

## ИЗОМОРФИЗМ В ГЛУБИННЫХ ГЕОСФЕРАХ: ВСЕ ЛИ ВОПРОСЫ РЕШЕНЫ?

Еремин Н.Н.<sup>1</sup>®, Марченко Е.И.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>МГУ им. М.В.Ломоносова, Геологический факультет

<sup>2</sup>МГУ им. М.В.Ломоносова, ФНМ

® [neremin@mail.ru](mailto:neremin@mail.ru)

Разнообразные методы теоретического прогноза, основанные на принципе поиска минимума энергии кристаллической структуры, хорошо зарекомендовали себя при решении разнообразных фундаментальных геологических и материаловедческих задач. В их числе - моделирование полиморфных переходов, оценка пределов изоморфных замещений, предсказание свойств еще не синтезированных соединений, оценка фазовой стабильности, создание реалистичной картины строения глубинных геосфер и многие другие задачи кристаллохимии, химии и физики твердого тела. В докладе результативность этих методов, применительно к явлению изоморфизма в мантии Земли иллюстрируется следующими примерами:

1) Анализ разнообразных схем изоморфного вхождения ионов  $K^+$ ,  $Na^+$  и  $Cr^{3+}$  в кристаллические структуры  $CaSiO_3$  и  $MgSiO_3$  при высоких давлениях и температурах, соответствующих верхней мантии Земли [1-2];

2) Оценка свойств смешения твердых растворов постшпинелевых фаз в сериях твердых растворах  $CaCr_2O_4$ - $CaAl_2O_4$ ,  $CaCr_2O_4$ - $CaFe_2O_4$ ,  $MgCr_2O_4$ - $MgAl_2O_4$ ,  $MgCr_2O_4$ - $MgFe_2O_4$  с учетом полиморфных переходов при высоких температурах и давлении [3];

3) Оценка изоморфной емкости основных мантийных фаз по кальцию и алюминию, показавшая наличие собственной акцессорной фазы алюмината кальция в нижней мантии [4];

4) Эволюционный поиск кристаллических структур стабильных фаз в системе  $CaO$ - $Al_2O_3$  [5-6] в диапазоне давлений 24-136 ГПа. В частности, было показано, что только фаза простейшего состава  $CaAl_2O_4$  со структурным типом  $CaFe_2O_4$  является стабильной при этих термодинамических условиях. Построена фазовая диаграмма  $CaAl_2O_4$  при низких давлениях, выявлены все возможные фазовые переходы. Кроме того, с помощью методов эволюционного моделирования была уточнена кристаллическая структура метастабильной фазы «Ca-III».

- [1] Еремин Н.Н. и др., 2019, ДАН. Науки о Земле. **488**. 530-533
- [2] Марченко Е.И. и др., 2019, ДАН. Науки о Земле. **487**. 76-78
- [3] Marchenko E.I. et al., 2024, Doklady Earth Sciences. DOI: 10.1134/S1028334X23603735.
- [4] Марченко Е.И. и др., 2017, Вестник Московского университета. Серия 4: Геология. 3-7
- [5] *Eremin N.N.*, et al., 2016, **61**. 432-442
- [6] Marchenko et al., 2022, Phys. and Chem. of Minerals. **49**. 44