

Оценка температуры плавления вещества мантии Земли

Г. И. Петрунин^a, В. В. Лупачик^b

*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет,
кафедра физики Земли. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.*

E-mail: ^ageoropov@phys.msu.ru, ^bvilen85@gmail.com

Статья поступила 16.03.2009, подписана в печать 17.04.2009.

Предложен подход, позволяющий на основе гипотезы Линдеманна в рамках дебаевского акустического приближения рассчитать постоянную Линдеманна для многоатомных кристаллических соединений (минералов) с различным типом связи и провести прямую оценку постоянства отношения среднеквадратичной амплитуды колебаний атомов к среднему расстоянию между атомами на кривой плавления. Полученное соотношение дало возможность оценить температуру плавления вещества мантии Земли в условиях естественного залегания без задания реперных точек, используя только данные современных сейсмических и минералогических моделей.

Ключевые слова: мантия, температура плавления, гипотеза Линдеманна.

УДК: 550.382.3. PACS: 91.35.Dc.

Введение

В изучении теплового режима Земли одним из важнейших параметров является температура плавления вещества недр T_m . Действительно, поскольку мантия и внутреннее ядро Земли находятся в эффективно твердом состоянии, T_m можно рассматривать как верхний предел возможных температур в этих областях. Особенно важно знание температуры плавления для объяснения природы слоя пониженных скоростей, граничных зон между внешним ядром и мантией с одной стороны и внешним ядром и внутренним ядром с другой стороны, где, возможно, происходит частичное или полное изменение агрегатного состояния вещества, стимулирующее эволюционные процессы в недрах Земли. Однако определение температур плавления даже для вещества мантии Земли, залегающего на глубинах 50–2000 км, — задача чрезвычайно сложная. Так, обычно применяемый в термодинамике учет влияния давления на температуру плавления по формуле Клаузуса–Клапейрона

$$\frac{dT_m}{dp} = T_m \frac{\Delta V}{Q},$$

где ΔV — изменение объема при плавлении, Q — скрытая теплота плавления, малоэффективен из-за незнания этих параметров для вещества недр Земли, находящегося в условиях высоких давлений. По той же причине применяемые полумпирические формулы также не дают полной уверенности в правильности получаемых результатов, поскольку неизвестно, как ведут себя эмпирические константы на глубинах > 100 км [1]. Поэтому в геофизике для обхода этих трудностей при расчете T_m были предложены соотношения, полученные на основе той или иной физической гипотезы о начале плавления.

Наибольшей известностью пользуется гипотеза Линдеманна о начале плавления кристаллических твердых тел, согласно которой вещество плавится, когда амплитуда колебаний атомов в решетке достигает строго определенной доли от параметра решетки [2]. Впервые эту гипотезу использовал Аффен для вывода соотношения, позволяющего рассчитать температуру плавления в мантии [3]:

$$\frac{T_m}{T_{m0}} = \frac{\delta \bar{M}}{\delta_0 \bar{M}_0} \frac{(K/\rho)}{(K/\rho)_0} = \frac{\delta \bar{M}}{\delta_0 \bar{M}_0} \frac{\left(v_p^2 - \frac{4}{3}v_s^2\right)}{\left(v_p^2 - \frac{4}{3}v_s^2\right)_0}, \quad (1)$$

где \bar{M} — средний атомный вес, K — модуль сжатия, ρ — плотность вещества, δ — структурный коэффициент, пропорциональный постоянной решетки, а v_p , v_s — продольные и поперечные сейсмические скорости соответственно. В этой формуле все величины с индексом «ноль» относятся к глубинам, для которых температура плавления известна из других источников. Важным достоинством этого соотношения является то, что оно позволяет рассчитать температуру плавления по сейсмическим скоростям, распределение которых в мантии Земли к настоящему времени считается наиболее хорошо изученным.

При фактических расчетах δ и \bar{M} обычно полагают постоянными для всей мантии, что является грубым приближением, особенно по отношению к структурному коэффициенту, так как очевидно, что рост давления должен приводить к уменьшению среднего расстояния между атомами и, следовательно, к уменьшению δ . При этом весь эффект изменения состава, фазовых переходов, сжатия учитывается через изменение компонент продольных и поперечных сейсмических скоростей v_p и v_s . Дополнительную неопределенность вносит относительность этого метода, так как для расчета требуется задание реперных точек, которые, очевидно, в принципе не могут быть точно известны.

Другое соотношение, предложенное В. Н. Жарковым [4], основано на гипотезе постоянства концентрации тепловых дефектов в решетке на кривой плавления для всех веществ и давлений:

$$\frac{T_m}{T_{m0}} = \frac{\omega_0}{\omega'_0} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\nu/3}, \quad (2)$$

где ω_0 и ω'_0 — энергия образования дефектов при начальном давлении вещества с плотностью ρ и ρ_0 соответственно, а ν — эмпирическая константа.

Наряду с неопределенностью в выборе константы при расчетах существенным недостатком формулы (2) является то, что она справедлива только для областей с однородным составом, поэтому она применяется для слоев от 100 до 400 км и от 1000 до 2900 км [1], при этом требуется знать уже два репера. И если можно

с достаточной уверенностью полагать, что на глубине 100 км $T_m \approx 1800$ К (температура плавления лав первичных очагов вулканов), то выбрать надежный репер для глубины 1000 км весьма затруднительно, поскольку диапазон возможных температур плавления на этой глубине достаточно широк. Также, при расчетах обычно полагают $\omega_0 = \omega'_0$, что маловероятно, скорее следует ожидать, что ω_0 в более плотном нижнем слое больше, чем ω'_0 . И, следовательно, рассчитанная T_m должна быть несколько заниженной по отношению к реальной.

В настоящей работе предложен подход, позволяющий в рамках дебаевского акустического приближения рассчитать постоянную Линдеманна для различных многоатомных кристаллических соединений (минералов), т. е. провести прямую проверку постоянства отношения среднеквадратичной амплитуды колебаний атомов к среднему расстоянию между атомами на кривой плавления. В итоге, это дало возможность оценить температуру плавления вещества мантии Земли без задания реперных точек, используя только данные сейсмических и минералогических моделей.

1. Вывод аналитической формулы для постоянной Линдеманна

Как уже упоминалось, согласно упрощенным представлениям Линдеманна, вещество плавится, когда амплитуда колебаний атомов становится сравнимой с величиной межатомных расстояний в кристаллической решетке. Для точки плавления потенциальная энергия атомов в приближении гармонического осциллятора равна кинетической, и ее можно записать в виде

$$E_n = \frac{1}{2}fa^2 = 2\pi^2\nu_{\max}^2ma^2, \quad (3)$$

где f — сила, вызывающая единичное смещение, m — масса атома, a — амплитуда колебаний атома в кристаллической решетке, $\nu_{\max} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{f/m}$ — максимальная частота колебаний атомов в гармоническом приближении.

С другой стороны, согласно закону о равномерном распределении энергии по степеням свободы, $E_n = 3kT_m$, где k — постоянная Больцмана, T_m — температура плавления. И учитывая, что $h\nu_{\max} = k\theta$, где θ — характеристическая температура Дебая, перепишем (3) в виде

$$3kT_m = 2\pi^2(k\theta/h)^2ma^2. \quad (4)$$

При переходе к многоатомным соединениям необходимо заменить массу отдельного атома m на усредненную массу атомов, входящих в соединение. Для этого удобно воспользоваться понятием среднего атомного веса \bar{M} , равного молекулярному, деленному на количество атомов в соединении. Тогда $m = \bar{M}/N_a$, где N_a — число Авогадро. Из (4) после проведения замены получаем

$$a^2 = \frac{3kT_m N_a}{2\pi^2(k/h)^2\theta^2\bar{M}} = \frac{3RT_m}{2\pi^2(k/h)^2\theta^2\bar{M}}. \quad (5)$$

Здесь R — универсальная газовая постоянная.

Введем обозначение X_m , равное отношению среднеквадратичной амплитуды тепловых колебаний атомов к параметру решетки:

$$X_m = \sqrt{\langle a^2 \rangle} / r. \quad (6)$$

Это не что иное, как постоянная Линдеманна, т. е. та строго определенная доля амплитуды колебаний атомов

от параметра решетки, при которой вещество плавится. В случае горных пород, представляющих собой конгломерат природных минеральных соединений, понятие параметра решетки теряет смысл, поэтому удобно ввести среднее расстояние между атомами или средний радиус сферы Вигнера–Зейца. Радиус сферы Вигнера–Зейца записывается в виде

$$r_s = \sqrt[3]{3V_s/4\pi}, \quad (7)$$

где V_s — объем, приходящийся на один атом.

Подставляя (7) и (5) в (6) и учитывая, что $V_s = \bar{V}/N_a$, где \bar{V} — объем, приходящийся на один средний грамм-атом, а также выражение для температуры Дебая в акустическом приближении $\theta = \frac{\hbar}{k} \left(\frac{3N_a}{4\pi\bar{V}} \right)^{1/3} \bar{v}$, получим выражение для температуры плавления:

$$T_m = \frac{1}{C^2} \frac{X_m^2 \bar{v}^2 \bar{M}}{R}, \quad (8)$$

где $C \approx 1.013$; \bar{v} — средняя скорость акустических волн в веществе, которая находится из соотношения $\bar{v}^3 = 3v_p^3 v_s^3 / (2v_p^3 + v_s^3)$; v_p и v_s — продольная и поперечная скорости упругих волн соответственно.

Таким образом, при применимости гипотезы Линдеманна для сложных минеральных соединений знание постоянной Линдеманна X_m дает возможность рассчитать температуру плавления вещества мантии исключительно по сейсмическим скоростям и среднему атомному весу без задания реперных точек.

2. Расчет величины X_m и проверка гипотезы Линдеманна для минерального вещества Земли

В последнее время накоплено большое количество лабораторных данных по физическим свойствам минералов и горных пород (в частности, по скоростям звука и температурам плавления [5]), что позволяет напрямую осуществить проверку гипотезы Линдеманна. Так, для некоторых металлов, имеющих отношение к составу вещества недр Земли, и большинства породообразующих минералов мантии были рассчитаны по формуле (8) значения постоянной Линдеманна. Оказалось, что X_m действительно имеет небольшой разброс около среднего значения, а именно $X_m = 0.163 \pm 0.016$ (таблица). В связи с этим представляется допустимым использование усреднения для чистых минералов в предположении, что вещество мантии состоит из данных минералов, и, таким образом, результаты, полученные для них, будут справедливы и для мантии в целом. Исходя из такого утверждения можно использовать среднее значение X_m и его стандартное отклонение при расчете температуры плавления вещества мантии. Кроме того, в результате расчетов была выявлена интересная тенденция в поведении X_m для различных соединений: оказалось, что среднее значение постоянной Линдеманна у металлов несколько меньше, чем у окислов, а у силикатов — несколько больше. Объяснение этого факта, на наш взгляд, связано с некоторыми различиями в типах связей между атомами в кристаллической решетке. В окислах и сложных окислах преобладает ионная связь, в силикатах возрастает доля более сильной ковалентной связи, а в металлах связь металлическая, которая слабее ионной. Действительно, логично, что чем сильнее связь, тем больше должна быть амплитуда колебаний, чтобы вещество расплавилось.

Результаты расчета постоянной Линдеманна X_m для различных веществ

Вещество	v , км/с	T_m , К	\bar{M} , г/(ср·г·ат)	X_m	Вещество	v , км/с	T_m , К	\bar{M} , г/(ср·г·ат)	X_m
Fe	3.75	1808	55.85	0.140	MgSiO ₃	5.52	1834	20.10	0.160
Ni	3.59	1728	58.69	0.140	Mg ₂ SiO ₄	5.47	2163	20.92	0.172
Al	3.50	933	26.98	0.155	Fe ₂ SiO ₄	3.82	1478	29.10	0.172
Co	3.48	1768	59.00	0.145	CaSiO ₃	4.74	1817	23.20	0.172
Cu	2.77	1356	63.55	0.154	CaMgSi ₂ O ₆	4.94	1664	21.65	0.164
Ti	3.50	1933	47.88	0.167	KAlSi ₃ O ₈	4.45	1473	21.40	0.172
Mg	3.52	922	24.30	0.161	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	4.23	1557	21.38	0.186
Ag	2.00	1235	107.87	0.156	NaAlSi ₃ O ₈	3.77	1373	20.17	0.202
Среднее значение X_m для металлов 0.152 ± 0.009					Среднее значение X_m для силикатов 0.175 ± 0.013				
Fe ₂ O ₃	4.66	1838	31.94	0.150	MgAl ₂ O ₄	6.36	2408	20.32	0.158
Al ₂ O ₃	7.16	2345	20.40	0.138	Ti ₂ O ₃	4.72	2400	28.75	0.178
MgO	6.72	3125	20.15	0.171	MnFe ₂ O ₄	4.35	2023	28.57	0.179
TiO ₂	6.01	2110	26.63	0.137	NiO	4.11	2257	37.34	0.174
Fe ₃ O ₄	5.04	1867	33.08	0.138	CoO	3.78	2068	37.46	0.182
Cr ₂ O ₃	5.50	2539	30.40	0.154	CaO	5.42	2873	28.04	0.172
Среднее значение X_m для окислов 0.162 ± 0.016					Среднее значение X_m для всех выбранных веществ 0.163 ± 0.016				

Отсюда следует, что можно модифицировать гипотезу Линдеманна следующим образом: для твердых тел с одинаковым преобладающим типом связи отношение среднеквадратичной амплитуды колебаний атомов к среднему расстоянию между атомами является постоянной величиной на кривой плавления.

3. Расчет температуры плавления вещества мантии Земли

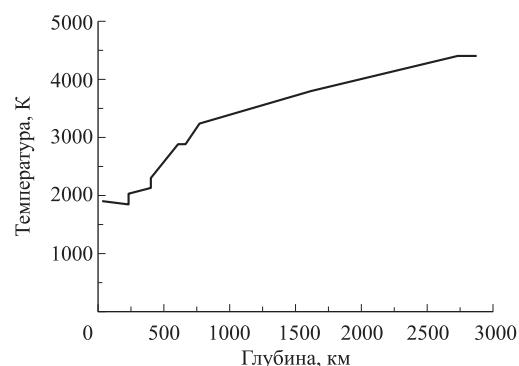
Таким образом, зная среднее значение величины X_m , характерное для мантии, можно легко оценить температуру плавления в мантии по формуле (8). Как видно, для этого необходимо знать распределение скоростей сейсмических волн и среднего атомного веса с глубиной.

В качестве минералогической модели мантии нами была принята пиролитовая модель Рингвуда, согласно которой значение среднего атомного веса \bar{M} на протяжении всей мантии можно считать постоянным и равным 21 г/(ср·г·ат) [6]. Что же касается средней скорости звука, то она рассчитывалась по данным усовершенствованной параметрической модели Земли PREM [7], показывающей распределение плотности, сейсмических скоростей и упругих модулей.

Модель PREM достаточно проста, оптимальна и удобна для получения общей картины распределения температуры плавления в мантии, так как по ней очень четко видна зонная структура оболочки Земли, а именно верхняя мантия, переходная зона, нижняя мантия, зона D'' (переходная зона между мантией и ядром), что дает возможность выявить общие закономерности в поведении температуры плавления в указанных оболочках.

При выборе значения постоянной Линдеманна X_m мантию можно условно разбить на две области — «верхняя мантия + переходная зона» и «нижняя мантия». В первой области, согласно выбранной пиролитовой модели, преобладает силикатный состав вещества, поэтому значение X_m логичнее выбрать характерным для силикатов, а именно $X_m = 0.175$. Что же касается состава нижней мантии, то на этот счет существует несколько гипотез. Одна из них — это гипотеза Магницкого–Берча, согласно которой нижняя мантия главным образом состоит из окислов, что соответствует $X_m = 0.162$. Она и была принята для расчетов. Также предполагают, что нижняя

мантия в основном состоит из перовскита и магнеziюстита [8]. Полученное в рамках рассматриваемых моделей распределение температуры плавления в мантии представлено на рисунке.



Распределение температуры плавления вещества мантии, полученное по формуле (8) с использованием данных сейсмической модели Земли PREM

Интересно отметить, что полученные температуры плавления на глубине в диапазоне 100–200 км, где, как предполагают, находятся первичные очаги вулканов, очень хорошо согласуются с известным и широко употребляемым репером — температурой плавления лав на этой глубине — 1800 К. Этот факт является дополнительным независимым подтверждением объяснения физической природы слоя пониженных скоростей частичным подплавлением вещества.

Второй примечательной особенностью поведения температуры плавления в мантии является наличие скачков на границах переходной зоны, что является логичным следствием фазовых превращений и увеличения плотности в этих областях. Также следует отметить, что получаемое значение температуры плавления в основании переходной зоны (~ 670 км) хорошо согласуется с температурой плавления перовскита, полученной из экспериментов по ударному сжатию, 2750 К [9].

Что же касается температуры плавления на границе СМВ (ядра и мантии), то значение 4400 К, полученное с помощью предложенного метода, вполне согласуется

с оценками В. А. Магницкого [10], модифицировавшего соотношение (1) с учетом влияния давления, и, что самое важное, оно практически совпадает со значениями, полученными путем экстраполяции экспериментальных данных по температурам плавления Ca-перовскита и $(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$ -магнезиовюстита — предположительно, одни из главных компонентов состава нижней мантии [11, 12].

Наконец, можно отметить также, что полученное распределение лежит между кривыми, рассчитанными ранее по формулам (1) и (2), Аффена и Жаркова [1]. Это свидетельствует в пользу правильности высказанных выше соображений о влиянии на величину T_m не учитываемых при подобных расчетах возможного уменьшения с глубиной (давлением) структурной константы δ и возрастания энергии образования дефектов ω_0 .

Заключение

Таким образом, распределение температуры плавления в мантии, полученное с помощью вышеописанного метода, находится в соответствии как с современными представлениями о минералогическом составе мантии, так и с гипотезами о природе переходного слоя и слоя пониженных скоростей. Отметим, что возможность производить расчет, используя только данные сейсмических моделей, без задания каких-либо реперных точек, делает

достаточно привлекательным такой метод расчета в наименее доступной и наименее изученной области нашей планеты — внутреннем ядре.

Список литературы

1. Магницкий В.А. Внутреннее строение и физика Земли. М., 1965.
2. Lindemann F. // Phys. Z. 1910. **11**. Р. 609.
3. Uffen R. // Trans. Amer. Geoph. Un. 1952. **33**, N 6. Р. 893.
4. Жарков В.Н. // Изв. АН СССР. Сер. геофиз. 1959. № 1.
5. Landolt-Börnstein. Numerical data and functional relationships in science and technology. Vol. 11. Berlin; Heidelberg; N. Y.; Tokyo, 1984.
6. Ringwood A.E. Composition and petrology of the Earth's mantle. N. Y., 1975.
7. Dziewonsky A., Anderson D. // Phys. Earth Planet. Inter. 1981. **25**. Р. 297.
8. Жарков В.Н. Геофизические исследования планет и спутников. Первое чтение им. О.Ю. Шмидта, 30 сент. 2002 г. М., 2003.
9. Zerr A., Boehler R. // Science. 1993. **262**. Р. 553.
10. Магницкий В.А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1956. № 2. С. 3.
11. Shen G., Lazor P. // J. Geophys. Res. 1995. **100**, N B9. Р. 17699.
12. Zerr A., Boehler R. // Nature. 1994. **371**. Р. 506.

Estimation of the Earth's mantle matter melting temperature

G. I. Petrunin^a, V. V. Lupachik^b

Department of Physics of Earth, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

E-mail: ^ageopopov@phys.msu.ru, ^bvilen85@gmail.com.

The Lindemann's hypothesis in the frame of the Debye acoustic approximation is used for calculation of the Lindemann constant for minerals with different bond type and give a direct estimate of the constancy of the ratio between mean-square oscillation amplitude of atoms and average distance between them on the melting curve. As a result, with the use of the data of modern seismic and mineralogical models one can estimate the melting temperature of the Earth's mantle matter from the obtained relation without fixed temperature points.

Keywords: Lindemann's hypothesis; melting temperature; Earth's mantle.

PACS: 91.35.Dc.

Received 16 March 2009.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 4(2009).

Сведения об авторах

1. Петрунин Геннадий Иванович — докт. физ.-мат. наук, профессор; тел.: 939-28-94, e-mail: geopopov@phys.msu.ru.
2. Лупачик Вилен Владимирович — аспирант; e-mail: vilen85@gmail.com.