地幔橄榄石中铁的氧化态及其热力学模型研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/24809.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！

橄榄石是镁铁硅酸盐矿物。
橄榄石不仅是基性、超基性岩的主要造岩矿物，而且是地幔岩、陨石的主要组成矿物，是地幔中最主要的指向性矿物相。对橄榄石的地球化学研究，对于探讨地幔不连续面成因，以及整个地幔物质的组成、演化、对流，俯冲板片深源地震等地球深部动力学问题具有重要意义，并对宇宙中其他类地行星类似地幔物质的起源具有重要的指示作用。橄榄石中铁的氧化作用对其物理化学特征具有重要影响，从而控制地球深部过程。然而，学界无法准确限定地幔条件下铁的氧化态及其随地质条件的变化情况。

中国科学院地球化学研究所矿床地球化学国家重点实验室研究员张飞武带领的计算矿物物理团队，与美国宝石学院博士Michael Jollands合作，建立了复杂地质条件下橄榄石中铁的氧化态及其赋存状态的热力学计算模型，开展了
关于橄榄石中铁的氧化态Fe^{3+}
/ΣFe、氧化途径、赋存状态等与
地球深部环境【活性硅（αSiO_2
）、温度（T）、压力（P）、氧逸度（fO_2），含水量（H_2O）等】的定量关系研究。

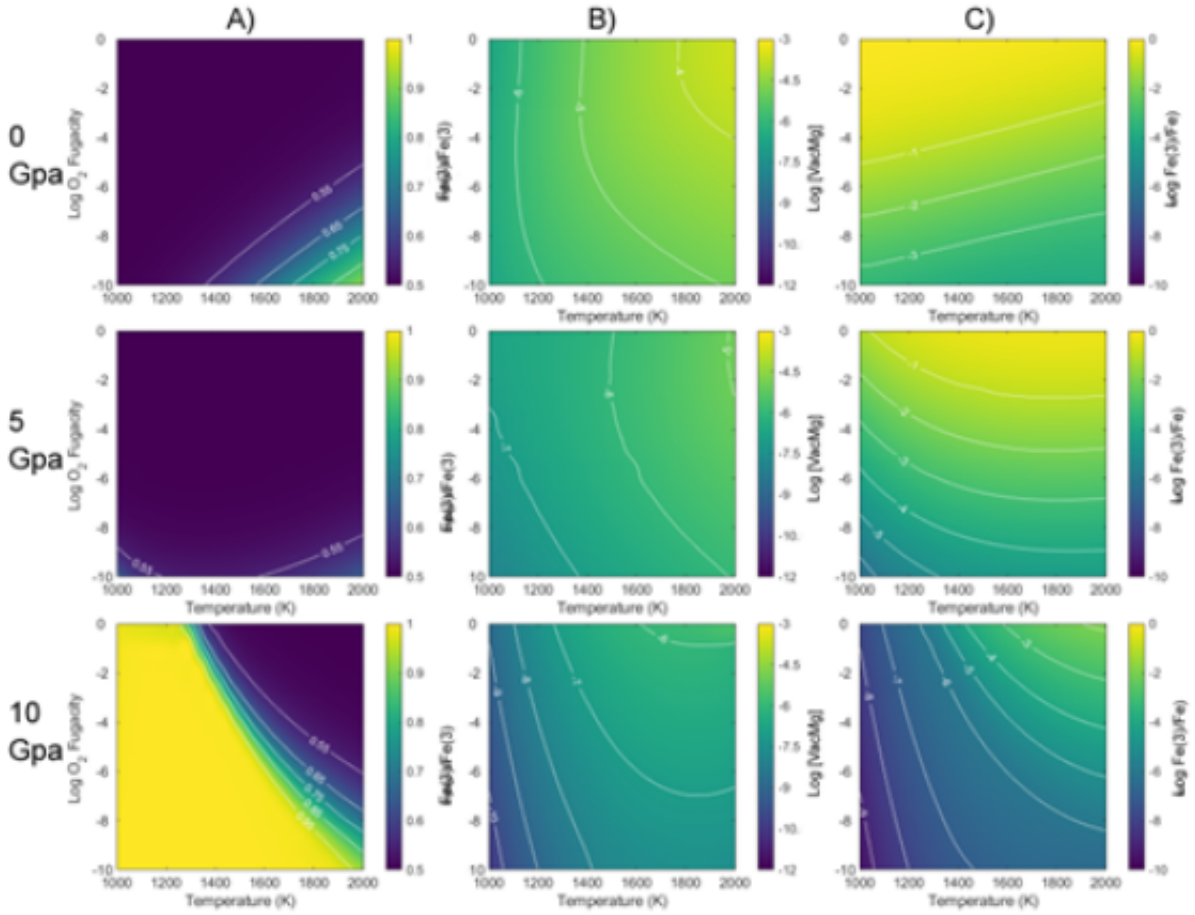
研究表明，榄石中铁的氧化态与深部环境具有复杂的制约关系，很难使用常规的阿伦尼乌斯（Arrh
enius
）公式和
有限条件下的实验
结果来简单推演。研究发现，不含水
橄榄石中铁的氧化态Fe^{3+}
/ΣFe偏低，并随着深度表现出不规律变化，100km处最大值0.003，含水（500ppmw）橄榄石中，Fe^{3+}
/ΣFe增加至0.03。虽然上地
幔条件下三价铁的浓度较低，但伴随着Fe^{3+}
的Mg/Si空位缺陷浓度及其相关的扩散，流变特性却是铁氧化态的函数。研究预计，这些特性在上地幔的深度范围内会发生多个数量级的变化。该研究进一步揭示了橄榄石在地球深部环境中具有更加复杂的结构与过程。

研究矿物中缺陷元素微观尺度的赋存状态和分离机理，是剖析关键金属矿床元素循环和矿床形成

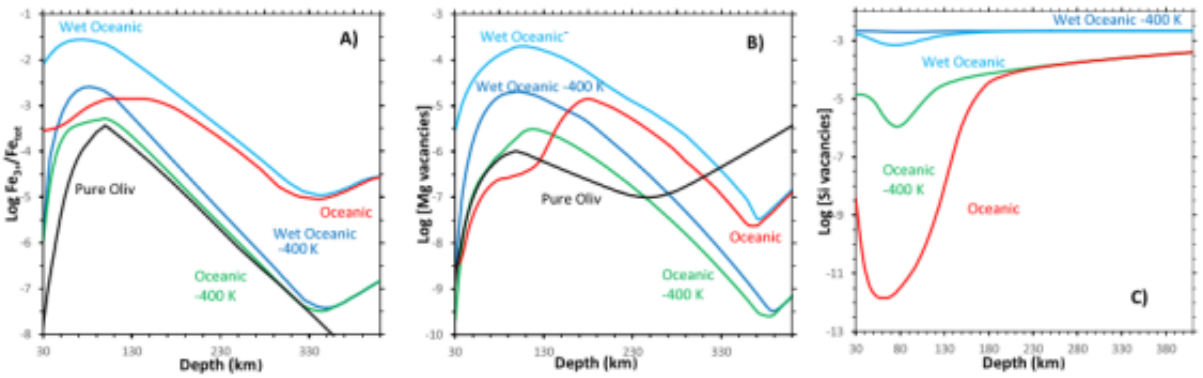
的地质-物理-化学过程的关键。该研究建立的热力学计算模型，通过精确模拟矿物体系的成分即压力、温度、计算关键金属元素在矿物体系中的分配，以及分馏、扩散、聚集、耦合和分离等内生动力的细节，为解决关键金属元素“稀”“伴”“细”导致的难示踪、难辨识、难探测的基础科学问题，特别是为解决找矿过程向深部发展难度激增问题提供了理论支撑，并进一步为高效清洁利用矿产资源提供了智力支持。

相关研究成果发表在（*Journal of Geophysical Research: Solid Earth*上。

论文链接



不同深度下（A）$\Sigma Fe^{3+}_{Mg}/\Sigma Fe^{3+}_{Si+Mg}$（B）Log[$V''_{Mg}$] 和（C) $Log\,\Sigma Fe^{3+}/Fe^{tot}$随着氧逸度log fO_2 和温度的变化关系。



预测的（a）A) $\Sigma Fe^{3+}_{Mg}/\Sigma Fe^{3+}_{Si+Mg}$，（b）镁空位浓度，（c）硅空位与深度关系。

研究团队单位：地球化学研究所

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转发