



您现在的位置: 首页 > 新闻动态 > 学术前沿

新闻动态

- 图片新闻
- 头条新闻
- 通知公告
- 学术活动
- 综合新闻
- 科研动态
- 研究亮点
- 学术前沿

## NG: 地核可能是地球内部最大的氢储库

2020-10-30 | 【大 中 小】 【打印】 【关闭】

地球内部水/氢的含量和分布一直都是备受关注但又富有争议的科学问题。最近的一些研究提出地球在演化早期就从星云中获得了大量的氢,并且在核幔分异过程中,这些氢可能会进入地核(Wu et al., 2018),前提是氢在高温高压条件下具有亲铁性。近两年的实验研究表明低温低压下( $\sim 2000$  K, 5-20 GPa)氢主要呈现亲石性(Clesi et al., 2018; Malavergne et al., 2019),但是在核幔边界条件下(4000-5000 K, 136 GPa)氢在金属核和硅酸盐地幔之间的分配关系还缺少可靠的约束。

近日,伦敦大学的John P. Brodholt教授团队通过第一性原理分子动力学模拟预测了20-135 GPa和2800-5000 K下氢在铁和硅酸盐熔体之间的分配系数,结果表明在高温高压下氢具有明显的亲铁性,即在核幔分异过程中氢更倾向于进入地核,因此地核很有可能是一个大型的氢储库。相关成果发表在*Nature Geoscience*上(Li Y et al., 2020)。

前人的研究表明氢在铁和硅酸盐熔体中的分配系数受到温度、压力以及氧逸度的影响(Kuramoto et al, 1996; Okuchi et al, 1997; Clesi et al., 2018; Malavergne et al., 2019)。因此,作者考虑了两种端元组分:  $P_{H_2}/P_{H_2+H_2O} = 1$  和  $P_{H_2O}/P_{H_2+H_2O} = 1$  (相当于实验中在铁和硅酸盐体系中加入纯 $H_2$ 和 $H_2O$ ),分别代表还原和氧化条件。他们通过第一性原理分子动力学模拟计算自由能的方法,计算了不同温压条件下H和 $H_2O$ 在铁和硅酸盐熔体之间的分配系数(图1),结果发现还原条件下(图1a)氢具有明显的亲铁性,而代表氧化条件(图1b)的 $H_2O$ 虽然在20 GPa和2800 K下是亲石的,但随着温度和压力的升高, $H_2O$ 也会表现出亲铁性。此外,他们还通过模拟相边界经验计数的方法(图2)在50 GPa和3500 K下直接获得了铁和硅酸盐熔体之间H的分配系数为 $3.1 \pm 0.3$ ,也表明高温高压条件下氢具有亲铁性。

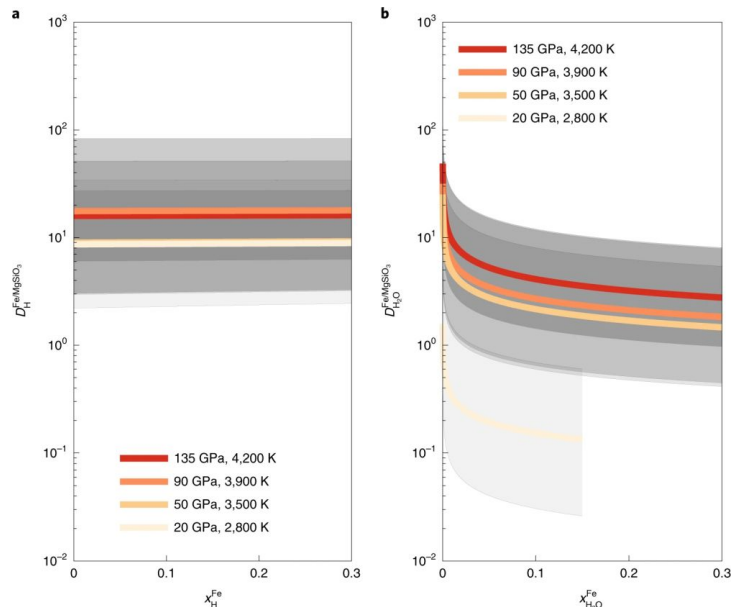


图1 不同温压条件下H (a)和 $H_2O$  (b)在铁和硅酸盐熔体之间的分配系数,横坐标是H (a)和 $H_2O$  (b)在铁中的摩尔浓度,阴影区域代表不确定度

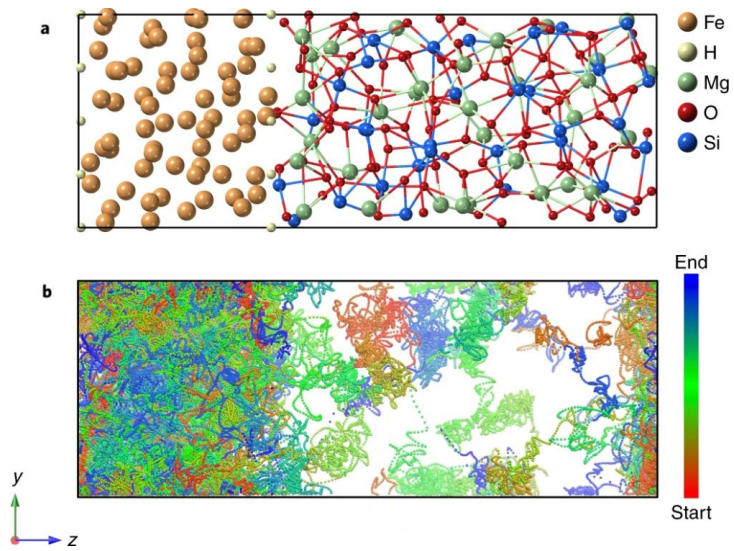


图2 经验计数法估算H的分配系数。(a) 第一性原理分析动力学模拟的初始构型，12个H原子分布在64个铁原子(左)和32个MgSiO<sub>3</sub>分子(右)的界面处，模拟过程中铁和硅酸盐都是熔体状态；(b) 模拟过程中12个氢原子的运动轨迹

综合前人的实验和计算数据分析(图3)，该文认为在还原条件下氢在铁和硅酸盐熔体之间的分配系数受温度和压力的影响不大，始终都具有明显的亲铁性；而代表氧化条件的H<sub>2</sub>O的分配系数在20-50 GPa之间受压力的影响很大，前人在氧化条件下的实验数据(Clesi et al., 2018; Malavergne et al., 2019)主要集中在5-20 GPa之间，同样也显示H的分配系数随着压力的升高而增大，在20 GPa左右氢会由亲石转变为亲铁。因此，作者推断不管是还原条件还是氧化条件，核幔分异过程中地球上超过76%的氢都会分配进地核中，也就是说地核至少会含有5个大洋水(一个大洋水 $\approx 1.5 \times 10^{21}$  kg)。依据图3，在当前核幔边界条件下，氢表现出明显的亲铁性，由此作者认为地幔深部的异常区域(例如超低速带和大型低剪切波速省)都应该是相对“干燥”的。

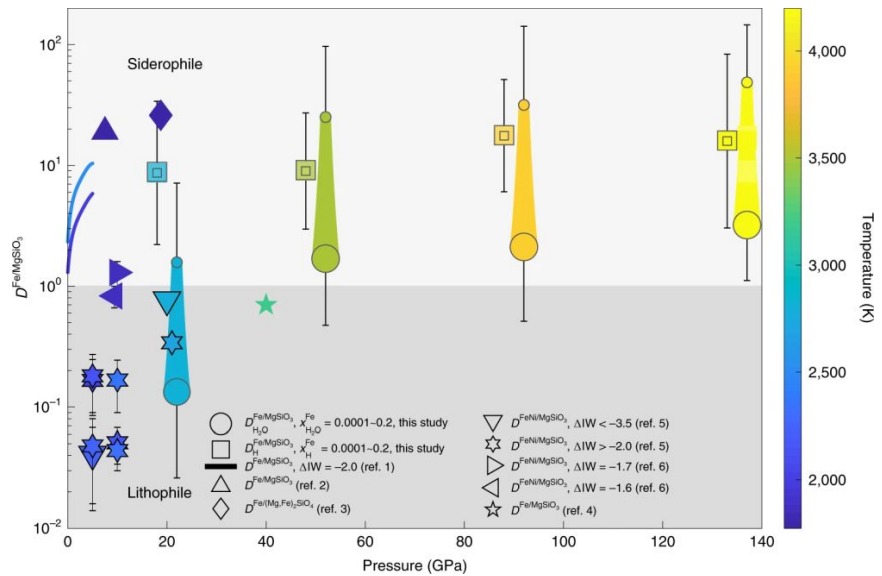


图3 不同温压条件下H和H<sub>2</sub>O在铁和硅酸盐熔体之间的分配系数与前人实验和计算结果的对比

对于地核是否是氢/水的储库这一问题，其实仍然有争议和变数。除了氢元素，地核中还可能会有硅、硫、氧和碳等轻元素，这些轻元素之间也会相互影响。其实，该论文本身就报道了铁熔体中O和H都倾向于与Fe成键，O和H之间存在竞争关系；结合他们分配系数的结果来看，O会减弱H的亲铁性，也就是说地核中氧的含量会影响氢的分配系数。地核中其它轻元素(Si、S、C等)，对H分配系数的影响和制约，目前的认识几乎还是空白，这将是未来更多高温高压实验与第一性原理模拟研究关注的重点。

【致谢：感谢地星室张驰副研究员的宝贵修改建议。】

#### 主要参考文献

Clesi V, et al. Low hydrogen contents in the cores of terrestrial planets[J]. *Science Advance*, 2018, 4(3), e1701876. (链接)

Kuramoto K. Partitioning of H and C between the mantle and core during the core formation in the Earth: its implications for the atmospheric evolution and redox state

of early mantle[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 1996, 101: 14909-14932. (链接)

Li Y, Vocadlo L, Sun T, et al. The Earth's core as a reservoir of water[J]. *Nature Geoscience*, 2020, 13(6): 453-458. (链接)

Malavergne V, et al. Experimental constraints on the fate of H and C during planetary core-mantle differentiation. Implications for the Earth[J]. *Icarus*, 2019, 321: 473-485. (链接)

Okuchi T. Hydrogen Partitioning into Molten Iron at High Pressure: Implications for Earth's Core[J]. *Science*, 1997, 278(5344): 1781-1784. (链接)

Wu J, Desch S J, Schaefer L, et al. Origin of Earth's water: chondritic inheritance plus nebular ingassing and storage of hydrogen in the core[J]. *Journal of Geophysical Research: Planets*, 2018, 123(10): 2691-2712. (链接)

(撰稿: 张志明, 张志刚/地星室)



地址: 北京市朝阳区北土城西路19号 邮编:100029 电话: 010-82998001 传真: 010-62010846  
版权所有© 2009-2021 中国科学院地质与地球物理研究所 京ICP备05029136号 京公网安备110402500032号

