

Распределение алюминия в минеральных фазах мантии Земли по данным теоретического моделирования

Научный руководитель – Еремин Николай Николаевич

Марченко Екатерина Игоревна

Студент (магистр)

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

E-mail: marchenko-ekaterina@bk.ru

Алюминий является пятым элементом по распространенности в земной коре и мантии. Однако, на сегодняшний день вопрос о минеральных фазах мантии Земли концентрирующих Al остается до конца неопределенным. Существующие количественные модели распространенности основных элементов в глубинных оболочках хорошо согласуются между собой. Так, согласно [3] в пересчете на один атом кремния распространенность элементов в земной коре и мантии выглядит следующим образом: O - 3.73, Mg - 1.06, Si - 1.0, Fe - 0.9, Al - 0.09, Ca - 0.06. По пиролитовой (примитивной) модели мантии относительная распространенность элементов меняется незначительно: O - 3.68, Mg - 1.24, Si - 1.0, Fe - 0.16, Al - 0.12, Ca - 0.09. Общепринято, что среднее содержание Al (0.12) уменьшается с глубиной и составляет 0.36 в Земной коре, 0.17 в верхней мантии и 0.06 в нижней мантии.

В настоящей работе проведен теоретический расчет количественного распределения алюминия по минеральным фазам мантии. В работе [1] методами компьютерного моделирования показано, что количество Al в $MgSiO_3$ может достигать до 2.5 мол.% в нижней мантии, тогда как вхождение атомов Al в $CaSiO_3$ энергетически менее предпочтительно, и рассматривать $CaSiO_3$ со структурой кубического перовскита как потенциальный «резервуар» атомов алюминия не представляется возможным. Результаты настоящих расчетов показали, что среднее содержание пяти наиболее распространенных элементов в мантии Земли в пересчете на один атом Si следующее: O - 3.59, Mg - 1.05, Si - 1.0, Fe - 0.082, Al - 0.048, Ca - 0.03. Как видно, не все количество Ca (0.3-0.6) и Al (0.04 - 0.07) в мантии может быть сосредоточено в перовскитовых фазах, следовательно, представляется возможным образование собственной фазы Ca и Al - алюмината кальция $CaAl_2O_4$ [2] предположительно со структурным типом марокита или фаз более сложного стехиометрического состава.

Источники и литература

- 1) Марченко Е.И., Еремин Н.Н., Бычков А.Ю. Компьютерное моделирование Ca- и Mg- перовскитов, содержащих атомы Al, при термодинамических условиях мантии Земли // Тезисы VIII Всероссийской молодежной научной конференции "Минералы: строение, свойства, методы исследования". Екатеринбург. 2016. С.115-116
- 2) Eremin N.N., Grechanovsky A.E., Marchenko E.I. Atomistic and ab-initio modeling of $CaAl_2O_4$ high-pressure polymorphs under Earth's mantle conditions // Crystallography Reports. Maik Nauka/Interperiodica Publishing. V. 61. №3. P.432-442
- 3) Irifune T., Tsuchiya T. mineralogy of the Earth – phase transitions and mineralogy of the lower mantle // Treatise on Geophysics, Elsevier. 2007. №2. P. 33-62.