

Структурные превращения нано-заземленной воды при высоких давлениях: потенциальный механизм триггерных эффектов в зонах субдукции

Цуканов А.А., Шилько Е.В., Псахье С.Г.

ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

e-mail: a.a.tsukanov@yandex.ru

Вода является одним из наиболее распространенных соединений в земной коре. В зонах субдукции захваченная в наноразмерных порах гидрофильных океанических минералов вода может увлекаться до глубин верхней мантии и переходной зоны. В нанозаземленном состоянии вода проявляет отличающиеся от свободного объемного состояния свойства особенно при экстремальных термодинамических условиях субдуцируемой плиты. Структура и свойства стенки нанопоры на молекулярном уровне являются значимыми факторами, определяющими структуру и свойства нанозаземленной воды, включая ее фазовые трансформации с ростом литостатического давления. Фазовые превращения нанозаземленной воды, которые сопровождаются резким, скачкообразным изменением ее механических свойств, а значит и свойств всего водонасыщенного минерала, могут быть потенциальным механизмом триггерных эффектов в зонах субдукции.

В настоящей работе на молекулярном уровне исследованы структура и фазовые трансформации нанозаземленной воды в модельных минералах с гидрофильной и гидрофобной поверхностью в диапазоне давлений до 10 ГПа. С использованием метода молекулярной динамики показано, что дипольный заряд поверхности нанопоры существенным образом влияет на физические свойства нанозаземленной воды в рассмотренном диапазоне давлений. В частности, для ограниченной воды в нанопоре с гидрофильными стенками наблюдалось фазовое превращение из жидкой фазы в ГПУ кристалл при давлении 3.0 ГПа и переход из ГПУ в ГЦК решетку при 6.7 ГПа. В то же время вода в искусственном гидрофобном минерале со схожей атомной структурой, но значительно сниженным парциальным зарядом на атомах минерала, ведет себя совершенно иначе: вода не образует ГПУ решетку и трансформируется непосредственно из жидкой фазы в фазу с ГЦК упаковкой при давлении 3.0 ГПа. Эти фазовые трансформации воды в нанопорах минералов сопровождаются скачкообразным обратимым увеличением сжимаемости воды до 1.0-1.5 порядков. Такие сильные переходные изменения в сжимаемости воды могут вызвать значительные изменения в эффективной жесткости водосодержащей породы и могут быть триггером динамического разрыва и сопутствующих сейсмических эффектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ), грант № 17-11-01232. Расчеты выполнены с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.