2023–2025), 硕士研究生, 研究方向: 高温高压实验矿物物理. Email: slj77886@mail.ustc.edu.cn

孙宁宇 (2019–), 特任副研究员, 研究方向: 高温高压实验矿物物理. Email: ningyu@mail.ustc.edu.cn

于英鑫 (2023–2026), 博士研究生, 研究方向: 高温高压实验矿物物理. Email: yingxinyu@mail.ustc.edu.cn

毛竹 (2013–), 教授, 研究方向: 高温高压实验矿物物理. Email: zhumao@ustc.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

水对斜方辉石热物理性质影响的高温高压实验研究

颜鑫鑫^{1*}

1. 中国科学院大学 地球化学研究所, 贵阳 550081

斜方辉石是上地幔的重要组成矿物之一, 其热物理性质 (如热导率、热扩散系数和比热容) 对地球深部热结构和动力学过程具有重要影响。水通常以 OH^- 形式存在于矿物晶格中, 其存在可能显著改变矿物的热物理性质, 但目前关于水对斜方辉石热物理性质影响的高温高压实验研究仍十分有限。本研究通过高温高压实验, 探讨了水对斜方辉石热物理性质的影响。在高温高压条件下 (温度范围: 300~900 K, 压力范围: 2~8 GPa) 利用瞬态平面热源法, 系统测量了不

同含水量斜方辉石的热导率、热扩散系数和比热容数据。实验结果表明, 随着水含量的增加, 斜方辉石的热导率和热扩散系数显著降低, 而比热容则略有增加。进一步的晶体结构分析和理论计算表明, 水通过引入晶格缺陷和增强声子散射, 降低了斜方辉石的热传输效率。

关键词: 斜方辉石; 水含量; 热物理性质; 高温高压实验

第一作者简介: 颜鑫鑫 (1999-), 博士研究生, 研究方向: 固体地球物理学. Email: yanxinxin21@mailsucas.ac.cn

*通信作者简介: 郭新转 (1979-), 研究员, 研究方向: 高温高压实验技术、地球内部物质传输特性、变质岩石学. Email: gxzhuan@mail.gyig.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

下地幔中镨氮化合物的稳定性及其地球深部意义

刘冉¹, 赵鑫宇¹, 刘兆东^{1,2*}

1. 吉林大学 高压与超硬材料全国重点实验室, 长春 130000;

2. 吉林大学 综合极端条件高压科学中心, 长春 130000

地球下地幔底部是地球内部波速、密度等物理性质变化最为剧烈的区域之一。该区域的物理和化学性质对地球的演化、板块构造运动以及地幔对流模式具有重要影响。近期研究表明, 氮可能存在于地球深部。例如, 氮已在铁陨石中被发现(Hashizume and Sugiura, 1998; Kaminsky and Wirth, 2017), 并作为包裹体存在于超深钻石中。此外, 氮在核幔分异过程中的行为及其在金属相和硅酸盐相之间的分配已被广泛研究, 这些研究揭示了氮在高压条件下与多种元素形成稳定化合物的潜力(Dalou 等, 2017; Speelmanns 等, 2019)。尽管部分观点认为氮元素很难通过板片俯冲被大量携带到下地幔, 但仍有大量的氮元素作为初始成分被保留在地球深部(Huang 等, 2024)。无论是俯冲到地球深部的氮, 还是作为原始成分保留在地球深部的氮, 其在下地

幔的存在形式及其特性均值得深入研究。其中, 稀土元素与氮元素之间的相互作用在地球深部条件下鲜有研究。作为典型的亲石元素, 镨(Pr)通过板块俯冲进入下地幔后, 在高压条件下其电子结构特性可能促进氮的稳定化。同时, 氮的化学活性也可能影响稀土元素的配位环境。这种元素间的耦合效应可能使镨氮化合物在下地幔深部稳定存在, 并在这一区域的动态组成中发挥重要作用。因此, 通过第一性原理计算方法模拟镨和氮在地球下地幔以及核幔边界条件下所能形成的稳定化合物及其物理化学特性, 对于理解地球深部物质组成具有重要意义。这也有助于理解地球深部的氮循环, 进而为解释地球深部“氮亏损”之谜提供启示。

关键词: 下地幔; 氮循环; 第一性原理计算

基金项目: 国家自然科学基金项目

第一作者简介: 刘冉(1997-), 博士研究生, 研究方向: 第一性原理计算 Email: liuran22@mails.jlu.edu.cn

*通信作者简介: 刘兆东(1986-), 教授, 研究方向: 高压技术、高压物理与地球深部科学. Email: liu_zhaodong@jlu.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

华南崆岭地体太古-古元古代花岗岩类中的长石 Pb 同位素重置: 对于示踪热演化历史的意义

孟凡雪^{1*}

1. 山东科技大学 地球科学与工程学院, 山东 青岛 266000

Feldspar Pb isotopes have been widely used to trace magmatic formation and evolution processes. However, it remains unclear whether post-magmatic thermal events can affect feldspar Pb isotopic ratios. Here, the in situ Pb isotopic composition of feldspar hosted in granitic rocks (thirteen Archean and one Paleoproterozoic) from the northern Kongling terrane, Yangtze Craton, South China, is analyzed. The samples reveal a substantial variation in their Pb isotopic composition, spanning the gap between the 1.9 Ga and present-day geochrons, which indicates extensive resetting by later tectonothermal events. This resetting was interpreted to have likely resulted from Paleoproterozoic and Neoproterozoic tectonothermal

events related to the assembly and breakup of the Columbia and Rodinia supercontinents. These results suggest that Pb isotopes should be used cautiously when tracing magma sources and petrogenesis in magmatic rocks that have experienced post-magmatic reworking. However, the in situ Pb isotopic composition of feldspar in ancient granitoids may also potentially be used to reveal later tectonothermal events. The extensive resetting of the Pb isotopic composition in feldspar by regional thermal events may also provide new insights into our understanding of the Pb isotope paradox.

关键词: 长石; Pb 同位素; 超大陆聚合

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

地球内核铁合金的流变机理和黏度的计算研究

何宇^{1*}

1. 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

地震学观测表明,地球内核具有复杂的不均一性和各向异性结构,各向异性结构的形成与内核动力学过程相关,是认知内核演化的关键。各向异性结构的形成与内核铁合金的流变机制与黏度有关,然而在内核条件下铁合金的流变机制与黏度仍无定论。另外,内核可能存镍、硅、硫、碳、氢、氧等杂质,这些杂质对粘度的影响也尚不清楚。在本研究中,利用从头算分子动力学(AIMD)和深度学习分子动力学(DPMD)方法计算了在内核条件下铁、镍、硅、硫、

碳、氢和氧的扩散系数。其中,碳、氢和氧在晶格中像液体一样具有高度扩散性,而铁、镍、硅和硫通过铁位空位扩散。这些杂质对粘度的影响微乎其微。基于位错蠕变机制,预测的六方相铁合金的黏度为 $1 \times 10^{14} \sim 2 \times 10^{16} \text{ Pa}\cdot\text{s}$,这与自由内核章动和地震波衰减观测预测的值一致。

关键词: 内核; 铁合金; 流变性质; 黏度; 分子动力学

基金项目: 自然科学基金(No. 42350002)和 中科院青年交叉团队(JCTD-2022-16)

第一作者简介: 何宇(1985-), 研究员, 研究方向: 高温高压下地球内部物质性质的计算模拟研究, E-mail: heyu@mail.gyig.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

有机碳俯冲过程中释放的含碳气体以及碳结构的演化

吴森森¹, 张宝华^{1*}

1. 浙江大学 地球科学学院, 杭州 310000

深部碳循环对于地球宜居环境的形成起到了关键作用。在深部碳循环中, 关于无机碳在俯冲过程中的相变、熔融、脱碳等过程开展了相当深入的研究。但是, 对于还原性有机碳在俯冲过程中的命运还不够了解。鉴于此, 我们以沉积岩中最具代表性的干酪根为有机碳材料, 在 5 GPa 和 1473 K 以内开展高温高压实验。结果表明, 干酪根在俯冲过程中释放了不到 10% 的甲烷和乙烷, 超过 90% 的有机碳以石墨的形式

存在于深部。由于这些含碳气体的挥发性, 因此倾向于上升到地表, 在上升过程中参与了多种地学过程, 最终部分气体会来到地表, 维持了当时地表的温暖。而固体组分石墨则会保存地幔, 间接地增强了地表环境的氧化。因此, 有机碳的高效俯冲对于地球氧化环境的形成起到了关键作用。

关键词: 深部碳循环; 有机碳; 含碳气体; 石墨

第一作者: 吴森森 (1991-) 博士后, 研究方向: 深部碳循环。Email: wusendeepoc@163.com

通讯作者: 张宝华 (1978-) 教授, 研究方向: 矿物物理。Email: zhangbaohua@zju.edu.cn

通讯作者: 胡清扬 (1987-) 研究员, 研究方向: 深部水。Email: qingyang.hu@hpstar.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

铁饱和超含水相 B 和相 E 的高压状态方程和振动光谱研究

李槟馨¹, 朱峰^{1*}

1. 中国地质大学(武汉) 地球科学学院, 武汉 430074

致密的含水镁硅酸盐(DHMS)相是地球水循环中的关键载体,也是深部地幔中水(氢)的重要宿主。许多高温高压研究对含水矿物的相稳定性、水容量、物理与化学性质等进行了探索,然而对于 Fe 对 DHMS 相的稳定性和物性影响的研究则相对较少。本研究中,我们选取超含水相 B 和相 E 作为本实验的研究对象,利用多面顶压机进行 FeO 与超含水相 B、相 E 间的相平衡实验,得到了超含水相 B 和相 E 的饱和 Fe 含量。再根据该结果通过多面顶压机实验

重新合成了 Fe 饱和的超含水相 B 和相 E 单相,并通过金刚石对顶砧实验对它们开展高压同步辐射 X 射线衍射实验及高压拉曼光谱实验,得到了 Fe 饱和的超含水相 B 和相 E 的三阶 Birch-Murnaghan 状态方程参量及振动模式与压力间的依赖关系。通过与纯 Mg 端元的超含水相 B 和相 E 进行比较,阐明了 Fe 对超含水相 B 和相 E 等 DHMS 相的物理性质的影响。

关键词: 高温高压; 超含水相 B; 相 E; 状态方程

基金项目: 国家自然科学基金项目(4210020845)

第一作者简介: 李槟馨(2001-), 硕士研究生, 研究方向: 岩石学、矿物学、矿床学.Email: 18724404148@163.com

通讯作者简介: 朱峰(1988-), 教授, 研究方向: 矿物物理.Email: fengzhu@cug.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

岩浆洋冷凝期间地幔转换带的水化作用

谢龙剑^{1,2,3,4*}, Micheal Walter², Tomoo Katsura³, 徐放⁵,
Jianhua Wang², Yingwei Fei²

1. 北京高压科学研究中心, 上海 201203;

2. Earth & Planets Laboratory, Carnegie Science, Washington DC 20015, USA 000000;

3. Bayerisches Geoinstitut, University of Bayreuth, Bayreuth 95440, Germany 000000;

4. Department of Earth Sciences, University College London, London WC1E6BS, UK 000000;

5. 浙江大学 地球科学学院, 杭州 310058

地幔过渡带以其卓越的储水能力著称, 被认为是地球深部水的重要储存区 (Ohtani, 2021)。尽管板块脱水作用——即地表海洋水通过俯冲板块释放——是地幔过渡带水化的主要机制 (Kuritani 等, 2011; Richard 等, 2006), 但深部地幔中的原生水 (Hallis 等, 2015) 暗示了另一种可能的水源。早期地球表面由于大碰撞作用形成了一个深岩浆洋, 其结晶固化过程奠定了现今固体地球的基本结构。该岩浆洋的残余熔体可能是这种原生水的潜在载体。由于地幔过渡带与下地幔顶部边界处存在密度跃迁, 是深部熔体的重要富集区。为了探究含水岩浆洋熔体在地幔过渡带与下地幔顶部边界的演化过程, 我们在 24 GPa 高压下研究了 MgO-FeO- CaO-Al₂O₃-SiO₂-H₂O 体系的熔融相关系。研究发现, 随着温度下降, 布里基曼石 (bridgmanite) + 斯石英 (stishovite) + 熔体, 以及布里基曼石 + 铁方镁石

(ferropericlase) + 熔体的相边界曲线向富镁富水方向演化, 水含量可高达约 80% H₂O。岩浆洋熔体成分最终将沿着这两条三相共存相边界演化。通过熔体成分估算的密度显示, 在水含量达到约 25%之前, 岩浆洋熔体相对于上地幔和地幔转换带矿物呈中性密度。这一中性密度区间导致在岩浆洋演化到晚期阶段且熔体渗流占主导时, 下地幔顶部可能形成一个短暂的熔体富集层。当岩浆洋的结晶度超过 98% 时, 该熔体富集层中熔体的水含量大于 25%, 导致其密度低于上地幔, 从而因浮力作用向上迁移, 进入并水化地幔转换带。这一过程为地幔转换带深部原生水的起源提供了一种机制, 为理解地球深部水循环提供了新的视角。

关键词: 岩浆洋; 地幔转换带; 水化作用; 高压熔融相图; 熔体密度

第一作者简介: 谢龙剑 (1988-), 研究员, 研究方向: 地球内部结构起源与高压技术研发, E-mail: longjian.xie@hpstar.ac.cn

通信作者简介: 谢龙剑 (1988-), 研究员, 研究方向: 地球内部结构起源与高压技术研发, E-mail: longjian.xie@hpstar.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

分子动力学模拟氢对橄榄石颗粒边界电导率的影响

王浩清^{1*}

1. 成都理工大学, 成都 610059

橄榄石作为地球深部的重要矿物之一, 其电导率对利用地球物理方法解释高导异常有重要作用, 而颗粒边界被认为对岩石的电导率有着重要的作用。尽管氢对地球内部物理化学性质极为重要, 其在颗粒边界的运移对橄榄石电导率影响还极为有限, 在特定情况下对氢的作用进行探究。本研究旨在探讨氢在橄榄石颗粒边界上的活动性及其对电导率的影响, 以揭示氢在深部地质条件下对橄榄石电导性质的作用。采用分子动力学模拟方法, 温度和压力由耦合到 Nosé-Hoover 恒温器的各向异性压抑器控制, 时间步长为 1 fs, 时间 1~2 ns, 模拟

了相同氢浓度下高温 (>1200 K)、和高压 (>1 GPa) 条件下的橄榄石多晶颗粒边界离子及含氢离子的活动性及其电导率, 分析了橄榄石颗粒边界离子以及氢离子在颗粒边界的迁移和电导。模拟结果表明, 在高温 (1500 K) 和高压 (1 GPa) 条件下, 氢离子活动性增强且橄榄石颗粒边界的电导率增加。氢对橄榄石电导率的影响显著。为探究氢对地幔橄榄石的作用提供参考。

关键词: 橄榄石; 颗粒边界; 电导率; 氢; 分子动力学模拟

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

含水矿物的超离子态相变与电学响应

刘锦^{1*}

1. 燕山大学 高压科学中心, 河北 秦皇岛 066004

基于大地电磁测深数据,俯冲板片随深度呈现出丰富的电学性质变化和结构特征,尤其是高导异常蕴含着关键的地球动力学信息。当前高温高压物质科学研究认为:15~20 公里以浅的浅层高导异常主要源于沉积物压实过程中孔隙水的排出作用;弧下深度>90 公里的深部异常则与蛇纹石、滑石等含水硅酸盐矿物的脱水反应密切相关,高温高压实验证实这些矿物在 400~600 °C 温压条件下发生分解并形成部分熔融体。近年观测数据显示,在冷俯冲带中普遍存在 30~70 公里深度的显著高导异常;然而,该深度高导异常结构的特殊性在于:冷俯冲板片温度在 200~300 °C 左

右,远低于叶蛇纹石和滑石脱水温度,以致传统脱水模型难以解释高导异常体的空间连续性和电导率量级。我们在燕山大学高压科学中心新引进的六轴压机上,设计并同步开展高温高压变形与电学性质测量实验,通过明确俯冲带重要含水矿物的高压变形特征及其电学性质的响应规律,并结合第一性原理计算模拟揭示了含水矿物的超离子态相变,为破解俯冲带弧前 30~70 公里深度的高导异常成因之谜提供了新思路。

关键词: 深部水循环; 俯冲板片; 高温高压; 电学性质

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

天然有机玻璃碳成因及其在高温高压下行为的研究

舒莎^{1,4}, 牛国梁¹, 张宇璇², 李世杰³, 缙慧阳¹, 李小伟⁴, 陶仁彪^{1*}

1. 北京高压科学研究中心, 北京 100193;

2. 北京大学, 北京 100871;

3. 中国科学院地球化学研究所, 贵阳 550081;

4. 中国地质大学(北京)地球科学与资源学院, 北京 100083

广西玻璃碳是一种罕见的通过地质作用形成的天然碳材料, 其具有和有机物类似的化学成分(含大量 N-S-H)以及玻璃碳材料(无序结构)属性。理解其成因及在高温高压下的行为, 对于探究相关地质过程与新材料的开发都具有重要意义。本研究以广西大化县七百弄乡地区采集的天然玻璃碳样品为对象, 根据天然玻璃碳的外观形态、元素含量、同位素组成以及光谱学等特征, 我们推测其可能由煤层沥青类物质迁移至地表固化而成。另外一方面, 最近研究发现, 天然地幔金刚石中可以容纳大量 N-H 缺陷, 但是对于其 N-H 缺陷成因还没有很好的解释。基于天然玻璃碳的特殊成分和结构性质, 我们对其进行了高温高压(5~25 GPa, 1400~1700 °C)处理, 用于研究地球深部形成天然含氢金刚石的成

因。实验结果表明, 在 5 GPa-1500 °C 的低压实验条件下, 天然玻璃碳转化为具有标准六边形结构的片状石墨, 通过石墨产物的 ID/IG 与 FWHM-D 的关系, 我们揭示了玻璃碳在高温高压下向石墨转化的路径。在 20 GPa-1500 °C 的超高压条件下, 天然玻璃碳能够成功转化为含氢纳米金刚石, 通过对合成纳米金刚石的 analysis, 我们推测了氢在合成金刚石中的存在方式和占位。本研究确定了广西天然玻璃碳的成因, 并研究了超高压下天然玻璃碳转化为含氢纳米金刚石的可行性, 为天然含氢金刚石研究和碳材料开发开辟了新方向。

关键词: 天然玻璃碳; 纳米金刚石; 天然含氢金刚石; 高温高压

基金项目: 国家重点研发计划青年科学家项目(2022YFB4100900)

第一作者简介: 舒莎(2000-), 硕士研究生, 研究方向: 有机碳在高温高压下行为的研究. Email: sha.shu@hpstar.ac.cn

*通信作者简介: 陶仁彪(1984-), 研究员, 研究方向: 地球与行星内部挥发份循环及效应研究. Email: renbiao.tao@hpstar.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

大洋板片表层沉积有机质深俯冲演化特征 及其深部资源勘查意义

徐良伟^{1*}, 许小凯², 胡咤咤², 张昆¹, 陈磊³

1. 河南理工大学 资源环境学院, 河南 焦作 454003;

2. 河南理工大学 能源科学与工程学院, 河南 焦作 454003;

3. 武汉工程大学 机电工程学院, 武汉 430205

近年来, 全球的油气勘探正向埋深更深、时代更古老的超深层进行探索。滕吉文等(2013)认为, 油气能源应用广泛而供给又十分紧迫, 必须向地球深部“挺进”, 进而提出了第二深度空间(5000~10000 m)的油气勘探与开发的理念。而关于超深层的深度界限、地质内涵, 国内外认识并不完全统一(马永生等, 2011; 滕吉文等, 2013; 贾承造等, 2015)。美国西内盆地阿达科凹陷米尔斯兰奇气田在 7663~8083 m 埋深的下奥陶统碳酸盐岩内发现了世界上最深的气藏, 在墨西哥湾密西西比三角洲的列克-华盛顿湖油田 6540 m 深处发现了世界上最深的油藏(庞雄奇等, 2010)。目前, 已有学者对全球 20 个典型沉积盆地的超深层油气藏的分布领域进行了统计, 油气藏的形成与分布的深度主要受控于地热梯度, 预测超深层油气分布的门限深度可达 14000 m(庞雄奇等, 2020; Pang 等, 2021a, b), 而全球沉积盆地烃类的供给门限及烃类的排出门限也各不相同, 最深可以分别达到 9000 m 及 5000 m 左右(贾承造等, 2015; Pang 等, 2020)。

综上所述, 石油地质学家们主要关注地球表层 1 万米左右深度以内沉积盆地及其周缘油气的聚集与成藏规律, 对于地球更深层的有机质或烃源岩在高温与超高压条件下的物理化学性质演化与生烃现象的研究鲜有涉及。而关于沉积盆地油气的来源与形成过程的探讨, 根据盆地演化过程及形成条件的差异, 不同学者主要设计了开放系统、半封闭系统、封闭系统

实验体系来进行了模拟, 这些体系主要模拟了烃源岩及有机质在有液态地层水和矿物介质共同参与, 在相对低温(300~600 °C)、较高地层流体压力(30~120 MPa)和静岩压力(60~200 MPa)等因素直接或间接作用下地球表层浅部油气的热压降解-缩聚反应的形成过程(王治朝等, 2009; 汤庆艳等, 2013; 何川等, 2021)。而俯冲板片所到达的地球深部是一个极端的高温高压环境, 随着俯冲深度到达壳幔边界或者是更大的深度, 相应的温度可高达上千度, 而压力也显著增大至数个 GPa 及以上, 这就造成俯冲带的岩石及矿物组成都会发生明显异于地球表层的物理-化学变化。因而传统的生烃模拟实验手段往往难以完整的展示大洋俯冲板片富有机质沉积物在深俯冲过程中的脱碳与生烃行为。

其实, 板块俯冲可以把大洋地壳中的富碳沉积物拖拽至地幔中, 这些沉积有机质有异于地表沉积盆地的物质化学性质和生烃模式, 使原来认为的油气勘探“死亡线”复杂化(陈晋阳等, 2004; 王传远等, 2006), 这些过程都不符合石油地质学家们所广泛关注的大陆地壳中沉积盆地油气成藏机理, 也打破了的烃类聚集门限深度而普遍被认为无法聚集成藏且并无勘探潜力和商业价值。

关键词: 大洋板片; 超深层油气分布; 板块俯冲; 油气勘探“死亡线”

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

地球外核中液态铁轻元素合金的第一性原理分子动力学研究

谢妙栩¹, 何宇¹, 付洁^{2*}

1. 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;

2. 宁波大学 高压物理科学研究院, 浙江 宁波 315211

地球外核主要由液态铁 (Fe) 和轻元素组成, 其中 S、O、Si、C、H 被认为是外核中的关键轻元素。此外, 近期研究指出, N 也可能存在于外核中 (Bajgain 等, 2019), 外核中轻元素的组成及其浓度仍是科学界争论的焦点。研究外核中轻元素的含量对于揭示地球内部轻元素的分布、核幔边界及内核边界处的物质交换和化学反应机制等都具有重要意义。值得注意的是, 近期研究表明, Fe-O、Fe-C 和 Fe-H 合金在内核温压下呈现出超离子态, 这一模型可以很好地解释内核中的诸多现象 (He 等, 2022)。基于此, 我们对外核温压下的 Fe-O、Fe-C 和 Fe-H 合金展开了系统性研究。

在本研究中, 我们采用第一性原理分子动力学 (FP-MD) 模拟, 系统地预测了外核条件下 (约 136~330 GPa, 4000~6000 K) 下液态 Fe-O、Fe-C 和 Fe-H 合金的密度、声速及其热力学性质, 以探索外核的组成。研究结果表明, O 浓度为 6.1% 的液态 Fe-O 合金能够同时满足初步参考地球模型的密度和声速。对于 Fe-C 合金, 我们发现 C 含量为 5.1%~6.6% 的

Fe-C 合金能够解释外核的密度亏损, 而 C 含量为 2.9%~3.7% 的 Fe-C 合金与地震学的声速数据相符。鉴于这一差异, 我们在先前 Fe-O 研究 (Xie 等, 2024) 的基础之上, 将研究扩展至 Fe-C-O 三元合金, 以更全面地理解外核成分。研究结果显示, Fe-C-O 合金能够同时满足密度和声速的地震观测结果。针对三种地热线, 我们提出了与地震观测数据一致的“最佳”模型: 当内核边界温度 (TICB) 为 5400 K 时, “最佳”模型为 Fe-7.3% O, 当 TICB=6350 K 时, “最佳”模型为 Fe-6.5% O-0.3% C, 当 TICB=6760 K 时, “最佳”模型为 Fe-5.3% O-1.1% C。此外, 我们还探究了 Fe-H 体系在外核及核幔边界处的物态特征。总体而言, 本研究通过严谨的第一性原理分子动力学模拟, 为外核成分提供了新的理论模型。这不仅深化了对地球外核组成的认识, 也为核幔边界及内核边界的物质交换和化学过程研究提供了重要参考。

关键词: 状态方程; 第一性原理分子动力学; 热力学性质; 液态铁-轻元素合金; 地球外核

基金项目: 国家自然科学基金项目 (11804175 和 42350002), 浙江省科技创新团队项目 (2021R01004), 宁波市自然科学基金 (2021J099), 中国科学院青年创新促进会 (JCTD-2022-16) 以及宁波大学王宽诚教育基金会。

第一作者简介: 谢妙栩 (2000-), 硕士研究生, 研究方向: 地球物理学. Email: xiemiaoxu@mail.gyig.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

氧缺陷型毛钙硅石的超离子态及其对深部地球氧循环的影响

王子范¹, 何宇^{1,2}, 毛河光^{1,3}, Kim Duck Young^{1,3*}

1. 北京高压科学研究中心, 上海 201203;
2. 中国科学院地球化学研究所, 贵阳 550081;
3. 上海前瞻物质科学研究院, 上海 201203

毛钙硅石 (CaSiO_3 钙钛矿) 是地球下地幔的一种重要矿物, 可能从早期的岩浆海中结晶形成。然而, 氧空位等缺陷在地幔中对毛钙硅石的物理化学性质的影响尚不明确。本研究基于机器学习分子动力学模拟, 系统研究了氧缺陷在极端条件下对毛钙硅石的结构及输运特性的影响。结果表明, 在高温高压下氧离子的扩散可使毛钙硅石进入超离子态, 使电导率得到显著提升, 并且氧空位的浓度升高能扩展超离子相的

压力-温度范围。这一现象表明, 含氧缺陷的毛钙硅石可能为深部地幔中游离氧的主要来源和载体, 对地球深部的氧循环及早期地幔的氧逸度演化具有关键的调控作用。该研究为地球动力学过程、核幔边界物质交换及地球深部氧循环提供了新的思路和见解。

关键词: 毛钙硅石; 超离子态; 氧空位; 氧循环; 深部地球

基金项目: 国家自然科学基金项目 (11774015, U1930401), 上海市科学技术委员会 (22JC1410300), 上海市极端环境新材料重点实验室 (22dz2260800)

第一作者: 王子范, 博士研究生, Email: zifan.wang@hpstar.ac.cn

通信作者: Duck Young Kim, 研究员, Email: duckyoung.kim@hpstar.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

相互统一的铂-金-氧化镁-压标 P-V-T 状态方程

叶宇¹, 朱曦^{1*}

1. 中国地质大学(武汉)地质过程与成矿预测全国重点实验室, 武汉 430074

高温高压实验是研究地球深部物质属性的重要实验手段, 实验中的压强标定则是高压实验的基础, 压标状态方程的准确性决定了我们能否地将实验模拟结果同地球物理观测合理地联系起来。Pt、Au 和 MgO 作为最常用的三种压标, 其 P-V-T 状态方程已有了大量研究, 但相互间长期存在着显著差异, 这严重制约着我们对高压实验结果的对比和分析。因此, 建立一套统一的、准确的 Pt、Au 和 MgO 状态方程, 对于我们将高压实验模拟同地球内部结构, 物理化学性质及诸多动力学过程有机联系是很有必要的。本研究基于这三种压标物质的冲击波(动高压)与金刚石压腔(静高压)的实验数据, 并结合

高温热熔, 高温 XRD 以及高温弹性测量数据, 建立了相互统一的 Pt-Au-MgO P-V-T 压标状态方程体系, 在 1500~2500 K, 0~140 GPa 的温压范围内, 三种压标方程标定的压力差别小于 1.5 GPa。基于建立的压标状态方程, 我们进一步精确约束了后尖晶石相变(主宰上下地幔分界面)和后钙钛矿相变(与下地幔底部“D”层形成密切相关)的克拉珀龙斜率分别为-2.4~-2.5 MPa/K 和+5~+7 MPa/K, 且基本不受化学成分的影响。

关键词: P-V-T 状态方程; 压标物质; 氧化镁; 后钙钛矿相变

第一作者简介: 叶宇(1982-), 教授, 研究方向: 矿物物理, Email: yeyu@cug.edu.cn

通讯作者简介: 朱曦(1995-), 博士后, 研究方向: 矿物物理, Email: zhuxi@cug.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

Distinguishing hydrogen defects and the thermoelastic wave velocities of hydrous stishovite

韩松松^{1,2*}, 侯明强¹, 胡清扬²

1. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院, 武汉 430077;

2. 北京高压科学研究中心, 北京 100193

The Landau-type transition in hydrous stishovite is investigated to characterize two major H incorporation mechanisms, namely the tetrahedral hydrogarnet-type defects ($\text{Si}^{4+}=4\text{H}^+$) and H-filled silica channels. Using first-principles simulation, we isolate specific H defect species, overcoming experimental challenges of mixed H defects. We find that H-free and hydrogarnet defect stishovite exhibit similar critical pressure of shear instability. In contrast, the crystal structure of stishovite with H-filled channels is intrinsically

distorted, shifting the stability range of CaCl_2 -type silica to much lower pressure. We conclude that the ratio of H-defect types controls the magnitude of elastic wave velocities drops during the post-stishovite transition. The large varieties of seismic scatterers associated with stishovite in Earth's lower mantle may reflect not only the H-defect type of the hosted stishovite but also the size of the water reservoir in the mantle.

关键词: 含水矿物; 地震散射体

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

利用机器学习研究二氧化硅的动力学和热力学相变路径

曹徐岩¹, 胡清扬^{1*}

1. 北京高压科学研究中心, 北京 100193

我们使用机器学习势函数进行模拟, 研究了二氧化硅的相变动力学, 重点研究了连接赛石英的相变途径。除了兆帕压力下, 在赛石英稳定范围内, 发现了一条热力学控制的相变路径, 也在约 10 和约 25 GPa 下, 远远低于赛石英的稳定范围, 发现了有两条动力

学控制的相变途径。理论预测撞击压力下的陨石赛石英与最近对陨石布里奇曼石的观测相吻合。赛石英的存在可能为约束相关的动态压缩条件提供关键信息。

关键词: 赛石英; 机器学习; 动力学相变,

基金项目: 国家科技部基金 (2022YFA1405500), 国家自然科学基金项目 (42150101, 12274383)

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 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

内核条件下铁相晶体结构的第一性原理计算研究

杨华¹, 万磊¹, 李云国^{1,2*}

1. 中国科学技术大学 岩石圈演化与环境演变全国重点实验室, 合肥 230026;

2. 中国科学技术大学 深空探测实验室/地球和空间科学学院, 合肥 230026

固态内核的晶体结构对于理解其化学成分和动力学演化至关重要。尽管已有大量高温高压实验和理论模拟研究, 关于内核条件下不同铁相结构 (如 bcc、fcc 和 hcp) 稳定性的争议仍未解决, 内核的具体晶体结构尚不明晰。实验上受限于内核极端的温压条件, 而计算上的主要困难在于不同结构相之间的能量差极小 (约几十毫电子伏特每原子), 导致不同理论方法 (如第一性原理计算、经验势能力场和机器学习方法) 得出的结论不一致。针对以上问题, 我们采用 Bain 路径积分方法, 通过对内应力做功进行热力学自由能计算, 避免了传统方法中引入其他参考体系及直接计算熵所带来的误差与收敛性问题。研究表明, Bain 路径积分方法显著提高了计算精度和效率, 澄清了不同理论方

法关于 bcc 结构在内核条件下力学和热力学均不稳定的争议。在此基础上, 我们以 Bain 路径积分方法自由能计算的收敛精度为基准, 进一步确立了两相热力学 (2PT) 模型自由能计算的收敛要求, 并结合大尺度、长时间的分子动力学模拟, 系统计算了不同铁相结构在内核条件下的熔点。结果显示, hcp 相的熔点要高于 bcc 和 fcc 相, 从热力学角度揭示了其成为内核最稳定晶体结构的内在机制。这一关于 hcp 相作为内核最稳定晶体结构的统一结论, 为未来内核成分、结构、温度及元素分配迁移等物性研究提供关键数据。

关键词: 铁相结构; 第一性原理; 高温高压; 自由能计算; 地球内核

基金项目: 国家自然科学基金项目 (42173040, 42322201), 中国博士后科学基金 (2024M763142)

第一作者简介: 杨华 (1995-), 博士后, 研究方向: 地核物质结构与性质. Email: yanghua98@ustc.edu.cn

*通信作者简介: 李云国 (1985-), 教授, 研究方向: 核幔相互作用与行星深部结构. Email: liyunguo@ustc.edu.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

深部熔体的波速和密度：对上地幔地震波低速异常区的启示

许满^{1,2*}, 景志成³, James Van Orman⁴, Tony Yu⁵, Yanbin Wang⁵

1. 上海前瞻物质科学研究院, 上海 201203;

2. 北京高压科学研究中心, 上海 201203;

3. 南方科技大学 地球与空间科学系, 广东 深圳 518055;

4. 凯斯西储大学 地球、环境与行星科学系, 美国 克利夫兰 044106;

5. 芝加哥大学 先进放射源中心, 美国 芝加哥 060637

深部熔体是地球内部能量与物质运移的主要媒介, 显著影响着地球的结构、成分及物理化学性质等, 造成地球物理及地球化学观测到的地幔不均一性。地震观测结果表明, 在上地幔软流圈及地幔过渡带之上存在显著的地震波低速异常区, 暗示着熔体层的存在。熔体能否稳定存在于这些区域并合理解释地震观测取决于熔体的密度和弹性波速等物理性质, 然而由于熔体具有易反应、易流动等特性, 给实验造成了较大的挑战, 熔体在高压下的波速和密度仍没有得到很好的制约。本研究运用先进的大腔体压机原位超声测量技

术和三维 X 射线断层显微成像技术对硅酸盐熔体的波速、密度及状态方程进行了测定, 包含 CaO-MgO-FeO-SiO_2 和 $\text{Na}_2\text{O-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ 熔体体系, 聚焦熔体中重要组分 FeO 和 Na_2O 对熔体物性的影响。实验结果对理解熔体在地球内部的重力稳定性及深部熔体的地震学特征具有重要意义。本报告将详细讨论这些实验结果及其对上地幔地震波低速异常区的启示。

关键词: 熔体; 弹性波速; 密度; 高温高压; 低速层

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

原始镁的存在解释地球外核最外层的低速层

刘涛¹, 景志成^{1*}

1. 南方科技大学, 广东 深圳 518000

地球液态外核的精确成分长期以来备受争议。现有模型认为, 外核主要由铁镍 (Fe-Ni) 合金组成, 并含有少量轻元素 (如 Si、O、C、S 和 H), 但这些模型无法解释外核最顶部数百公里处地震学观测到的低速层 (称为 “E” 层)。本研究提出, 原始镁 (Mg)——一种可能在月球形成巨型撞击事件后进入外核最外层的潜在轻元素——可为 E' 层的形成提供合理解释。通过第一性原理分子动力学模拟, 我们首次获得了外核条件下 Fe-Mg 合金熔体的状态方程 (压

力-密度-温度关系) 和纵波速度 (V_p)。结果表明, 与其他轻元素的增强效应不同, Mg 的存在会略微降低液态铁的 V_p 。结合地震学观测的密度和 V_p 约束, 我们发现需要 0.5%~1.79% 的 Mg 才能匹配外核的地震模型。外核中原始镁的含量可以部分地解释硅酸盐地球整体镁含量相对于球粒陨石的轻微亏损现象。

关键词: 地球外核顶部; 轻元素; 第一性原理; 镁

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

类地行星地幔粘、弹性结构及潮汐响应

陈博文^{1*}, 吴忠庆¹, 吴小平¹

1. 中国科学技术大学, 合肥 230026

潮汐耗散是近轨道系外行星的重要产热机制,也是超级地球区别于地球的重要动力学特征,对于理解类地行星的热演化和宜居性至关重要。行星内部的潮汐耗散强度不仅取决于行星的轨道参数,还与其自身的粘度和剪切模量密切相关,为此,我们通过第一性原理计算,研究了后钙钛矿 MgSiO_3 、I-42d 型 Mg_2SiO_4 和 P21/c 型 MgSi_2O_5 三种超级地球主要组成矿物的扩散、粘度和弹性性质。计算表明,超级地球中的矿物相变均能导致粘度降低,表现出高压软化现象,并在行星内部形成多个低粘度层。基于矿物的物性参数,我们构建了超级地球的地幔粘弹性结构,并进一步估

算了其内部潮汐勒夫数和潮汐产热速率。我们发现,近轨道超级地球内部的潮汐产热速率极高,远超放射性同位素衰变,是行星内部的最主要热源。如此强烈的潮汐加热作用显著降低了近轨道超级地球的宜居性,即便他们可能位于红矮星的宜居带内。此外,我们还探讨了行星内部结构和成分变化对地表潮汐响应的影响,评估潮汐耗散作为系外行星探测手段的可行性。

关键词: 类地行星; 粘弹性; 第一性原理计算; 潮汐耗散

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

The fate of perovskites deep in the mantle: aggregate chemistry at extreme temperatures

Joshua Muir¹, 张飞武^{1*}

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

The Earth, particularly the deep earth where the conditions are unreachable by modern experiments, is generally represented by a series of models of simple ideal components but at extreme conditions (high temperatures, low strain rates, high pressures) these models can increasingly break down. The most common model of the mantle is that of a pyrolitic solid solution. In this talk I shall use thermodynamic models to predict that such a model would break down as temperatures increase and isolated phases increasingly interact. The most notable effect is that bridgmanite and davyne will dissolve into a single Ca-Mg-pv phase. This has profound implications for the lower mantle

and the core-mantle boundary as the properties of the aggregate increasingly diverge from the properties of the individual components of the aggregate. We predict the ‘D’ discontinuity is more likely a product of overlapping phase transitions between “inert species” rather than a single isolated phase transition, that the core is largely exposed to a Mg-Ca-pv perovskite rather than bridgmanite and that harzburgite, basalt and pyrolite have different stable phases (with different seismicity) in lower mantle conditions.

关键词: Mantle; Perovskites; Thermodynamic models; Phase transitions

基金项目: 国家重点研发计划 (2024FTF0807500)

第一作者简介: Joshua Muir (1985– 至今), 研究员, 研究方向: 理论地球化学。Email: j.m.r.muir@mail.gyig.ac.cn

*通信作者简介: 张飞武 (1980– 至今), 研究员, 研究方向: 理论地球化学。Email: zhangfeiwu@mail.gyig.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

高温高压实验探究地核中铁-氧-氢三元系统的熔融性质

付苏宇^{1*}

1. 浙江大学 地球科学学院, 杭州 310058

地核由液态外核与固态内核组成。地球化学结果显示,地核主要由铁-镍(Fe-Ni)合金组成(McDonough and Sun, 1995)。然而,地震学观测发现,外核的密度比液态纯铁的低 7.5%~7.6%,而内核的密度比固态纯铁的低约 5%,被称为地核的密度亏损(Dziewonski and Anderson, 1981; Fei 等, 2016; Kuwayama 等, 2020)。为了解释这一密度亏损,前人提出地核中含有 5%~10%的轻元素,如氢(H)、硅(Si)、氧(O)、硫(S)、碳(C)(Poirier, 1994; Hirose 等, 2021)。然而,地核中究竟含有哪些轻元素以及它们的含量有多少,目前仍没有定论。此外,地球的外核与内核是在逐渐冷却过程中,由早期原始液态核结晶分异形成。轻元素在内核与外核中如何分配与地核可能组分的熔融相图密切相关。因此,为了更好地约束地核的成分,需要开展针对地核可能组分在高温高压条件下熔融性质的实验研究。

在地核可能含有的几种轻元素中,氢与氧一直是深部地球科学的研究重点。比如,矿物物理针对氢在硅酸盐熔体与液态铁合金间分配所展开的实验发现,氢在高温高压下由很强的亲铁性:在早期岩浆洋分异过程中,0.3%~0.6%氢能进入地核,使得地核可能成为一个巨大的储水库(Tagawa 等, 2021)。理论计算也表明,Fe-H 合金中的氢在内核的温压条件下表现为超离子态,可能解释地震学观测的波速、密度、泊松比等性质(Wang 等, 2021; He 等, 2022)。此外,在早期岩浆洋模型中,由于共存的硅酸盐熔体与液态铁合金,大量氧能进入地核。特别的,地核中氧含量的氧与固态铁几乎不相

溶,因此大部分氧在内核形成时会从其中排出,进入液态外核中(Oka 等, 2019)。尽管氢和氧在地核中很重要,但之前的实验核理论计算研究主要聚焦于高温高压下 Fe-O 或 Fe-H 二元系统的熔融相图(Oka 等, 2019; Tagawa 等, 2022)。Oka 等(2022)对 Fe-H-O 三元系统熔融相图的研究局限于 40 GPa,远低于地核的温压条件。

在本研究中,我们结合金刚石压腔和激光加热技术,对 Fe-H-O 系统进行了高温高压熔融实验(高达 120 GPa 和 4000 K)。我们采用同步辐射 X 射线衍射技术原位采集了高温高压下的 X 射线衍射图谱(XRD),通过测量样品的体积估算它的氢含量。我们通过聚焦离子束(FIB)技术切割表征了回收样品,并采用电子探针(EPMA)技术定量分析了 Fe-H-O 熔化过程中熔体相和共存固体相的成分。这些结果用于构建 Fe-H-O 在高温高压条件下的熔融相图,并定量分析了氢和氧对铁合金熔化曲线的影响。结果显示,氢和氧都能降低铁合金的熔化温度,而且氧元素的影响比氢元素腔。我们的结果还发现,随着氧在熔体中含量的增加,氢更倾向于进入共存固体相,使得氢在固-液相中的分配系数大于 1。由于氧几乎与铁不相溶,这意味着,在早期液态核结晶形成内核的过程中,大部分氧残留在液态外核中,而氢更倾向于进入内核,使得内核中的氢含量可能大于外核。这些结果能为约束地核的成分提供关键数据。

关键词: 地核的成分; 铁-氧-氢; 高温高压熔融实验; 金刚石压腔

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

Sulfide-Silicate Reactions at the Base of the Mantle: Implications for Core Formation and Seismic Anomalies

胡清扬^{1*}, 公龙飞¹

1. 北京高压科学研究中心, 上海 100193

Sulphide-silicate equilibrium during the final stage of core-mantle differentiation may have led to substantial sulphide reservoirs in the lowermost mantle. We here investigated the reactivity of calcium sulphide and silica at the pressure-temperature conditions relevant to the base of mantle. Experiments combining X-ray diffraction, Raman spectroscopy, and electron microscopy revealed a reaction transforming CaS into a denser sub-sulphide with the composition of Ca_{1+x}S , along with the formations of CaSiO_3 davemaoite, elemental sulphur, and possibly silicon. These findings

reveal a mechanism for incorporating siderophile elements like sulphur and silicon into the outer core, converting ancient sulphide reservoirs into dense phases like davemaoite and sub-sulphide. These dense products, potentially admixed throughout lower mantle convection, could contribute to the development of large-scale seismic structures observed today, including the large low velocity provinces.

关键词: Core-mantle differentiation; Sulphide-silicate equilibrium; Davemaoite; Sub-sulphide phases

国家自然科学基金项目 (T2425016)

第一作者简介: 公龙飞 (2000–), 硕士研究生, 研究方向: 材料科学. Email: longfei.gong@hpstar.ac.cn

*通信作者简介: 胡清扬 (1987–), 研究员, 研究方向: 高压矿物物理、凝聚态物理和高压化学. Email: qingyang.hu@hpstar.ac.cn

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

碳酸镁铁在自旋转变区间的异常物理性质及其在地幔中部电导率不均一性的应用

赵超帅¹, 毛竹^{1*}, 刘锦², 徐良旭³, 侯明强⁴, 张馨月¹, 庄毓凯⁵, Spivak Anna⁶,
于英鑫¹, 李络¹, 朱洁⁷, 林俊孚⁸

1. 中国科学技术大学, 合肥 230026;

2. 燕山大学, 河北 秦皇岛 066004;

3. 北京大学, 北京 100871;

4. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院, 武汉 430077;

5. 四川大学, 成都 610065;

6. Korzhinskii Institute of Experimental Mineralogy, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka 142432;

7. 贵州理工大学, 贵阳 550013;

8. The University of Texas at Austin, Texas 078712

(Mg, Fe)CO₃ 在地幔深部的碳存储和输运中扮演着至关重要的作用(Farsang 等, 2021; Isshiki 等, 2004; Zhao 等, 2021)。研究其在极端条件下的物理性质(如声速、电导率、热导率)对约束俯冲带碳含量、解释地球物理异常(如地震波速异常、热化学异常、电导率不均一性)以及识别深部地幔潜在富碳酸盐区域具有重要意义(Chao and Hsieh, 2019; Farsang 等, 2021; Fu 等, 2017; Gaillard 等, 2008; Liu 等, 2014; Thomson 等, 2016; Yu 等, 2024)。然而, (Mg, Fe)CO₃ 在同时高温高压下的物理性质的研究仍然相对匮乏。在本研究中, 我们结合外电阻加热金刚石压腔高温高压实验技术, 通过拉曼光谱研究了 0~65 GPa 和 300~900 K 下三种不同铁含量的(Mg, Fe)CO₃ 单晶样品的振动和结构特性。高温高压实验结果表明(Mg, Fe)CO₃ 在 0~65 GPa 和 300~900 K 仍然稳定存在。有趣的是, (Mg, Fe)CO₃ 在高温高压下表现出异常的振动特性和自旋转变相图。三种(Mg, Fe)CO₃ 样品的自旋转变初始压力随着温度升高先降低后升高, 在 500 K 时发生转折。值得注意的是, 富铁(Mg, Fe)CO₃ 的自旋转变压力

区间比贫铁(Mg, Fe)CO₃ 更窄。这些结果为研究温度、压力、铁含量对(Mg, Fe)CO₃ 的自旋转变的影响提供了新的约束(Zhao 等, 2024b)。

此外, 我们采用四探针范德堡法测量了(Mg, Fe)CO₃ 在 0~83 GPa 和 126~2000 K 条件下的电导率。在常温高压下, (Mg, Fe)CO₃ 的电导率与铁含量呈正相关, 且在自旋转变区间电导率异常增加 2~3 个数量级。在 10~20 GPa 压力下, FeCO₃ 的电导率从 300 到 1500 K 提升了约 6 个数量级, 显示出高温对其电导性质的显著增强效应。结合地球物理观测, 我们发现在 800~2000 km 深部地幔环境中, (Mg, Fe)CO₃ 及其分解产物 FeCO₃+Fe₃O₄±C 混合体系的电导率比地幔主要矿物布里奇曼石、方镁铁矿和毛钙硅石高 1~4 个数量级。这一发现为揭示中下地幔局部大地电磁异质性的成因和潜在富碳区域的形成机制提供了重要参考(Zhao 等, 2024a)。

关键词: (Mg, Fe)CO₃; 高温高压; 自旋转变; 电导率

基金项目: 国家自然科学基金项目(42104101, 42241117, 42272036), 国家重点研发计划(2019YFA0708502, 2023YFF0804100)

第一作者简介: 赵超帅(1989-), 副研究员, 研究方向: 高压矿物物理。Email. cszhao@ustc.edu.cn

通讯作者简介:

毛竹(1982-), 教授, 研究方向: 高压矿物物理。Email. zhuma@ustc.edu.cn

刘锦(1984-), 教授, 研究方向: 高压矿物物理。Email. jinliu@ysu.edu.cn

朱洁(1986-), 副教授, 研究方向: 激光传输调控与整形技术。Email. jiezh_16@163.com

• 专题 7: 地球深部物质的组成、结构和物性 •

月球和水星核心条件下铁硅合金的声速

李孝红¹, 侯明强^{1*}

1. 中国科学院精密测量科学与技术创新研究院, 武汉 430071

金属核心中轻元素的种类和含量对了解类地行星和卫星的结构、热状态、地球动力和演化具有重要作用。硅 (Si) 已被认为是地球和小天体行星核中主要的候选轻元素, 但参考前人对 Fe-Si 的声速研究结果, 仍然缺乏对于面心立方 (fcc) Fe-Si 的声速研究。因此在本研究中, 我们利用脉冲回波重叠技术结合能量色散 x 射线衍射 (EDXRD) 测量了含 3% 和 6% Si 的 Fe 合金在压力和温度高达 6.3 GPa 和 1273 K 时的横波 (VP) 和纵波 (VS) 波速。在温度为 300 K 时, Si 的加入使体心立方 (bcc) Fe 的 VP 随 Si 含量的增加而增加了

0.074(15) km/s, VS 降低了 0.024(9) km/s。然而, 3% Si 对 fcc-Fe 的影响很小。掺入 6% Si 使 bcc 和 fcc 相中的 Fe 在高温下稳定, VP 相对于 fcc-Fe 的声速增加了 0.59 km/s。根据阿波罗地震观测和 Fe 和 Fe-Si 合金的 VP, Si 不太可能是月球核心中唯一的轻元素。对于水星核, 当 Si 含量小于 3% 时, VP 分布在 5.65~6.34 km/s 时, 水星核处于 fcc 相。而 6% Si 可以稳定 bcc 和 fcc 混合相的水星核, VP 分布为 6.17~6.85 km/s。

关键词: 月核; 水星核; 声速

基金项目: 中国自然科学基金 (批准号: 42394114, 42394112, 42192535, R22R6402)

第一作者简介: 李孝红 (1998 年), 性别 女, 博士研究生, 研究方向: 地球及其他类地行星内部的物理与化学研究. E-mail: lixiaohong@apm.ac.cn

*通信作者简介: 侯明强现任中国科学院精密测量科学与技术创新研究院研究员, 属于地震与地球内部物理研究部, 曾获优秀青年基金 (海外), “武汉英才”领军人才支持计划等项目支持. E-mail: houmq@apm.ac.cn