

СЕКЦИЯ «ГЕОЛОГИЯ»

ПОДСЕКЦИЯ «ПЕТРОЛОГИЯ»

Компьютерное моделирование Na-содержащих мэйджоритовых гранатов

*Дымищ Анна Михайловна**студент**Московский государственный университет им.М.В. Ломоносова, геологический факультет, Москва, Россия
E-mail: anett1987@yandex.ru*

Гранаты, заключенные в алмазах в виде включений часто содержат примесь Na_2O и SiO_2 (Stachel, 2001). Детальное экспериментальное изучение подобных гранатов показало, что повышенные концентрации Na связаны с гетеровалентным изоморфизмом: $\text{Na} + \text{Si} = \text{Mg} + \text{Al}$ (Bobrov et al, 2008).

Данные исследования направлены на изучения термодинамических и структурных характеристик NaGrt ($\text{Na}_2\text{MgSi}_5\text{O}_{12}$), который предполагается конечным членом в ряду пироповой группы гранатов с избыточным Na и Si.

Статическая энергия решетки рассчитывалась в программе GULP (Gale, Rohl, 2003), с использованием модели силовых полей (Vinograd et al., 2007) для 200 структур с заданным составом граната $\text{Na}_2\text{MgSi}_5\text{O}_{12}$. Эти структуры были получены с использованием ячейки пироба ($\text{Ia}\bar{3}\text{-d}$) $\text{Mg}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$, путем замены всех атомов Al в октаэдрической позиции на атомы Si и 2/3 атомов Mg на Na. Заселение Na на позиции Mg производилось случайным образом. Статические энергии структур оценивались путем кластерного разложения с использованием 8 парных параметров взаимодействия (effective cluster interaction – ECI). Эти параметры позволили произвести Монте Карло моделирование в суперячейке $4\times 4\times 4$ (NNN – взаимозаменяемые позиции). Результаты моделирования без учета температуры показали, что наименьшей энергии соответствует структура с пространственной группой $\text{I4}\bar{2}\text{D}$. Зависимость структуры от температуры изучалась дополнительно в пределах от 300 до 2000К с шагом в 50К. Резкий скачок энтальпии разупорядочения наблюдался при 500К. Этот результат говорит о том, что при температуре ниже 500К Na и Mg в NaGrt имеют тетрагональное упорядочение, в то время как при более высокой температуре NaGrt разупорядочен и имеет кубическую сингонию.

Также, в работе было изучено равновесие между тетрагональным NaGrt и NaPx с общей формулой $\text{NaMg}_{0,5}\text{Si}_{2,5}\text{O}_6$ (Angel et al., 1988) с использованием ab initio расчетов в программе CASTEP (Clark et al., 2005). Наши расчеты показали, что переход из NaPx в NaGrt наблюдается при 13 ГПа для 0К и при 14 ГПа для 1923К, что хорошо согласуется с экспериментальными данными (Gasparik, 1989). По результатам моделирования, с использованием уравнения Мурнагана были также получены значения сжимаемости NaPx и NaGrt , которые составили 112,2 и 165,5 ГПа, соответственно.

Автор выражает благодарность к.г.-м.н. Боброву А.В. и д.г.-м.н. Винограду В.Г. за помощь в проведении работы.

Литература

1. Angel R.J., Gasparik T, Ross N.L., Finger L.W., Prewitt C.T., Hazen R.M. A (1988) silica-rich sodium pyroxene phase with six-coordinated silicon. Nature. V. 335. P. 156–158
2. Clark S., Segal M., Pickard C., Hasnip P., Probert M., Refson K., Payne M. (2005) First principles methods using CASTEP. Krystallographie. V. 220. N. 5–6. P. 567–570

3. Bobrov A.V., Litvin Yu.A., Bindi L., Dymshits A.M. (2008) Phase relations and formation of sodium-rich majoritic garnet in the system $Mg_3Al_2Si_3O_{12}$ – $Na_2MgSi_5O_{12}$ at 7.0 and 8.5 GPa. *Contrib. Mineral. Petrol.* DOI:10.1007/s00410-008-0283-3.
4. Gale J., Rohl A. (2003) *Molecular Simulations*. 291 p.
5. Gasparik T. (1989) Transformation of enstatite – diopside – jadeite pyroxenes to garnet. *Contrib Mineral Petrol.* V.102. P. 389–405
6. Stachel T. (2001) Diamonds from the asthenosphere and the transition zone. *Eur. J. Mineral.* V. 13. P. 883–892.
7. Vinograd V., Winkler B., Gale J. (2007) *Physics and Chemistry of Minerals*. V. 34. P. 71.

Возраст и состав крупнейших извержений Ключевской Группы вулканов в раннем голоцене по данным изучения пирокластических пород¹

Крашенинников С.П.²

*Студент-магистр первого года обучения геологического факультета
Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: spkrashennikov@mail.ru*

Ключевская группа вулканов является крупнейшей на Камчатке. Однако, история и эволюция вулканизма Ключевской группы вулканов до сих пор изучена достаточно плохо. Цель моего исследования - определение вулканов Ключевской группы, которые были активны в раннем голоцене, и петрологическая характеристика их пирокластических пород.

Изученные породы были отобраны из 12-метрового разреза почвенно-пирокластического чехла на СВ склоне подножья Ключевского вулкана во время полевых экспедиций 2007 и 2008 гг. Мною были изучены образцы пород из 5-метровой нижней части разреза и сделаны оценки их возрастов, находящиеся в интервале 6,8 – 11,3 тыс. л.н.. Точность определения возраста отдельных прослоев оценивается в ± 150 лет. На основе полученных возрастов, петрографических, минералогических и геохимических данных было выделено 3 группы пород.

Породы 1-й и 3-й групп, изверженные соответственно 6,8 – 9,9 и 10,5 – 11,3 тыс. л.н., представлены порфировыми обильно-пористыми фрагментами шлаков с микролитовой структурой основной массы. Вкрапленники и микролиты представлены *Ol*, *Cpx*, *Pig* и *Pl*, иногда *Mt*. Породы отвечают по составу умеренно-К высоко-А1 базальтам и андезитам [1] известковистой или известково-щелочной специфики [2]. Составы пород этих групп ближе всего соответствуют породам вулкана Ключевской или, возможно, его предшественника - вулкана Камень, сведения о вулканической активности которого практически отсутствуют.

Породы 2-й группы, отвечающие возрастному интервалу 9,9-10,5 тыс. л.н., отличаются вытянутыми, трубчатыми фрагментами стекол и наличием гиганто-порфировых кристаллов *Pl* (до 1 см) в стекловатой матрице. Микролиты представлены редкими зернами *Ol*, *Pl*, *Cpx*, *Pig*, *Mt* и *Ap*. Составы пород 3-й группы соответствуют высоко-К трахиандезитам известково-щелочного ряда [2]. Характерным отличием вулканических стекол 2-й группы от стекол 1-й и 3-й групп являются приблизительно в

¹ Тезисы основаны на материалах исследований, проведенных в рамках гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 07-05-00807) и российско-немецкого проекта "KALMAR".

² Автор выражает признательность доцентам, д.г.-м.н. Плечову П.Ю., к.г.-м.н. Портнягину М.В. и к.г.-м.н. Пономаревой В.В. за научные консультации.

два раза более высокие концентрации K_2O и P_2O_5 . Близкими аналогами пород 2-й возрастной группы являются высоко-К андезиты и андезибазальты в. Ушковский.

На основании полученных данных мною делается вывод, что наиболее активным вулканом в Ключевской группе в раннем голоцене был вулкан Ключевской, породы которого появляются в разрезе уже начиная с ~12 тыс. лет т.н.. Полученные данные позволяют предполагать, что высокая активность Ключевского вулкана могла начаться на ~5 тыс. лет раньше, чем это оценивалось в работе О.А. Брайцевой [3]. Вспышка активности вулкана Ушковский произошла 9,9 – 10,5 тыс. л.н.. В течении этого времени на вулкане Ушковский произошло, по крайней мере, 10 очень сильных извержений, после чего вулкан был не активен до настоящего времени.

Литература

1. Gill J.B. (1981) *Orogenic Andesites and Plate Tectonics*. Berlin: Springer, 390 pp.
2. M.A. Peacock (1931) Classification of igneous rock series. *J. Geology* 39: 54-67.
3. Braitseva O.A. *et al.* (1995) Ages of calderas, large explosive craters and active volcanoes in the Kuril-Kamchatka region, Russia. *Bull. Volcanol.* 57: 383-402