

专题 8: 地球深部物质物理化学属性和深部过程

下地幔及D''层矿物含水性和含水量的
地球化学理论模型的研究

蒋佳俊, 张飞武*

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 550002

地震学的研究表明在核幔边界 (CMB) 存在着一个被称为 D'' 层的地震不连续区。D'' 层具有强烈的地震波各向异性、剪切波和体波速度的反相关性、地震波速的不连续、大范围低剪切波速区 (LLSVPs) 以及 0~300km 的剧烈横向厚度变化等特征 (Cobden et al., 2015; Lay and Garnero, 2011)。近年来, 在 D'' 层顶部温压条件下布里奇曼石和后钙钛矿间的相变被认为是造成 D'' 层区域异常特征的主要原因。前人的研究表明, 对于纯的 MgSiO_3 体系, 布里奇曼石和后钙钛矿间的相变边界大约位于 2740km 的深度 (Murakami et al., 2004; Oganov and Ono, 2004; Tsuchiya et al., 2004)。然而, 由于下地幔中被证明含有 Al、Fe、Ca 等阳离子, 因此在真实的下地幔底部环境下, 布里奇曼石和后钙钛矿间的相变远比纯的 MgSiO_3 体系更为复杂。Al、Fe 等元素作为杂质进入矿物的晶格中会不同程度地改变布里奇曼石和后钙钛矿之间相变界面的深度。此外, 下地幔中水挥发分的存在也会对矿物物理化学性质和相变产生影响 (Hallis et al., 2015)。前人的研究得出水能够以氢缺陷的方式进入地幔矿物的晶格中, 并且是以电荷耦合替换为主要的替换机制 (Wright, 2006)。到目前为止, 人们对地幔转换带中矿物的含水量已经做了大量研究 (Pearson et al., 2014)。但是对于下地幔来说, 由于下地幔矿物含水量估算结果的不一致使得下地幔的含水量仍然存在着许多争议: 从不超过 20×10^{-6} (Panero et al., 2015), 到 $(50 \sim 4000) \times 10^{-6}$ (Litasov et al., 2003; Murakami et al., 2002)。最近, Townsend (2016) 等使用第一性原理计算的方法计算了水在布里奇曼石和后钙钛矿间的分配, 同时还探究了水对布里奇曼石和后钙钛矿间相变的影响。在他们的结果中指出, 在下地幔底部, 大量的水可能会被储存在 Al-bearing 的后钙钛矿中。

我们通过第一性原理计算的方法探究了水在布里奇曼石和后钙钛矿中的附存机制、水和其他阳离子对矿物物理性质的影响以及在下地幔温压条件下水对布里奇曼石和后钙钛矿间相变的影响。我们建立了七种不同的含氢缺陷来探究不同体系下矿物的含水机制: $(2\text{OH}_0 + V_{\text{Mg}}'')$ 、 $(4\text{OH}_0 + V_{\text{Si}}''')$ 、 $(\text{Al}_{\text{Si}} + \text{OH}_0)$ 、 $(\text{Al}_{\text{Mg}} + \text{OH}_0 + V_{\text{Mg}}'')$ 、 $(\text{Fe}_{\text{Si}}' + \text{OH}_0)$ 、 $(\text{Fe}_{\text{Mg}} + \text{OH}_0 + V_{\text{Mg}}'')$ 、和 $(\text{Fe}_{\text{Mg}}^x + 2\text{OH}_0 + V_{\text{Mg}}'')$ 。弹性性质计算表明, 对于 (Al, Fe)-free 体系和 Al-bearing 体系, 水对弹性波速和模量的影响都很小, 但是对于 Fe-bearing 体系, 水对弹性波速和模量的影响较为明显, 尤其是对剪切波 (V_S) 和剪切模量 (G)。此外我们发现, 含有 Fe^{3+} -H 缺陷的布里奇曼石和后钙钛矿会分别产生 -2.9% 和 -3.1% 的剪切波异常 (dV_S), 这与观测到的 LLSVPs 的平均异常值非常接近, 这个结果暗示了含三价铁和水的 MgSiO_3 很可能是 D'' 层中大范围低剪切波速区 (LLSVPs) 的主要成分。我们使用密度泛函微扰理论 (DFPT) 和准简谐近似 (QHA) 的方法计算得到了不同含水体系下布里奇曼石和后钙钛矿间的 P-T 相图, 结果表明与不含水体系相比, 当氢原子替换 Mg 空位或者 Si 空位, 将会分别造成相

基金项目: 国家自然科学基金项目(批准号: 41773057)

第一作者简介: 蒋佳俊(1992-), 男, 博士研究生, 研究方向: 地幔矿物的理论计算研究. E-mail: jiangjiajun@mial.gyig.ac.cn

*通信作者简介: 张飞武(1980-), 男, 研究员, 研究方向: 论地球化学和矿物物理计算. E-mail: zhangfeiwu@vip.gyig.ac.cn

变界面的降低或者升高。这很可能是 D''层横向厚度剧烈变化的原因之一。此外, 通过假设 D''层厚度是氢和铁含量的函数, 我们估算了下地幔底部的水储量可能会高达 0.36~0.82wt.%。氢这种挥发分的存在也许是下地幔底部强烈的横向化学不均一性的原因之一。