

**Оценка энергетических параметров взаимодействия в высокобарной системе
пироп - мэйджорит - гипотетический титановый гранат.**

Научный руководитель – Еремин Николай Николаевич

Гостищева Надежда Дмитриевна

Студент (магистр)

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

E-mail: nadya-nikishaeva@mail.ru

Изучение поведения главных и примесных элементов в мантии Земли имеет важное значение для выявления химического и фазового состава глубинных оболочек, а также для определения условий и процессов образования различных минеральных ассоциаций. Так, одним из основных источников информации о P-T условиях мантии являются алмазы, индикаторами генезиса которых служат включения высокобарных минералов (перовскит, пироп, мэйджорит и др.) [2, 3]. Особое внимание привлекают включения Ti-содержащих минералов группы граната, так как титан, как литофильный элемент, остается одним из важнейших микроэлементов земной коры. Многочисленные современные исследования указывают на то, что состав включений с высоким содержанием титана соответствует базальтовой океанической коре, которая в процессе субдукции может погружаться на глубины с давлениями, достигаемыми в верхней и нижней мантии Земли [5, 6].

В настоящей работе были проведены расчеты изоморфного вхождения ионов Ti^{4+} в структуры пироба и мэйджорита в диапазоне давлений 7–25 ГПа. Моделирование примесных дефектов в структурах осуществляли с использованием программы GULP двумя независимыми способами:

- с использованием модели «вложенных сфер» (метода Мотта-Литтлтона) [4];
- методом моделирования в сверхъядерках [1].

Полученные в результате настоящих расчетов данные были использованы для определения количественных характеристик вхождения титана в структуры минералов группы граната, а также для оценки смесимости фаз в тройной системе пироп - мэйджорит - титановый гранат на глубинах, соответствующих верхней и нижней мантии Земли.

Источники и литература

- 1) Урусов В.С., Еремин Н.Н. Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов // М: ГЕОС, 2012. С. 428.
- 2) Meyer H. Inclusions in diamond // Mantle Xenoliths, 1987. V. 1. P. 501–522.
- 3) Moore R.O., Gurney J.J., Griffin W.L., Shimizu N. Ultra-high pressure garnet inclusions in Monastery diamonds; trace element abundance patterns and conditions of origin // Eur. J. Miner., 1991. V. 3. P. 213–230.
- 4) Mott N.F., Littleton M.J. Conduction in polar crystal. I. Electrolytic conduction in solid salts // Transactions of the Faraday Society, 1938. V. 34. P. 485-495.
- 5) Stachel, T., Brey, G.P., Harris, J.W. Kankan diamonds (Guinea) I: from the lithosphere down to the transition zone // Contrib. Mineral. Petrol., 2000a. V. 140. P. 1–15.
- 6) Tappert, R., Stachel, T., Harris, J.W., Muehlenbachs, K., Ludwig, T., Brey, G.P. Diamonds from Jagersfontein (South Africa): messengers from the sublithospheric mantle // Contrib. Mineral. Petr., 2005. V. 150. P. 505–522.