

## 专题20: 新型同位素体系的分析方法、示踪原理和重要应用

## 固体的间隙扩散同位素动力学效应: 理论和应用

李雪芳, 张一宁, 刘耘\*

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

随着高空间分辨率质谱仪的不断发展, 研究单矿物中同位素的分布已经成为热点。矿物在熔融、变质等热事件中, 同位素会发生差异性迁移, 导致同位素进一步重新分布。Hu 等用 NanoSIMS 分析了 GRV020090 火星陨石中磷灰石和含熔体中 H 同位素的分布(Hu et al., 2014), 发现从矿物边缘到核中心 H 和 D 同位素效应越来越明显, 结合水含量从边缘到核中心的变化, 最终得出水向矿物中扩散持续的时间。Xia 等发现地幔的 Cr 同位素组成并不均一, 并认为导致这些地幔岩 Cr 同位素变化的主要因素包括 Cr 同位素的扩散作用(Xia et al., 2017)。Parkinson 等(2007)研究发现, 在上地幔、接触性变质带和岩浆体系中 Li 同位素的分馏与 Li 在这些体系中的扩散有关。

虽然矿物颗粒尺度的同位素分布数据正在快速积累, 但是由于缺乏固体中同位素扩散的理论基础而没有得到很好的解释, 这严重影响了我们拟从更微观的尺度诠释同位素在一个动力学背景下的分布规律, 更好地解释地质体热演化历史。所以, 基于微观尺度的固体同位素动力学扩散效应的理论急需建立。

经典的关于固体中同位素扩散速率的研究(Schoen et al., 1958; Tharmalingam and Lidiard, 1959)总结了同位素效应受相关系数和耦合常数影响, 二者的乘积用来衡量同位素效应的大小(LeClaire, 1966)。通过仔细研究前人的文献, 我们发现其中存在较多的问题。所以无论从理论还是数据积累方面都有待我们进一步地挖掘和充实。

先从间隙扩散机制出发, 我们结合统计力学理论, 建立了统一的计算固体中扩散的动力学同位素效应的理论公式。该公式不含通常使用的几个近似处理, 能够极大提升计算的准确性。用基于该公式的计算可以得到众多同位素体系在几乎所有固体矿物中的同位素动力学效应, 以及和温度、压力的关系, 从而将扩散过程的热历史的讨论深化到分子级的层面。

本研究还用 He 在固体矿物中的扩散来显示了如何应用该理论公式。因为洋岛玄武岩高的  $^3\text{He}/^4\text{He}$  的比值, 通常被认为来源于比较深的地幔物质, 而且地核可能是 He 的一个 reservoir, 所以最近地球 He 的 budget 成为一个研究的热点(Roth et al., 2019)。因为在早期星子或者星胚在加积形成地球的过程中, 液态的金属和硅酸盐的不完全平衡将极大地影响 He 的 budget, Roth 等实验测试了 He 在液体的金属和固体的硅酸盐中的配分系数, 说明 He 在这样的过程中是一个中度亲铁的元素, 只要早期星子加积过程中有一小部分不平衡, 将会导致地核中含有大量的 He, 说明了玄武岩中高的  $^3\text{He}/^4\text{He}$  比值可能代表着地球形成之时所保存的陆相岩浆海洋中金属-硅酸盐不平衡的最后遗迹。这里我们用已经推导出的公式, 以 He 在橄榄石中的扩散为例, 计算了  $^3\text{He}$  和  $^4\text{He}$  的同位素效应。通过对数据的分析以限制地球中 He 的 budget。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(批准号: 41873024)

第一作者简介: 李雪芳(1980-), 女, 副研究员, 研究方向: 理论与计算地球化学研究. E-mail: lixuefang@mail.gyig.ac.cn

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