

Кристаллохимия титана в оливине, вадслеите и рингвудите при термодинамических параметрах переходной зоны и верхней мантии Земли

Научный руководитель – Марченко Екатерина Игоревна

Бучинский Владимир Витальевич

Студент (магистр)

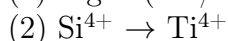
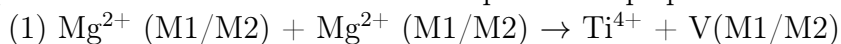
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: buchinskiy.vova@gmail.com

Оливин с общей кристаллохимической формулой M_2SiO_4 , где $M^{2+} = Mg^{2+}, Fe^{2+}, Ca^{2+}, Mn^{2+}$ и др.) является одним из преобладающих минералов верхней мантии и земной коры. В структурном отношении этот минерал имеет несколько полиморфных модификаций – собственно оливин (α -фаза), вадслеит (β -фаза) и рингвудит (γ -фаза), переходы между которыми происходят при давлениях, соответствующих глубинам 410 и 520 км, и являются одними из маркеров соответствующих глобальных сейсмических границ. Земная кора и мантия представляют собой огромный резервуар с ценными для сегодняшней промышленности элементами, в том числе за счет наличия явления изоморфизма в слагающих их минеральных фазах. Одним из таких ценных элементов является титан, без которого сложно представить современную жизнь – он используется от лакокрасочной промышленности до космических полетов.

В настоящее время титан, сконцентрированный в мантии Земли, не имеет промышленного значения, поскольку его добыча не представляется возможной. Тем не менее, с геохимической точки зрения изучение его способности изоморфно входить в пороодообразующие минералы верхней мантии и переходной зоны может помочь лучше понять процессы миграции и пути его попадания из верхней мантии в земную кору.

Целью настоящей работы являлось выявление с помощью теоретических методов кристаллохимического моделирования релевантных схем дефектообразования в оливине, вадслеите и рингвудите для вхождения в их кристаллические структуры ионов-примесей титана. Расчеты осуществлялись методами атомистического моделирования с использованием программы GULP [1] и сконструированной моделью потенциалов межатомного взаимодействия. Расчеты были проведены в сверхъячейках $3 \times 3 \times 3$ для оливина и $2 \times 2 \times 2$ для вадслеита и рингвудита с учетом возможных схем дефектообразования и различных вариантов сочетаний независимых кристаллографических позиций:



Показано, что схема 1 является наиболее энергетически выгодной по сравнению с другими, причем кластер дефектов обладает более низкой энергией по сравнению с равномерным распределением дефектов по сверхъячейке. Показано, что при концентрациях Ti порядка 0.6 масс %, соответствующих экспериментальным данным наиболее выгодно вхождение титана в кристаллическую структуру α -модификации (оливина).

Источники и литература

- 1) 1) Gale J.D. GULP: a computer program for the symmetry adapted simulation // J.Chem. Soc. Faraday Trans. 1997. V.93. Pp. 629-637.