



# 中国矿物岩石地球化学学会

CHINESE SOCIETY FOR MINERALOGY PETROLOGY AND GEOCHEMISTRY

请输入关键字

[首页](#) (</>)>[学术交流](#) (</>)>[成果进展](#) (</>)

## 学术交流

> [会议计划](#) (</>/hyjh/)

> [会议通知](#)  
(</>/hytz\_134984/)

> [会议纪要](#) (</>/hyjy2017/)

> [成果进展](#) (</>)

## 中科院地化所：Br同位素分馏的第一性原理计算研究进展

发布时间：2021-04-21 | [【打印】](#) [【关闭】](#)

卤族元素主要存在于海水及盐类矿物当中，其同位素分馏已经被广泛应用于古海洋及古气候等研究中。Br是第三周期的卤族元素，主要存在于现代海水、卤水以及以类质同象形式替代Cl进入盐类矿物。由于Br在自然样品中含量较低，早期的同位素研究工作很少。

近年来，随着分析测试技术的发展，Br同位素的研究工作在逐年增加。研究者们发现自然样品中 $\delta^{81}\text{Br}$ 的变化范围明显偏大（ $\sim 4.15\text{‰}$ ），甚至在一些样品当中其同位素变化范围还大于同样品中 $\delta^{37}\text{Cl}$ 的变化范围。然而，根据同位素的质量分馏理论，同位素质量差较大的Cl同位素体系（5.71%）应该比质量差较小的Br同位素体系（2.53%）的同位素变化范围更大。已有的实验以及样品观测工作都无法解释这个观测事实。



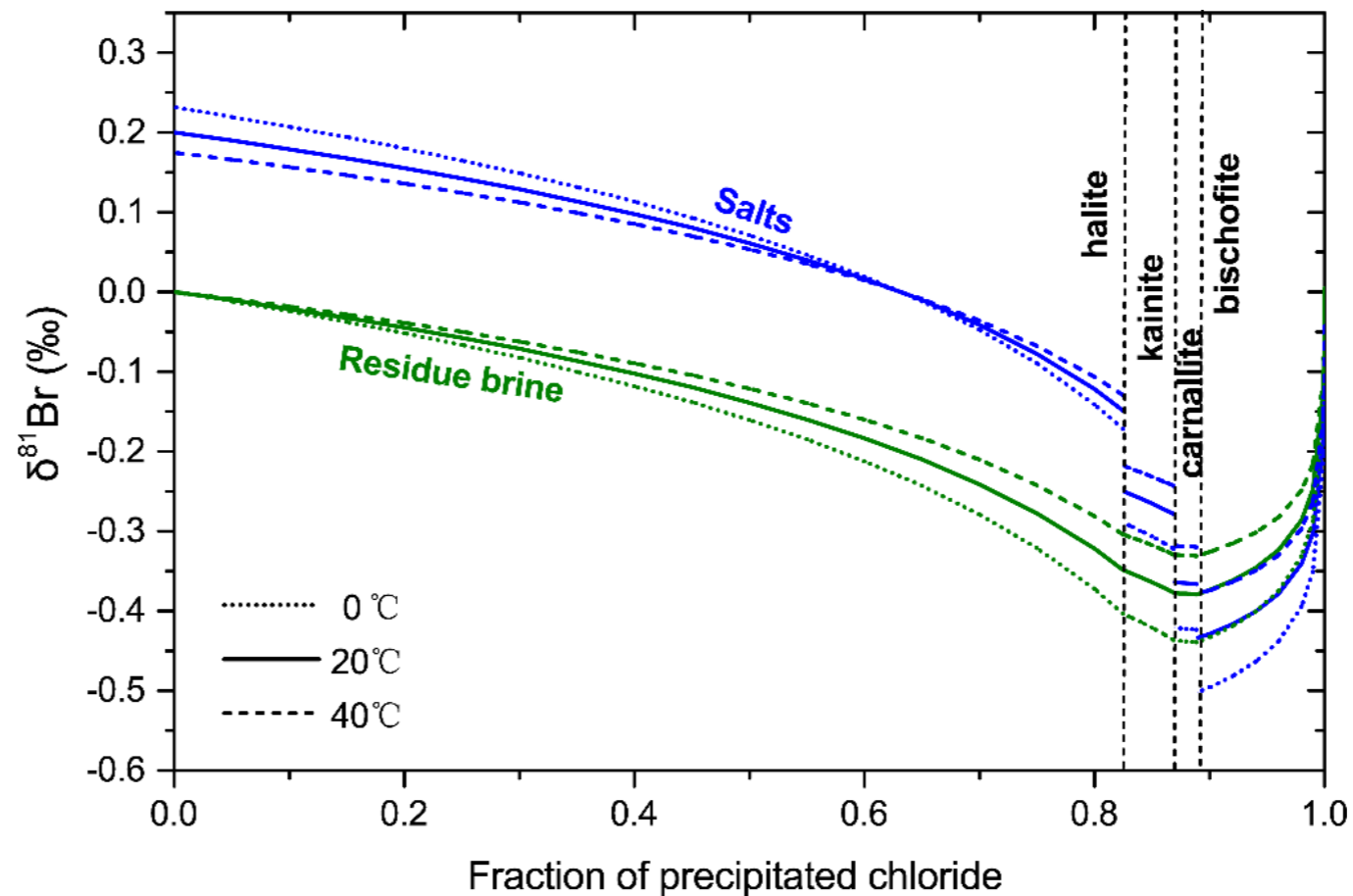


图1 盐类矿物结晶过程中矿物及剩余海水的Br同位素组成变化情况。盐类矿物结晶过程主要分为四个阶段，在图中以竖虚线划分

中国科学院地球化学研究所刘耘研究员团队利用第一性原理的计算方法预测了一系列含Br矿物、溶液以及分子间的Br同位素分馏，结果显示盐类矿物在结晶过程当中是存在Br同位素分馏的（比如20°C下 $\delta^{81}\text{Br}(\text{Br-halite}-\text{NaBr}(\text{aq})) = 0.200 \text{ ‰} \pm 0.041 \text{ ‰}$ ），并且其同位素分馏大小与矿物中Br/Cl比值存在相关性。为了探究盐类矿物结晶过程中的同位素分馏，他们利用瑞利模型模拟了盐类矿物结晶过程中的Br同位素变化（图1），结果显示盐类矿物结晶过程中的Br同位素变化范围不超过1.0‰，这仍无法解释前人样品中观测到的Br同位素变化范围，证明偏重的Br同位素变化不是由矿物结晶过程造成，而可能与别的过程相关。基于此，他们计算了不同氧化还原态下的Br物质的 $\delta^{81}\text{Br}$ 分馏系数（即 $\beta$ 值）（图2）。他们发现Br氧化还原态的变化对同位素分馏有着显著影响。同一氧化态的物质间Br同位素的分馏不超过1.0‰，然而，不同氧化态物质间同位素的分馏可高达11‰！由此，他们推测前人样品中观测到的Br同位素的大变化范围是与氧化还原状态变化过程相关。在海水中，由于Br-相对Cl-更容易被氧化，所以在一定的条件下，Br被氧化得更多，而Cl被氧化得较少，从而造成 $\delta^{81}\text{Br}$ 变化范围明显偏大，甚至大于大多数自然界得Cl同位素的变化范围。



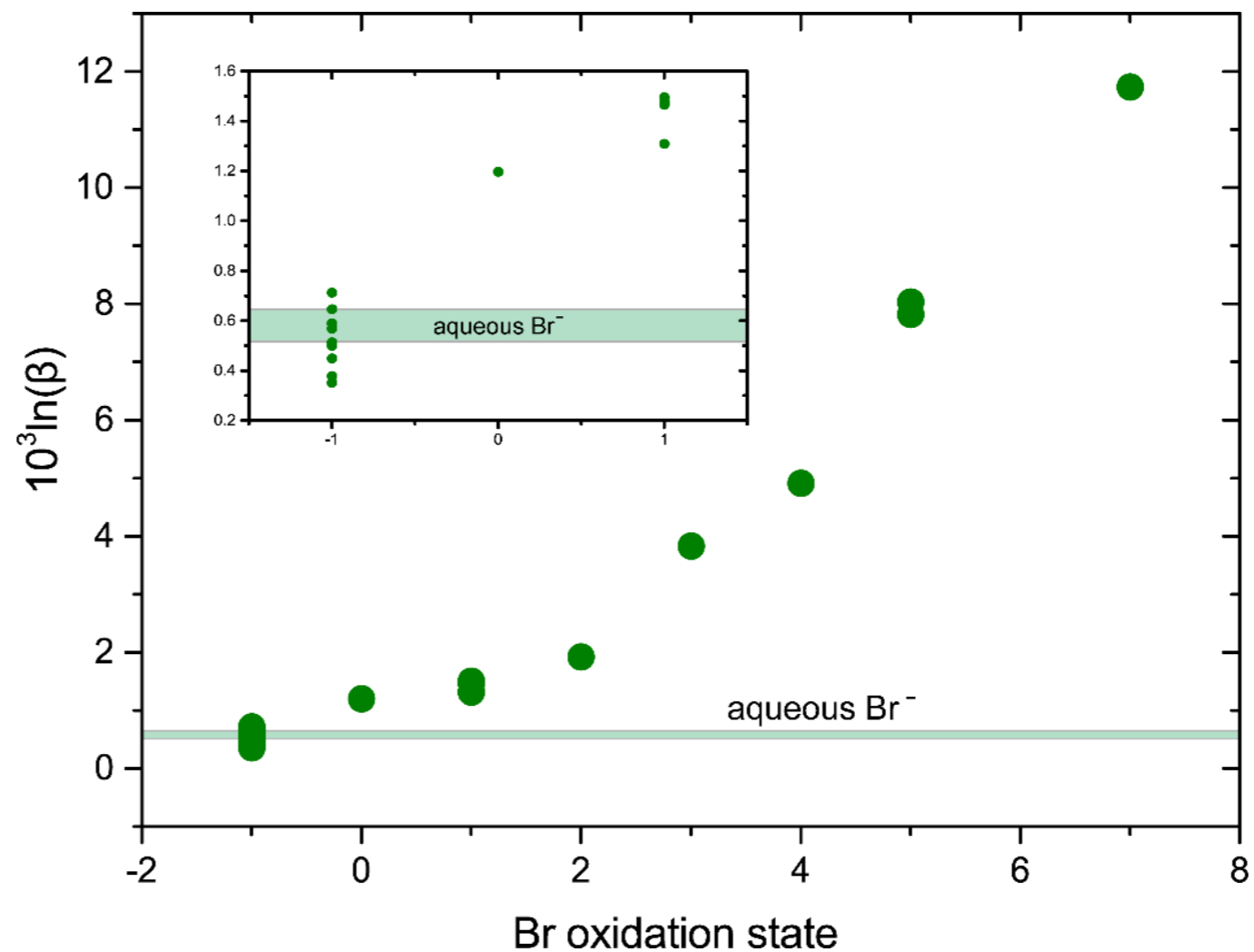


图2 不同氧化态含Br物质的 $\beta$ 值。 $\beta$ 值越大，代表越容易富集重的同位素。两种物质间同位素分馏可通过对比其 $\beta$ 值获得。图中内嵌图为低氧化态部分的放大图

该研究工作发表在国际期刊*Geochimica et Cosmochimica Acta*上，该研究受到中国科学院战略性先导科技专项 (XDB18010100, XDB41000000) 及国家自然科学基金的共同资助。

论文信息: Gao Caihong, Liu Yun, First-principles calculations of equilibrium bromine isotope fractionations, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2021, 297, 65-81, <https://doi.org/10.1016/j.gca.2021.01.010>



(<http://www.cas.cn/>)

版权所有 © 中国矿物岩石地球化学学会 备案号: 黔ICP备07002071号 (<https://beian.miit.gov.cn/>)

([https://www.cnzz.com/stat/website.php?web\\_id=1278519410](https://www.cnzz.com/stat/website.php?web_id=1278519410))

地址: 贵州省贵阳市观山湖区林城西路99号 邮编: 550002 电话: 0851-85895849



Email: [csmpg@vip.skleg.cn](mailto:csmpg@vip.skleg.cn) (mailto:csmpg@vip.skleg.cn)

 贵公网安备 52011502000706号 (<http://www.beian.gov.cn/portal/registerSystemInfo?recordcode=52011502000706>) 技

术支持: 青云软件 (<http://www.qysoft.cn/>)

