



中国地震局地震预测研究所基本科研业务费，
国家自然科学基金和地震科学基金资助

从原子到地球

——高压地球科学研究进展

杜建国 谢鸿森 主编



地震出版社

中国地震局地震预测研究所基本科研业务费，
国家自然科学基金和地震科学基金资助

从原子到地球

——高压地球科学研究进展

杜建国 谢鸿森 主编

地震出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

从原子到地球——高压地球科学研究进展/杜建国, 谢鸿森主编. —北京: 地震出版社, 2007. 12

ISBN 978 - 7 - 5028 - 3271 - 1

I. 从… II. ①杜…②谢… III. 地球科学 - 研究 IV. P

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2007) 第 168498 号

地震版 XT200700282

从原子到地球——高压地球科学研究进展

杜建国 谢鸿森 主编

责任编辑: 张友联

责任校对: 庞娅萍

出版发行: 地震出版社

北京民族学院南路9号

邮编: 100081

发行部: 68423031 68467993

传真: 88421706

门市部: 68467991

传真: 68467991

总编室: 68462709 68423029

传真: 68467972

E-mail: seis@ht.rol.cn.net

经销: 全国各地新华书店

印刷: 北京市顺义富各庄福利印刷厂

版(印)次: 2007年11月第一版 2007年11月第一次印刷

开本: 787×1092 1/16

字数: 368千字

印张: 14.375

印数: 0001~1000

书号: ISBN 978 - 7 - 5028 - 3271 - 1/P · 1351 (3940)

定价: 35.00元

版权所有 翻印必究

(图书出现印装问题, 本社负责调换)

《从原子到地球——高压地球科学研究进展》编委会

主 编：杜建国 谢鸿森

编 委：杜建国 龚自正 李和平 宋茂双

孙 檣 谢鸿森 赵志丹 周文戈

前 言

2007年11月,中国地震局地震预测研究所、中国空间技术研究院、中国科学院地球化学研究所、中国科学院广州地球化学研究所、中国地质大学(北京)和北京大学地球空间科学学院在北京主办了“从原子到地球——高压地球科学学术研讨会”。利用高温高压实验和原位测量技术和多尺度(微观到宏观)模拟方法,研究地球内部物理化学特征是本次会议讨论的主题。近年来高压地球科学引起了学术界的重视。2005年,《地学前缘》出版了“深部地球物质科学与高温高压实验技术”的专集(第12卷第1期),报道了利用静高压和动高压实验和原位测量技术研究地球深部物质和行星方面的成果。2005年12月,中国地震局地震预测研究所召开了“从原子到地球学术研讨会”,重点讨论了从微观到宏观(从分子到地球)多尺度模拟研究地球深部物质运动,尤其是如何利用分子动力学模拟方法研究孕震介质的演化。最近,美国科学院学报出版了高压地球科学(High-Pressure Geoscience)专集(PNAS, 2007, Vol. 104, No. 22),汇集了16篇高压地球科学特写(Special Feature),报道了利用高温高压实验技术和天然高压矿物研究地球深部的新成果。

本书为从原子到地球学术研讨会的论文集锦,涵盖三个方面的内容:①高压地球科学实验研究及其应用;②地球深部物质的分子动力学模拟研究;③高温高压下水-岩反应在地震、油气和环境科学中的研究进展及应用。概括了分子动力学模拟-高压地球科学研究方面的研究成果和新进展。

温度、压力、时间和化学成分是决定物质状态的要素。在较低的压力下,温度、化学成分和时间对体系的影响是非常重要的,压力的作用有时显得并非突出。压力可以改变物质的原子间距,引发一系列结构与性质的重大变化。目前广泛采用的高压实验装置主要包括:①活塞-圆筒高压装置(PCA),产生的压力可以达到4 GPa;②多顶砧高压装置(MAA),采用碳化钨压砧产生的压力可以达到28 GPa,采用烧结金刚石二级压砧可以达到75 GPa;③金刚石压腔(DAC)产生的压力可以达到550 GPa;④动高压装置,用二级轻气炮或化爆加载方法驱动可以在靶区产生的高压约为0.5~1.0 TPa,强激光驱动技术产生的高压可以达到10 TPa。在极端高的温压条件下,压力会引发物质发生意想不到的物理化学变化,即在一般温压下观测不到的物质的结构、弹性、电性、磁性转变和矿物成分变化等。高压变量的充分开拓在地球和行星科学以及其他领域的科学探索中增加了一个新的变维。

数字模拟和实验可以互补。从原子到地球,从分子动力学到地球动力学是

认识地球物质运动的新观念，即从微观、介观到宏观多尺度研究地球运动过程和物质演化。利用分子动力学模拟可以了解矿物和单相体系在不同温压条件下的物理化学变化。地球动力学和地震学模型的分析表明，地幔 D" 层复杂多变可能是矿物的固-固相变将引起的，该相变的 Clapeyron 斜率约为 6 MPa/K。用激光加热金刚石压腔技术对 MgSiO_3 的研究发现，在接近地核的下地幔温压条件下 (125 GPa, 2500 K)， MgSiO_3 由钙钛矿结构转变成后钙钛矿结构。同时，在 (20 ~ 160) GPa 内，对优化钙钛矿和 CaIrO_3 结构的 MgSiO_3 后钙钛矿相的分子动力学模拟计算的结果，从理论上证明了后钙钛矿相存在的可能性。有限元方法的最大优点是能够将复杂介质的力学性质的本构关系及边界条件问题，转化成为常规问题的计算。有限元数值模拟可以了解一些介观和宏观尺度的物质物理化学过程，因此被广泛地用于岩石结构（矿物之间相互接触关系）、地下水系统、块体运动、壳幔运动的动力学以及地震孕育等方面的研究中。但是，跨尺度的模拟仍是数值模拟科学方面待解决的难题。

“从原子到地球——高压地球科学学术研讨会”喜逢谢鸿森教授七十诞辰。自 20 世纪 70 年代初，谢教授一直在探究地球深部的秘密，为高压地球科学的发展呕心沥血，做出了卓越的贡献。他在中国科学院地球化学研究所组建了地球深部物质科学实验室，在静高压大腔体装置上建成了弹性、电性和热学等原位物性测量技术，并开展了地球深部物质研究。谢教授在国内外科学期刊上发表论文近 300 篇。他著的《地球深部物质科学导论》是高压地球科学发展史上的里程碑。谢教授主持完成的“地球深部物质研究”，“静态超高压大腔体实验技术研究”，“中国东南岩石圈的结构、组成与演化”，“地球深部物质的实验研究”等成果获得了多项省部级奖和国家科学技术进步三等奖。2006 年 5 月，经福谦院士与谢鸿森教授负责完成了“地球内部几个重要界面物质的高温高压物性研究”国家自然科学基金重大项目，发表 SCI 收录的文章百余篇，该项目的完成情况被国家自然科学基金委组织的专家评审为特优，在高压地球科学方面又立了丰碑。令人敬佩的是谢教授为探究地球的奥秘仍在继续孜孜不倦、兢兢业业地工作着。他的科学精神值得我们崇尚和发扬，在此向他表示最美好的祝福！

杜建国 龚自正

2007.11 于北京

目 录

地球深部物质研究的必由之路

- 高压科学与技术研究的某些进展与展望 谢鸿森 侯 渭 (1)
- 黑云斜长片麻岩-榴辉岩相变过程的结构变化
..... 周文戈 刘永刚 蒋 玺 范大伟 万 方 谢鸿森 (10)
- 华北地台太行-五台地块地壳岩石 3 GPa 下纵波速度实验研究
- 兼论实验数据质量评价
..... 赵志丹 谢鸿森 周文戈 郭 捷 高 山 骆庭川 (16)
- 我国动高压物理应用于地幔矿物研究的若干近期进展
..... 龚自正 谢鸿森 Yingwei Fei (28)
- 140 GPa 冲击压力下 ($\text{Mg}_{0.92}$, $\text{Fe}_{0.08}$) SiO_3 钙钛矿的声速及其地球物理意义
..... 杨金科 龚自正 何 林 (77)
- 从 (变质) 玄武岩类的熔融实验看中酸性岩浆的形成
..... 万 方 周文戈 姜 能 刘永刚 范大伟 谢鸿森 (85)
- 静高压 0~3 GPa 下 α -Fe 横、纵波波速的就位测量研究
..... 刘永刚 毕 延 王志刚 宋 伟 周文戈 谢鸿森 (92)
- 超高压对沉积有机质演化的影响 王传远 杜建国 (98)
- 高温高压下黑云斜长片麻岩电导率的实验研究 黄晓葛 白武明 周文戈 (111)
- The Effects of Pressure on Water Structure at Ambient Temperature;
Anomalous Viscosity Study Qiang Sun (120)
- Compressional Wave Velocity and Attenuation in Dunite to 1240°C at 1.0 GPa
..... Wei Liu Jianguo Du LiPing Bai WenGe Zhou Jie Guo Hongsen Xie (127)
- 石榴石中稀土元素扩散系数的计算 苏根利 李和平 谢鸿森 (133)
- 俯冲带沉积物变质脱水深度的热力学计算和高压差热实验研究 李 营 (138)
- 烧结金刚石压砧在高温高压实验研究中的应用 翟双猛 (144)
- 金刚石压腔 (DAC) 外加温装置与技术
..... 马麦宁 周文戈 刘 景 谢鸿森 孙 楠 郑海飞 杜建国 (152)
- Application of Gibbs Phase Rule to Thermodynamically Sufficient Gas Hydrate Models

in Geological Environments	Xiangyang Wu Wenyue Xu (157)
非静水压下地球内部的状态方程	王新华 白武明 (163)
天然镁橄榄石热状态方程研究	
范大伟 周文戈 刘丛强 刘永刚 蒋 玺 万 方 刘 景 白利刚 谢鸿森 (174)	
基于准简谐 Debye 模型下的 MgSiO_3 钙钛矿高温高压特性的第一性原理研究.....	
..... 吴 迪 赵纪军 姬广富 龚自正 郭永新 (180)	
金属铝在高压下的状态方程和声速的第一性原理模拟研究	
..... 姬广富 张艳丽 李晓凤 赵 峰 孟川民 宋振飞 (190)	
第一性原理在地震地质和高压矿物研究中的应用	
..... 刘 红 杜建国 赵纪军 刘 雷 龚自正 (198)	
流体对岩石变形与破坏影响的有限元模拟研究现状	
..... 陈玉香 杜建国 刘 红 刘 雷 (209)	
利用 ECOSAT 模拟研究农田土中重金属活动性	易 丽 王多君 (216)

地球深部物质研究的必由之路*

——高压科学与技术研究的某些进展与展望

谢鸿森 侯 渭

1. 开展地球科学的高压实验研究的必要性

近十多年来,全球性地球物理探测的普遍开展,特别是在地震学基础上发展起来的地震层析成像技术的广泛使用,获得了大量有关地球深部结构和动力学的资料和图像,并由此对许多重大的地球深部科学问题,诸如,热点火山岩与地幔热柱的关系、地幔上升流的分布、俯冲大洋板块的最终归宿、地幔底层的结构和性质等做出了推断。这些研究成果的取得标志着地球科学已经进入了一个对地球深部认识日趋成熟的新阶段。然而,我们也清醒地认识到,在目前还不可能进入地球深部进行取样和直接观测的条件下,要进一步了解地球深部物质的性质和状态,必须在开展全球性地球物理探测以及全球性构造、岩石和地球化学研究的同时,加强地球科学的高压实验研究,以便获得地球深部高温高压条件下地球物质的成分和物性数据,并以此为依据对地球深部探测结果进行物质的解释,进而对地球内部各种物理场的图像进行物质组成与结构的反演,最终获得对地球深部结构、物质组成和动力学特征的全面认识(谢鸿森,1992)。

大量的地球物理和地质观测表明,地球内部是一个复杂的高温高压体系,从地表的常温常压可连续过渡到地核的极端高压(地核的中心压力约360 GPa)和高温(地核温度约5000℃)状态。发生在地球表面的地质、地球物理和地球化学等事件,都与地球深部物质的性质、状态以及由此诱发的物质运动和能量的传输密切相关。因此,现代地球科学许多重大科学问题的解决,如元素的超常富集与超大型矿床的形成;板块的运动机制;火山和地震的孕发;岩石圈内不连续界面的性质;软流层的产生与性质;核幔边界的D'层与地幔热柱成因等,都需要相应的高温高压下地球深部物质的性质和状态的实验数据为依据。因此,高压地学的实验研究既是我们探索地球深部的必由之路,也是解决现代地球科学问题的重要研究手段。

2. 高压地学研究的新形势

2.1 高压科学等相关学科的兴起和发展所带来的启示

压力作为热力学的基本参数,其主要作用是改变物质的原子间距,引发一系列结构与性质的重大变化乃至突变。众所周知,压力、温度和化学成分同为决定物质的三大要素。然而长期以来,受高压技术的局限,压力对各物质学科的研究只起到了微调的作用。目前静高压技术的突破使实验室里产生的高压达到500 GPa以上(Xu et al., 1986),这样大的压力足

* 国家重点基础研究发展计划项目(No. 2005CB724400);中国科学院知识创新工程重要方向项目(KJ CX2-SW-N20);国家自然科学基金项目(40574036)。

以对物质产生普遍而根本的影响。所有物质在高压下都发生了极丰富而意想不到的变化，因此，也形成了一门新的学科——高压科学（引自：中国科学院外籍院士毛河光 2000 年来华讲学的报告）。

高压能够引起所有物质内能的增加和体积的变化。研究表明，从常压增高到 100 万个大气压时，物质的原子或分子间距会发生 10%~15% 的变化，使物质产生 3~5 个新相。从某种意义上讲，高压研究获得的成果进一步丰富了化学元素周期表的内容。高压下原子或分子间距的改变将引起物质的物理和化学性质的变化，乃至突变。如常压下化学性质不活泼的惰性元素在高压下能结合成化合物；常压下的绝缘体在高压下能成为导体；常压下的晶体在高压下可能转变为非晶态等。地幔矿物的高压实验资料表明，在高温高压下所有硅氧四面体均变成八面体，从而形成了一整套新的地幔矿物学。构成生命体的有机碳化物的六角碳环及氢键，在高压下均变成了碳四面体及离子键，从而形成新的有机化学。构成天体的主要组分的氢、氧、氮等轻元素在星球内部的巨大压力下，将以目前我们未知的状态存在。在高温高压极端条件下对物质的物理和化学性质进行研究，已成为当代物质科学创新的重要领域。超过地心压力的实现、原位观察方法的建立、微区集成测量手段的完善等新技术发展对高压科学的强反馈，使得当前高压科学处于新突破的前夜。

此外，研究表明，在高温高压下，处于超临界状态水和 CO_2 等流体，具有许多新奇的物理和化学性质。比如，在地幔高温高压条件下的水能使常温常压下化学惰性的铜、金、铂等发生溶解，能将难降解的有机质和剧毒物质发生降解，成为无毒的液体或气体。从而开创了高压化学和冶金学的新领域。超临界流体不仅在地球深部物质的演化、成岩成矿过程中起重要作用，而且已广泛应用于材料科学、工业生产和环境治理等方面。

上述情况表明，高压科学等相关学科的形成和发展，已经和将要出现了许多前所未闻的新现象、新性质、新效应和新规律，它将是物理学、化学、生物学和地球科学等学科原始创新的一个重要源头。高压科学的发展将推动着整体科学的进步，是物质科学重要的科学创新领域。近几十年来，高压实验技术在地球科学上的应用，已经使地球科学家们认识到，在地球内部的超高压状态下，地球物质内部原子间距离将发生改变、并增加相邻电子轨道的重叠、改变电子自旋，进而改变物质的结构、电子状态和性质。也更加体会到开展地球物质的高压实验是深入认识地球深部物质结构、性质及其变化规律的有效途径。事实上，随着高压实验技术的进步和在地学中的应用，在地球科学领域也已经逐步形成了一些与高压科学密切相关的新的分支学科，如高压矿物物理学、高压岩石学、高压岩石力学、实验地球化学、实验地球物理学、地球深部流体科学等等。这些分支学科的综合就形成了一个新的边缘学科——高压地球物质科学或称为地球深部物质科学（谢鸿森等，1997）。因而，在当前地球科学逐步向地球深部发展的新形势下模拟地球深部的高温高压条件下，对地球物质的物理性质和状态进行实验研究，是地球物质科学发展的重要方向。

2.2 应用于地球科学研究的高压技术及其进展

高压技术分为动高压和静高压技术。动高压技术依照其加载能源的不同而形成了多种技术，各种技术达到的压强范围及其持续时间也不同。强激光驱动技术产生的瞬态高压可以达到 10 TPa 量级，但其形成的高压持续时间很短（约 1~10 ns）。用二级轻气炮或化爆加载方法驱动弹丸高速撞击靶（样品）材料，可以在靶区产生约 0.5~1.0 TPa 的高压强，但高压状态维持的时间较长（一般为 0.1~1.0 s），因而可以采用尺寸较大（约为 $\phi 30 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ ）的实

验样品,加之配有精密的测量和诊断设备,故数据测量精度高,已成研究地球和行星物质科学中的一种重要的高压技术(毕延、经福谦,2005)。

静态高压实验技术目前已发展为相互补充、各有所长的两大系列——金刚石压腔(DAC)和碳化硅压腔(MAC)对顶砧体系及大腔体压机组成的实验技术体系。金刚石压腔技术获得过550 GPa的压力,超过了地心物质的压力。近年来在DAC装置上发展了激光加热和外加热技术,利用高功率红外激光器,经过聚焦后照射DAC中的样品,可以获得高至4000 K以上的温度(刘景等,2005;肖万生等,2005)。近期在北京正负电子国家实验室附属的北京同步辐射装置上,建立了高压激光加热系统,已经具有在高压同时高温条件下进行晶体结构研究的能力。在2.0 GPa高压下获得了石墨的熔融温度。由于激光加温在1000 K以下,温度测量上还存在一定的技术问题,因此发展了电阻加热原理的外加温技术。中国科学院地球化学研究所在MAC装置上建立了外加热和超声测量系统,获得室温到1000 K之间的温度条件,并在MAC装置利用超声脉冲回波频谱分析法在10 GPa高压下获得了超声脉冲回波信号。吉林大学建立了激光加温的高温高压拉曼光谱和高温高压布里渊(Brillouin)散射光谱实验系统(Zhou et al., 2004; Li et al., 2006)利用薄膜制备和光刻等技术,在金刚石压砧上集成测量电路,发展了百万大气压下电学性质测量实验技术(Gao et al., 2005),并开展了一些研究工作(Li et al., 2007; He et al., 2007)。高压下电子会经历局域化——非局域化的转变,也能从非关联到强关联。高压下原子电子间的各种相互作用交织在一起,产生众多新的现象和新的规律。高压下物质电输运性质的研究,能直接获得原子间的原子内部不同轨道电子间的相互作用规律和特点,是发展电输运理论的重要方法。与此同时,还发展了DAC和MAC压腔与同步辐射和中子散射光源相结合的技术,能在超高压条件下对物质结构和性质直接进行原位、微区、精密的测量,结合高压理论,能够深入研究高压下决定物质行为的电子状态和微观相互作用的本质特征。并广泛应用于深部地幔、地核的矿物成分、相变、物性参数及地幔物质化学反应的研究,加深了人们对地球深部,特别是下地幔和地核的认识。

大体积压机与金刚石对顶砧相辅相成,都是高压研究中不可或缺的重要技术。虽然大体积压机在实验的温压范围上较金刚石压砧为小,但它具有更加均匀的温压环境以及高于金刚石压砧几千以至百万倍的试样体积。这些特色使大体积压机成为精确测量岩石和矿物整体物性和系统研究复杂材料系列的重要实验装置。近十多年来大腔体高压实验技术有很大的发展,特别是近年来在大腔体装置上发展了一系列的原位物性测量技术,包括弹性超声测量技术(Liu et al., 2000)、应用于电学传输测量的阻抗谱技术(王多君等,2005)、热学测量技术等,为地球深部物质的物理性质的精密就位测量与研究提供了有力的支持。过去的20年里,大腔体特别是二级顶砧技术有了很大的发展,目前国际上大腔体实验技术的压力达到了30 GPa以上(最高达到50 GPa),相当于地下1000 km深度处的压力,可对地幔物质的物性进行多方面的研究。在高压技术和同步辐射方面的进展使大体积高压研究取得了革命性的突破。王雁宾(2006)撰文详细论述了近年来用同步辐射和大体积高压技术在高温高压研究中取得的进展,如高温高压下物质的相平衡研究、高压下晶体相变动力学分析以及状态方程($P-V-T$)研究;高温高压下熔体结构、密度和粘度的研究;晶体材料高温高压下的形变研究;高压层析成像技术等。其中有许多新的实验技术是王雁宾主持研究和发展的。

在实验地球物理的研究中,岩石流变学性质的研究是开展最早的实验技术,主要在三轴

压力下研究岩石变形和破裂机制,为岩石构造物理提供实验依据。近年来在国际上建立了大扭力 (Bystricky et al., 2000) 且在 20 GPa 高压和高温条件下进行物质流变学性质研究,同时,在国际上还开展了利用大腔体装置与同步辐射光源结合,在高压下 (20 GPa) 研究物质的应力状态。总之,高压实验技术的突破为地球科学研究提供了新机遇。

3. 地球内部主要层圈界面的实验研究问题

经过几十年的高温高压研究,人们已经对地球内部的物质结构和某些物理和化学性质有了一定的认识。但是,对于地球整体而言,尤其是地球内部各层圈界面的物质结构和性质的认识,仍然存在许多争论,特别是受高压技术能力的限制,对地球较深部物质的弹性、粘滞性、电学性质、热学性质、流变学性质和物质结构的变化等重大科学问题研究得较少,有些甚至是空白。近几年来,高压技术的突破为解决这些问题提供了新的机遇。

实验地球科学拟解决的关键科学问题是:对地球物理探测获得的各种地球深部物理场图像,赋予物质组成的内涵。① 建立地球各层圈主要物质的弹性波速度剖面、电性剖面、粘滞性剖面和热结构;② 提供地幔各界面主要物质的新结构和热弹性状态方程的基本数据;③ 提供地球深部主要流体对不连续界面和软流层性质影响的基本数据。因此,高压地学研究应针对岩石圈、软流层、地幔过渡带、地幔底层-地球核幔边界高能量密度物质的结构和物态、地球深部流体及其对物质性质的影响和实验技术和实验方法几个方面开展研究。

3.1 岩石圈

依据地球内部的结构,对地球整体物质演化以及对地球动力学有重大影响的是地球内部的三个全球性的不连续界面——软流层、地幔过渡带和核幔边界。刚性岩石圈 (大陆和大洋) 的结构与演化与人类生存关系最为密切,如矿产资源、能源、火山与地震灾害等科学问题,都与岩石圈的结构和物质性质有关,与人类生存最为密切。因此,实验地球科学主要针对岩石圈、软流层、地幔过渡带和地幔底层物质的关键科学问题开展实验研究。

在岩石圈内也存在地震不连续界面,特别是低速高导层的成因,是研究岩石圈动力学的关键课题,鉴于目前国内外完成了百余条 TTG 剖面测量的研究,针对这些综合地球物理剖面,在高温高压下开展岩石圈的物性测量,依据实验获得的物性参数对岩石圈精细物质结构进行研究。应包括以下内容:① 岩石圈各类岩石的流变学;② 中国重要构造带 (板快俯冲带、裂谷带) 各类岩石的综合物性 (弹性、电性、热学性质、状态方程及相变) 测量及其对岩石圈精细物质结构制约;③ 岩石部分熔融过程中的弹性波速度和电导率及其对低速高导层的物质解译;④ 高温高压及控制热力学条件下的物质的传输特性 (电导、扩散) 研究;⑤ 高温高压下岩石矿物的热学性质研究。

3.2 软流层

软流层是岩石圈板块进行深俯冲运动的基底,是由地震波速度较低的物质组成。有可能的物质状态是在岩石的矿物颗粒间存在岩浆熔体,或是岩浆玻璃-熔体的混熔体,或是有较多的流体存在,且在该区域的温度较高。因此,在模拟软流层的温压条件下进行相关岩浆玻璃 (固体) 和熔体的弹性、电性、粘滞性及其与岩浆熔体结构的关系等研究,对于探索岩石圈和软流层的力学性质和板块运动机制具有重要的科学意义。玄武岩是地表广泛分布的一种幔源火成岩。大量研究,特别是对玄武岩中存在的地幔橄榄岩包体的研究表明,玄武岩浆

的来源深度可达 60 ~ 100 km 的范围。岩石圈中多个低速层以及岩石圈下伏软流层的形成,都与地幔岩石的熔融或部分熔融形成的岩浆熔体有关。大量研究,特别是近年来在常压高温下原位物性测量的结果表明,淬火玻璃与相同成分的熔体在结构上基本一致。为此,通过对不同温度压力下形成的淬火玻璃的成分、密度、粘度、拉曼光谱和红外光谱的分析和测量,获得相应岩浆熔体结构、成分以及与压力的关系等基础数据,是岩浆熔体研究中常用的一种方法。岩石发生熔融或部分熔融形成岩浆熔体,岩浆熔体的聚集、运移、上升和冷凝固晶是地球壳幔物质演化、深成岩浆岩的形成和火山爆发等地质灾害发生的主要原因。因此,对于软流层物质的实验研究的主要内容有:① 高温高压下岩浆熔体结构的研究;利用高温高压下获得的岩浆熔体玻璃进行分子光谱学研究,获得成分、温度和压力对岩浆熔体结构的影响;② 高温高压下岩浆熔体玻璃的原位物性测量研究,包括弹性、电学、热学等性质,获得岩浆熔体随压力和温度的变化特征。根据有关弹性理论和热力学关系,计算岩浆玻璃的一系列弹性参数以及相关的热力学参数;③ 岩石部分熔融过程中的弹性波速度、电导率和流变学性质的研究;④ 高温高压下岩浆熔体的流变学和粘滞性的研究。

3.3 地幔过渡带

地幔分为上地幔(200 ~ 400 km)过渡带(400 ~ 670 km),该环境的压力约为(13 ~ 23) GPa 和下地幔(670 ~ 2900 km,核幔边界压力为 135 GPa)。在上地幔中橄榄石占 57%,橄榄石的 α 相 $\rightarrow$ β 相变,可能是形成上地幔和过渡带的 410 km 界面主要原因。而超尖晶石相变(橄榄石的尖晶石相变为钙钛矿结构)可能是形成过渡带与下地幔 670 km 界面的主要原因。普遍认为下地幔主要矿物是钙钛矿结构的硅酸盐矿物(龚自正等,2005)和少量方镁石和斯石英的高压相。研究表明地幔过渡带的矿物的相变带,是地球内部各层圈中物质性质和状态变化最大的地方。通过地幔物质的对流,向上影响到上地幔,乃至岩石圈,向下影响到下地幔乃至核幔边界。无论是地幔热柱上涌,还是大陆板块深俯冲都要经过这一过渡带。

地幔过渡带不仅是矿物的相变带,还是水的储集带。实验结果发现,相同压力下, β -橄榄石的水含量受温度和成分的影响很大。温度高, Mg/Si 低的情况下, β -橄榄石的水含量低;反之温度低且 Mg/Si 高的情况下, β -橄榄石的水含量高。以橄榄石和辉石高压相的水含量为依据,对过渡带和下地幔水含量进行了估算,其结果是:过渡带和下地幔上部的水含量为 1.48%,地幔水的 74% 以上存在于过渡带和下地幔上部。此外,对高温高压下合成的高密度含水镁硅酸盐相(以下简称 DHMS)的研究表明,已发现了 10 种以上的此类含水矿物相——10Å 相、3.65Å 相、A 相、B 相、C 相、D 相、D'相、E 相、F 相、G 相和超 B 相等。比较确定的 6 种 DHMS——10Å 相、A 相、B 相、D 相、E 相和超 B 相在过渡带中都可能存在。高温高压下测定水在地幔矿物中的分配系数(D)如下:

$$D_{\text{wadsleyite/单斜顽火辉石}} = 3.8 \quad (15 \text{ GPa}, 1300^\circ\text{C});$$

$$D_{\text{ringwoodite/akimotoite}} = 21 \quad (19 \text{ GPa}, 1300^\circ\text{C});$$

$$D_{\text{akimotoite/MgSiO}_3\text{钙钛矿相}} \gg 1 \quad (24 \text{ GPa}, 1600^\circ\text{C});$$

$$D_{\text{periclase(方镁石)/MgSiO}_3\text{钙钛矿相}} > 1 \quad (24 \text{ GPa}, 1500^\circ\text{C})。$$

这些结果表明,地幔中大部分的水分配于过渡带中(谢鸿森等,2005)。因此,过渡带是实验地球科学研究的重要领域,其主要研究内容有:① 地幔过渡带的主要矿物(包括含水镁硅酸盐)的结构与相变;② 地幔过渡带的主要矿物的 $P-V-T$ 状态方程;③ 地幔过渡

带的主要矿物的弹性和电学性质研究；④ 地幔过渡带的主要含水矿物的热稳定性。

3.4 地幔底层—地球核幔边界高能量密度物质的结构和物态

在地球形成的 45 亿年中，控制地球演化使地球环境变迁、能源和资源的形成以及火山和地震发生的重要因素，是核幔边界的高能量密度物质的结构和物态。核幔边界物质处于高压 135 GPa（相当 135 万大气压）同时约有 4000℃ 以上的高温状态。也正是外核的液态铁形成了保护人类得以生存的地磁场。

下地幔主要是硅酸盐物质— ABO_3 结构的钙钛矿，与液态外核之间有一层高能量密度物质称为地幔底层。这层物质在核幔界面之上，下地幔一侧有厚度在 50 ~ 300 km 范围内，其地震波速度的分布极不均匀，由高地震波速度和高密度的 D'' 层和超低速带（ULVZ）组成（侯渭等，2005）。地幔底层是地核热能向地幔传播的必经之路，也是地球中温度和温度梯度最高的地区。地幔底层既是俯冲板块的最终归宿，又是热柱和超级热柱的发源区。因此，地幔底层既是全地幔对流的起点，又是全地幔对流的终点。在地幔底层发生地幔物质（包括俯冲板块物质在内）的部分熔融作用，也存在外核液态铁与地幔硅酸盐的化学反应。所以地幔底层在全球物质演化中占有重要的地位。因此，研究地球核幔边界高能量密度物质的结构和物态，不仅是超高压下凝聚态物质研究的重要领域，也是地球科学研究中的前沿科学问题。

地球内部的超高压高温环境能有效地改变物质内部原子间距离、增加相邻原子间的电子轨道重叠、改变电子自旋，进而改变物质的结构、电子状态和性质。高压下原子的电子会经历局域化—非局域化的转变，也能从非关联到强关联。因此，研究地球内部的超高压高温环境下的物质是深入认识高能量密度物质的结构、性质及其变化规律的有效途径。高压能够形成其他条件无法实现的新物质结构，已经成为创造新材料的有效手段；高压下物质的状态和性质对于国防研究具有特殊意义，将为新型防御武器的开发利用提供可靠的科学依据。主要的研究内容包括有：① 超高压高温下 ABO_3 结构的硅酸盐与铁的物质结构研究；② 地球内部 ABO_3 型钙钛矿与铁形成的无公度结构及其电子态的研究；③ 超高压高温下 ABO_3 结构的硅酸盐与氢、水的相互作用及其结构；④ 超高压高温下铁与氢、水形成的新结构及其电子态的研究；⑤ 地幔底层超低速带的物态研究。上述研究内容目前已具备实验研究的条件，但有较大难度，建议进行探索性研究。

4. 地球深部流体及其对物质性质的影响

类地行星中唯一有水的是地球，正是水的存在使地球物质在几十亿年中一直进行着演化，形成地球的层圈结构。所以地球内部流体的性质、存在形式、迁移路径，以及与物质相互作用机制，是探讨地球物质演化和层圈结构形成机理的重要依据。同时，地球流体也影响地球物理场的变化。在岩石圈内部和岩石圈之下存在若干地震不连续界面，且多数为低速高导层。其中，岩石圈之下的软流层的性质和成因问题与板块驱动机制关系最为密切。研究地球深部超临界流体的赋存状态，以及高温超高压下超临界流体对岩石、矿物、熔体的弹性波速、电导等物理性质的影响，对于探讨上述不连续界面的性质及其成因机制都有重要意义。在板块构造各单元中存在的许多地质现象也都与流体的作用有关：如俯冲带中深源地震的成因与含水矿物在高温高压下脱水相变的关系，来自地幔的金伯利岩和钾镁煌斑岩浆中除含有大量的水外，总是伴随有碳酸盐的出露。在这一地质过程中超临界水和超临界二氧化碳起到

什么作用？以羟基的形式占据名义上无水矿物（NAMs）如橄榄石、辉石、石榴石和它们的高压相的点缺陷。这种溶解的水在地球内部地球动力学过程中起到重要作用，因为它有效的影响着岩石的熔融行为，矿物的转变特性，如扩散、形变、电导，以及它们的弹性特征。

水和 CO_2 等流体是地球内部的主要流体，且在地球中处于超临界状态下，出现了新奇的物理和化学性质。如水对难降解的有机质和剧毒物能降解为无毒气体，开创了高压化学和冶金学的新领域。地球深部的超临界水是集酸碱特性于一身，如在地幔条件下的水，使化学惰性的铜、金、铂等能被大量溶解，也正是由于高温高压下水的特殊化学活性，目前高温高压下超临界水的物性资料大多限于临界点附近（水的临界压力为 22.06×10^{-3} GPa，临界温度为 374°C ）。而相当于岩石圈地幔温度（ 500°C 以上）压力（3.0 GPa 以上）条件下，水特性的资料却非常有限。在高温高压极端条件下地球流体的物理和化学性质，水在地球各层圈的存在形式与状态，是当前探讨地球层圈结构演化和板块运动机制的重要研究内容，也是当代科学创新的重要领域。主要的研究内容有：① 地球深部流体性质的实验研究。高温高压下地球内部典型流体的基本性质和状态方程的研究，包括高温高压下流体中络合物稳定常数、流体中离子的活度系数、离子的扩散系数、流体的状态方程、流体的介电常数、流体的 pH 值、流体的热传导率等；② 高温高压下流体性质的突变性和不连续性；③ 地球内部流体与矿物和岩石的相互作用（含水矿物的形成与脱水及地震孕育模型等）研究；④ 地球深部流体对矿物相转变、岩石、熔体的密度、粘度等性质的影响。

5. 实验技术和实验方法的研究

目前高压实验技术已发展成为金刚石压腔、大腔体静高压和动高压三大技术系列。可在实验室中模拟从地表到地核各层圈的温度和压力。与多种就位测量的新技术相结合，特别是同步辐射与激光技术的使用，为开展地球深部物质的实验研究，提供了有力的技术支持。在实验室创造可控的地球深部环境模拟地球内部的温度、压力和组分等条件，研究物质在这些条件下的状态、性质和变化规律，从而对地质和地球物理的观测结果进行物质解释，这是固体地球科学发展的必然要求。

实验地球科学的关键科学问题是高压科学的理论和技术的发展。高压科学是理论研究与高压技术的强反馈，高压科学进步的关键是高压技术的创新。针对地球科学中的高压科学问题，在体积很小的高压腔上集成物性测量的各种传感器和接收装置，获得高压腔中物质随温度和压力变化的信息。此外，还需要在高压腔中创造模拟地球深部的物理化学环境。高压腔提供了压力（ P ），需要针对地球内部的深度进行加温（ T ），使高压腔的物质恒定时间达到温压条件下平衡态（ t ），此外还需要控制氧逸度（ f_{O_2} ）和流体的量及其流体成分（ H_2O ）等。

大腔体高压实验装置可在 100 mm^2 的高压腔中获得 5 GPa ~ 6 GPa 同时 2000 K 的高温条件，能进行岩石等多组分物质的实验。在 20 mm^2 的高压腔中获得 10 GPa 而在 $1 \sim 2 \text{ mm}^2$ 的高压腔中能获得 20 GPa 以上高压条件。目前在大腔体中能获得 30 GPa 以下的高压环境。

金刚石压腔（DAC）及其宝石压腔装置，是利用宝石能透光的性能作为高压腔的测量窗口，目前在 $0.2 \sim 0.3 \text{ mm}^2$ 的高压腔中获得 100 GPa 以上的高压环境。虽然金刚石的强度很大，由于无法生长大颗粒金刚石，所以，金刚石压腔室一般小于 1 mm^2 。最近人工合成了硬度接近金刚石（10）的超硬材料—碳化硅（9.25）单晶，可生长数十厘米大的单晶作为压

腔顶砧(徐济安等, 2006)。另外, 碳化硅单晶在 149.6、766.9、788.4 和 964.7 cm 处的清晰的拉曼谱峰既不与金刚石的 $\nu_0 = 1333$ cm 的一级拉曼峰重叠, 也不和 2300~2700 cm 范围的多声子二级拉曼谱带重叠。其光学特性, 弥补了金刚石自身的红外、拉曼和 Brillouin 谱峰对某些测试样品的干扰。利用碳化硅单晶做压砧制作碳化硅压腔(MAC)可制作较大腔体的高压装置, 能达到 50 GPa 的高压条件, 且价格比金刚石低廉。用碳化硅制作压砧的砧面直径可达 4.0 mm, 使 MAC 的样品室最大可达到 DAC 的上千倍。这样大的样品尺度不仅便于 X 射线衍射, 光学谱, 电导和磁感应等测量的操作, 还能进行中子衍射, 中子散射, 非弹性 X 射线光谱, X 射线 Compton 散射, 核磁共振和超声测量等。对进一步在宝石压腔装置上开展高温高压下的物性研究, 开辟了新的技术途径。目前应加快下列实验技术的研究: ① 模拟地球深部物理和化学环境(P 、 T 、 t 、 f_{O_2} 、 H_2O)的大腔体超高压实验技术; ② 金刚石压腔和碳化硅压腔及其物性测量技术的研究; 利用宝石压砧的透光特性, 在宝石压腔上开展与激光技术相结合的物性测量技术, 如弹性测量, 物质光学性质的测量等; ③ 较高压力(1~20 GPa)下的大扭矩流变学装置及其实验技术研究; ④ 高压下声子态密度测量技术; ⑤ 金刚石压腔的弹性和阻抗谱测量。

本文是应邀为项目申请提供的研究大纲, 主要是针对我国地学中目前高压科学发展的现状, 提出的一些建议, 由于该领域的研究范围很广, 受作者知识的限制, 本文仅涉及了熟悉的部分内容供读者参考。

参 考 文 献

- 毕延、经福谦, 动高压物理在地球与行星科学研究中的应用, 地学前缘, 2005, 12: 77~92。
- 龚自正、谢鸿森、费英伟、张莉、邓力维、经福谦, 下地幔矿物研究及其进展 [J], 地学前缘, 2005, 12: 3~22。
- 侯渭、谢鸿森、周文戈, 地幔底层及其在全球物质演化中的意义, 地学前缘, 2005, 12: 37~41。
- 侯渭、谢鸿森、陨石成因与地球起源, 北京: 地震出版社, 2003, 256~285。
- 刘景、肖万生、李晓东、李延春、谢鸿森、胡天斗, 同步辐射激光加温 DAC 技术及在地球深部物质研究中的应用, 地学前缘, 2005, 12: 93~101。
- 王多君、易丽、谢鸿森、李和平, 交流阻抗谱法及其在地球深部物质科学研究中的应用, 地学前缘, 2005, 12: 123~130。
- 王雁宾, 地球内部物质物性的原位高温高压研究: 大体积压机与同步辐射源的结合, 地学前缘, 2006, 13: 1~36。
- 肖万生、翁克难、刘景、谢鸿森, 高温高压微束衍射实验进展及其地学应用, 地学前缘, 2005, 12: 102~114。
- 谢鸿森、侯渭、周文戈, 地幔中水的存在形式和含水量, 地学前缘, 2005, 12: 55~60。
- 谢鸿森(译), 地球物质研究, 西安: 西北大学出版社, 1992, 1~117。
- 谢鸿森, 地球深部物质科学导论, 北京: 科学出版社, 1997, 1~7。
- 徐济安、谢鸿森、侯渭, 碳化硅压腔和高压下的中子衍射, 物理, 2006, 35: 597~584。
- Bystricky M., Kunze K., Burlini L., Burg J. P. High shear strain of olivine aggregates: Rheological and seismic consequences. Science, 2000, 290, 1564~1567。
- Gao C., Han Y., Ma Y., White A., Liu H., Luo J., Li M., He C., Hao A., Huang X., Pan Y., Zou G. Accurate measurements of high pressure resistivity in a diamond anvil cell. Rev. Sci. Instrum., 2005, 76, 083912~083915。

- He C. , Gao C. , Ma Y. , Li M. , Hao A. , Haung X. , Liu B. , Zhang D. , Yu C. , Zou G. , Li Y. , Li H. , Li X. , Li J. 2007, In situ electrical impedance spectroscopy under high pressure on diamond anvil cell. *Applied Physics Letters*, 91, 092124 ~ 092126.
- Li F. , Cui Q. , He Z. , Cui T. , Gao C. , Zhou Q. , Zou G. Brillouin Scattering Spectroscopy for a Laser Heated Diamond Anvil Cell. *Applied Physics Letters*, 2006, 88, 203507 ~ 203509.
- Li M. , Gao C. , Ma Y. , Wang D. , Li Y. , Liu J. In situ electrical conductivity measurement of high - pressure molten ($\text{Mg}_{0.875}$, $\text{Fe}_{0.125}$) 2SiO_4 . *Applied Physics Letters*, 2007, 90, 113507 ~ 113509.
- Liu Y. , Xie H. , Guo J. , Zhou W. , Xu J. , Zhao Z. A new method for experimental determination of compressional velocities in rocks and minerals at high - pressure. *Chinese Physics Letters*, 2000, 17, 924 ~ 926.
- Xu J. , Mao H. , Bell P. M. 1986, High - pressure ruby and diamond fluorescence: Observations at 0.21 to 0.55 Terapascal. *Science*, 232, 1404 ~ 1406.
- Zhou Q. , Cui Q. , Cui T. , Zhang J. , Xie Y. , Tang K. , Zou G. Raman scattering system for laser heated diamond anvil cell. *Rev. Sci. Instrum.* , 2004, 75, 2432 ~ 2434.