
科学家发现斯石英一维含水通道超结构

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24118.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

科学家发现斯石英一维含水通道超结构。北京高压科学研究中心联合中山大学、复旦大学、中国科学院地质与地球物理研究所和中国科学院广州地球化学研究所研究团队，在地幔深部的极端温度和压力条件下合成含水二氧化硅，并表征其具有一维含水通道的超精细结构，其中含水通道在高温高压环境下呈现超离子态特性。相关研究成果9月1日在线发表于《科学进展》。论文第一作者为北京高压科学研究中心博士研究生李俊威，通讯作者为北京高压科学研究中心研究员胡清扬和中山大学副教授朱升财。

研究团队多年来聚焦水在二氧化硅中的赋存。研究表明，其高压相之一的斯石英在地幔深部（如410千米以下深度）的储水能力显著增强，但其储水机制仍然存在诸多争议。由于名义无水矿物中含氢缺陷结构的复杂性及当前高温高压实验和理论计算手段的局限性，在传统实验和计算框架下深入研究斯石英的储水机制极具挑战性。

该研究在实验样品表征和理论计算建模两个方面进行了原创性探索。研究团队首先利用机器学习的高维神经网络势能构建SiO₂-H₂O体系的高精度势函数，并结合势能面随机行走算法（SSW）对含水结构进行了全势能面的结构搜索，成功获得含水量0.9wt%~3.6wt%斯石英的最低能量结构。研究发现，在地幔的温度和压力条件下，氢更倾向于占据斯石英的晶格间隙位置，形成一种新型的具有一维含氢通道的超结构。

研究团队同时在接近下地幔顶部的温度和压力条件下合成了高质量的含水斯石英单晶，并利用二次离子质谱、拉曼光谱、红外光谱对样品的含水特性进行表征。名义无水矿物中氢的结构解析是技术难点，研究人员对核磁共振（NMR）激发装置进行了针对性改造，利用Lenz磁透镜增大通过样品腔的磁通量，从而显著提高NMR探针灵敏度，实现了~80 μg量级的单晶样品中氢的含量和结构表征，并证实了含水斯石英的一维水通道超结构真实存在。

随后，研究团队利用第一性原理分子动力学研究了含水斯石英在高温高压下的动力学行为。当温度达到1000K时，氢原子开始摆脱O-H键的束缚，在一维含水通道内自由扩散，表现出类似流体的特征和极强的电导率各向异性。

该研究为揭示二氧化硅在地幔深部的储水机制提供了精细的晶体结构，颠覆了人们长期以来对斯石英储水机制的看法。斯石英的一维含水通道超结构刷新了人们对名义无水矿物中含氢缺陷结构的认知，丰富了地球深部水储库的存在形式，有助于解释含水斯石英的超高热稳定性和斯石英-后斯石英相变压力提前之谜。同时，含水斯石英的一维超离子态相变为解释地幔高导异常和电导率各向异性结构提供了新线索，也为人们重新认识名义无水矿物在高温高压下的物理化学性质提供了重要参考。（来源：中国科学报 赵路）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/sciadv.adh3784>

作者：胡清扬等 来源：《科学进展》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发