

地核温压下铁合金的超离子态转变及其对地震波速的影响

何宇^{1*} 孙士川¹ Duck Young Kim² Bo Gyu Jang² 李和平¹ 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 北京高压科学研究中心 上海 201203

地球内核是地球中最神秘的区域,地震学观测显示,地球内核密度比纯铁密度低,表示存在部分比铁轻的元素,其中 C, H, O, Si, S 被认为是最有可能存在于地球内核的轻元素 [1, 2]. 这些轻元素的存在将对地球内核物质的熔点、弹性、热导率等性质产生显著影响,因此研究地球内核轻元素的组成是内核研究的重要课题[3-5]。然而,前人很少关注这些轻元素的状态,因此,我们利用第一性原理分子动力学对六方密堆积铁 (hcp-Fe) 中轻元素在地核温压下的状态进行了计算研究 [6]。我们研究的轻元素包括 C、H、O、Si、S, 分别考虑其在间隙位和替代位的效应,我们模拟的压力为 250 至 400 GPa, 模拟温度为 2000 至 7000 K。我们模拟的时长达到 100 ps。并且我们还研究了这些 Fe 合金的熔点,已避免过热态对我们计算结果的影响。我们研究发现, H、O、C 可以在 hcp-Fe 的间隙位稳定存在,并且在温度超过 3000 K 时, H、O、C 离子可以在 hcp-Fe 晶格中发生显著的扩散现象,而 Fe 原子仍然在其格点位置上振动。这种现象也被称为超离子态转变,自由扩散的离子表现出流体的性质,可以对超离子态物质的电导率和弹性的性质产生显著影响 [7-9]。因此,我们进一步对超离子态 Fe-H、Fe-C 和 Fe-O 的弹性性质进行第一性原理分子动力学研究,并计算了其在地核温压下的地震波速。我们计算研究显示,超离子态转变导致了明显的弹性软化和波速降低,特别是明显的横波波速降低,使其与地球内核的观测结果非常接近,从而为地球内核特殊的波速特征(低横波波速高泊松比)提供了解释 [10, 11]。因此,地球内核很有可能处于超离子态而非我们通常认为的固态。

本研究由中科院先导专项 (No. XDB 18010401)、中国自然科学基金 (No. 41774101、42074104) 和 中科院青促会 (No. 2020394) 资助。

参考文献

- [1] Birch, F. Elasticity and constitution of the Earth's interior. *J. Geophys. Res.* 57, 227 - 286 (1952).
- [2] Li, J. & Fei, Y. Experimental constraints on core composition. In *Treatise on Geochemistry, Vol. 2: The Mantle and Core*, ed. RW Carlson, Amsterdam: Elsevier pp. 1 - 31 (2007).
- [3] Pozzo, M., Davies, C., Gubbins, D. & Alfè D. Thermal and electrical conductivity of iron at Earth's core conditions. *Nature* 485, 355, (2012).
- [4] Mao, Z. et al. Sound velocities of Fe and Fe-Si alloy in the Earth's core. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 109, 10239 - 44 (2012).
- [5] Mashino, I. et al. Melting experiments on the Fe-C binary system up to 255 GPa: Constraints on the carbon content in the Earth's core. *Earth Planet. Sci. Lett.* 515, 135-144 (2019).
- [6] He, Y., Sun, S., Kim, D. Y., Li, H., Mao, H.-k. Superionic hcp-Fe alloys and their seismic velocities in Earth's inner core. *Research Square* (2020) DOI: 10.21203/rs.3.rs-108794/v1.
- [7] Hou, M., He, Y. et al., Superionic iron oxide-hydroxide in Earth's deep mantle. *Nat. Geosci.* 14, 174-178 (2020).

[8] Sun, S., He, Y., Kim, D. Y., Li, H. Anomalous elastic properties of superionic ice. *Phy. Rev. B* 102, 104108 (2020).

[9] He, Y., Sun, S., Li, H. Ab initio molecular dynamics investigation of the elastic properties of superionic Li₂O under high temperature and pressure. *Phy. Rev. B* 103, 174105 (2021).

[10] Dziewonski, A. M. & Anderson, D. L. Preliminary reference Earth model. *Phys. Earth Planet. Inter.* 25, 297 - 356 (1981).

[11] Tkalčić, H. & Pham, T.-S. Shear properties of Earth's inner core constrained by a detection of J waves in global correlation wavefield. *Science* 362, 329 (2018).