

МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТАВА ВНЕШНЕГО ЖИДКОГО ЯДРА ЗЕМЛИ

© 2023 г. В. Ф. Анисичкин*

Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

**E-mail: avf@hydro.nsc.ru*

Поступила в редакцию 10.06.2022 г.

После доработки 17.10.2022 г.

Принята к публикации 19.10.2022 г.

Предложены согласующиеся с экспериментальными данными выражения для вычисления скорости звука и температуры конденсированной среды при давлениях внешнего жидкого ядра Земли через параметры ударной адиабаты среды. Добавки во внешнем жидком железоникелевом ядре Земли подбирались так, чтобы расчетные давление, плотность и скорость звуковых волн соответствовали геофизическим значениям, а температура не выходила за допустимые пределы. Получено, что необходимым требованием в качестве основной легкой добавки в верхних слоях ядра Земли удовлетворяет карбид железа Fe_3C с содержанием углерода (4.0 ± 0.5) мас. %, с добавками FeS_2 и SiC с суммарным содержанием Si и S до 1.5 мас. %. Менее вероятно добавка углерода в алмазной фазе до 0.5 мас. %. Во внешнем ядре Земли у границы с твердым внутренним ядром легкими добавками могут быть карбид железа Fe_3C с содержанием углерода (3.5 ± 0.4) мас. % или углерод в алмазной фазе (4.0 ± 0.5) мас. %. Добавки в основание внешнего жидкого ядра Земли, содержащие Si, S в существенных количествах, маловероятны. Содержание H во внешнем жидком ядре Земли может быть существенно при минимально возможных температурах ядра. Содержание O не существенно.

Ключевые слова: уравнение состояния конденсированной среды, состав ядра Земли, углерод.

DOI: 10.31857/S0002333723020035, **EDN:** LHHSXF

ВВЕДЕНИЕ

Из геофизических данных следует, что в состав ядра должны входить вещества менее плотные, чем железо. Такими могут быть только достаточно распространенные в Солнечной системе химические элементы H, C, O, Si, S.

Железоникелевые метеориты, предположительно являясь осколками ядер небесных тел, разрушившихся в результате столкновений или взрывов [Анисичкин, 1997], могли иметь состав, близкий к составу ядра Земли, так как планеты Солнечной системы образовались из одного протопланетного облака. Однако в таких метеоритах, даже метрового размера, обычно нет значительных количеств легких элементов [Norton, 1998].

Причиной дефицита легких добавок в железоникелевых метеоритах может быть то, что после выделения из недр родительского тела в течение миллиардов лет в космосе, до падения на Землю, они потеряли возможные легкие элементы из своего состава в результате слабой связи с металлом и диффузии. Наиболее мобилен водород, при этом гидриды железа разлагаются при низких давлениях с выделением молекулярного водорода [Iizuka-Oku et al., 2017]. Поэтому, из науки о ме-

теоритах, водород наиболее предпочтителен в качестве добавки в ядро Земли.

Другой причиной может быть то, что легкие элементы или их соединения с железом находились в ядре разрушенной планеты в виде крупных включений, и отделились от металлической матрицы в результате катастрофических дроблений родительского тела, и при разрушении метеоритов в атмосфере Земли. Из легких элементов, вероятно только углерод может образовывать при высоких давлениях и температурах отдельные крупные тела малой плотности с необходимой, более высокой, по сравнению с железом, скоростью звука.

В исследованиях наибольшее распространение получили два основных метода подбора сред, моделирующих состав ядра Земли. Это эксперименты при высоких ударных и статических давлениях. Другой метод – построение полуэмпирических уравнений состояния (УрС), расчеты из “первых принципов”.

Водород в составе гидридов железа как возможных добавок в железоникелевое ядро Земли, рассмотрен, например, в работах [Бажанова и др., 2012; Сагатова и др., 2020]. В работе [Sakamaki et al., 2016] получено, что меньшая плотность, но

большая скорость звука во внутреннем твердом ядре, по сравнению с железом, может объясняться концентрацией водорода в ядре Земли. В работах [Hirose et al., 2021; Tagawa et al., 2021; Vočadlo et al., 2020], также отдается предпочтение водороду, как основной легкой добавке в ядро Земли.

В работе [Литасов и др., 2015] на основании “первопринципных” расчетов получено содержание углерода 2.0–2.9 мас. % в составе карбидов у границы внутреннего ядра Земли. В работах [Бажанова и др., 2012; Chen et al., 2018; Сагатов и др., 2019; Xiaojun et al., 2019] карбиды железа также рассматриваются как возможные основные легкие компоненты твердого внутреннего ядра Земли. Отдельные включения углерода в виде графита и алмаза встречаются в железных метеоритах [Norton, 1998]. Но в работах [Nakajima et al., 2015; Yokoo et al., 2022] приводятся аргументы против значительного присутствия углерода в ядре Земли.

В работах [Siebert et al., 2013; Badro et al., 2014] приводятся аргументы в пользу присутствия кислорода в ядре Земли.

Соединения кремния с кислородом и некоторыми металлами, являются важной составной частью силикатных и железосиликатных метеоритов. В работах [Zhang et al., 2018; Komabayashi et al., 2019] получено, что кремний во внутреннем твердом ядре Земли может объяснять его характеристики.

Сера, в основном в виде троилита (FeS), в различных количествах встречается в метеоритах как силикатных, так и железных [Norton, 1998]. В работе [Helfrich et al., 2004] получено, что содержание 10.5 ± 3.5 мас. % серы и 1.5 ± 1.5 мас. % кислорода может объяснять плотность и скорость сейсмических волн во внешнем жидком ядре Земли.

В обзоре [Литасов и др., 2016] наиболее обоснованной считается модель ядра Земли с содержаниями (мас. %): Si = 5–6, O = 0.5–1.0, S = 1.8–1.9, C \approx 2.0.

В работе [Бажанова и др., 2017] определены четыре наиболее вероятные составы легких добавок в ядро Земли: 1) 14 мол. % C; 2) 16 мол. % O; 3) 7 мол. % S + 9 мол. % H; 4) 6 мол. % Si + 9 мол. % H.

В обзоре [Hirose et al., 2021] из сравнения данных по физике минералов, космохимии и геохимии более вероятным предполагается сложный состав легких элементов в ядре Земли. По мнению авторов, состав внешнего ядра Земли: (Fe + 5% Ni + 1.7% S + 0–4.0% Si + 0.8–5.3% O + 0.2% C + 0–0.26% H по массе), что составляет около 7 мас. % легкой добавки в о внешнем жидком ядре Земли.

В работах [Анисичкин, 2000; Титов и др., 2004; Анисичкин и др., 2009] представлены экспериментальные данные и результаты расчетов по

ударному сжатию железа с добавками углерода, кислорода, кремния и серы. Однозначный вывод о составе ядра Земли сделан не был из-за неучета влияния температуры на параметры состояния испытываемой среды.

Выше упомянуты далеко не все публикации с аргументами “за” или “против” той или иной легкой добавки в ядро Земли. Но и из приведенных ссылок следует, что нет устоявшегося мнения об элементном составе ядра Земли. Причиной таких расхождений представляется то, что в разных исследованиях используются разные методы расчетов и экспериментов и при условиях, не всегда близких к параметрам состояния ядра Земли.

Поэтому цель настоящей работы – подбор и сравнение по единой методике возможных добавок в железоникелевое ядро Земли, удовлетворяющих основным известным характеристикам ядра Земли.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

В методах исследования ядра Земли одним из основных является расчет его состава на основе полуэмпирических УрС, опирающихся на ударно-волновые и статические экспериментальные данные при высоких давлениях. Ударно-волновые данные более адекватны решаемой задаче, так как ударные адиабаты (УА) железа с добавками могут быть получены во всем диапазоне давлений и температур, характерных для ядра Земли.

Внешнее ядро Земли жидкое, поэтому, в рассматриваемой задаче, нецелесообразно использовать широкодиапазонные многофазные УрС, которые усложняют расчеты. Достаточно использовать УрС конденсированной среды в жидком состоянии.

Так как ядро Земли состоит в основном из железа, то неточности в его УрС приводят к различным выводам о составе добавок в ядре Земли. Поэтому основная задача состоит в выборе УрС железа, наиболее полно согласующегося с известными его характеристиками при высоких давлениях.

УрС конденсированной среды удобно представить в виде суммы потенциальной p_p и тепловой p_h составляющих полного давления [Зельдович и др., 1963]:

$$p(V, T) = p_p(V) + p_h(V, T). \quad (1)$$

Другой подход в построении УрС заключается во введении понятия сжимаемого “коволома”, в котором тепловое давление создается точечными частицами идеального одноатомного газа, занимающими отдельный, “свободный” от упругих

частиц объем [Копышев, 1971; 2009]. В модели сжимаемого коволюма УрС можно придать вид:

$$V(p, T) - V_C(p) = RT/p \equiv V_i(p, T), \quad (2)$$

где: V – объем; p – давление; T – температура; V_C – коволюм, собственный объем упругих частиц, зависящий только от давления. Правая часть равенства выражает объем V_i , который занимала бы система точечных частиц идеального газа при заданных p и T .

Сравнивая (1) и (2), представим УрС в более общем виде [Анисичкин, 2017]:

$$p(V, T) = p_p(V) + p_h(V_i, V, T), \quad (3)$$

где сохраняется условие $V_i = V - V_C$. То есть в таком модифицированном УрС тепловое давление p_h зависит не от двух, но от трех параметров: V_i , V и T .

В УрС (3) необходимо знать зависимость потенциальной составляющей давления вещества p_p от плотности $\rho = 1/V$. В работе [Анисичкин, 1979], из сравнений экспериментальных УА и низкотемпературных изотерм ряда веществ, получена приближенная связь полного давления p_H и потенциальной составляющей давления p_p за фронтом ударной волны (УВ), когда начальными значениями потенциального p_{p1} и теплового p_{h1} давлений перед фронтом УВ, по сравнению с величинами за фронтом, можно пренебречь:

$$p_H = p_p \frac{\rho}{\rho_1},$$

которое, развивая предложенный метод построения УрС, с учетом начальных значений потенциального и теплового давлений, следует записать как [Анисичкин, 2017]:

$$p_H = \Delta p_p \frac{\rho}{\rho_1} + p_{p1}, \quad (4)$$

$$\text{где } \Delta p_p = p_p - p_{p1}.$$

Здесь и далее индексом 1 отмечены начальные значения величин перед фронтом УВ, символами без индекса обозначены текущие значения величин.

АДИАБАТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В СЖАТОЙ И НАГРЕТОЙ СРЕДЕ

Изменение состояния вещества внешнего ядра Земли, с глубиной, должно быть близким к адиабатическому [Жарков, 2013]. Поэтому рассмотрим в рамках принятой модели адиабатическое сжатие среды, когда начальными значениями давления p_{p1} и p_{h1} нельзя пренебречь.

Вернемся к УрС в виде (3), (4). Потенциальное сжатие или расширение вдоль $p_p(\rho)$ обратимо. Давление идеального одноатомного газа, модели-

рующего тепловые свойства среды, при медленном адиабатическом изменении занимаемого ими “свободного” объема должно меняться пропорционально $(V_{i1}/V_i)^{1.67}$, то есть с показателем адиабаты $\gamma = 1.67$. Поэтому изэнтропу среды получаем следующей:

$$p_S = \Delta p_p + p_{p1} + p_{h1} \left(\frac{V_{i1}}{V_i} \right)^{1.67}. \quad (5)$$

При ударном сжатии зависимость прироста полного давления во фронте УВ, от прироста потенциальной составляющей, выражается соотношением (4). Прирост теплового давления идеального газа при ударном сжатии занимаемого им свободного объема примем как в работе [Зельдович и др., 1963]:

$$p_h/p_{h1} = \frac{(\gamma + 1)V_{i1} - (\gamma - 1)V_i}{(\gamma + 1)V_i - (\gamma - 1)V_{i1}}, \quad (6)$$

где, как принято выше, $\gamma = 1.67$ для одноатомного газа.

Для наглядности и удобства расчетов, как показало сравнение результатов, практически не влияя на точность, можно в (5) и (6) аппроксимировать отношение p_h/p_{h1} отношением $(V_1/V)^n$. При этом в расчетах n подбирается с ростом давления в ядре Земли, и уменьшается приблизительно от 3 для вершины ядра, до, приблизительно 2 у границы с внутренним ядром. Тогда зависимость давления p_H за фронтом УВ от потенциальной составляющей давления p_p принимает следующий простой вид:

$$p_H = (p_p - p_{p1}) \frac{\rho}{\rho_1} + p_{p1} + p_{h1} \left(\frac{\rho}{\rho_1} \right)^n. \quad (7)$$

Изэнтропу среды получаем следующей:

$$p_S = p_p + p_{h1} \left(\frac{\rho}{\rho_1} \right)^n. \quad (8)$$

Для расчетов потенциальной составляющей давления вдоль УА среды из (7) последовательно получаем следующее соотношение:

$$p_p = p_H \frac{\rho_1}{\rho} + p_{p1} \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho} \right) - p_{h1} \left(\frac{\rho}{\rho_1} \right)^{n-1}. \quad (9)$$

(Приведенные ниже примеры расчетов с применением (9) потенциального давления, скорости звука, температуры в ядре Земли при высоких начальных значениях p_{p1} и p_{h1} проверялись численно сравнением с расчетами по точным соотношениям (5) и (6)).

**СКОРОСТЬ ЗВУКА В
КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЕ**

Объемная скорость звука в жидкой среде при плотности ρ :

$$c_V = \sqrt{\frac{dp_S}{d\rho}}$$

По приближенному соотношению (8):

$$c_V^2 = \frac{dp_p}{d\rho} + n \frac{p_h}{\rho}, \quad (10)$$

Простое аналитическое выражение для скорости звука из (10) можно получить, если локально представить экспериментальную УА в виде прямой:

$$D = A + BU, \quad (11)$$

где здесь и на рис. 3–рис. 6 D , U и коэффициент A в км/с, B – безразмерный.

В результате, выполняя подстановку p_p из (9) и (11) в (10) при плотности $\rho = \rho_1 D / (D - U)$ и произвольном тепловом давлении p_h , получаем скорость звука в среде, если известна ее УА:

$$c_V = (D - U) \left[\frac{2(D - U)}{A} - 1 + \frac{p_{p1}}{\rho_1 D^2} + n \frac{p_h}{\rho (D - U)^2} \right]^{0.5} \quad (12)$$

**ТЕМПЕРАТУРА КОНДЕНСИРОВАННОЙ
СРЕДЫ**

Для расчета температуры примем объем V_C , как и в модели сжимаемого коволюма [Копышев, 1971; 2009], равным объему среды на кривой потенциального сжатия, рассчитываемой из УА по (9), при p_p , равном полному давлению p [Анисичкин, 2017]. Тогда “свободный” объем, доступный для теплового движения частиц:

$$V_i = V(p, T) - V_C(p), \quad (13)$$

где $V(p, T)$ объем среды. А так как давление идеального газа равно RT/V_i , то УрС (3) приобретает вид:

$$p(V, T) = p_p(V) + \frac{RT}{V_i}, \quad (14)$$

где температура среды:

$$T = \frac{p_h V_i}{R}. \quad (15)$$

Так как величины, входящие в уравнение (15), могут быть найдены с помощью (3), (6), (9), (13), если известна УА среды $p_H(V)$, то уравнение (15) позволяет рассчитать температуру среды.

**СРАВНЕНИЕ РАСЧЕТОВ
С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ
ДЛЯ ЖЕЛЕЗА**

Сравнить результаты расчетов по предложенному УрС следует с экспериментальными данными для железа как основного компонента ядра Земли.

Скорость звука

Расчет проводился по формуле (12) из экспериментальной УА железа [Трунин, 2006]:

$$D = 3.664 + 1.79U - 0.0342U^2 \quad (16)$$

и, для сравнения, по обобщенной УА железа [Анисичкин, 1979], уточненной для диапазона давлений ядра Земли:

$$D = U + 1.983U^{0.5} + 2.29, \quad (17)$$

где скорости в км/с.

Подставляя в уравнение (12) с $n = 2$ для давления $p_H = 328.8$ ГПа за фронтом УВ при $D = 10.34$ км/с и $U = 4.05$ км/с численное значение коэффициента $A = 4.27$ км/с, для локального приближения УА (17) прямой линией, и p_h , рассчитанное с помощью (3), (9), получаем объемную скорость звука равной 9.86 км/с. (Величина $p_{p1} = -6$ ГПа для $\rho_1 = 7.85$ г/см³, принятая в расчетах из экстраполяции данных работы [Young et al., 2016], несущественно влияет на результаты.) Аналогичный расчет по УА (17), дает значение скорости звука 9.89 км/с.

На рис. 1 приведено сравнение расчетных и экспериментальных значений скорости звука за фронтом УВ в железе в диапазоне давлений внешнего жидкого ядра Земли [Анисичкин и др., 2009; Nguyen et al., 2004; Альтшулер и др., 1960; Brown, McQueen, 1986; Anderson, Ahrens, 1994]. Там же приведены скорости сейсмических волн у вершины и основания внешнего жидкого ядра Земли (Dziewonski et al., 1981).

Скорость сейсмических волн в ядре Земли при давлении 328.8 ГПа – 10.36 км/с (Dziewonski et al., 1981). Следовательно, расчетная скорость звука в железе при давлении 328.8 ГПа за фронтом УВ на 0.5 км/с меньше, чем в ядре Земли, но при более высокой температуре, чем в ядре Земли, как будет получено ниже.

Температура

По УА (16) при $U = 4.05$ км/с, $D = 10.34$ км/с, $p_H = \rho_1 D U = 328.8$ ГПа, $\rho = 12.91$ г/см³ ($V = 4.32$ см³/моль). Принимая в (9) $p_{p1} = -6$ ГПа, $n = 2$. Учитывая, что $p_{p1} = -p_{h1}$ при нормальных начальных условиях, получаем $p_p = 187.7$ ГПа, $p_h = p_H - p_p = 141.2$ ГПа.

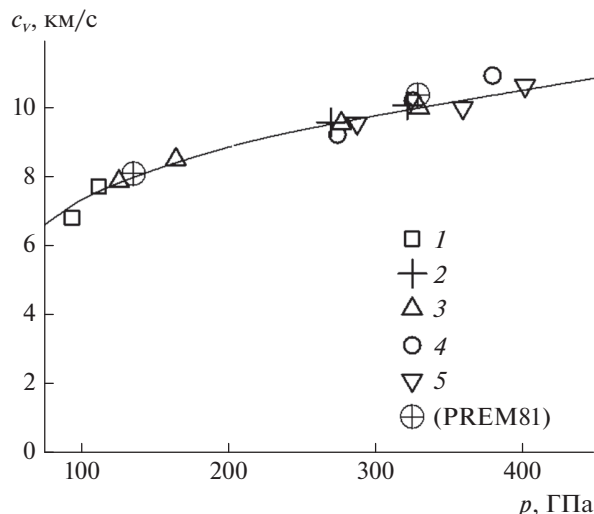


Рис. 1. Сравнение расчетных и экспериментальных значений скорости звука за фронтом УВ в железе и скорость сейсмических волн в ядре Земли. Линия – расчет вдоль УА (16). Эксперимент: 1 – [Анисичкин и др., 2009]; 2 – [Nguyen et al., 2004]; 3 – [Альтшулер и др., 1960]; 4 – [Brown et al., 1986]; 5 – [Anderson et al., 1994]; (PREM81) – [Dziewonski et al., 1981].

Согласно предложенной модели, при давлении p собственный объем упругих частиц V_C – часть полного объема V и равен объему среды на кривой потенциального сжатия при давлении $p_p = p$. Поэтому, при потенциальном давлении $p_p = 328.8$ ГПа плотность железа, рассчитанная по (9), равна 14.5 г/см³, то есть $V_C = 3.85$ см³/моль. Следовательно, $V_i = V - V_C = 0.472$ см³/моль.

Подставляя полученные численные значения величин в выражение (15), получаем температуру за фронтом УВ (опуская для краткости размерности):

$$T = \frac{141.2 \times 0.472}{8.314} \approx 8 \text{ [кК]}.$$

Аналогичные расчеты по УА (17), дают близкое значение температуры за фронтом УВ при давлении 328.8 ГПа.

На рис. 2 приведено сравнение расчетных и экспериментальных [Ahrens et al., 1998; Yoo et al., 1993] значений температуры за фронтом УВ в железе.

В работе [Yoo et al., 1993] температура внешнего ядра на границе с внутренним ядром при давлении 328.8 ГПа принята равной (6830 ± 500) К. В работе [Anzellini et al., 2013] температура предполагается равной (6230 ± 500) К. В работе [Ahrens et al., 2002] температура основания внешнего ядра принята равной (5300 ± 400) К. В работе [Литасов и др., 2016] более вероятной считается (5450 ± 250) К, то есть ниже, чем при ударном сжатии до давления 328.8 ГПа.

Согласно работе [Dziewonski et al., 1981], при давлении 328.8 ГПа плотность среды основания

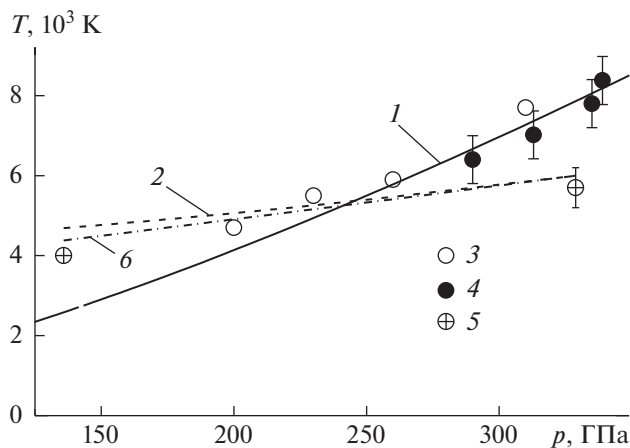


Рис. 2. Сравнение расчетных и экспериментальных значений температуры за фронтом УВ в железе. Линия 1 – расчет температуры железа вдоль УА (16). Линия 2 – расчет адиабатического изменения температуры жидкого железа по (7). Линия 6 – расчет адиабатического изменения температуры железа [Жарков, 2013]. Эксперимент: 3 – [Ahrens et al., 1998]; 4 – [Yoo et al., 1993]; 5 – наиболее вероятная температура ядра Земли [Литасов и др., 2016].

внешнего ядра Земли 12.17 г/см³. Как получено выше, при таком давлении, но более высокой температуре плотность железа за фронтом УВ на ~ 0.7 г/см³ больше.

Следовательно, по предложенному УрС добавки в железо должны снижать плотность, но повышать объемную скорость звука при условиях в ядре Земли. (Результат, который согласуется со многими известными исследованиями по составу ядра Земли.

Согласно распространенности химических элементов в Солнечной системе, данным о составе железоникелевых метеоритов, содержание никеля в ядре Земли принимается близким к 5%. Плотности никеля и железа отличаются менее, чем на 15%. В итоге, плотности железа и железоникелевой смеси отличаются менее, чем на 1%. Также близки ударные адиабаты железа и бедной железоникелевой смеси [Трунин, 2006]. Возможные ошибки ударно-волновых данных в сумме с возможными неточностями геофизических данных по параметрам состояния вещества ядра Земли в несколько раз больше. Поэтому целесообразно отдельно учитывать в расчетах вклад никеля.

Изэнтропическое сжатие жидкого железа

Примем давление у основания внешнего ядра равным 328.8 ГПа, у границы с вышележащей мантией 135.8 ГПа [Dziewonski et al., 1981].

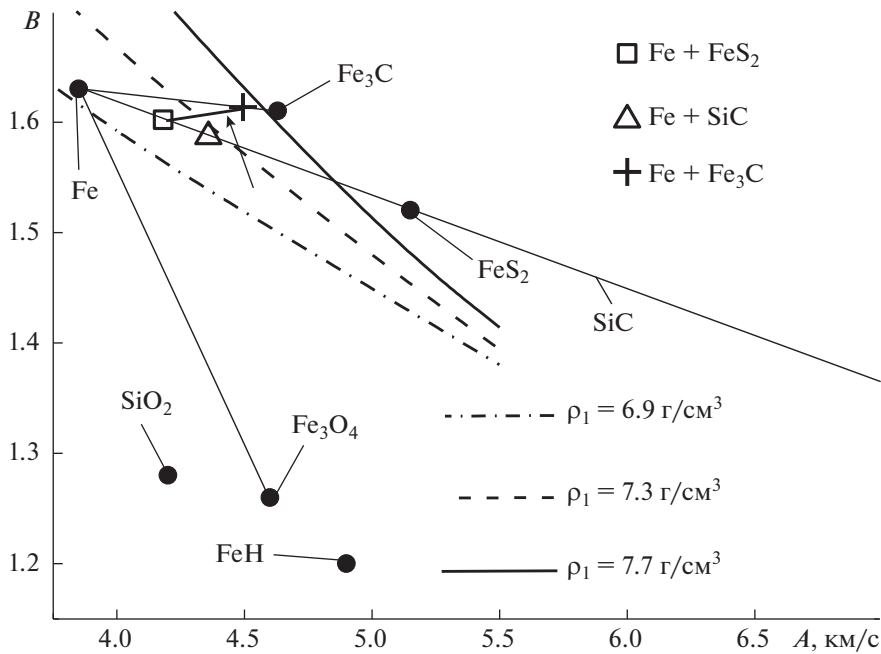


Рис. 3. Коэффициенты A и B для УА гипотетической среды верха внешнего ядра Земли при разных ρ_1 и экспериментальные значения A и B для вероятных легких добавок в ядро Земли. Найденное решение показано крестиком.

Для железа при давлении 328.8 ГПа и $T = 0$ К объем $V_C = V$ и равен $3.85 \text{ см}^3/\text{моль}$ при расчете по (9) из УА (16) (или (17)), $V_i = 0, p_h = 0$.

С ростом температуры при постоянном давлении $p = 328.8$ ГПа значения p_h, V_i и V увеличиваются. Значение V_C постоянно. В расчетах процедура обратная. Постепенно увеличивая значения p_h , и, следовательно, V и V_i при постоянном полном давлении 328.8 ГПа, получаем увеличивающиеся значения температуры.

Примем $V = 4.25 \text{ см}^3/\text{моль}$ $V_i = 0.4 \text{ см}^3/\text{моль}$. Согласно (9) при $V = 4.25 \text{ см}^3/\text{моль}$ $p_p = 204.3$ ГПа, тогда $p_h = 124.5$ ГПа.

Подставляя эти значения V_i и p_h в уравнение (15) для расчета температуры железа, получаем $T = 6000$ К. Так как такая температура близка к предполагаемой для основания внешнего ядра [Yoo et al., 1993; Anzellini et al., 2013; Ahrens et al., 2002; Литасов и др., 2016], то принятые выше значения величин и есть начальные, исходные для расчета изэнтропы железа из состояния у границы с внутренним ядром Земли. А именно: $V_{i1} = 0.4 \text{ см}^3/\text{моль}$, $p_{h1} = 124.5$ ГПа.

При давлении 135.8 ГПа объем V_C равен $4.61 \text{ см}^3/\text{моль}$ при расчете по (9) из УА (17).

Со снижением давления вдоль изэнтропы объемы V и V_i растут, давление p_p падает. При $V = 5.178 \text{ см}^3/\text{моль}$ $p_p = 65.86$ ГПа (согласно (9)), $V_i = 0.566 \text{ см}^3/\text{моль}$. Подставляя найденные значения

в уравнение изэнтропы (5), получаем $p_s = 135.8$ ГПа, $p_h = 70$ ГПа. Следовательно, величина $V = 5.178 \text{ см}^3/\text{моль}$ находится на линии изэнтропы железа при давлении у вершины ядра Земли.

Подставляя полученные численные значения величин при давлении 135.8 ГПа в выражение (15), получаем изэнтропическую температуру железа 4800 К, что выше вероятной температуры вершины ядра, например [Литасов и др., 2016]. Такой результат естественно объяснить передачей тепла от ядра Земли вышележащей мантии.

Сравнение изэнтропического изменения температуры железа с давлением и наиболее вероятной температурой ядра Земли приведено на рис. 2.

ПОДБОР ГОМОГЕННОЙ СРЕДЫ С ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ВЕЩЕСТВА ВНЕШНЕГО ЖИДКОГО ЯДРА ЗЕМЛИ

Если в предыдущих разделах ρ_1 – плотность железа при нормальных условиях и его УА были известны, и по ним рассчитывались скорость звука и температура среды, то для вещества ядра Земли решалась обратная задача. Для известного давления, плотности, скорости звука, и наиболее вероятной температуры ядра подбирались плотность при нормальных условиях ρ_1 , УА среды и средняя атомная масса μ гипотетической среды при расчете температуры такие, чтобы получить адекватные характеристики ядра Земли.

Пошагово выполнялись следующие процедуры. Для вероятного диапазона плотностей ρ_1 от 6.9 до 7.7 г/см³ подбирались пары коэффициентов A и B в УА (11) такие, чтобы в расчетах по (5) (или (12)) получить геофизические значения скорости звука при плотностях и давлениях ядра Земли. (В формуле (12) принималось для вершины ядра $n = 3$, для основания внешнего ядра $n = 2$.) Затем, для принятых значений температуры ядра Земли, с помощью (15) рассчитывалась необходимая для этого средняя атомная масса среды μ . (При равных плотностях ρ_1 расчетная температура тем выше, чем больше μ .)

Последовательность расчетов и результаты для наглядности показаны на приведенных ниже рисунках.

Вершина внешнего ядра Земли

У границы ядра с силикатной мантией давление 135.8 ГПа, плотность ядра 9.9 г/см³, скорость сейсмических волн 8.065 км/с [Dziewonski, Anderson, 1981]. Примем в расчетах, как наиболее вероятную, температуру вершины внешнего ядра 4000 К [Литасов и др., 2016].

На рис. 3 линиями показано, какие параметры A и B должны быть у УА сред с плотностью ρ_1 от 6.9 до 7.7 г/см³, чтобы получить скорости звука, равные геофизическим значениям. Там же приведены коэффициенты A и B экспериментальных УА возможных легких добавок в железоникелевое ядро Земли из работы [Трунин, 2006]. для Fe₃C с плотностью $\rho_1 = 7.52$ г/см³ из работы [Сагатов и др., 2019].

Для гидрида железа нет экспериментальных ударно волновых данных. Поэтому на рис. 3 показано вероятное положение точки для FeH с учетом экспериментальных значений коэффициентов A и B для УА гидридов других металлов [Трунин, 2006], а также с учетом обобщенной УА химических соединений [Анисичкин, 1979].

Считалось, что для смесей коэффициенты A и B принимают промежуточные значения для чистых компонентов, согласно правилу аддитивности. Поэтому решение находилось следующим образом.

Для смеси железа с Fe₃C, как показано на рис. 3, вдоль линии соединяющей точки для Fe и Fe₃C плотность смеси ρ_1 уменьшается с количеством легкой добавки от 7.85 до 7.52 г/см³. Одновременно требуемая плотность увеличивается от 6.95 до 7.75 г/см³. При $A = 4.49$ км/с плотности сравниваются при значении 7.58 г/см³, что, следовательно, удовлетворяет требованию скорости звука в смеси для давления и плотности вершины ядра Земли (на рис. 3 найденное решение показано крестиком).

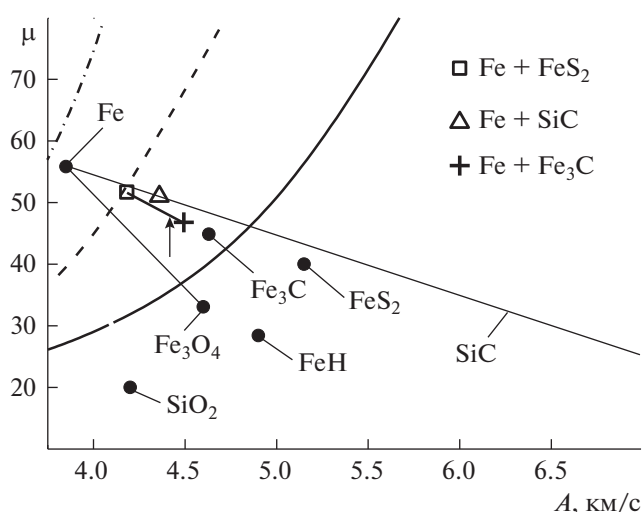


Рис. 4. Значения необходимой средней атомной массы вещества верха ядра Земли при разных ρ_1 и средних значения μ легких добавок в ядро Земли. Найденное решение показано крестиком. Обозначения те же, что на рис. 3.

На рис. 4 кривые постоянной плотности ρ_1 рассчитаны для температуры ядра 4000 К (если температура ядра выше, то кривые идут пропорционально выше, если ниже, то кривые идут пропорционально ниже, согласно (15)).

На рис. 4 найденное решение с $A = 4.49$ км/с и расчетной средней атомной массой 46.8 показано также прямым крестиком. Видно, что для совпадения расчетных плотностей на рис. 3 и на рис. 4 кривые постоянной плотности на рис. 4 должны быть выше с большими значениями атомной массы. Но, так как средняя атомная масса для найденного состава смеси фиксирована, то должна быть выше температура среды, согласно уравнению (15). По расчету, что видно из рис. 4, температура вершины ядра Земли должна быть около 4400 К, чтобы удовлетворить требованиям давления, плотности и скорости звука в ядре Земли. Но наиболее вероятная температура вершины ядра Земли около 4000 К [Литасов и др., 2016]. Поэтому двухкомпонентный состав вершины ядра Земли из железоникелевого расплава с добавкой Fe₃C при такой температуре маловероятен.

Аналогично получено, что смесь железа с FeS₂ должна иметь температуру около 3300 К, смесь железа с SiC около 3100 К, чтобы удовлетворить геофизическим требованиям, что выходит за допустимые пределы (найденные решения на рис. 3 и на рис. 4 показаны квадратиком и треугольником соответственно).

Смеси с железом других легких добавок, приведенных на рис. 3, лежащих ниже линии постоянной плотности $\rho_1 = 6.9$ г/см³, должны быть

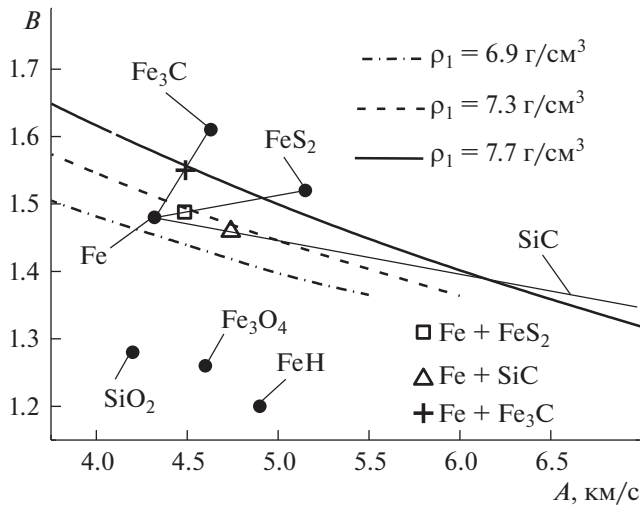


Рис. 5. Коэффициенты A и B для УА адиабат гипотетической среды низа внешнего ядра Земли при разных ρ_1 , и экспериментальные значения A и B для вероятных легких добавок в ядро Земли. Решение показано крестиком.

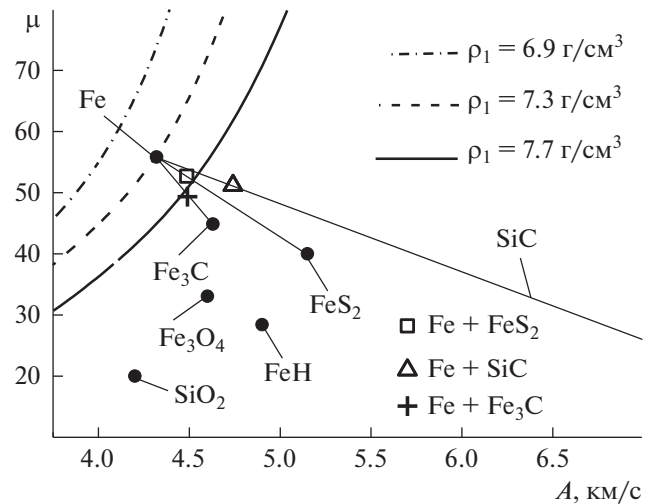


Рис. 6. Значения необходимой средней атомной массы вещества низа внешнего ядра Земли при разных ρ_1 и средние значения μ для легких добавок в ядро Земли. Решение показано крестиком.

плотностью менее 7.4 г/см^3 , чтобы получить необходимые скорости звука. (В случае не приведенных на рис. 3 Si и S меньше 7.0 г/см^3 .) Но, согласно результатам расчетов, приведенным на рис. 4, эти смеси должны иметь плотности ρ_1 не меньше, а существенно больше 7.4 г/см^3 , чтобы удовлетворить требованию температуры ядра в 4000 К . Поэтому, например, добавки с кислородом и водородом в своем составе в существенных количествах маловероятны.

Выше получено, что добавка в железо Fe_3C требует более высоких температур среды, а добавка FeS_2 или SiC меньших, чем принятая температура вершины ядра в 4000 К . Поэтому подбором состава многокомпонентных сред из указанных веществ можно удовлетворить требованиям давления, плотности, скорости звука и температуры вершины ядра Земли. В результате получено, что необходимым требованиям удовлетворяют, например, трехкомпонентные смеси: 1) $\text{Fe} + \text{Fe}_3\text{C} + \text{FeS}_2$ (показана стрелкой на рис. 3 и на рис. 4) с содержанием С 4.4 и S 1.5 мас. % или 2) $\text{Fe} + \text{Fe}_3\text{C} + \text{SiC}$ с содержанием С 4.5 и Si 1 мас. % и их многокомпонентные комбинации.

В объемах углерода в кристаллической алмазной фазе будет распространяться более быстрая продольная волна, поэтому смеси расплава железа и алмаза следует рассмотреть отдельно.

Основание внешнего ядра Земли

У границы с твердым внутренним ядром давление 328.8 ГПа , плотность 12.17 г/см^3 , скорость

сейсмических волн 10.36 км/с [Dziewonski et al., 1981]. Примем, исходя из приведенных выше данных, температуру основания внешнего ядра 6000 К (в работе [Литасов и др., 2016] наиболее вероятной считается температура $5200\text{--}5700 \text{ К}$).

На рис. 5 показаны результаты расчетов необходимых коэффициентов A и B для УА гипотетической среды с плотностью при нормальных условиях ρ_1 от 6.9 до 7.7 г/см^3 . Линии на рис. 5 – места точек, с фиксированным значением ρ_1 , в которых характеристики пробной среды удовлетворяют геофизическим параметрам состояния ядра Земли по давлению, плотности и скорости звука. Экспериментальные значения коэффициентов A и B для УА вероятных легких добавок на рис. 5 взяты из работы [Трунин, 2006], для Fe_3C с плотностью $\rho_1 = 7.52 \text{ г/см}^3$ из работы [Сагатов, 2019].

На рис. 6 показаны результаты расчетов необходимой средней атомной массы μ гипотетической среды с плотностью при нормальных условиях ρ_1 от 6.9 до 7.7 г/см^3 . Линии на рис. 6 – места точек с фиксированным значением ρ_1 , в которых рассчитанная по (15) температура пробной среды совпадает с принятой температурой ядра 6000 К (если температура ядра выше, то кривые идут пропорционально выше, если температура ядра ниже, то кривые идут пропорционально ниже, согласно (15)).

Как показали расчеты, необходимым требованиям в качестве добавки удовлетворяет карбид железа. Если принять, согласно правилу аддитивности, что ударно волновые свойства смеси зависят от объемной концентрации компонентов, то вдоль линии $\text{Fe}\text{--}\text{Fe}_3\text{C}$ на рис. 5 плотность смеси

уменьшается с 7.85 г/см^3 для железа до 7.52 г/см^3 для карбида железа с увеличением доли добавки в железо. Необходимая расчетная плотность ρ_1 , как видно из рис. 5, при этом растёт от ~ 7.08 до $\sim 7.84 \text{ г/см}^3$. При объемной концентрации карбида железа около 76% ($A = 4.49 \text{ км/с}$; отмечено крестиком) обе плотности сравниваются при значении ρ_1 около 7.65 г/см^3 , что можно принять в качестве решения по критериям давления, плотности и скорости звука в ядре.

На рис. 6 положение такой смеси с объемной концентрацией карбида железа 76%, $A = 4.49 \text{ км/с}$ на линии Fe–Fe₃C также показано крестиком. Видно, что по критерию температуры необходимая расчетная плотность такой смеси должна быть около 7.75 г/см^3 (по критерию скорости звука $\rho_1 \sim 7.65 \text{ г/см}^3$). Но, так как средняя атомная масса для найденного состава смеси фиксирована, то температура среды должна быть ниже принятой в 6000 К, согласно уравнению (15). По расчету температура основания внешнего ядра Земли должна быть около 5600 К, чтобы удовлетворить требованиям давления, плотности и скорости звука в ядре Земли. В работе [Yoo et al., 1993] температура внешнего ядра на границе с внутренним ядром принята равной $(6830 \pm 500) \text{ К}$. В работе [Anzellini et al., 2013] температура предполагается равной $(6230 \pm 500) \text{ К}$. Но в работе [Aghrens et al., 2002] температура основания внешнего ядра принята равной $(5300 \pm 400) \text{ К}$. В работе [Литасов и др., 2016] более вероятной считается $(5450 \pm 250) \text{ К}$. Поэтому двухкомпонентный состав основания внешнего ядра Земли из железа с добавкой Fe₃C вероятен при температуре ниже 6000 К.

При этом, если принять за основную легкую добавку в основании внешнего ядра Земли карбид железа, то содержание углерода в смеси должно быть $(3.5 \pm 0.4) \text{ мас. \%}$.

Порядок сравнительных расчетов для FeS₂, SiC и других добавок аналогичен. Полученный результат для внешнего ядра Земли у границы с внутренним ядром, как и для вершины ядра, можно обобщить в следующем виде. Чем ниже расчетных линий для ρ_1 и μ на рис. 5 и рис. 6 параметры испытываемых сред, тем ниже принятых должны быть температуры ядра, и тем менее они соответствуют требованиям в качестве легких добавок в железоникелевое ядро Земли. Поэтому добавки Si, S в основание внешнего ядра вероятны при минимальных предполагаемых температурах ядра. Добавки O и H в существенных количествах маловероятны.

Следовательно, приведенные на рис. 5 вещества, кроме карбида железа, не могут быть основными легкими добавками в ядро Земли из-за недостаточно высоких параметров A и B своих УА. Существенно более высокое значение коэффи-

циента A у углерода в алмазной фазе [Трунин, 2006], но из-за уникальных механических и “аномальных” тепловых свойств [Анисичкин, 1984] его влияние как добавки в железо следует рассмотреть отдельно.

ПОДБОР ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЫ С ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ВЕЩЕСТВА ВНЕШНЕГО ЖИДКОГО ЯДРА ЗЕМЛИ

Из расчетов рис. 3, рис. 5 следует, что необходимым требованиям в качестве основных добавок во внешнее жидкое ядро Земли удовлетворяют вещества с относительно высоким значением коэффициента A или B в уравнении УА. Таким свойством, кроме карбида железа, обладает также УА углерода в алмазной фазе [Трунин, 2006].

Алмазная фаза углерода может быть устойчива при высоких давлениях и температурах в недрах планет [Eggert et al., 2010; Smith et al., 2016; Wang et al., 2020]. В работе [Smith et al., 2016] предполагается образование крупных алмазных тел в жидкометаллической среде глубоко в недрах Земли. В работе [Жимулев и др., 2015] обосновывается возможность миграции расплава железа вместе с алмазными частицами в недра планеты при гравитационной дифференциации ее вещества. Поэтому следует рассмотреть алмазные тела как легкие добавки в ядро Земли в виде отдельных включений.

Ранее в работах [Анисичкин, 2000; Титов и др., 2004] расчетными методами и экспериментально, было рассмотрено влияние добавки алмаза в железо на его характеристики при высоких ударных давлениях и температурах. При этом расчет и анализ экспериментальных данных основывались на УА алмаза [Павловский, 1971]:

$$D = 12.16 + U, \quad (18)$$

где скорости в км/с. Было получено, что углерода в железоникелевом ядре Земли должно быть $\sim 10 \text{ мас. \%}$. Хотя и считается, что в Солнечной системе углерода больше, чем железа и никеля [Фор, 1989], такая высокая концентрация углерода в ядре Земли представляется маловероятной.

Чем выше скорость звука в добавке в железоникелевое ядро, тем меньше ее надо чтобы повысить скорость звука в смеси до необходимых геофизических значений. При распространении слабого возмущения в смеси в жидкой компоненте его скорость будет близка к объемной скорости звука, в твердой фазе, например в кристаллах алмаза, к продольной, упругой скорости звука, что и следует учитывать в расчетах. В работах [McWilliams, 2008; McWilliams et al., 2010] получены более высокие скорости распространения упругих ударных волн в алмазе, по сравнению с получаемыми из (18), которые, усредняя, можно представить в следующем виде:

$$D = 18.14 + 1.88U. \quad (19)$$

Поэтому, расчеты с учетом данных работах [McWilliams, 2008; McWilliams et al., 2010] привели к содержанию углерода в ядре Земли меньшему, чем получено в работах [Анисичкин, 2000; Титов и др., 2004].

Если рассчитать плотность алмаза по УА (19) при давлении 135.8 ГПа в вершине внешнего ядра, то получаем плотность алмаза (4.2 ± 0.1) г/см³. У границы с внутренним твердым ядром при давлении 328.8 ГПа получаем плотность (5.0 ± 0.1) г/см³ (считая тепловое расширение алмаза несущественным). Примем в расчетах продольные скорости звука в алмазе, усредняя экспериментальные значения [McWilliams, 2008; McWilliams et al., 2010; Shigemori et al., 2012], равными (17.0 ± 0.2) и (19.5 ± 0.2) км/с для вершины и основания внешнего ядра соответственно.

У границы с вышележащей силикатной мантией железоникелевый расплав, вмещающий алмазные тела, может иметь температуру (4000 ± 200) град. [Литасов и др., 2016]. У границы с внутренним твердым ядром железоникелевый расплав должен иметь температуру близкую к температуре затвердевания при высоком давлении (5700 ± 500) К, как принято выше. Для принятого разброса температур, расчетные плотности расплава составляют (10.9 ± 0.2) и (13.1 ± 0.25) г/см³, для вершины и основания внешнего ядра, соответственно, по предложенному УрС.

Скорости звука в железоникелевом расплаве, рассчитанные из (5) и по формуле (12), получаются равными (7.9 ± 0.2) и (9.9 ± 0.3) км/с, в зависимости от принятой температуры, в условиях вершины и основания внешнего ядра Земли, соответственно (в работе [Hirose et al., 2019] в расчетах скорости принимаются около (7.9 ± 0.05) и 10.2 км/с, соответственно).

Скорость звука в смеси зависит от концентрации компонентов и структуры самой среды. В среде из чередующихся параллельных слоев двух материалов скорость распространения возмущения рассчитана в работе [Кристенсен, 1982]. В работе [Куропатенко, 2012] предложено простое аналитическое выражение для c_c – скорости звука в двухкомпонентной неупорядоченной смеси:

$$c_c = 1/(\alpha/c_1 + (1 - \alpha)/c_2). \quad (20)$$

В расчетах по формуле (20) и формулам, приведенным в работе [Кристенсен, 1982], усредняя результаты, подбиралось α , объемное содержание алмазной фазы углерода в железоникелевом расплаве, такое, чтобы удовлетворить значениям давления, плотности и скорости звука в ядре для принятой температуры ядра Земли. Получены следующие результаты:

Состав вершины внешнего ядра Земли при гетерогенном строении: содержание углерода в алмазной фазе, в дополнение к карбиду железа, не более 0.5 мас. %.

Состав основания внешнего ядра Земли при гетерогенном строении: железоникелевый расплав может содержать включения углерода в алмазной фазе (4.0 ± 0.5) мас. %. Плотность железоникелевого расплава (13.1 ± 0.25) г/см³. Плотность алмазных тел (5.0 ± 0.1) г/см³ (при температуре (5700 ± 500) К).

РЕЗУЛЬТАТЫ

Основная легкая добавка во внешнем жидком железоникелевом ядре Земли углерод (4.0 ± 0.5) мас. % как в составе карбидов, так и в свободном виде.

Содержание углерода в составе карбида железа во внешнем жидком ядре Земли составляет от 3.5 до 4.5 мас. %, в зависимости от принятой температуры ядра, и максимально у границы с силикатной мантией.

Содержание углерода в алмазной фазе во внешнем жидком ядре Земли может быть существенно при максимально допустимых температурах ядра Земли у границы с внутренним твердым ядром, и может составлять (4.0 ± 0.5) мас. %.

Содержание серы и кремния во внешнем жидком ядре Земли может достигать (1.0 ± 0.5) мас. %, в зависимости от принятой температуры ядра.

Добавки только кислорода и водорода во внешнем жидком ядре Земли не объясняют его характеристики.

Следовательно, по предлагаемой новой модели внешнее жидкое ядро Земли состоит из железоникелевого расплава, (4.0 ± 0.5) мас. % углерода и до (1.0 ± 0.5) мас. % серы и кремния.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основной компонент ядра Земли железо. Поэтому даже небольшие неточности в определении его параметров при высоких давлениях и температурах приводят к существенно разным требованиям к характеристикам легких добавок в ядре Земли, что является причиной разнообразия известных моделей ядра. Так в ряде работ уравнение состояния железа выводится из расчетов “*ab initio*” и экспериментов на алмазных наковальнях. Но расчеты без упрощений, предположений, то есть точные, пока невозможны из-за сложностей и не дают определенного ответа о составе ядра Земли (см. например, [Umetsoto et al., 2020]). Результаты измерений плотности и скорости звука на алмазных наковальнях экстраполируются до давлений и температур ядра Земли в несколько раз более высоких, чем в эксперименте, что также

влияет на точность расчетов. Поэтому в моделировании критически важен выбор исходных данных и метода построения корректного УрС железа, но полуэмпирические и из “первых принципов” УрС часто не согласовываются с достаточно достоверными экспериментальными данными по свойствам железа при высоких давлениях и температурах.

Так, например, в работе [Hirose et al., 2021] скорость звука в железе в основании внешнего ядра принимается около 10.2 км/с, что существенно выше получаемой с учетом экспериментальной адиабаты железа при давлениях ядра Земли [Smith et al., 2018] и выше полученной в настоящей работе скорости в (9.9 ± 0.3) км/с. Но при более высокой принятой скорости звука в железе “высокоскоростная” добавка практически не нужна. Достаточно любой, понижающей плотность добавки, содержащей водород, кислород, серу, кремний.

Выведенное и принятое выше в моделировании состава ядра Земли УрС железа хорошо описывает такие чувствительные к его неточностям величины, как скорость звука и температура железа за фронтом ударной волны. Кривая потенциального сжатия и адиабата железа, рассчитываемые по (4) и (5), согласуются с приведенной в работе [Smith et al., 2018] изотермой и экспериментальной адиабатой железа при высоких давлениях.

В результате, моделирование состава ядра Земли, с более достоверной кривой потенциального и адиабатического сжатия железа показало, что все рассмотренные добавки понижают плотность, но в соответствующих количествах недостаточны для повышения скорости звука до необходимых значений в ядре Земли. Только добавка в железо углерода в составе карбида или в алмазной фазе делает среду достаточно “жесткой”, высокоскоростной.

В работах, цитированных во ВВЕДЕНИИ, и ряде других приводятся аргументы “за” присутствие углерода в ядре Земли. В работах [Nakajima et al., 2015; Yokoo et al., 2022; Li et al., 2020; Tagawa et al., 2021; Hirose et al., 2021] приводятся аргументы “против” существенного содержания углерода в ядре Земли, основанные на теориях образования планет и процессах формирования их ядер, на несмешиваемости растворов водорода и углерода в железе. Однако теории образования планет не устоялись и поэтому недостаточны в обоснование отсутствия углерода, но доминирующего присутствия, в частности, водорода в ядре Земли. Так, например, по наиболее современной и известной теории, Земля и Луна образовались из вещества двух столкнувшихся планет. При этом вещество планет практически полностью перемешалось, чтобы объяснить сходство изотопных

составов Земли и Луны, а ядро Земли сформировалось, в основном, слиянием ядер обеих планет. В таком катастрофическом процессе легколетучий водород мог не сохраниться в ядре, если он там был.

С другой стороны, углерод мог входить в состав ядра в виде отдельных твердых тел карбида железа и алмаза, из-за более высокой, по сравнению с железом, температуры плавления [Wang et al., 2020; Жимулев и др., 2015]. Поэтому аргумент о несмешиваемости раствора водорода и раствора углерода в железе не представляется критичным по углероду в составе ядра.

Существенная неопределенность температуры ядра Земли приводит в моделировании к разным составам легких добавок. Так, чем ниже принятая температура, тем больше может быть содержание других легких элементов в среде в дополнение к углероду. Но при допустимых температурах ядра углерод остается основным легким элементом в составе внешнего жидкого ядра Земли.

Принципиально новым в работе является применение уравнения состояния железа, более согласующегося с современными экспериментальными данными при давлениях и температурах ядра Земли, что критически важно в моделировании состава ядра Земли.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Альтшулер Л.В., Корнер С.Б., Бражник С.Б., Владимиров Л.А., Сперанская М.П., Фунтиков А.И. Изэнтропическая сжимаемость алюминия, меди, свинца и железа при высоких давлениях // ЖЭТФ. 1960. Т. 38. Вып. 4. С. 1061–1073.
- Анисичкин В.Ф. Аномальная ударная сжимаемость и теплоемкость алмаза // Физика горения и взрыва. 1984. Т. 20. № 1. С. 77–79.
- Анисичкин В.Ф., Бордзиловский С.А., Караханов С.М., Половинкин В.Г., Титов В.М., Туркин А.И. Скорость звука за фронтом ударной волны в смесях железа с серой и кремнием // Физика горения и взрыва. 2009. Т. 45. № 1. С. 100–107.
- Анисичкин В.Ф. Взрываются ли планеты? // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33. № 1. С. 138–142.
- Анисичкин В.Ф. Обобщенные ударные адиабаты и нулевые изотермы элементов // Физика горения и взрыва. 1979. Т. 15. № 2. С. 152–157.
- Анисичкин В.Ф. Ударно-волновые данные как доказательство присутствия углерода в ядре и нижней мантии Земли // Физика горения и взрыва. 2000. Т. 36. № 4. С. 108–115.
- Анисичкин В.Ф. Уравнение состояния для расчета температуры материалов при обработке взрывом // Инженерно-физический журн. 2017. Т. 90. № 4. С. 1025–1035.
- Бажанова З.Г., Оганов А.Р., Джанола О. Системы Fe–C и Fe–H при давлениях внутреннего ядра Земли // Успехи физических наук. 2012. Т. 182. № 5. С. 521–530.
- Бажанова З.Г., Ройзен В.В., Оганов А.Р. Поведение системы Fe – S при высоких давлениях и состав ядра Зем-

- ли // Успехи физических наук. 2017. Т. 187. № 10. С. 1105–1113.
- Жарков В.Н. Внутреннее строение Земли и планет. М.: Наука и образование. 2013. 416 с.
- Жимулев Е.И., Чепуров А.И., Сонин В.М., Похиленко Н.П. Миграция расплава железа через оливиновую матрицу в присутствии углерода при высоких p – T -параметрах (экспериментальные данные) // Докл. РАН. 2015. Т. 463. № 1. С. 72–74.
- Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука. 1963. 688 с.
- Копышев В.П. Термодинамическая модель плотной жидкости // ПМТФ. 1971. № 1. С. 119–122.
- Копышев В.П. Теория уравнений состояния. Саров: ФГУП “РФЯЦ-ВНИИЭФ”. 2009. 386 с.
- Кристенсен Р. Введение в механику композитов. Пер с англ. Бейли А.И. и Жмудя Н.П. М.: Мир. 1982. 334 с.
- Куропатенко В.Ф. Скорость звука в многокомпонентной смеси // Докл. РАН. 2012. Т. 446. № 4. С. 401–403.
- Литасов К.Д., Попов З.И., Гаврюшкин П.Н., Овчинников С.Г., Федоров А.С. Первопринципные расчеты уравнений состояния и относительной стабильности карбидов железа при давлениях ядра Земли // Геология и геофизика. 2015. Т. 56. № 1–2. С. 214–223.
- Литасов К.Д., Шацкий А.Ф. Современные представления о составе ядра Земли // Геология и геофизика. 2016. Т. 57. № 1. С. 31–62.
- Медведев А.Б. Широкодиапазонное многофазное уравнения состояния железа // Физика горения и взрыва. 2014. Т. 50. № 5. С. 91–108.
- Павловский М.Н. Ударное сжатие алмаза // Физика твердого тела. 1971. Вып. 3. С. 893–895.
- Сагатов Н.Е., Гаврюшкин П.Н., Инербаев Т.М., Литасов К.Д. Карбиды железа при p - T параметрах ядра Земли. Труды Всероссийского ежегодного семинара по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии. 2019. С. 37–39.
- Сагатова Д.Н., Гаврюшкин П.Н., Сагатов Н.Е., Медриш И.В., Литасов К.Д. Фазовые диаграммы гидридов железа при давлениях 100–400 ГПа и температурах 0–5000 К // Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 111. Вып. 3. С. 160–165.
- Титов В.М., Анисичкин В.Ф., Бордзиловский С.А., Карханов С.М., Туркин А.И. Измерение скорости звука за фронтом ударной волны в смесях железа с алмазом // Физика горения и взрыва. 2004. Т. 40. № 4. С. 117–130.
- Трунин Р.Ф. (ред.) Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2006. 531 с.
- Фор Г. Основы изотопной геологии. Пер с англ. Горохова И.М., Шуколюкова Ю.А. М.: Мир. 1989. 590 с.
- Ahrens T.J., Holland K.G., Chen G.Q. Shock Temperatures and the Melting Point of Iron. Shock Compression of Condensed Matter -1997 / S.C. Schmidt et al. (eds.). NY AIP Press, Woodbury. 1998. P. 133 – 136.
- Ahrens T.J., Holland K.G., Chen G.Q. Phase diagram of iron, revised-core temperatures // Geophysical Research Letters. 2002. V. 29. № 7. P. 1150. . P. 54-1–54-4. <https://doi.org/10.1029/2001gl014350>
- Anderson W.W., Ahrens T.J. An equation of state for liquid iron and implications for the Earth’s core // Journal of Geophysical Research. 1994. V. 99. № B3. P. 4273–4284.
- Anzellini S., Dewaele A., Mezouar M., Loubeyre P., Morard G. Melting of iron at Earth’s inner core boundary based on fast X-ray diffraction // Science. 2013. V. 340(6131). P. 464–466.
- Badro J., Cote, A. S., Brodholt J. P. A seismologically consistent compositional model of Earth’s core. Proc. Nat. Acad. Sci. 2014. USA 111. P. 7542–7545.
- Brown J.M., McQueen R.G. Phase transitions, Grüneisen parameter, and elasticity for shocked iron between 77 GPa and 400 GPa // Journal of Geophysical Research. 1986. V. 91(B7). P. 7485–7491.
- Chen B., Lai X., Li J., Liu J., Zhao J., Bi W., Alp E.E., Hu M.Y., Xiao Y. Experimental constrains on the sound velocities of cementite Fe₃C to core pressures // Earth and Planetary Science Letters. 2018. V. 494. P. 164–171.
- Dziewonski A.M., Anderson D.L. Preliminary reference Earth model // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 1981. V. 25. Is. 4. P. 297–356.
- Eggert J.H., Hicks D.G., Celliers P.M., Bradley D.K., McWilliams R.S., Jeanloz R., Miller J.E., Boehly T.R., Collins G.W. Melting temperature of diamond at ultrahigh pressure // Nature Physics. 2010. V. 6. P. 40–43.
- Helffrich G., Kaneshima S. Seismological Constraints on Core Composition from Fe-O-S Liquid Immiscibility // Science. 2004. V. 306. P. 2239–2242.
- Hirose K., Wood B., Vočadlo L. Light elements in the Earth’s core // Nature Reviews | Earth & Environment. 2021. V. 2. P. 645–658.
- Iizuka-Oku R., Yagi T., Gotou H., Okuchi T., Hattori T., Sano-Furukawa A. Hydrogenation of iron in the early stage of Earth’s evolution. Nat. Commun. 2017 Jan 13. 8:14096. <https://doi.org/10.1038/ncomms14096>
- Komabayashi T., Pesce G., Sinmyo R., Kawazoe T., Breton H., Shimoyama Y., Glazyrin K., Konopkova Z., Mezouar M. Phase relation in the system Fe-Ni-Si to 200 GPa and 3900 K and implications for Earth’s core // Earth and Planetary Science Letters. 2019. V. 512. P. 82–88.
- Li Y., Vočadlo L., Sun T., Brodholt J.P. The Earth’s core as a reservoir of water // Nat. Geosci. 2020. V. 13. P. 453–458.
- McWilliams R.S. Elastic and inelastic shock compression of diamond and other minerals. A dissertation submitted in partial satisfaction of the requirements for the degree of doctor of philosophy. University of California. Berkeley, 2008. 158 с.
- McWilliams R.S., Eggert J.H., Hicks D.G., Bradley D.K., Celliers P.M., Spaulding D.K., Boehly T.R., Collins G.W., Jeanloz R. Strength effects in diamond under shock compression from 0.1 to 1 TPa // Physical Review. 2010. V. B 81. P. 014111-1–014111-19.
- Nakajima Y., Imada S., Hirose K., Komabayashi T., Ozawa H., Tateno S.). Carbon-depleted outer core revealed by sound velocity measurements of liquid iron-carbon alloy // Nature Communications. 2015. V. 6. P. 8942. <https://doi.org/10.1038/ncomms9942>
- Nguyen J.H., Holmes N.C. Melting of iron at the physical conditions of the Earth’s core // Nature. 2004. V. 427. P. 339–342.

- Norton O.R.* Rocks from Space: Meteorite and Meteorite Hunters. Mountain Press Publishing Company, Missoula, Montana. 1998. 447 c.
- Sakamaki T., Ohtani E., Fukui H., Kamada S., Takahashi S., Sakairi T., Takahata A., Sakai T., Tsutsui S., Ishikawa D., Shiraishi R., Seto Y., Tsuchiya T., Baron A.Q.R.* Constraints on Earth's inner core composition inferred from measurements of the sound velocity of hcp-iron in extreme conditions // *Science Advances*. 2016. V. 2(2). P. 1–6.
- Shigemori K., Sakaiya T., Asakura Y., Kondo T., Shimizu K., Kadono T., Hironaka Y., Azechi H.* Sound velocity measurements by x-ray shadowgraph technique for melting phenomena at ultrahigh-pressure regime // *Review of Scientific Instruments*. 2012. V. 83. P. 10E529-1–10E529-3.
- Siebert J., Badro J., Antonangeli D., Ryerson F.J.* Terrestrial accretion under oxidizing conditions // *Science*. 2013. V. 339. P. 1194–1197.
- Smith E.M., Shirey S.B., Nestola F., Bullock E.S., Wang J., Richardson S.H., Wang W.* Large gem diamonds from metallic liquid in Earth's deep mantle // *Science*. 2016. V. 354. Is. 6318. P. 1403–1405.
- Smith R.F., Fratanduono D.E., Braun D.G., Duffy T.S., Wicks J.K., Celliers P.M., Ali S.J., Fernandez-Panella A., Kraus R.G., Swift D.C., Collins G.W., Eggert J.H.* Equation of state of iron under core conditions of large rocky exoplanets // *Nature Astronomy*. 2018. V. 2. P. 452–458.
- Tagawa S., Sakamoto N., Hirose K., Yokoo S., Herlund J., Ohishi Y., Yurimoto H.* Experimental evidence for hydrogen incorporation into Earth's core. *Nat Commun*. 2021 May 11. V. 12(1). P. 2588. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-22035-0>
- Umemoto K., Hirose K.* Chemical compositions of the outer core examined by first principles calculations // *Earth Planet. Sci. Lett*. 2020. V. 531. P. 116009.
- Wang Z., Ma H., Fang S., Yang Z., Miao X., Chen L., Jia X.* Synthesis and characterization of gem diamond single crystals in Fe-C system under high temperature and high pressure // *Journal of Crystal Growth*. 2020. V. 531. P. 125371.
- Xiaojun Hu, Yingwei Fei, Jing Yang, Yang Cai, Shijia Ye, Meilan Qi, Fusheng Liu, and Mingjian Zhan.* Phase Stability and Thermal Equation of State of Iron Carbide Fe₃C to 245 GPa // *Geophysical Research Letters*. 2019. P. 1–7. <https://doi.org/10.1029/2019GL084545>
- Yokoo S., Hirose K., Tagawa S., Morard G., Ohishi Y.* Stratification in planetary cores by liquid immiscibility in Fe–S–H. *Nat. Commun*. 2022 Feb 3. V. 13(1). P. 644. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-28274-z>
- Yoo C.S., Holmes N.C., Ross M., Webb D.J., Pike C.* Shock Temperatures and Melting of Iron at Earth Core Conditions // *Physical Review Letters*. 1993. V. 70. № 25. P. 3931–3934.
- Young D.A., Cynn H., Söderlind P., Landa A.* Zero-Kelvin Compression Isotherms of the Elements $1 \leq Z \leq 92$ to 100 GPa // *J. Physical and Chemical Reference Data*. 2016. V. 45. № 4. P. 043101-1–043101-36.
- Zhang Y., Sekine T., Lin J.-F., He H., Liu F., Zhang M., Sato T., Zhu W., Yu Y.* Shock compression and melting of an Fe–Ni–Si alloy: implications for the temperature profile of the Earth's core and the heat flux across the core–mantle boundary // *J. Geophysical Research Solid Earth*. 2018. V. 123(2). P. 1314–1327.

Modeling the Composition of the Earth's Liquid Outer Core

V. F. Anisichkin*

Lavrentyev Institute of Hydrodynamics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090 Russia

*E-mail: avf@hydro.nsc.ru

The paper suggests expressions, coherent with experimental data, for the calculation of the sound velocity and the temperature of a condensed medium under pressures in the Earth's liquid outer core through parameters of the shock Hugoniot of the medium. Additives to the Earth's liquid outer iron-nickel core were fitted so that the calculated pressure, density and sound wave velocity corresponded to geophysical values and the temperature did not exceed the admissible limits. It was established that the iron carbide Fe₃C containing (4.0 ± 0.5) wt.% carbon with additives of FeS₂ and SiC with a total content of Si and S up to 1.5 wt.% meets the required criteria as the main light additive in the upper layers of the Earth's core. Less probable is the additive of carbon in the diamond phase up to 0.5 wt.%. In the Earth's outer core, at the boundary with the solid inner core, among the possible light additives are the iron carbide Fe₃C with (3.5 ± 0.4) wt.% carbon or diamond phase carbon of (4.0 ± 0.5) wt.%. Additives at the bottom of the Earth's liquid outer core, containing significant amounts of Si, S, are hardly probable. The content of H in the Earth's liquid outer core can be significant at the minimum possible core temperatures. The content of O is insignificant.

Keywords: Equation of state of condensed medium, composition of the Earth's core, carbon