

doi:10.3799/dqkx.2013.050

# 静水压力和单轴压力对后钙钛矿 MgSiO<sub>3</sub> 中地震波速的影响

何开华<sup>1</sup>, 陈琦丽<sup>1</sup>, 王清波<sup>1</sup>, 王希成<sup>1</sup>, 高本州<sup>1</sup>, 姬广富<sup>2</sup>

1. 中国地质大学数学与物理学院, 湖北武汉 430074

2. 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆炸物理国防科技重点实验室, 四川绵阳 621900

**摘要:** 后钙钛矿 MgSiO<sub>3</sub> 对于重新认识地球的基本结构和成分具有重大意义. 采用基于密度泛函理论的第一性原理计算对后钙钛矿 MgSiO<sub>3</sub> 在静水压力和单轴压力下的弹性性质和地震波速特征进行了研究. 首先通过总能比较和力学稳定性判据验证了后钙钛矿 MgSiO<sub>3</sub> 在高压下的稳定性, 并且计算得到的晶格常数与前人结果符合很好. 计算表明在高压下(D''层), 后钙钛矿具有比钙钛矿大的体变模量、剪切模量及密度, 并且具有大的地震波速, 这与地震观测 D''层中地震波速的不连续性一致. 在静水压力作用下, 计算结果显示压缩波各向异性基本保持不变, 而剪切波各向异性增强. 有单轴应力作用时, 后钙钛矿地震波各向异性差异非常明显, 当压力作用在 *a* 轴或 *c* 轴上时, 能够得到比对应静水压力下后钙钛矿更强的各向异性, 而恰好相反的是, 压缩 *b* 轴时, 各向异性有减小的趋势. 本研究能为解释地幔底部地震波不连续性和横向差异提供一定的参考.

**关键词:** 后钙钛 MgSiO<sub>3</sub>; 静水压力; 单轴压力; D''层; 地震波速; 矿物材料.

中图分类号: P315.3; O482.1

文章编号: 1000-2383(2013)03-0501-07

收稿日期: 2012-08-25

## Effects on Seismic Velocity of Post-Perovskite MgSiO<sub>3</sub> under Hydrostatic and Uniaxial Pressure

HE Kai-hua<sup>1</sup>, CHEN Qi-li<sup>1</sup>, WANG Qing-bo<sup>1</sup>, WANG Xi-cheng<sup>1</sup>, Gao Ben-zhou<sup>1</sup>, JI Guang-fu<sup>2</sup>

1. School of Mathematics and Physics, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China

2. Institute of Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China

**Abstract:** The elastic property and seismic velocity of Post-Perovskite (PPv) MgSiO<sub>3</sub> have been studied using first-principles calculations based on density of functional theory (DFT). Firstly, the stability of PPv-MgSiO<sub>3</sub> under high pressure is validated through total energy calculations and the criterion of mechanical stability. The obtained lattice constants are in accordance well with the previous calculated and experimental results. The calculations indicate that the bulk modulus, shear modulus, density and seismic velocity of PPv-MgSiO<sub>3</sub> are larger than those of Pv-MgSiO<sub>3</sub>, which are in agreement with seismic observations. Under hydrostatic pressure, the anisotropy of compressed wave has little change, while that of shear wave is enhanced. For the uniaxial pressure, both compressed and shear anisotropies are increased with strain along the *a* or *c* axis, while are decreased with strain along the *b* axis with respect to that of hydrostatic pressure. This study is useful for explaining the seismic velocity discontinuity and lateral heterogeneity in the D'' layer.

**Key words:** Post-Perovskite MgSiO<sub>3</sub>; hydrostatic pressure; uniaxial pressure; D'' layer; seismic velocity; mineral materials.

后钙钛矿 MgSiO<sub>3</sub> (Post-Perovskite MgSiO<sub>3</sub>, PPv-MgSiO<sub>3</sub>) 对于重新认识地球的基本结构和成分具有重大意义, 被认为是 21 世纪初地球深部研究最

重大的发现. 人们期望通过此新的高温高压相矿物解释地震波位于核幔边界上方的 D'' 层内的独特特征. 其主要特征包含以下几个方面: (1) 不连续性. 核

**基金项目:** 国家自然科学基金项目 (No. 41104054); 中央高校基本科研业务费资助项目.

**作者简介:** 何开华 (1978-), 男, 讲师, 主要从事纳米材料和矿物材料的计算模拟研究. E-mail: he23981006@126.com

幔边界上方 200~300 km 范围内,压缩波( $P$ 波)和剪切波( $S$ 波)波速比  $D''$  层上方波速都有约 3% 的增加;(2)强烈的不均匀性.地幔底部的 300 km 横向不均匀性明显增强,全球速度模型在  $D''$  层内的  $S$  波速度异常变化约为  $\pm 2\% \sim 4\%$ ,  $P$  波速度异常约为  $\pm 1\%$  (Gu *et al.*, 2001; Kárason and van der Hilst, 2001; Zhao, 2001; Grand, 2002);(3)强的各向异性.  $D''$  层高质量的反射、折射和绕射数据分析表明  $D''$  层中的  $S$  波分裂普遍存在,如环太平洋区域,水平极化的  $S$  波要比垂直极化的  $S$  波快 1%~3% (张中杰, 2002; 杨凤琴等, 2008);(4)存在超低声速区 (ultra low velocity zone, ULVZ). 位于  $D''$  层下部核幔边界 5~60 km 之间,  $P$  波速度减小 5%~10%, 而  $S$  波速度减小可达 10%~30%, 并且密度增加可达 10% (Garnero and Helmberger, 1995; Wen and Helmberger, 1998; Vidale and Hedlin, 1998; Ni and Helmberger, 2003).  $D''$  层在地球动力学上有重大意义,因而理解和解释该层的地震波特征一直是地震学和相关学科的研究热点 (朱介寿, 2000; Murakami *et al.*, 2004; 候渭等, 2005; 唐群署和李丽红, 2006; Rost *et al.*, 2010; 张苑和舒良树, 2010). 不过,由于其自身的复杂性,迄今对地震波的异常传播特征仍存在较大争议,综合目前成果来看,形成  $D''$  层的地震波特征应该是多方面的,可能是包含局部熔融体、化学不均匀性等,最近又提出了  $D''$  层中伴随有相变产生. 因此,要揭示  $D''$  层地震波特征的本质仍需要各个学科继续努力.

2004 年以来,多个研究组从模拟计算和实验分别证实了在  $D''$  层条件下,钙钛矿  $MgSiO_3$  (Perovskite  $MgSiO_3$ ,  $Pv-MgSiO_3$ ) 会相变成  $PPv-MgSiO_3$  (Iitaka *et al.*, 2004; Mao *et al.*, 2004; Murakami *et al.*, 2004; Oganov and Ono, 2004; Shim *et al.*, 2004). 该相变可引起 1%~2% 的地震波速度和 1% 左右的密度增加,并且还可以引起可观的各向异性,从而提供了新的机制来解释地震学在  $D''$  层的观测结果 (Garnero *et al.*, 2004; Wookey *et al.*, 2005).

由于  $PPv-MgSiO_3$  发现的时间较短,并且相变在实验上很难控制,加之极端条件下测量  $PPv-MgSiO_3$  的性质很难,人们对其在  $D''$  层条件下的性质的认识还不充分. 因此借助基于量子力学的第一性原理计算模拟方法是研究和理解此区领域的有力方法. 到目前为止,此方法已被成功应用于研究镁橄榄石 (Liu *et al.*, 2009) 和  $Pv-MgSiO_3$  的性质

(Li *et al.*, 2005; Stackhouse *et al.*, 2006; Zhang and Oganov, 2006; Bengtson *et al.*, 2008; Caracas *et al.*, 2010; Hsu *et al.*, 2010). 利用第一性原理计算方法,预测了  $Pv-MgSiO_3$  向  $PPv-MgSiO_3$  的相变,有些工作得到了与实验符合较好的结果,并且一定程度上能够证实在这个区域内的地震学或地球动力学结论. 在这些计算工作中,都考虑到了静水压对地震波速及其各向异性的影响. 在复杂的地球内部,可能会存在各轴上压力相差比较大的情况,此时  $PPv-MgSiO_3$  的地震波速和各向异性又会发生怎样的变化呢? 因此本文将采用基于量子力学的第一性原理计算方法,比较研究在静水压力和单轴压力下地震波速和各向异性的特征.

## 1 计算模型及方法

$PPv-MgSiO_3$  为底心正交结构,空间群为  $Cmcm$ ,其晶胞如图 1 所示:沿  $c$  轴方向在  $SiO_6$  八面体顶角位置的氧原子相连接,沿  $a$  轴方向由  $SiO_6$  八面体两边相连形成链状连接,这种  $SiO_6$  八面体的链沿  $b$  轴形成层状堆积,  $Mg^{2+}$  阳离子位于  $SiO_6$  八面体的层状堆积之间. 本文计算采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的平面波赝势方法的 CASTEP 软件. 电子与离子核间的相互作用用超软赝势来描述 (Perdew and Zunger, 1981), 交换关联相互作用采用局域密度近似 (LDA) (Vanderbilt, 1990). 为确保计算能满足足够的精度,本文计算平面波截断能均取为  $1.282 \times 10^{-16}$  J, 系统总能量和电荷密度在布里渊区的积分计算使用 Monkhorst-Pack 方案 (Monkhorst and Pack, 1976) 来选择  $k$  空间网格点 ( $Pv-MgSiO_3$  和  $PPv-MgSiO_3$  分别取为  $10 \times 10 \times 4$  和  $18 \times 6 \times 8$ ), 保证了体系能

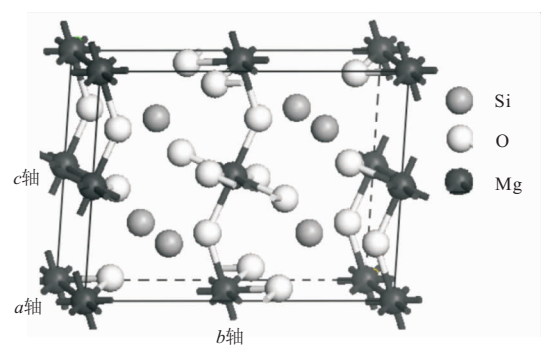


图 1  $PPv-MgSiO_3$  结构

Fig. 1 Structure of  $PPv-MgSiO_3$

量和构型在准准备基上的收敛. 原子间的相互作用收敛标准为  $1.602 \times 10^{-11}$  J/m, 每原子的能量收敛标准为  $8.01 \times 10^{-25}$  J.

## 2 结果与讨论

### 2.1 高压下的晶格常数与弹性性质

首先对 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在 0~180 GPa 范围内的结构进行了优化, 为了便于比较, 对 Pv-MgSiO<sub>3</sub> 也进行了计算. 图 2 给出了 2 种结构的焓差值随压强的变化关系. 可以看出当压力高于 110 GPa 时, Pv-MgSiO<sub>3</sub> 的焓要高于 PPv-MgSiO<sub>3</sub>, 说明在高压下 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 要比 Pv-MgSiO<sub>3</sub> 结构更加稳定, 相变可能在此压强附近发生. 前人的计算工作 (Shim *et al.*, 2004) 给出了 120 GPa 时 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 的晶格常数为  $a = 2.456 \times 10^{-10}$  m,  $b = 8.042 \times 10^{-10}$  m 和  $c = 6.093 \times 10^{-10}$  m, 实验在 121 GPa, 300 K 条件下测得的晶格常数分别为  $a = 2.455 \times 10^{-10}$  m,  $b = 8.051 \times 10^{-10}$  m 和  $c = 6.099 \times 10^{-10}$  m, 本文计算得到的 120 GPa 时晶格常数为  $a = 2.440 \times 10^{-10}$  m,  $b = 8.031 \times 10^{-10}$  m 和  $c = 6.068 \times 10^{-10}$  m. 可以看出本文计算结果与前人的计算结果和实验值符合得很好.

在静水压力作用下, 两种结构晶格常数比率 ( $b/a$  和  $c/a$ ) 变化情形如图 3 所示. 很明显两种结构的压缩性质存在较大的差异, PPv 结构压缩时各向异性要强于 Pv-MgSiO<sub>3</sub>. Pv-MgSiO<sub>3</sub> 在压力作用下,  $b/a$  和  $c/a$  同时增大, 表明  $a$  轴最容易被压缩. 在较低压力时,  $c/a$  变化较为平缓, 随着压力的增加趋近线性变化; 而  $b/a$  始终接近线性变化, 并且线性变化的斜率与  $c/a$  在高压时的斜率趋于一致, 说明在较高压强时,  $b$  轴与  $c$  轴具有相近的压缩性质. 对于 PPv-MgSiO<sub>3</sub>,  $b/a$  随压力减小, 而  $c/a$  随压力增加, 因此 3 轴中,  $b$  轴最容易被压缩, 而  $c$  轴最难以被压缩, 这与其他研究中认为  $b$  轴方向为晶格优选方向一致 (Tsuchiya *et al.*, 2004). 两种结构间不同的压缩特性, 必然导致它们间弹性常数的差异.

表 1 中列出了 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在不同压力下的弹性常数. 从表中可以看出 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 有着较强的各向异性, 并且 9 个独立的弹性常数都随着压力的增加而增大, 各向异性增强. 在所有压力下, 3 个压缩弹性常数中  $C_{11}$  和  $C_{33}$  很接近, 且都比  $C_{22}$  要大一些, 这也验证了前面提到的  $b$  轴最容易被压缩的事实. 剪切弹性常数中虽然都在随压力增加而增大, 但

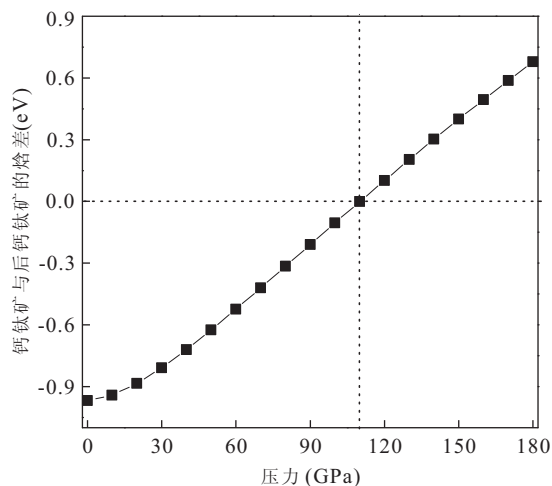


图 2 Pv-与 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 的焓差值 ( $\Delta H$ ) 与压力 ( $P$ ) 的关系  
Fig. 2 Difference of enthalpy between Pv- and PPv-MgSiO<sub>3</sub>

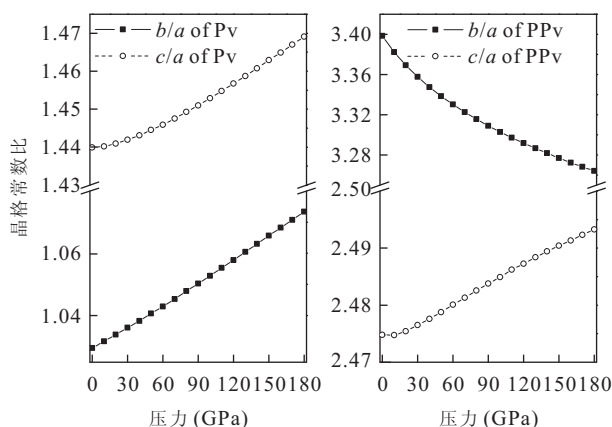


图 3 Pv-与 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 中晶格常数比值 ( $b/a$ ,  $c/a$ ) 与压力 ( $P$ ) 的关系

Fig. 3 Pressure dependence of  $b/a$  and  $c/a$  of Pv- and PPv-MgSiO<sub>3</sub>

是可以看出  $C_{66}$  在 0 GPa 时 (此条件下 Pv-MgSiO<sub>3</sub> 更稳定) 要小于  $C_{44}$  和  $C_{55}$ , 但在高压下, 明显增加很快, 其值超过了  $C_{44}$  和  $C_{55}$ , 说明晶体在高压作用下侧向偏移性质在发生剧烈的改变. PPv-MgSiO<sub>3</sub> 属正交晶系, 可以利用正交晶系的力学稳定性判据来验证其在高压下的结构稳定性. 正交晶系的力学稳定性判据为:

$$\begin{aligned} C_{11} > 0, C_{22} > 0, C_{33} > 0, C_{44} > 0, C_{55} > 0, \\ C_{66} > 0, \\ C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{13} + 2C_{23} > 0, C_{11} + \\ C_{22} - 2C_{12} > 0, C_{11} + C_{33} - 2C_{13} > 0, C_{22} + C_{33} - \\ 2C_{23} > 0, \end{aligned}$$

由表中所列弹性常数可知 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在高压下是满足力学稳定性的, 也进一步证实了“Pv→

表 1 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在不同压力下(P)的弹性常数(单位:GPa)Table 1 Elastic constants of PPv-MgSiO<sub>3</sub> under different pressure (in GPa)

P	C <sub>11</sub>	C <sub>22</sub>	C <sub>33</sub>	C <sub>44</sub>	C <sub>55</sub>	C <sub>66</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>23</sub>
0	624	435	516	100	134	96	49	84	119
120	1 290	962	1 290	300	286	415	418	325	487
160	1 475	1 103	1 496	352	331	504	521	402	593

PPv”相变的产生.

图 4(a)给出了 Pv-和 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在高压作用下体变模量和剪切模量的变化. 从图中可以看出, 压力较低时, Pv-MgSiO<sub>3</sub> 的体变模量和剪切模量均要大于 PPv-MgSiO<sub>3</sub>. 随着压力的增大, PPv-MgSiO<sub>3</sub> 的体变模量和剪切模量增加较快, 在一定压强后, 会比 Pv-MgSiO<sub>3</sub> 的要大. 压缩声速(纵波,  $V_p$ )和剪切声速(横波,  $V_s$ )分别由  $V_p = \sqrt{(B + 4G/3)/\rho}$  和  $V_s = \sqrt{G/\rho}$  给出, 因此两种结构的体变模量和剪切模量的差异会造成地震波速的差异. Pv-和 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在高压下的密度变化如图 4b 所示, 可以看出, 在本文所计算的的压力范围内, PPv-MgSiO<sub>3</sub> 的密度均大于 Pv-MgSiO<sub>3</sub>, 因此也可以说明实验发现的 Pv-MgSiO<sub>3</sub> 在高压下密度增加, 即是由 Pv→PPv 相变引起的. 两种结构的体相波速如图 5 所示: 低压力时, PPv-MgSiO<sub>3</sub> 的  $V_p$  和  $V_s$  都要低于 Pv-MgSiO<sub>3</sub>, 而在压力较高时, PPv-MgSiO<sub>3</sub> 的  $V_p$  和  $V_s$  均大于 Pv-MgSiO<sub>3</sub>. 在 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 能够稳定存在的 D' 层中, 压强可以达到 125~135 GPa, 因此可以解释在此区域内, 速度要大于其他以 Pv-MgSiO<sub>3</sub> 形式存在的区域.

如前所述, 地幔底部的 300 km 横向不均匀性明显增强, 全球速度模型在 D' 层内的 S 波速度异常变化约为  $\pm 2\% \sim 4\%$ , P 波速度异常约为  $\pm 1\%$ . 在复杂的地球系统内部, PPv-MgSiO<sub>3</sub> 各方向上受到的压力可能相差较大, 并且可能产生不同于静水压力情形下的地震波特征, 借此来为解释这种横向不均匀性提供一种参考, 因此本文研究了单轴压力作用下 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 的弹性性质和地震波速特征. 文中计算时单轴压力是通过改变晶格单轴的晶格长度来实现的, 并且对晶格长度改变后的晶格中离子的位置进行了优化. 图 6 给出了 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在单轴压力作用下体变模量和剪切模量的变化情况. 图中的各点为计算值, 线为拟合. 从图中可以反映出, 体变模量和剪切模量在单轴应力作用下基本上呈现出线性变化, 但是在不同轴上变化差异较大. 沿 a 轴施

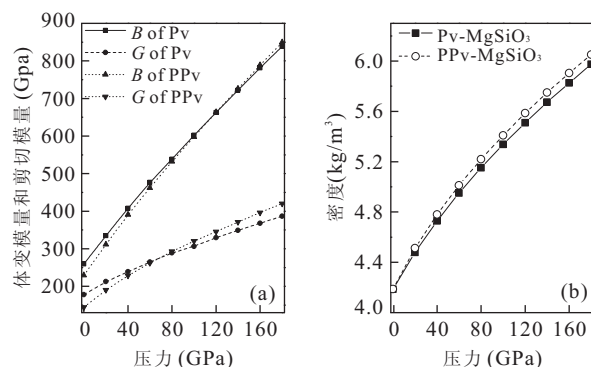
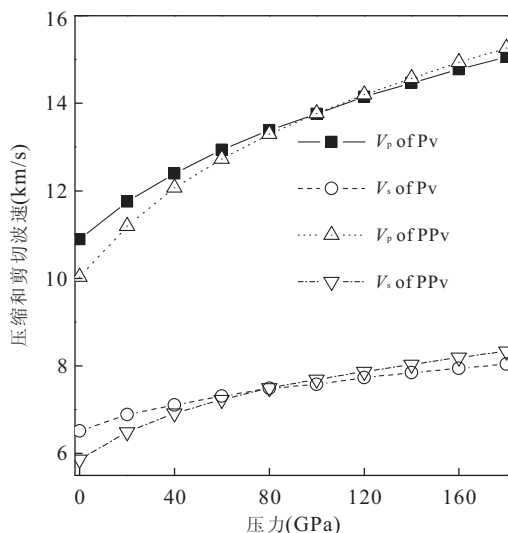


图 4 体变模量(B), 剪切模量(G)及密度(D)与静水压力(P)的关系

Fig. 4 Pressure dependence of bulk modulus, shear modulus and density

图 5 Pv-与 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 中波速(V)与压力(P)关系Fig. 5 Pressure dependence of seismic velocity of Pv- and PPv-MgSiO<sub>3</sub>

加压力时, 体变模量和剪切模量的斜率最小; 而当压力施加在 c 轴时, 体变模量和剪切模量分别对应最大斜率. 这种不规则的变化会引起异于静水压力作用下的各向异性. 因此单轴压力施加在不同的轴上时, 地震波速和其各向异性会发生强烈的变化.

## 2.2 地震波速各向异性

图 7 给出了压缩波在静水压力和单轴压力作用下沿各方向的传播特征. 在静水压力作用下,  $V_p$  最大值会由 [100] 方向变化到 [001] 方向, 而最小的  $V_p$  始终处在 [010] 方向上. 在单轴压力作用下,  $V_p$  表现出了与静水压下的不同特征. 当 a 轴施加压力时,  $V_p$  沿 [100] 方向始终具有最大值, 而最小值并不是静水压下的 [010] 方向, 而是 [111] 方向, 并且与

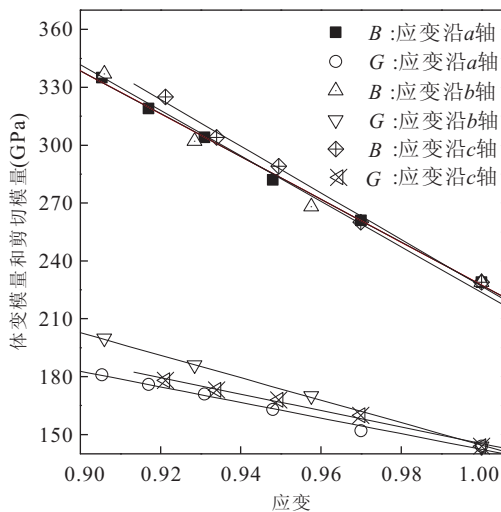


图 6 体变模量(B)和剪切模量(G)与单轴压力的关系  
Fig. 6 Uniaxial pressure dependence of bulk modulus and shear modulus

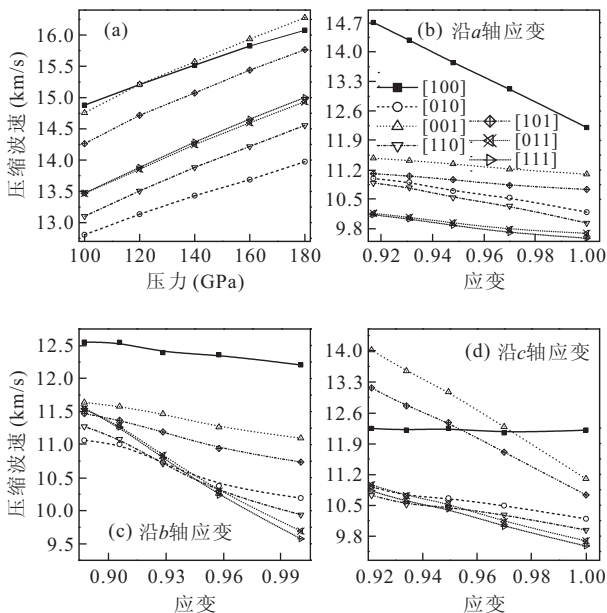


图 7 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 中不同传播方向压缩波波速与压力(应变)的关系  
Fig. 7 Hydrostatic and uniaxial pressures dependence of seismic velocities of different directions

表 2 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 中在压力下的压缩波(A<sub>p</sub>)和剪切波(A<sub>s</sub>)的各向异性

Table 2 Anisotropies of seismic velocities of PPv-MgSiO<sub>3</sub> under pressure

		A <sub>p</sub>	A <sub>s</sub>
静水	100 GPa	15.1%	17.6%
压力	180 GPa	15.1%	23.6%
	a/a <sub>0</sub> =0.907 6	15.65%	19.84%
	a/a <sub>0</sub> =0.877 0	40.97%	28.73%
单轴	b/b <sub>0</sub> =0.876 0	14.62%	9.5%
压力	b/b <sub>0</sub> =0.836 0	13.63%	17.77%
	c/c <sub>0</sub> =0.910 4	27.11%	26.52%
	c/c <sub>0</sub> =0.882 0	29.97%	31.93%

方向,而压力较大时变为[110]方向. 剪切波速也有类似的转变.

地震波速各向异性的定义式为:  $A = (V_{max} - V_{min}) / \langle V \rangle \times 100\%$ , 其中  $V_{max}$  和  $V_{min}$  分别代表压缩和剪切最大和最小速度,  $\langle V \rangle$  为等向平均值. 表 2 给出了 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 分别在静水压力下和单轴压力下的各向异性. 在静水压力作用下, 因为各方向压缩波的变化都接近斜率相同的线性变化, 因此其各向异性(A<sub>p</sub>)基本保持不变, 而剪切波各向异性(A<sub>s</sub>)增强. 在单轴压力作用下(表中所列 a/a<sub>0</sub>、b/b<sub>0</sub> 和 c/c<sub>0</sub> 分别为静水压力在 100 GPa 和 180 GPa 时对应的晶格常数与零压下晶格常数的比率), 各向异性呈现出了丰富的变化. 压力作用在 a 轴时, 各向异性变化较为明显, 特别是 A<sub>p</sub>, 当 a 为 180 GPa 下的晶格常数时, 其达到了 41%; A<sub>s</sub> 也有随着压力的增加而增强的趋势. 当压力作用在 b 轴时, 恰好和在 a 轴施加压力时相反, 此时 A<sub>p</sub> 和 A<sub>s</sub> 都会比对应静水压力下的各向异性要低, 也就是 b 轴的压缩有利于减小各向异性. 施加在 c 轴上时现象和在 a 轴上类似, 均比对应静水压力时的各向异性要高一些, 而且随着压力的增大, A<sub>p</sub> 和 A<sub>s</sub> 都在增加.

### 3 结论

采用第一性原理计算研究了 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在高压(D' 层, 静水压力和单轴压力)的弹性性质和地震波速特征. 首先通过计算 Pv-和 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 两种结构的总能及正交晶系的力学稳定性判据验证了 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 在高压下的稳定性, 得到的晶格常数与前人的实验值和计算结果符合得很好. 在静水压力的作用下, PPv 结构的晶格常数比率(b/a, c/a)

[011]方向的速度非常接近. 而当应力施加到 b 轴时, V<sub>p</sub> 最大值方向仍为[100]方向, 在较小压力时, V<sub>p</sub> 最小值在[111]方向, 但随着压力增加, [110]和[010]方向会相继成为 V<sub>p</sub> 最小值方向. 当 c 轴上施加压力时, 有一个非常有趣的现象, 沿[100]方向的波速基本上保持不变. 施加压力较小时, V<sub>p</sub> 在[100]方向有最大值, 而后[001]方向为最大值. 最小值方向也发生了转变, 压力较小时, 速度最小值在[111]

呈现出比 Pv 结构更复杂的变化;计算得到的弹性常数在各方向的差异较大,并且随压力变化明显,上述两方面都揭示出 PPv-MgSiO<sub>3</sub> 具有较大的各向异性. 计算得到了地震波速随静水压和单轴压力作用下的变化情况,在高压作用下,PPv-MgSiO<sub>3</sub> 的地震波速要大于 Pv-MgSiO<sub>3</sub>,符合地震观测现象. 在静水压力和单轴压力的作用下,地震波最大和最小速度方向都有可能发生转变. 最后分析了压力作用对地震波速各向异性的影响,在静水压力作用下,压缩波各向异性基本保持不变,而剪切波各向异性增强. 当单轴压力作用在 *a* 或 *c* 轴上时,能够得到增强的各向异性,而恰好相反,压缩 *b* 轴时,各向异性有减小的趋势.

## References

- Bengtson, A., Persson, K., Morgan, D., 2008. Ab Initio Study of the Composition Dependence of the Pressure-induced Spin Crossover in Perovskite (Mg<sub>1-x</sub>, Fe<sub>x</sub>) SiO<sub>3</sub>. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 265(3-4): 535-545. doi: 10.1016/j.epsl.2007.10.049
- Caracas, R., Mainprice D., Thomas C., 2010. Is the Spin Transition in Fe<sup>2+</sup>-Bearing Perovskite Visible in Seismology? *Geophys. Res. Lett.*, 37(3): L133091 - L133096. doi: 10.1029/2010GL043320
- Garnero, E. J., Helmberger, D. V., 1995. A Very Slow Basal Layer Underlying Large-Scale Low-Velocity Anomalies in the Lower Mantle Beneath the Pacific: Evidence from Core Phases. *Phys. Earth Planet. Int.*, 91(1-3): 161-176. doi: 10.1016/0031-9201(95)03039-Y
- Garnero, E. J., Maupin, V., Lay, T., et al., 2004. Variable Azimuthal Anisotropy in Earth's Lowermost Mantle. *Science*, 306(5694): 259-261. doi: 10.1126/science.1103411
- Grand, S. P., 2002. Mantle Shear-wave Tomography and the Fate of Subducted Slabs. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 360(1800): 2475-491. doi: 10.1098/rsta.2002.1077
- Gu, Y. J., Dziewonski, A. M., Su W. J., et al., 2001. Models of the Mantle Shear Velocity and Discontinuities in the Pattern of Lateral Heterogeneities. *J. Geophys. Res.*, 106(B6): 11169-11199. doi: 10.1029/2001JB000340
- Hou, W., Xie, H. S., Zhou, W. G., 2005. Lowermost Mantle Layer and Its Significance in the Earth's Material Evolution. *Earth-Science Frontiers*, 12(1): 37-41 (in Chinese with English abstract).
- Hsu, H., Umemoto, K., Blaha, P., et al., 2010. Spin States and Hyperfine Interactions of Iron in (Mg, Fe) SiO<sub>3</sub> Perovskite under Pressure. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 294(1-2): 19-26. doi: 10.1016/j.epsl.2010.02.031
- Iitaka, T., Hirose, K., Kawamura, K., et al., 2004. The Elasticity of the MgSiO<sub>3</sub> Post-Perovskite Phase in the Earth's Lowermost Mantle. *Nature*, 430(6998): 442-445. doi: 10.1038/nature02702
- Kárason, H., van der Hilst, R. D., 2001. Tomographic Imaging of the Lowermost Mantle with Differential Times of Refracted and Diffracted Core Phases (PKP, Pdiff). *J. Geophys. Res.*, 106(B4): 6569-6587. doi: 10.1029/2000JB900380
- Li, L., Brodholt, J. P., Stackhouse, S., et al., 2005. Electronic Spin State of Ferric Iron in Al-Bearing Perovskite in the Lower Mantle. *Geophys. Res. Lett.*, 32(17): L173071-L173074. doi: 10.1029/2005GL023045
- Liu, L., Du, J. G., Zhao, J. J., et al., 2009. Elastic Properties of Hydrous Forsterites under High Pressure: First-principle Calculations. *Phys. Earth Planet. Int.*, 176(1-2): 89-97. doi: 10.1016/j.pepi.2009.04.004
- Mao, W. L., Shen, G. Y., Prakapenka, V. B., et al., 2004. Ferromagnesian Post-Perovskite Silicates in the D'' Layer of the Earth. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 101(45): 15867-15869. doi: 10.1073/pnas.0407135101
- Monkhorst, H. J., Pack, J. D., 1976. Special Points for Brillouin-zone Integrations. *Phys. Rev. B*, 13(12): 5188-5192. doi: 10.1103/PhysRevB.13.5188
- Murakami, M., Hirose, K., Kawamura, K., et al., 2004. Post-Perovskite Phase Transition in MgSiO<sub>3</sub>. *Science*, 304(5672): 855-858. doi: 10.1126/science.1095932
- Ni, S. D., Helmberger, D. V., 2003. Seismological Constraints on the South African Superplume; Could Be the Oldest Distinct Structure on Earth. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 206(1-2): 119-131. doi: 10.1016/S0012-821X(02)01072-5
- Oganov, A. R., Ono, S., 2004. Theoretical and Experimental Evidence for A Post-Perovskite Phase of MgSiO<sub>3</sub> in Earth's D'' layer. *Nature*, 430(6998): 445-448. doi: 10.1038/nature02701
- Perdew, J. P., Zunger, A., 1981. Self-interaction Correction to Density-Functional Approximations for Many-Electron Systems. *Phys. Rev. B*, 23(10): 5048-5079. doi: 10.1103/PhysRevB.23.5048
- Rost, S., Garnero, E. J., Stefan W., 2010. Thin and Intermittent Ultralow-Velocity Zones. *J. Geophys. Res.*, 115(B6): B0631201 - B0631212. doi: 10.1029/2009JB006981
- Shim, S. H., Duffy, T. S., Jeanloz, R., et al., 2004. Stability and Crystal Structure of MgSiO<sub>3</sub> Perovskite to the Core-mantle Boundary. *Geophys. Res. Lett.*, 31(10):

- L106031—L106035. doi: 10. 1029/2004GL019639
- Stackhouse, S., Brodolt, J. P., Dobson, D. P., et al., 2006. Electronic Spin Transitions and the Seismic Properties of Ferrous Iron-Bearing  $\text{MgSiO}_3$  Post-perovskite. *Geophys. Res. Lett.*, 33(12): L12S031—L12S034. doi: 10. 1029/2005GL025589
- Tang, Q. S., Li, L. H., 2006. The Earth's Lowermost Mantle and Its Seismological Research Progress. *Earth Science Frontiers*, 13(2): 213—223 (in Chinese with English abstract).
- Tsuchiya, T., Tsuchiya, J., Umemoto, K., et al., 2004. Elasticity of Post-Perovskite  $\text{MgSiO}_3$ . *Geophys. Res. Lett.*, 31(14): L146031—L146034. doi: 10. 1029/2004GL020278
- Vanderbilt, D., 1990. Soft Self-Consistent Pseudopotentials in a Generalized Eigenvalue Formalism. *Phys. Rev. B*, 41(11): 7892—7895. doi: 10. 1103/PhysRevB. 41. 7892
- Vidale, J. E., Hedlin, M. A. H., 1998. Evidence for Partial Melt at the Core-Mantle Boundary North of Tonga from the Strong Scattering of Seismic Waves. *Nature*, 391: 682—684. doi: 10. 1038/35601
- Wen, L., Helmberger, D. V., 1998. Ultra-low Velocity Zones Near the Core-Mantle Boundary from Broadband PKP Precursors. *Science*, 279(5357): 1701—1703. doi: 10. 1126/science. 279. 5357. 1701
- Wookey, J., Stackhouse, S., Kendall, J. M., et al., 2005. Efficacy of the Post-Perovskite Phase as an Explanation for Lowermost-mantle Seismic Properties. *Nature*, 438(7070): 1004—1007. doi: 10. 1038/nature04345
- Yang, F. Q., Liu, B., Ni, S. D., et al., 2008. Shear Velocity Anisotropy of the Lowermost Mantle Beneath the Siberia. *Acta Seismological Sinica*, 30(2): 209—213 (in Chinese with English abstract).
- Zhang, F. W., Oganov, A. R., 2006. Valence State and Spin Transitions of Iron in Earth's Mantle Silicates. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 249(3—4): 436—443. doi: 10. 1016/j. epsl. 2006. 07. 023
- Zhang, Y., Shu, L. S., 2010. On Research Achievements in Earth's D' Layer in Core-Mantle Boundary: An Important Breakthrough in 21st Experimental Petrology. *Journal of Geology*, 34(2): 113—116 (in Chinese with English abstract).
- Zhang, Z. J., 2002. A Review of the Seismic Anisotropy and Its Applications. *Progress in Geophysics*, 17(2): 281—293 (in Chinese with English abstract).
- Zhao, D. P., 2001. Seismic Structure and Origin of Hotspots and Mantle Plumes. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 192(3): 251—265. doi: 10. 1016/S0012—821X(01)00465—4
- Zhu, J. S., 2000. Structure of Lower Mantle and Core-Mantle Boundary Region and Its Geodynamics. *Advances in Earth Sciences*, 15(2): 139—142 (in Chinese with English abstract).

#### 附中文参考文献

- 侯渭, 谢鸿森, 周文戈, 2005. 地幔底层及其在全球物质演化中的意义. *地学前缘*, 12(1): 37—41.
- 唐群署, 李丽红, 2006. 核幔边界 D' 区的地震学研究进展. *地学前缘*, 13(2): 213—223.
- 杨凤琴, 刘斌, 倪四道, 等, 2008. 西伯利亚下地幔底部的剪切波各向异性. *地震学报*, 30(2): 209—213.
- 张苑, 舒良树, 2010. 21 世纪实验岩石学的重大突破——核幔边界 D' 层研究. *地质学刊*, 34(2): 113—116.
- 张中杰, 2002. 地震各向异性研究进展. *地球物理学进展*. 17(2): 281—293.
- 朱介寿, 2000. 下地幔及核幔边界结构及地球动力学. *地球科学进展*, 15(2): 139—142.