

专题8: 地球深部物质物理化学属性和深部过程

高温高压下水合矿物超离子态氢的第一性原理研究

何宇^{1,2*}, Duck Young Kim², Chris J. Pickard^{3,4},
Richard J. Needs⁵, 胡清扬², 毛河光²

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; 2. 北京高压科学中心, 上海 201203; 3. Department of Materials Science and Metallurgy, University of Cambridge, 27 Charles Babbage Road, Cambridge CB3 0Fs, United Kingdom; 4. Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University 2-1-1 Katahira, Aoba, Sendai, 980-8577, Japan; 5. Theory of Condensed Matter Group, Cavendish Laboratory, JJ Thomson Avenue, Cambridge CB3 0HE, United Kingdom

超离子态氢被理论和实验证明存在于高温高压下的冰中, 当冰处于超离子态时, 其质子有较高的扩散速率, 可以在晶格内自由迁移, 表现出类似于液体的性质, 然而冰中的氧原子的扩散速率很低, 只能在其晶格格点位置进行振动, 表现出固体的性质(Cavazzoni et al., 1999)。超离子态氢极大地改变了冰在高温高压下的电导率, 并可能对天王星和海王星内部的电导率和磁场产生影响, 因而冰的超离子态自发现以来引起了广泛的关注和研究。在地球内部, 氢主要是以水和矿物的形式存在, 但对于高温高压下水和矿物中氢的存在形式的研究目前还很少。通过第一性原理计算的方法, 我们以三种高密度水和矿物(py-FeO₂H, py-FeO₂H_{0.5}以及 δ -AlOOH为例), 在70~140GPa以及1500~3500K的温压范围内, 对其中氢的存在状态进行了研究。

研究发现, 上述三种矿物在高温高压下都存在超离子态, 但其转变为超离子态的温压范围有所不同, 其中py-FeO₂H和py-FeO₂H_{0.5}可以在下地幔的温压条件下转变为超离子态, 而 δ -AlOOH要在更高的温度下(核幔边界)才能转变成超离子态。在超离子态下, 上述矿物中的质子可以在晶格中自由迁移, 表现出较高的质子扩散系数和质子电导率, 而其他的离子只能在其晶格位置上振动。进一步计算表明, 在下地幔和核幔边界处的温压条件下, 超离子态氢的电导率可以达到100 S/m。我们的研究表明, 在含水矿物中, 氢从低压下的羟基形式(-OH)转变为高压下的对称性的O-H-O形式, 在高温高压下转变为超离子态。超离子态氢的存在将对下地幔以及核幔边界处的质子扩散系数、电导率、磁场产生影响。并且, 由于这种超离子态氢拥有类似液体的特性, 这将导致下地幔氢同位素的均匀分部。

基金项目: 自然科学基金面上基金(批准号: 41774101)

第一作者和通讯作者简介: 何宇(1985-), 男, 副研究员, 研究方向: 高温高压矿物性质的第一性原理研究. E-mail: heyu@mail.gyig.ac.cn