

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА»
ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ 05.03.01 ГЕОЛОГИЯ
ПРОФИЛЬ
КАФЕДРА Кристаллография**

**КУРСОВАЯ РАБОТА
«Луна в разрезе»**

**Выполнил студент
105 группы
Дорофеев Матвей Михайлович**

Научный руководитель:

**Доктор химических наук, декан геологического
факультета Еремин Николай Николаевич**

Москва

2024

Содержание

Введение

Содержание работы

Глава 1. Современное представление о строении и составе Луны – литературный обзор.

1.1 Валовый состав

1.2 Состав и строение коры

1.3 Мантия

1.4 Магматический океан (подошва LMO)

1.5 Ядро

1.6 Гипотезы происхождения Луны

Глава 2. Обзор используемых программ.

2.1 Метод полуэмпирического моделирования

2.2 Программа GULP

2.3 Программа Atoms

2.4 Программа VESTA

Глава 3. Результаты работы

3.1 Моделирование мантийных фаз

3.2 Изменения кристаллоструктурных характеристик

3.2.1 Ильменит

3.2.2 Энстатит

3.2.3 Форстерит

3.2.4 Гранат

3.2.5 Клиноэнстатит

3.2.6 Шпинель

Заключение

Приложение 1

Литература

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы

Луна занимает особое место среди небесных тел Солнечной системы, а ее происхождение, внутреннее строение и вещественный состав остаются одними из фундаментальных проблем естествознания. Проблема химического и минерального состава Луны тесно связана с проблемой начального состояния и ранней эволюции тел Солнечной системы, поскольку геохимические данные играют решающую роль в доказательстве любой концепции происхождения Луны. Луна представляет интерес в качестве потенциального источника минералогического сырья и промежуточной базой для полетов к дальним объектам Солнечной системы. Однако данные о внутреннем строении, ее глубинных породах и составе ядра Луны недостаточны.

Цели и задачи работы

- Изучить современные представления о химическом и минеральном составе глубинных оболочек Луны
- Провести компьютерное моделирование основных мантийных лунных фаз при термодинамической обстановке, соответствующей лунной мантии, проследить изменение кристаллоструктурных параметров этих фаз
- осуществить визуализацию кристаллических структур при термодинамической обстановке, соответствующей лунной мантии

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Глава 1. Современное представление о строении и составе Луны - литературный обзор.

Глава написана на основе данных, изложенных в диссертации Екатерины Викторовны Кронрод “Термохимические модели состава и внутреннего строения мантии Луны”.

Модель внутреннего строения Луны включает в себя пять оболочек: кора (40 км), верхняя мантия (40-250 км), средняя мантия (250-750 км), нижняя мантия (750 км-ядро), и ядро. Глубина магматического океана (подошвы LMO) принята за 750 км, ниже которой находится недифференцированная мантия, не затронутая процессами частичного плавления (рис 1).

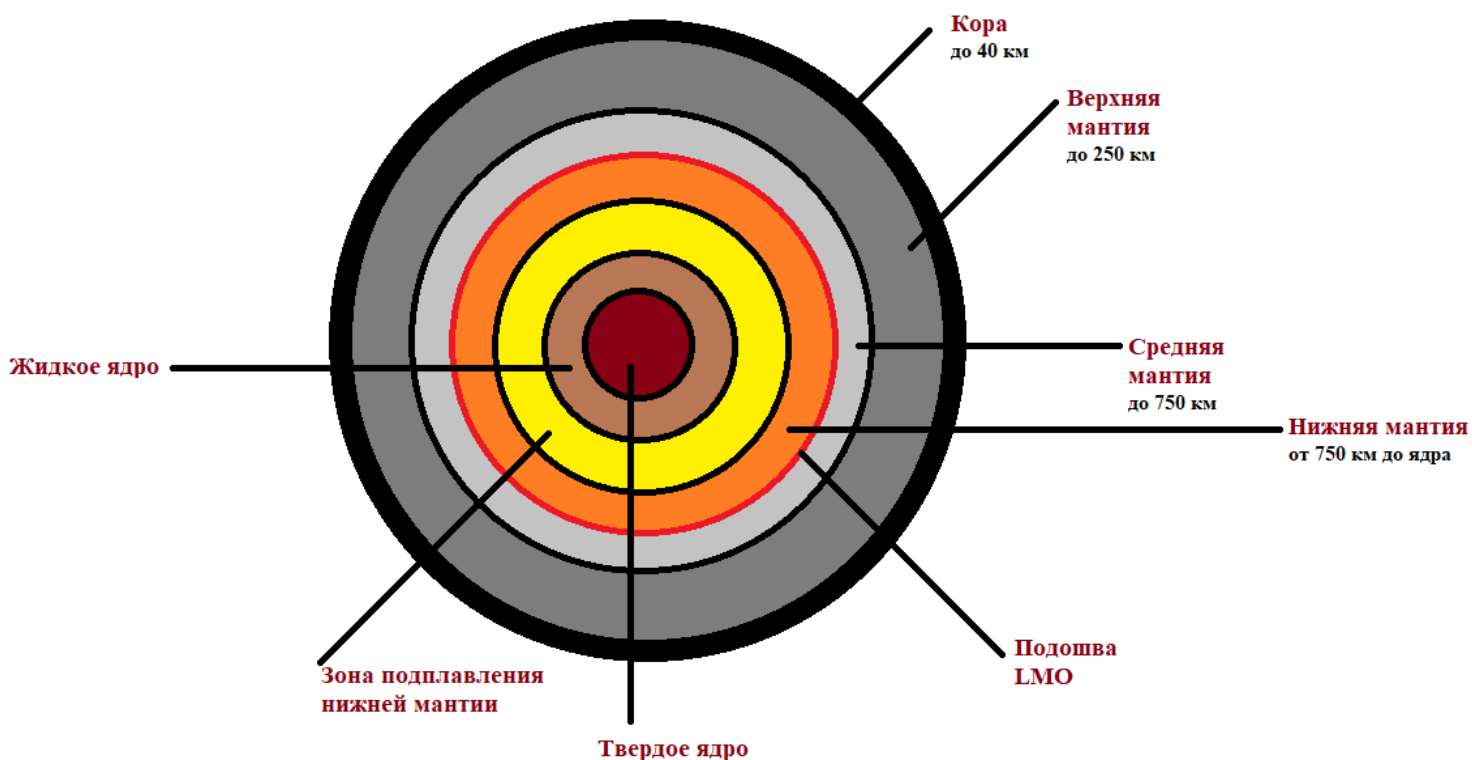


Рис.1

1.1 Валовый состав

В результате работы автоматических станций Луна и экспедиций Apollo были собраны образцы лунного вещества, но они не отражают состав мантии, что не позволяет определить валовый состав спутника. Более надежными данными выступают результаты оценки состава коры, основанные на результатах исследования образцов лунных пород и метеоритов, а также дистанционного зондирования.

В оценках валового состава Луны используются разные подходы и методы: конденсационные модели (Morgan et al., 1978), петрологические эксперименты (Ringwood, Essene, 1970; Longhi, 2006), геофизические модели (Kuskov, 1997; Кронрод, Кусков, 2011; Khan et al., 2013), геохимические ограничения на элементные отношения и корреляции между содержаниями Th, U и тугоплавких оксидов (Taylor, 1982; Rasmussen, Warren, 1985; Wanke, Dreibus, 1986; Jones, Delano, 1989; O'Neill, 1991; Галимов, 2004). В литературе встречаются различные модели химического состава: от состава, подобного ультраосновному веществу верхней мантии Земли, до состава, резко обогащенного Ca и Al и подобного высокотемпературным включениям в углистом хондрите Allende; содержание FeO варьирует от 6 до 18 мас.% (Ringwood, 1979; Hood, Jones, 1987; Kuskov et al., 2002; Wiczorek et al., 2006).

1.2 Состав и строение коры

Согласно геологическим данным, лунная кора сложена материковыми породами и небольшой долей базальтов. В процессе моделирования внутреннего строения кора Луны заменяется на однородную по составу, плотности и мощности сферическую оболочку, также предполагается отсутствие инверсии плотности по глубине.

В ранних работах по исследованию толщины коры Луны в местах посадки “Apollo 12, 14, 16” указан интервал 55-75 км (Nakuma et al., 1983), но в результате повторной обработки сейсмических данных были получены значения мощности толщины коры до 30 км (Lognonne et al., 2003). В обзоре (Wieczorek et al., 2006) приведена сводка результатов по оценке мощности коры, где указана предпочтительная величина толщины в 49 км. Благодаря усовершенствованным методам анализа сейсмической информации Apollo и новым данным с миссии GRAIL появились более надежные оценки мощности коры. На основе этих данных средняя мощность коры Луны оценивается в пределах 34-43 км.

Содержание основных оксидов в лунной коре по (Taylor, 1982) составляет: $Al_2O_3=27.3\%$, $CaO=15.5\%$, $MgO=6.8\%$, $FeO=6.3\%$, $SiO_2=44.1\%$.

Согласно современным моделям (Khan et al., 2013; Taylor, Wieczorek, 2014) весовое содержание Al_2O_3 в материковой коре в верхнем и промежуточном слоях составляет около 30% и 20% в нижнем слое мафической коры. Эти модельные представления близки к предыдущим результатам определения Al_2O_3 в лунных метеоритах (Демидова, Назаров, 2007) и 25-28% Al_2O_3 (Taylor, 1982; Taylor и др., 2006; Shearer и др., 2006; Longhi, 2006).

1.3 Мантия

Анализ данных экспедиций Apollo предполагает существование нескольких сейсмических границ в мантии (Nakamura, 1983; Lognonne, 2005; Gagnepain-Beyneix et al., 2013) и деление мантии на верхнюю (кора-270 км, 940 К), среднюю (270-750 км, 1123 К) и нижнюю (750 км-ядро, 1400 К).

Из-за отсутствия на данный момент образцов глубинного вещества Луны, информация о составе и структуре мантии может быть получена только из косвенных источников, таких как анализ базальтов и вулканических стекол, а также на основе совокупности геофизических данных.

Определения сейсмических свойств и электропроводности показывают, что до глубин порядка 1200 км мантия Луны является твердой. Из этого следует, что температура мантии в этой области должна быть ниже температуры солидуса.

Существует ряд противоречий между геохимическими и геофизическими классами моделей химического и минерального состава мантии Луны и внутри самих классов. Основным противоречием является оценка концентраций тугоплавких оксидов и FeO.

Одни исследователи считают, что обогащена FeO, Al₂O₃ и CaO (Taylor, et al. 2006; Hood, Jones, 1987; Галимов, 2004а; Кусков, Кронрод 1999; Lognonné et al., 2003), в то время как другие придерживаются точки зрения, что по сравнению с мантией Земли, мантия Луны обогащена FeO, а содержание Al₂O₃ и CaO практически идентично земному (Ringwood, 1979; Wänke, Dreibus, 1986).

Выделяют четыре различные модели, охватывающие широкий спектр концентрации Ca, Al, Fe: Ol-Px или пироксенитовая модель (Ca-Al-обедненный состав оливинового пироксенита), Ol-Cpx-Gar (обогащенный Ca и Al оливин-клинопироксен-гранатовый состав), пиrolитовый состав мантии Луны, модель однородного состава мантии.

Модели Ol-Px и Ol-Cpx-Gar были выведены совместной инверсией сейсмических и гравитационных данных (Кронрод, Кусков, 2011). Модель Ol-Px верхней мантии согласуется с данными экспериментальной петрологии (Ringwood, Essene, 1970), что делает ее наиболее вероятной моделью верхней мантии Луны (~2 мас. % CaO и Al₂O₃, $\rho \sim 3.33\text{--}3.34$ г/см³), при этом ортопироксен является доминирующим элементом верхней мантии Луны, а не оливин. Фазовый состав Ol-Cpx-Gar отличается как от состава Ol-Px пород верхней мантии Луны так и от пиrolитового состава мантии Земли, который широко используется как модель, отражающая состав примитивной мантии Земли. Модель Ol-Cpx-Gar не рассматривается в качестве петрологической основы верхней мантии, поскольку приводит к нереалистичным показателям температуры, однако может рассматриваться в качестве модели нижней мантии. Есть предположение, что пиrolит близок к составу мантии Луны, но в сравнении с пиrolитом, однородный состав мантии Луны имеет более высокое содержание FeO, более низкое содержание MgO и меньшее содержание тугоплавких элементов, что указывает на существенные различия химического состава силикатных оболочек.

Из оценки валового состава Луны следует, что распространенность в Луне Al₂O₃ либо такая же как и на Земле (Ringwood, 1977; Jones, Delano, 1989; O'Neill, 1991; Longhi, 2006; Warren, 2005; Khan et al., 2006a,b; Кронрод, Кусков 2011; Dauphins et al., 2014), либо Луна обогащена рефракторными элементами относительно мантии Земли в 1.5 раза (Morgan et al., 1978; Taylor, 1982; Kuskov, Kronrod, 1998a,b; Lognonné et al., 2003; Taylor, et al., 2006; Галимов, 2011).

1.4 Магматический океан (подошва LMO)

Под лунным магматическим океаном обычно понимается внешняя оболочка Луны, прошедшая через стадию частичного плавления (Shearer et al., 2006; Elkins-Tanton et al., 2011; Khan et al., 2013).

Петролого-геохимические и геофизические модели указывают на стратификацию Луны по химическому составу, что связывают с идеей LMO.

Несмотря на то, что моделирование фазовых равновесий имеет важную роль при развитии представлений кристаллизации LMO, масштаб первоначального плавления Луны остается неизвестным.

В результате кристаллизации LMO образовались последовательности кумулятивных слоев, сложенные различными минералогическими ассоциациями, и сопровождалась образованием легкой пылешпатовой коры, под которой находился тонкий слой Ti-обогащенных кумулятов и мощный слой пироксен-оливиновых кумулятов на глубине (Wieczorek et al., 2006; Shearer et al., 2006). В результате инверсии плотности происходит оцемантийный глобальный переворот или овертон, обусловленный кристаллизацией плотных Ti-обогащенных кумулятов (Snyder et al., 1992; Hess, Parmentier, 1995; Elkins-Tanton et al., 2011) и содержащих радиоактивные элементы (U, Th, K), продуцирующих выделение тепла и способствующих образованию обогащенных TiO₂ расплавов (Khan et al., 2013, 2014).

Основываясь на физико-химических моделях затвердевания LMO и геофизической информации толщина магматического океана составляет от верхних 200-500 км до частичного или полного плавления всей Луны (Ringwood, 1977; Shearer et al., 2006; Wieczorek et al., 2006; Elardo et al., 2011; Barr, Grove, 2013).

Возможной отметкой подошвы LMO принято считать скачок сейсмических свойств на глубине 500 км. Это означает, что максимальная глубина проплавления могла затронуть только верхние 500 км, разделяющие оливин-ортопироксеновые кумуляты от примитивной гранат-содержащей мантии (Wieczorek et al., 2006; Barr, Grove, 2013). Существуют эволюционные модели конвектирующего LMO вплоть до глубин 1000 км (Elkins-Tanton et al., 2011). Также существует модель полного плавления Луны-глобального магматического океана (Shearer et al., 2006).

При повторной обработке и интерпретации данных (Lognonne, 2005; Gagnepain-Beyneix et al., 2006) был выявлен резкий скачок скоростей P-, S-волн на глубине 750 км. Термодинамическая обработка сейсмических моделей показала, что скачок мог быть обусловлен изменением состава от обедненного Ca, Al до состава, обогащенного Ca и Al, что выражается в повышенном содержании граната (Кусков, Кронрод, 2009; kuskov et al., 2014). Если изменения в составе связаны с солидификацией подошвы LMO, то глубина 750 км маркирует LMO как химическую неоднородность, указывающей на разный химический состав ниже- и вышележащих горизонтов мантии и переход от оливин-пироксенитовых кумулятов к примитивной мантии, в виде ассоциации оливин + клинопироксен + гранат (Кусков, Кронрод, 1998; Kuskov, Kronrod, 1998).

1.5 Ядро

При написании раздела использовался обзор Д. Ю. Пущаровского “Железо и его соединения в ядре Земли: новый данный и идеи”.

В ранних работах по сейсмическим данным «Аполлона» размер и физическое состояние ядра Луны определить было невозможно, но вследствие анализа данных сейсмографа с учетом отраженных от ядра волн удалось получить оценку радиуса ядра Луны. Было установлено, что твердое ядро радиусом 240 км окружает жидкое ядро радиусом 330 км. Бурмин (2012) провел независимое переопределение скоростного распределения в мантии Луны и размеров Fe-FeS ядра на основе интерпретации данных по программе «Аполлон».

1.6 Гипотезы происхождения Луны

У ученых нет до сих пор единого мнения о том, как появилась Луна. Известно лишь то, что спутник образовался через 100 млн лет после образования Солнечной системы. В разное время учеными выдвигались различные гипотезы.

1) Гипотеза центробежного отделения. Гипотезу в 1878 году выдвинул Джордж Дарвин. Согласно этой гипотезе, Луна сформировалась из крупного куска вещества, который оторвался от Земли под действием центробежной силы, когда та крутилась с очень высокой скоростью. Экваториальный выступ планеты настолько растянулся, что от нее оторвался кусок вещества. Эта гипотеза объясняет меньшую плотность Луны, поскольку та соответствует плотности мантии Земли, однако требуемый момент импульса должен быть в 3-4 раза больше нынешнего момента импульса системы Земля. Также у Луны более низкое содержание летучих элементов, чем у Земли.

2) Гипотеза захвата. Гипотезу захвата первым выдвинул астроном Томас Джефферсон Джексон Си в 1909 году. Он предположил, что Луна являлась независимой планетой Солнечной системы и в результате пертурбаций перешла на эллиптическую орбиту, пересекающуюся с Земной орбитой. Луна была захвачена земной гравитацией и стала спутником.

Многие исследователи считают, что с гораздо большей вероятностью пролетающая планета столкнулась бы с Землей или была бы отброшена за пределы земной орбиты гравитацией. Помимо этого, если Луна сформировалась за пределами земной группы планет, тогда можно объяснить отсутствие железного ядра и малую плотность, но тогда не представляется возможным объяснить дефицит летучих элементов, которыми обогащены планеты-гиганты.

Существует также версия Сергея Ушакова и Олега Сорохтина 1989-го. Они предположили, что Земля притянула прото-луну с соседней орбиты интенсивными приливными силами. Прото-луна приблизилась на расстояние предела Роша и начала разрушаться, железное ядро упало на Землю, а из оставшихся на орбите обломков коры образовалась Луна.

3) Гипотеза многих лун. В 1960-х годах Томас Голд и Гордон Макдональд представили гипотезу, согласно которой Земля по отдельности захватила несколько небольших небесных тел. На протяжении миллиарда лет тела могли сталкиваться друг с другом, а из их обломков сформировалась Луна.

Однако, данная гипотеза не объясняет схожий изотопно-кислородный состав Луны и Земли. Также сама возможность захвата Землей нескольких небесных тел выглядит неправдоподобно.

4) Гипотеза столкновения. Гипотезу в 1975 году выдвинули Уильям Хартман и Дональд Дэвис. Согласно их гипотезе, протопланета столкнулась с прото-Землей на ранней стадии ее формирования. В результате большая часть ударившегося объекта и часть земной мантии были выброшены на околоземную орбиту. Из этих обломков сформировалась прото-Луна. Данная теория сейчас является основной, поскольку объясняет имеющиеся факты о строении Луны и ее химическом составе.

5) Гипотеза испарения. В 1955 году Эрнст Юлиус Эпик выдвинул гипотезу, согласно которой прото-Земля от постоянных бомбардировок каменными частицами разогрелась до 2000°C . Крупные массы вещества были выпарены в околоземное пространство. Летучие компоненты были сдуты солнечным ветром, а тяжелые компоненты сконденсировались и соединились с материалом вращающихся колец, образовав Луну. Однако, геологические данные свидетельствуют о том, что температура Земли никогда не была настолько высокой.

6) Гипотеза совместной аккреции. В 1755 году Иммануил Кант выдвинул предположение, что Земля и Луна сформировались из одного пылевого сгустка. Согласно гипотезе, Земля и Луна сформировались из протопланетного роя твердых частиц на одной орбите как двойная планета. Когда прото-Земля набрала достаточную массу, частицы протопланетного роя захватывались её притяжением и начинали вращаться вокруг зародыша планеты по самостоятельным эллиптическим орбитам. Из этих частиц образовался другой околопланетный рой, частицы которого сталкивались между собой. Одни теряли скорость и падали на прото-Землю, а орбиты других усреднялись между собой, формируя близкую к круговой орбиту. Из этого роя и сформировалась Луна.

Недочетом гипотезы является то, что она не объясняет дефицит железа и летучих веществ Луны, а также различия в плотностях между Землей и Луной.

7) Гипотеза метеоритной бомбардировки. Гипотезу выдвинул в 2004 году физик Николай Горькавый. Он предполагал, что в результате астероидной бомбардировки, часть мантии Земли оказалась в космическом пространстве, где из нее и образовалась Луна.

Глава 2. Обзор используемых программ.

2.1 Метод полуэмпирического моделирования

Метод полуэмпирического (атомистического) моделирования основан на поиске взаимного расположения атомов в элементарной ячейке, при котором величина энергии кристаллической структуры принимает наименьшее значение. Одной из основных проблем компьютерного моделирования структуры является проблема выбора конкретных законов межатомного взаимодействия.

Для неорганических кристаллов характерны большие величины зарядов атомов, приближающиеся к своим формальным валентностям. Поэтому, одним из основных членов в выражении для структурной энергии является кулоновское взаимодействие заряженных частиц, дающее значительный электростатический дальнедействующий вклад в общую энергию межатомного взаимодействия.

Из используемых в настоящее время методом атомистического моделирования нескольких десятков парных потенциалов разнообразных форм наибольшее распространения получили потенциалы Букингема, Леннарда-Джонса, Морзе, Юри-Брэдли, потенциал кручения, гармонический, угловой трехчастичный гармонический и “внеплоскостной”, а на практике чаще всего используют потенциалы в форме Букингема или Леннарда-Джонса, так как наиболее точно межионное отталкивание описывается обратно-степенной или экспоненциальной зависимостью. В таком случае полное взаимодействие между ионами будет описываться суммой отрицательного кулоновского и положительного короткодействующего вклада.

В атомистическом методе моделирования широко используется принцип «трансферабельности» (переносимости) межатомных потенциалов. Оптимизированный на некоторой относительно простой и изученной кристаллической структуре набор параметров потенциалов используется без существенных изменений для моделирования более сложных (часто даже гипотетических) соединений. Таким образом, удается получить неизвестную из эксперимента информацию об их структурах и свойствах. Принцип трансферабельности параметров межатомного взаимодействия давно используется как само собой разумеющееся при моделировании органических структур. Для неорганических структур такой универсальный подход применим только внутри родственных групп минералов и соединений, где схоже химическое связывание. Причинами служат незначительный вклад в общую энергию взаимодействия Ван-Дер-Ваальсовских сил, значительно большее разнообразие контактов между соседними атомами в неорганических кристаллах и то, что взаимодействие между атомами не ограничивается ближайшим окружением, а затрагивает весь кристалл.

В связи с тем, что не всегда ряд характеристик кристалла можно определить экспериментальным путем, атомистические расчеты с использованием оптимизированных значений межатомных потенциалов востребованы для решения широкого круга задач физики, химии и структурной минералогии. Знание оптимального набора межатомных потенциалов позволяет определить энергию сцепления, фононный спектр, механические, термодинамические и многие другие свойства кристаллической структуры.

2.2 Программа GULP

Комплекс General Utility Lattice Program (сокращенно GULP) [Gale and Rohl, 2003] является безусловным лидером среди программ по структурному моделированию неорганических кристаллов. Программа позволяет проводить минимизацию энергии в режиме постоянного давления, постоянного объема и варьировать только параметрами ячейки. GULP использует различные оптимизационные алгоритмы поиска локальных структурных минимумов. Программа позволяет рассчитать в равновесной точке широкий круг физических свойств кристалла, такие как упругие константы и разнообразные модули сжатия, пьезоэлектрические, статические и высокочастотные диэлектрические константы, кривые фононных спектров, термодинамические свойства (в том числе теплоемкость и энтропию, величины энергий Гиббса и Гельмгольца), а также способна проводить анализ оптимальной кристаллической структуры на предмет длин и углов связей, межатомных расстояний, плотности и объема элементарной ячейки, электростатических потенциалов и градиентов электрического поля в разнообразных позициях. Для оценки зарядов некоторых сортов атомов существует возможность использовать алгоритмы EEM [Van Genechten et al, 1987] и QEq [Rappe and Goddard, 1991]. Как и в более ранних программа GULP позволяет осуществлять оптимизацию уточняемых параметров потенциалов для обеспечения наилучшего описания упругих констант, статических и высокочастотных диэлектрических констант, модулей сжатия, пьезоэлектрических модулей, теплоемкости, энтропии, энергии решетки и самой кристаллической структуры [Урусов и Еремин, 2012].

2.3 Программа Atoms

Atoms-это программа для визуализации и изучения геометрических особенностей кристаллических структур (www.shapesoftware.com). В зависимости от решаемой задачи Atoms позволяет моделировать как полностью «трехмерные» цветные чертежи, так и создавать достаточно простые схематические черно-белые рисунки. В программе есть разнообразные стили представления: шариковые модели, каркасы химических связей, взаимопроникающие атомы с пространственным заполнением, полиэдрическое изображение, режим показа эллипсоидов тепловых колебаний атомов и т.д., а для улучшенного восприятия изображения могут быть задействованы режимы перспективы и стереопары.

Программа воспринимает симметрию пространственных групп для «наращивания» структурного фрагмента, который может быть представлен разнообразными граничными условиями: 1) элементарная ячейка; 2) задание фрагмента в виде индексов Миллера граничных плоскостей; 3) срезы (слои роста); 4) сфера определенного радиуса; 5) непериодические молекулы и т. д. ATOMS поддерживает большое число кристаллографических стандартов файлов записи структурной информации, например, cif-формат. Помимо этого есть возможность записи изображений в stl-файлы для 3D-печати и экспорта структур в векторный формат, что позволяет получать большие изображения фотографического качества.

2.4 Программа VESTA

Программа для визуализации кристаллических структур VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis) [Mottma and Izumi, 2011] является мощным инструментом для геометрического анализа химических соединений, представлена в свободном доступе для некоммерческих пользователей. VESTA адаптирована для работы в нескольких операционных системах: Windows, Mac-OS и Linux (<http://jp-minerals.org>).

Глава 3. Результаты работы

3.1 Моделирование мантийных фаз

Для визуализации кристаллической структуры в программе необходимо составить структурную модель. Используя показатели температуры и давления, в соответствии с глубиной, были созданы файлы формата `inp` для каждой минеральной фазы мантии. При помощи консольного файлового менеджера `Far` и программы `GULP`, было осуществлено моделирование основных мантийных лунных фаз при термодинамической обстановке, соответствующей лунной мантии (табл. 3.1).

Таблица 1.

	0 км	250 км 1,25 ГПа	400 км 2 ГПа	750 км 3,2 ГПа	1000 км ~4 ГПа
Ильменит	a:5,117589 b:5,117589 c:14,233430 V:322,827882	a:5,106376 b:5,106376 c:14,181944 V:320,252131	a:5,099838 b:5,099838 c:14,152273 V:318,764239	a:5,089674 b:5,089674 c:14,106417 V:316,466163	a:5,083090 b:5,083090 c:14,076867 V:314,986680
Энстатит	a:18,517757 b:8,846689 c:5,256732 V:861,162258	a:18,468042 b:8,777213 c:5,226121 V:847,143447	a:18,440959 b:8,742099 c:5,211459 V:840,153393	a:18,399844 b:8,693542 c:5,192006 V:830,512370	a:18,373515 b:8,664859 c:5,180873 V:824,815187
Форстерит	a:4,843552 b:10,186481 c:6,001389 V:296,101046	a:4,833067 b:10,138835 c:5,981758 V:293,116151	a:4,827069 b:10,111766 c:5,970396 V:291,416135	a:4,817879 b:10,070524 c:5,952817 V:288,822125	a:4,812008 b:10,044305 c:5,941482 V:287,171310
Гранат	a:11,548778 b:11,548778 c:11,548778 V:1540,309772	a:11,520567 b:11,520567 c:11,520567 V:1529,049628	a:11,504140 b:11,504140 c:11,504140 V:1522,518240	a:11,478583 b:11,478583 c:11,478583 V:1512,393470	a:11,462013 b:11,462013 c:11,462013 V:1505,853307
Клиноэнстатит	a:9,788379 b:8,832602 c:5,244982 V:429,095148	a:9,739671 b:8,762928 c:5,214826 V:422,106780	a:9,716869 b:8,729014 c:5,201170 V:418,738272	a:9,685946 b:8,681931 c:5,182867 V:414,066505	a:9,667802 b:8,653986 c:5,172232 V:411,285909
Шпинель	a:8,069959 b:8,069959 c:8,069959 V:525,549945	a:8,054202 b:8,054202 c:8,054202 V:522,477525	a:8,044961 b:8,044961 c:8,044961 V:520,681050	a:8,030493 b:8,030493 c:8,030493 V:517,877015	a:8,021055 b:8,021055 c:8,021055 V:516,053262

Файлы информации для расчета приведены в приложении 1

3.2 Изменения кристаллоструктурных характеристик

Помимо расчетов, GULP создал cif-файлы для каждой минеральной фазы на разных глубинах. Полученные cif-файлы пропускаются через визуализатор, который моделирует трехмерные изображения кристаллических структур.

С использованием набора межатомных потенциалов определены изменения кристаллоструктурных характеристик следующих основных фаз мантии Луны.

3.2.1 Ильменит

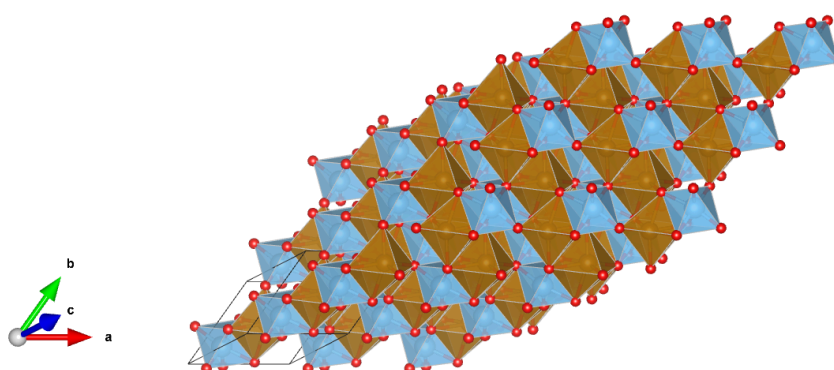


Рисунок 2.

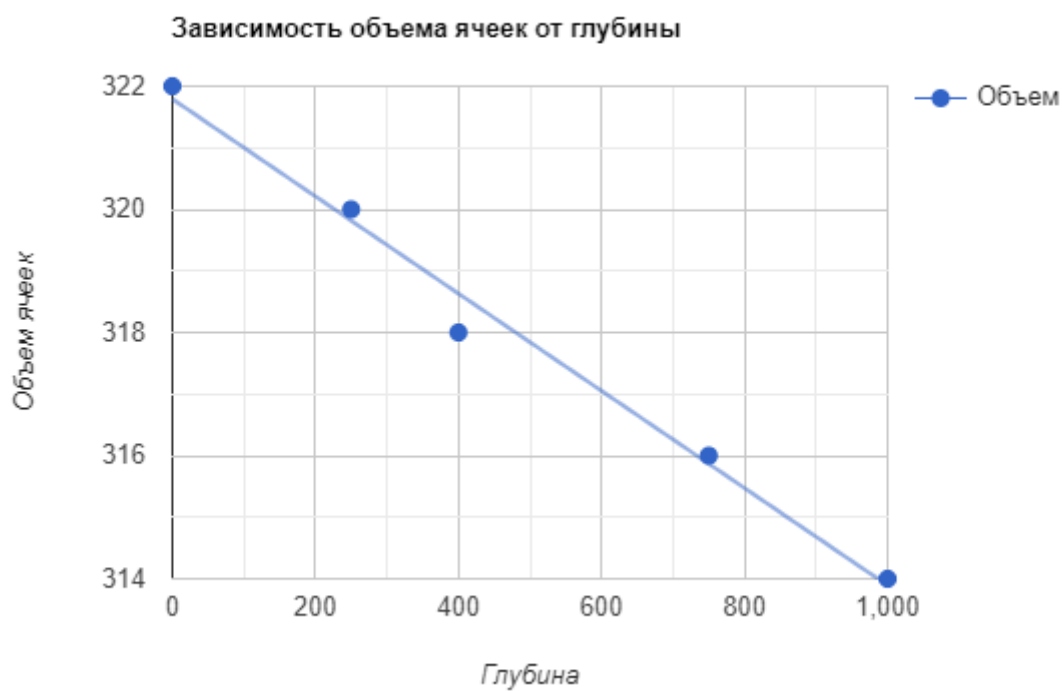


Рисунок 3.

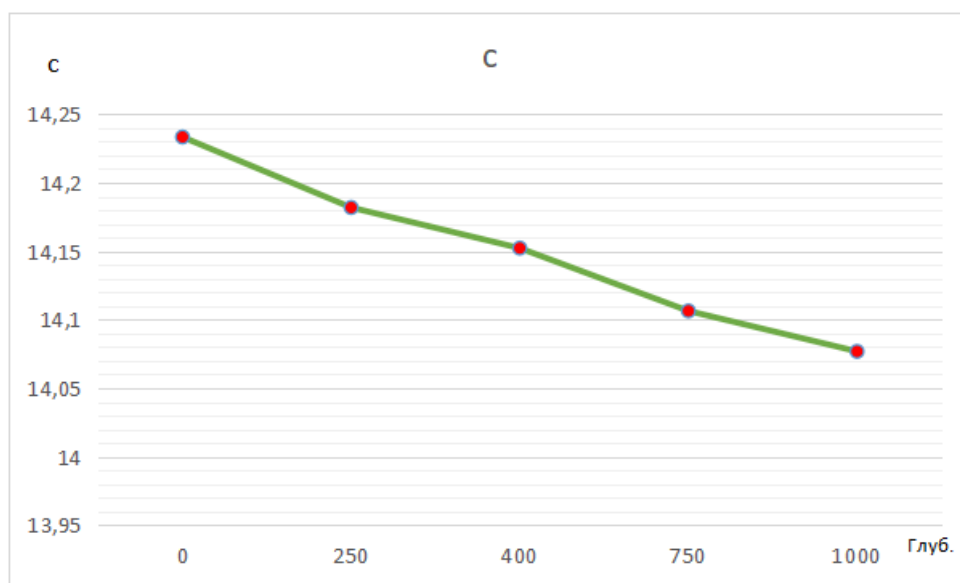
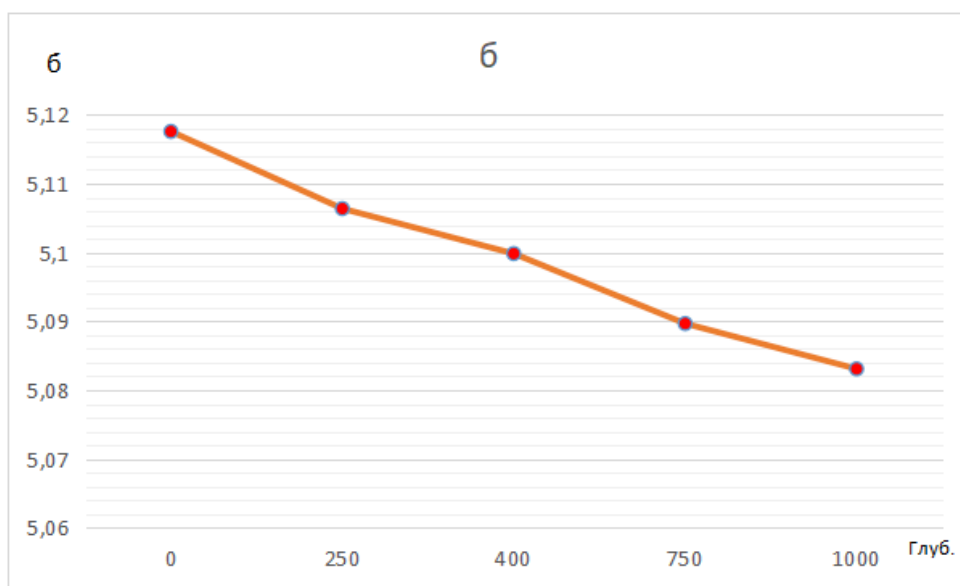
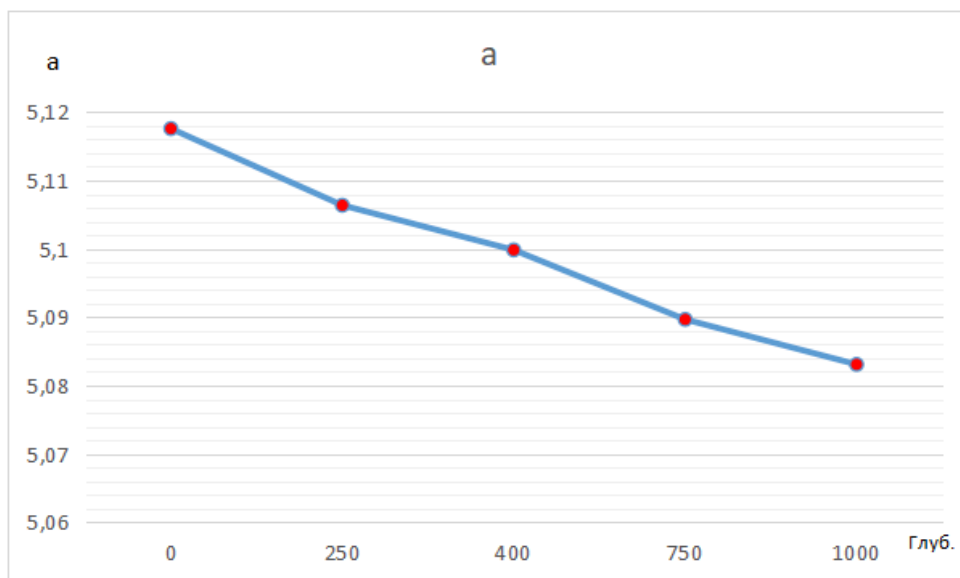


Рисунок 4.

3.2.2 Энстатит

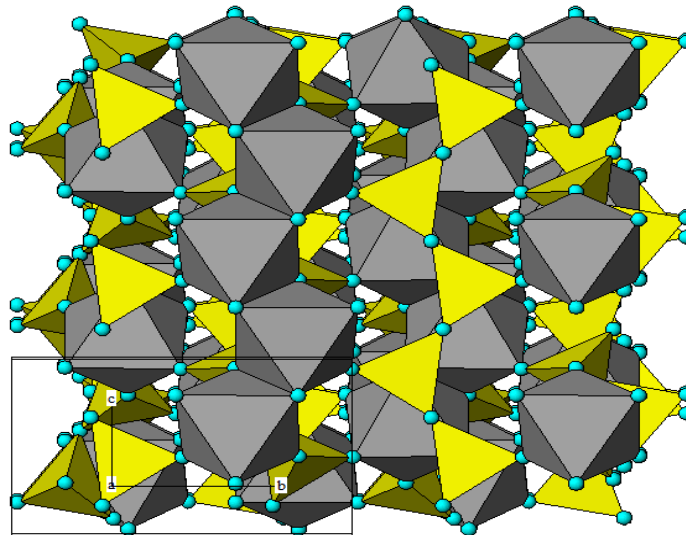


Рисунок 5.

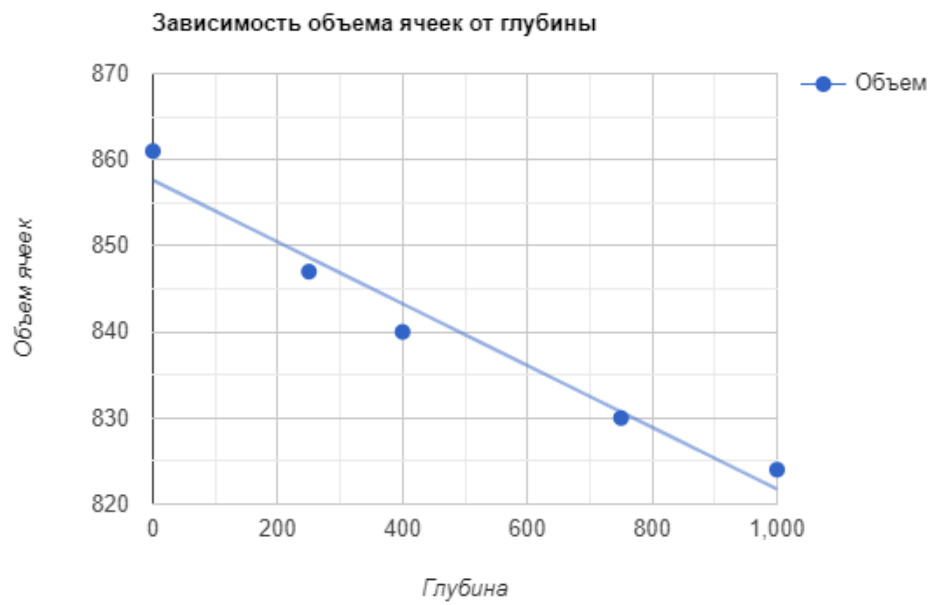


Рисунок 6.

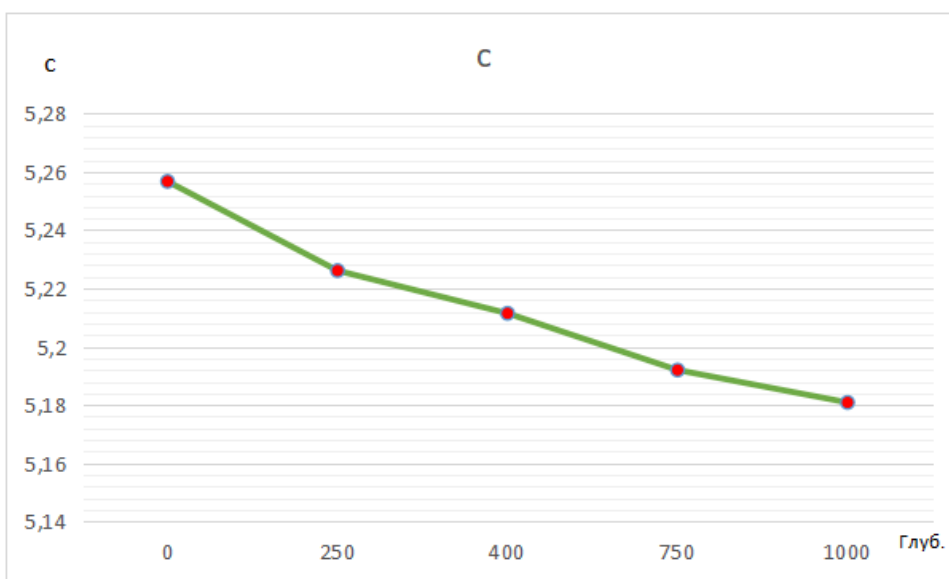
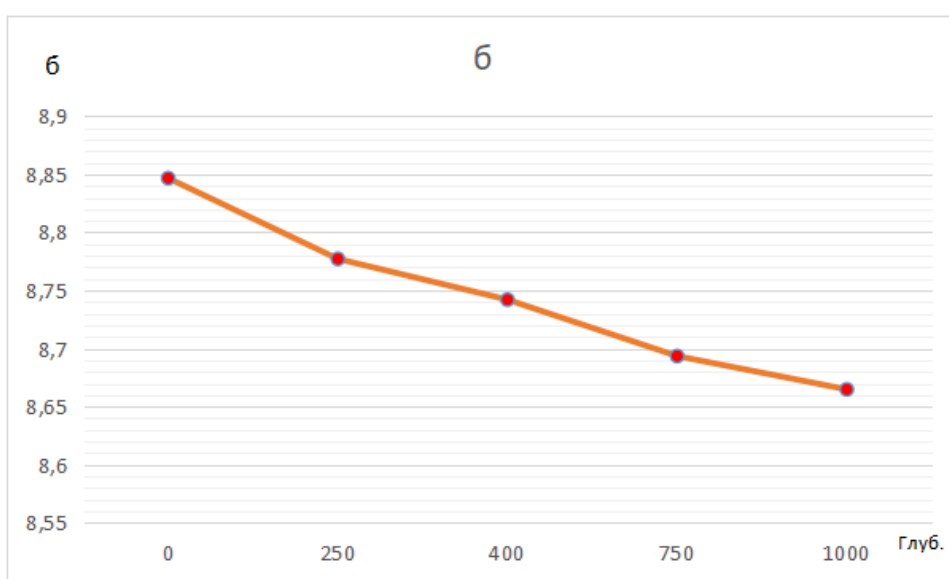
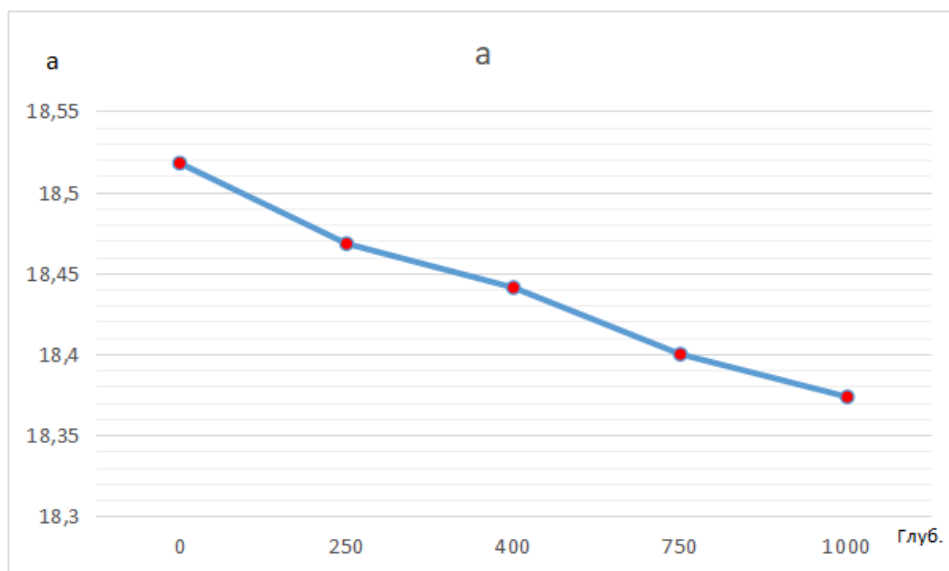


Рисунок 7.

3.2.3 Форстерит

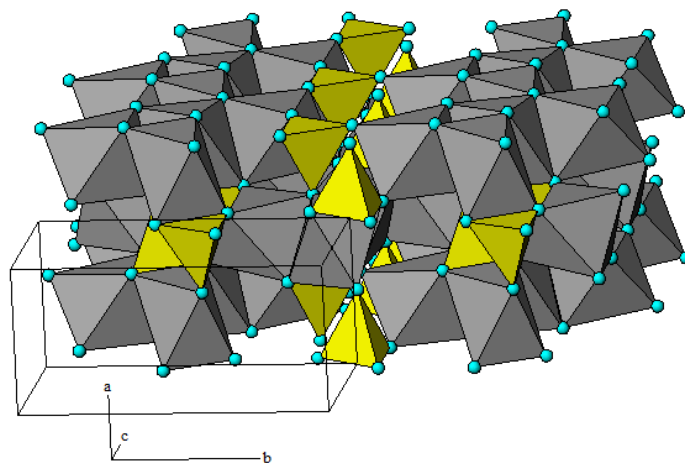


Рисунок 8.

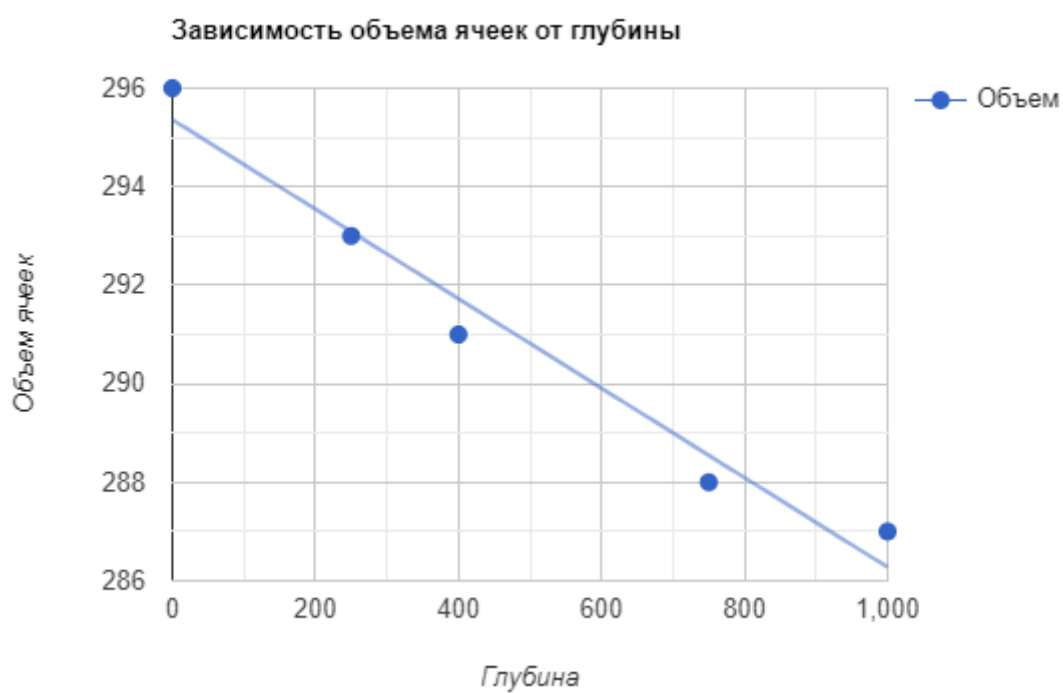


Рисунок 9.

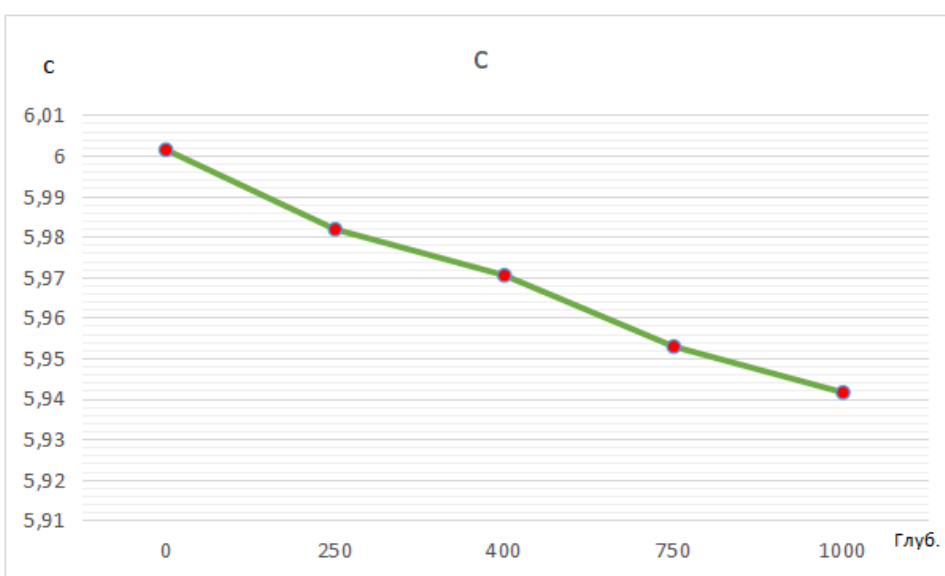
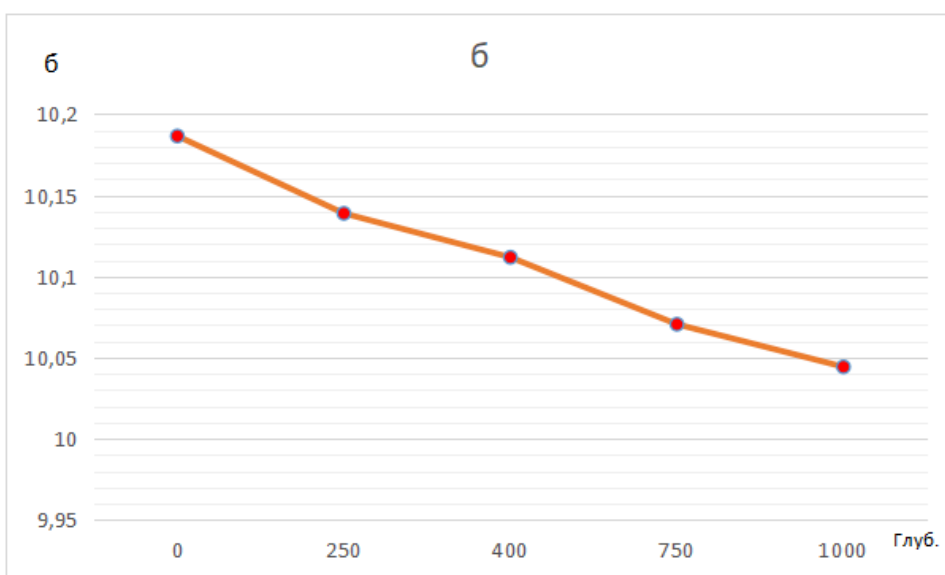
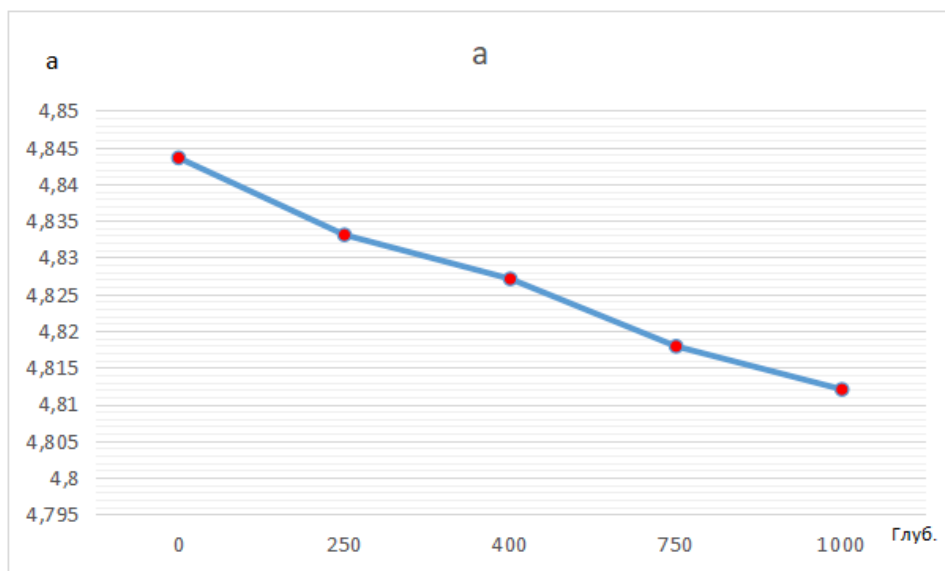


Рисунок 10.

3.2.4 Гранат

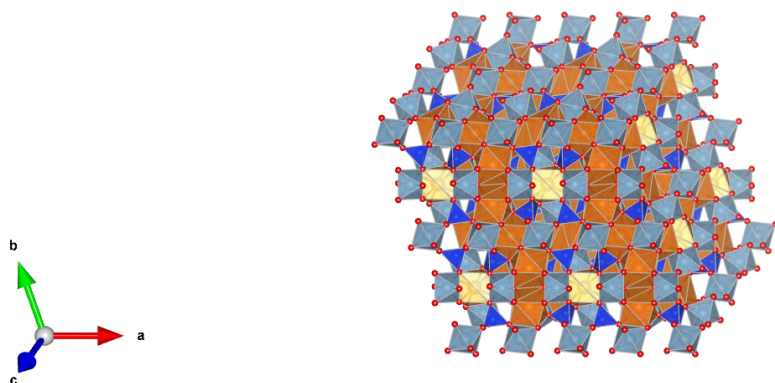


Рисунок 11.

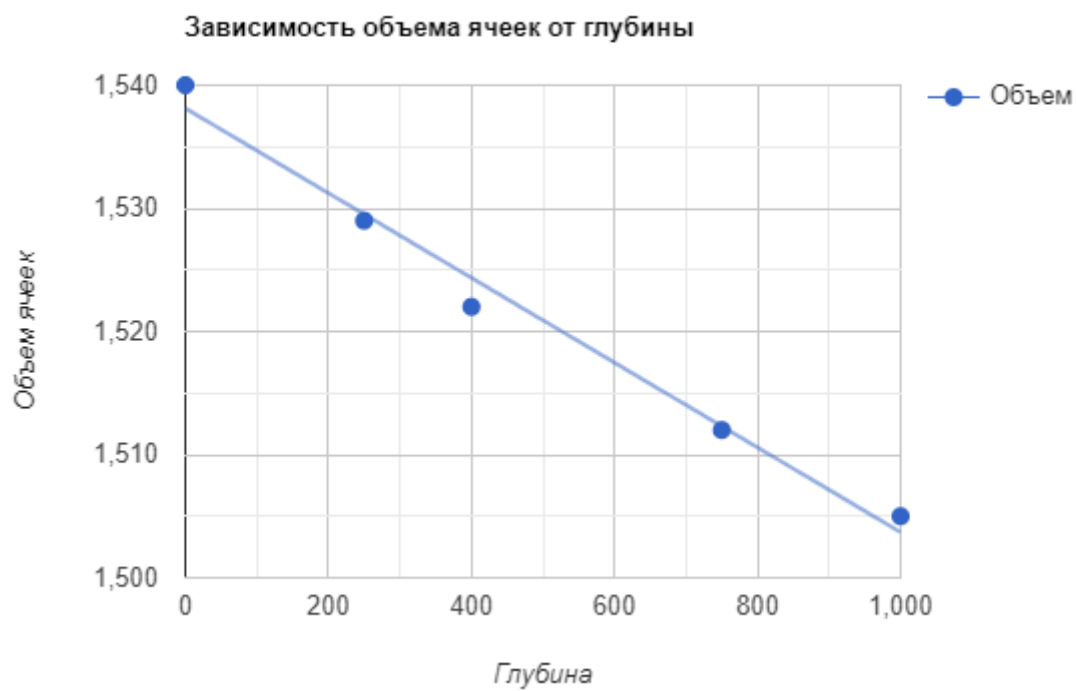


Рисунок 12.

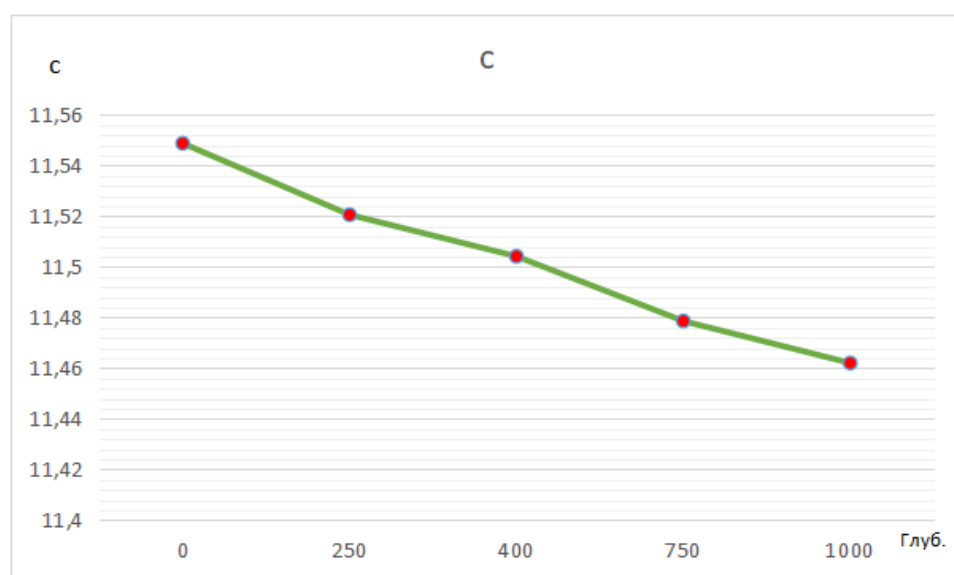
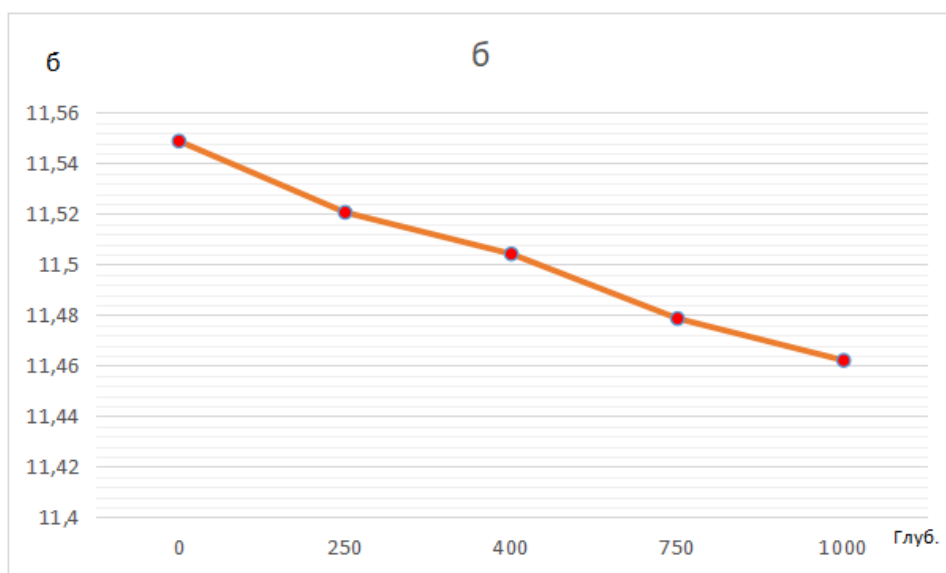
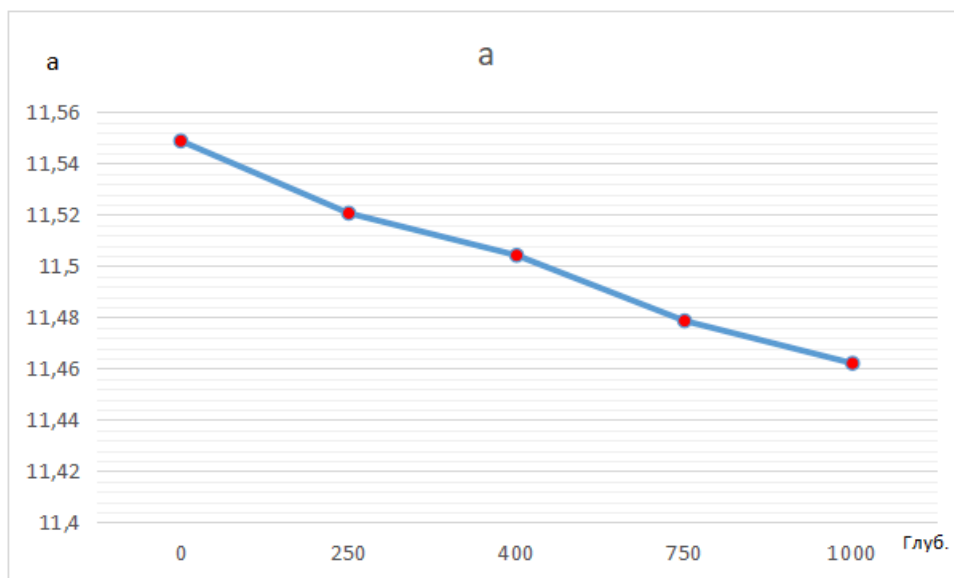


Рисунок 13.

3.2.5 Клиноэнстатит

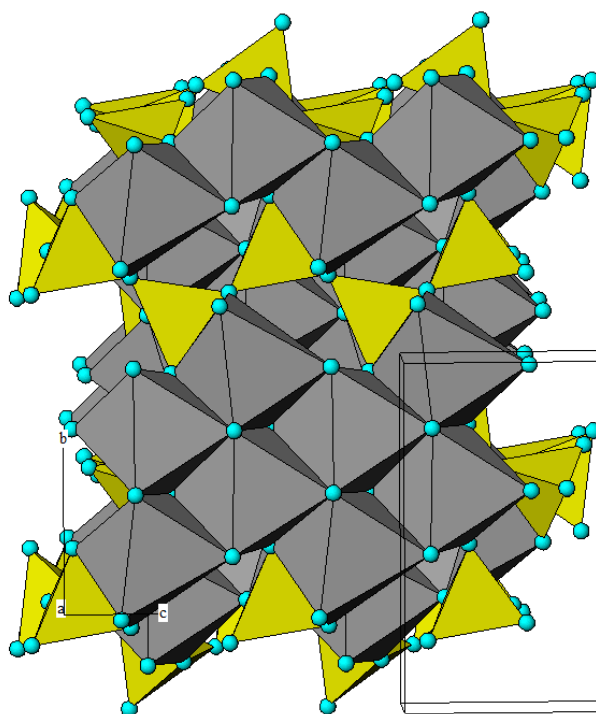


Рисунок 14.

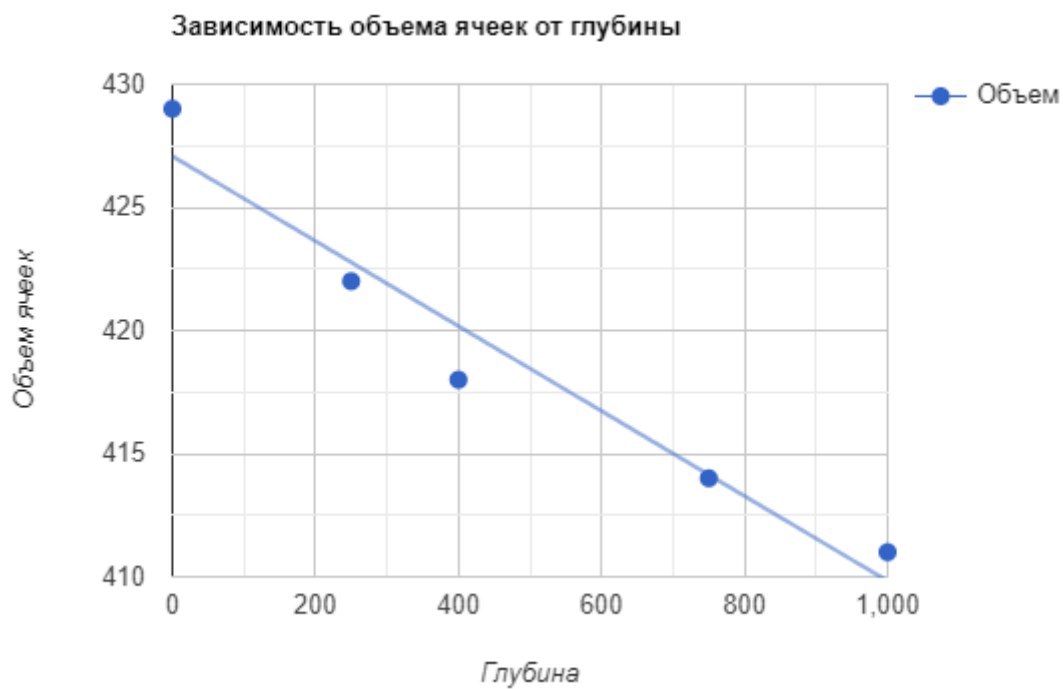


Рисунок 15.

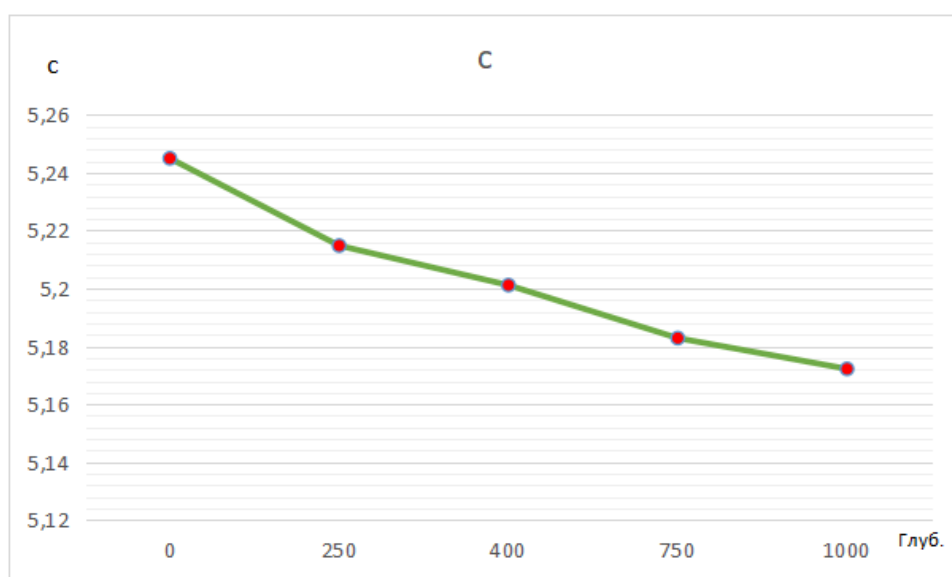
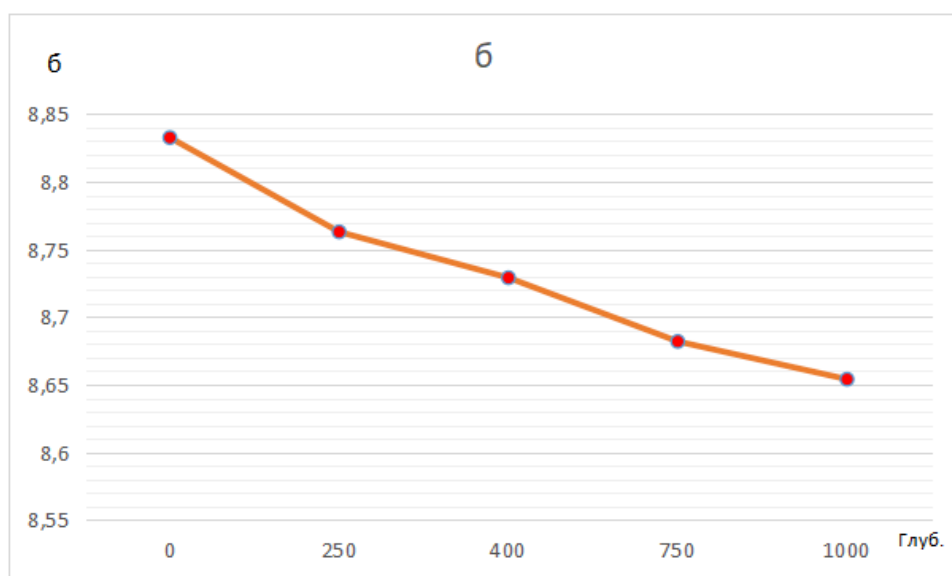
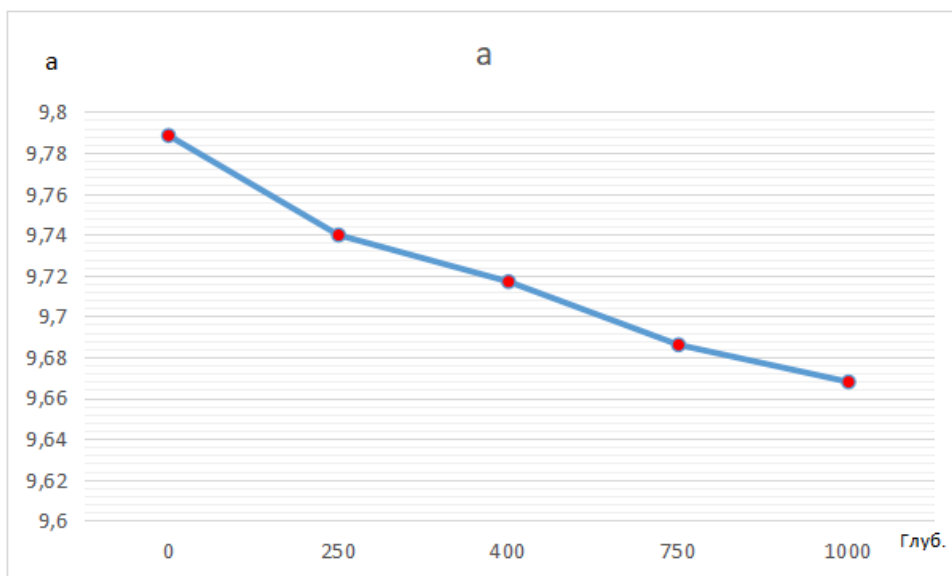


Рисунок 15.

3.2.6 Шпинель

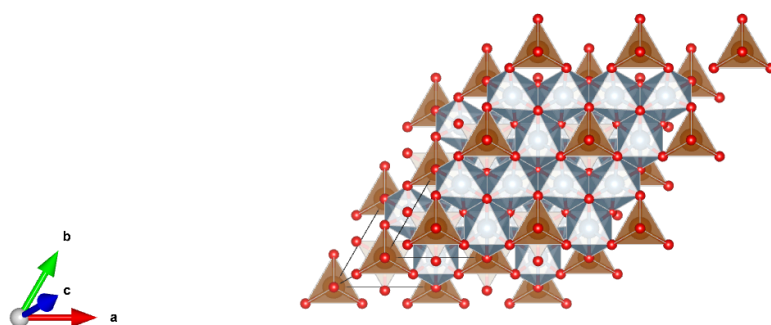


Рисунок 16.

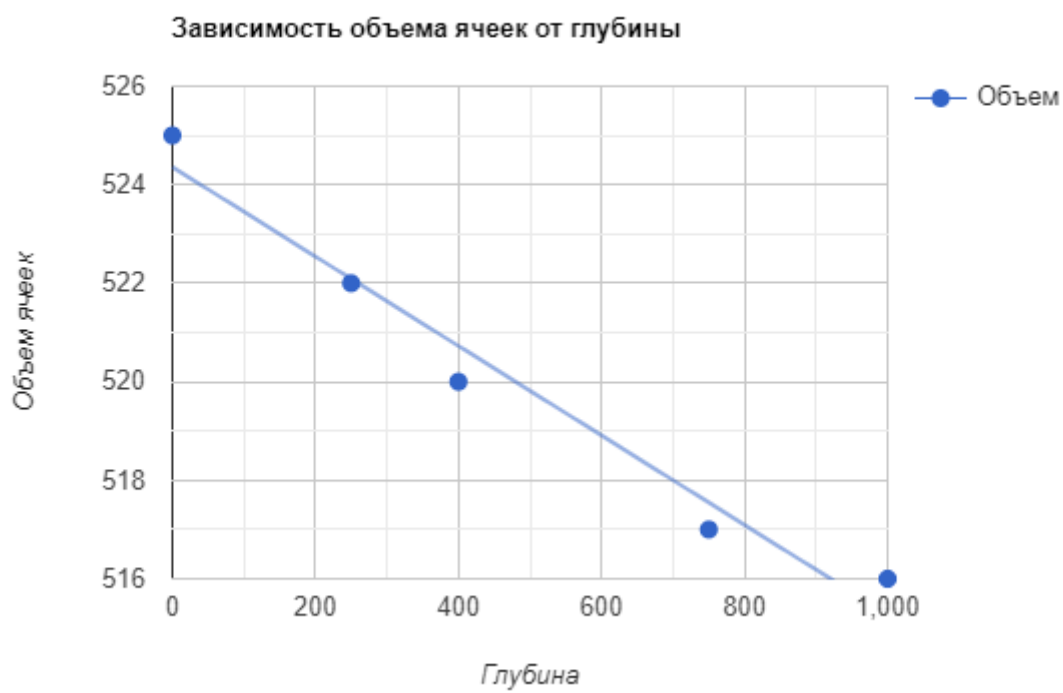


Рисунок 17.

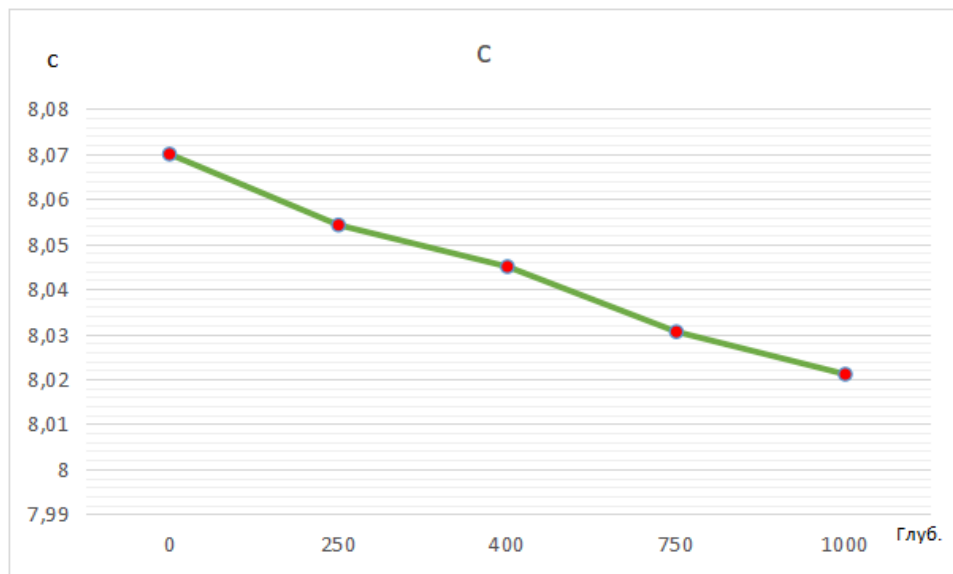
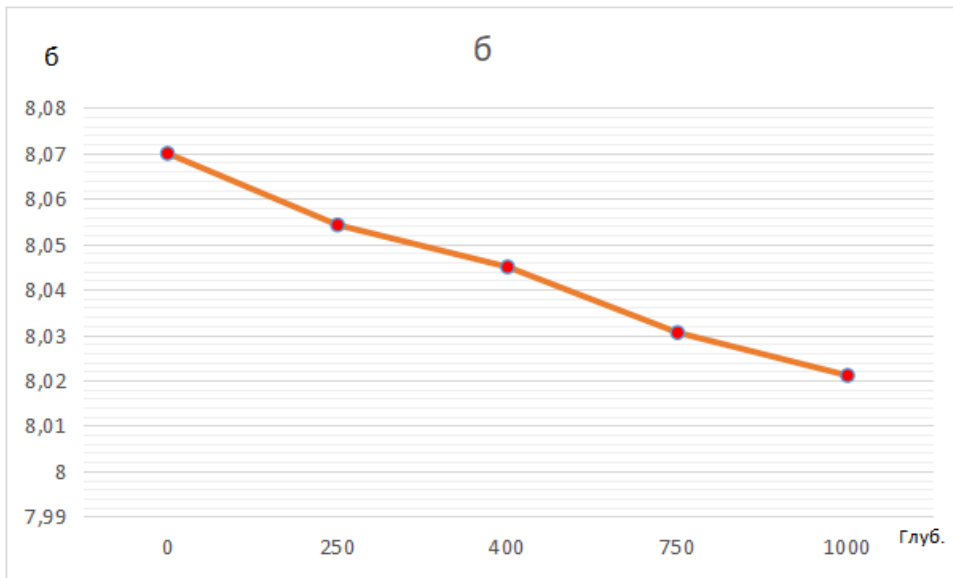
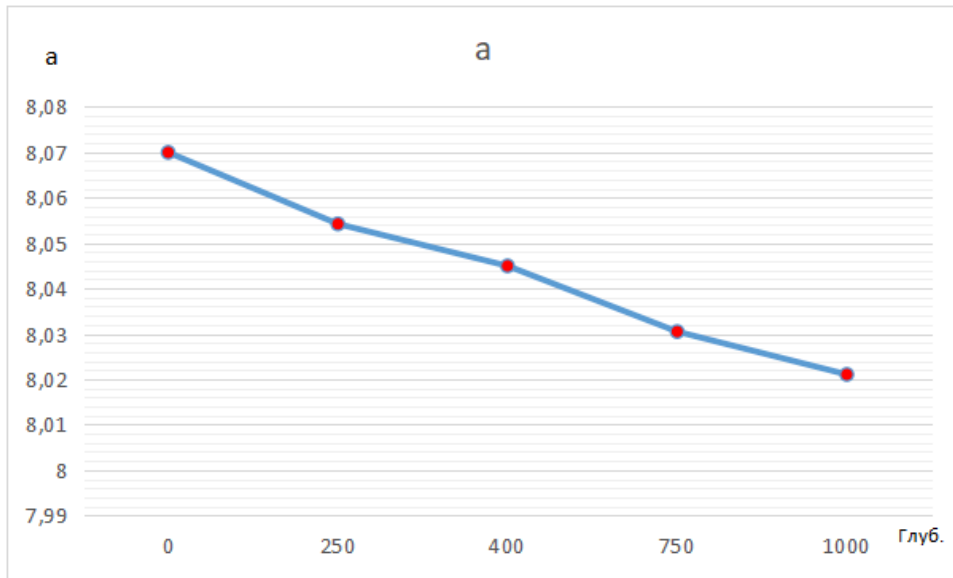


Рисунок 18.

Заключение

Проведено ознакомление с программой структурного моделирования GULP и программами-визуализаторами ATOMS и VESTA.

Осуществлено моделирование основных минеральных фаз мантии Луны при термодинамической обстановке, соответствующей лунной мантии.

С использованием набора межатомных потенциалов из работы Кронрод Екатерины Викторовны “Термохимические модели состава и внутреннего строения мантии Луны” были составлены графики и определены изменения кристаллоструктурных характеристик основных фаз мантии Луны.

Согласно графикам зависимости объема ячеек от глубины и соответствующих давлению и температуре, объем ячеек кристаллических структур уменьшается, причем наиболее резкое уменьшение объема ячеек происходит у энстатита и граната. У остальных уменьшение объема ячеек практически равномерно.

Приложение 1

<i>Потенциалы работы [Pedone et al, 2006]</i>			
Пара атомов	D_M, eV	$s, \text{\AA}^{-2}$	$r_0, \text{\AA}$
Li - O	0.001114	3.429506	2.681360
Na - O	0.023363	1.763867	3.006315
K - O	0.011612	2.062605	3.305308
Be - O	0.239919	2.527420	1.815405
Mg - O	0.038908	2.281000	2.586153
Ca - O	0.030211	2.241334	2.923245
Sr - O	0.019623	1.886000	3.328330
Ba - O	0.065011	1.547596	3.393410
Sc - O	0.000333	3.144445	3.200000
Ti - O	0.024235	2.254703	2.708943
Zr - O	0.206237	2.479675	2.436997
Cr - O	0.399561	1.785079	2.340810

Mn ²⁺ - O	0.029658	1.997543	2.852075
Fe ²⁺ - O	0.078171	1.822638	2.658163
Fe ³⁺ - O	0.418981	1.620376	2.382183
Co - O	0.012958	2.361272	2.756282
Ni - O	0.029356	2.679137	2.500754
Cu ⁺ - O	0.090720	3.802168	2.055405
Ag ⁺ - O	0.088423	3.439162	2.265956
Zn - O	0.001221	3.150679	2.851850
Al - O	0.361581	1.900442	2.164818
Si - O	0.340554	2.006700	2.100000
Ge - O	0.158118	2.294230	2.261313
Sn - O	0.079400	2.156770	2.633076
P - O	0.831326	2.585833	1.800790
Er - O	0.040448	2.294078	2.837722
O - O	0.042395	1.379316	3.618701

Литература

1. Кронрод Екатерина Викторовна // Термохимические модели состава и внутреннего строения мантии Луны // 2019
2. Д.Ю. Пушаровский // Железо и его соединения внутри Земли: новые данные и идеи // 2019, № 9, с. 936-947
3. Урусов В.С., Еремин Н.Н // Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов // 2012 // ГЕОС Москва, ISBN 978-5-89118-581-0? 448 с.
4. Ringwood, A. E. // *Origin of the Earth and Moon* // Springer. New York. 1979
5. Ringwood A.E., Essene E. Petrogenesis of Apollo 11 basalts, internal constitution and origin of the Moon // *Proc. Apollo 11th Lunar Sci. Conf.* 1970. V. 1. P. 769-799.
6. Rasmussen K.L., Warren P.H. Megaregolith thickness, heat flow, and the bulk composition of the Moon // *Nature*. 1985. V. 313. P. 121–124.
7. O'Neill, H.St.C. The origin of the Moon and the early history of the Earth – a chemical model. Part 1: The Moon // *Geochim. et Cosmochim. Acta*. 1991. V. 55. P. 1135–1157.
8. Ringwood A.E. Basaltic magmatism and the bulk composition of the Moon. I. Major and heat-producing elements // *The Moon*. 1977. V. 16. P. 389-423.
9. Nakamura Y. Seismic velocity structure of the lunar mantle // *J. Geophys. Res.* 1983. V. 88. P. 677-686.
10. Morgan J.W., Hertogen J., Anders E. The Moon: composition determined by nebula processes // *Moon and Planets*. 1978. V. 18. P. 465-478.
11. Lognonné P., Gagnepain-Beyneix J., Chenet H. A new seismic model of the Moon: implications for structure, thermal evolution and formation of the Moon // *Earth Planet. Sci. Lett.* 2003. V. 211. P. 27-44.
12. Lognonné P. Planetary seismology // *Annu. Rev. Earth Planet.* 2005. V. 33. P. 571–604.
13. Kuskov O.L. Constitution of the Moon: 4. Composition of the mantle from seismic data // *Phys. Earth Planet. Inter.* 1997. V. 102. P. 239-257.
14. Kronrod V.A., Kuskov O.L. Temperature in the Moon's mantle from seismic data // *Izv. Phys. Solid Earth*. 1999. V. 35. P. 363-371.
15. Khan A., MacLennan, J. Taylor S.R., Connolly J.A.D. Are the Earth and the Moon compositionally alike? Inferences on lunar composition and implications for lunar origin and evolution from geophysical modeling // *J. Geophys. Res.* 2006a. V. 111, E05005. <http://dx.doi.org/10.1029/2005JE002608>.
16. Jones J.H., Delano J.W. A three component model for the bulk composition of the Moon // *Geochim. Cosmochim.* 1989. V. 53. P. 513-527.
17. Hood L.L., Jones J.H. Geophysical constraints on lunar bulk composition and structure: A reassessment // *J. Geophys. Res.* 1987. V. 92E. P. 396 -410.
18. Wiczorek M.A., Jolliff B.J., Khan A., Pritchard M.E., Weiss B.J., Williams J.G., Hood L.L., Righter K., Neal C.R., Shearer C.K., McCallum I.S., Tompkins S., Hawke B.R., Peterson C., Gillis J.J., Bussey B. The constitution and structure of the lunar interior // *Rev. Mineral. Geochem.* 2006. V. 60. P. 221–364.
19. Wänke H., Dreibus G. Geochemical evidence for the formation of the Moon by impact-induced fission of the proto-earth // *Origin of the Moon* / Eds. Hartmann W.K. et al. Houston: LPI. 1986.
20. Warren P.H. 'New' lunar meteorites: implications for composition of the global lunar surface, lunar crust, and the bulk Moon // *Meteorit. Planet. Sci.* 2005. V. 40. P. 477–506. doi:10.1111/j.1945-5100.2005.tb00395.x.
21. Taylor S.R. *Planetary Science: A Lunar Perspective* // Houston. TX. LPI. 1982. P. 481.
22. Taylor S.R., Taylor G.J., Taylor L.A. The Moon: A Taylor perspective // *Geochim. Cosmochim. Acta*. 2006. V. 70. P. 594-5918.
23. Snyder G.A., Taylor L.A., Neal C.R. A chemical model for generating the source of mare basalts: Combined equilibrium and fractional crystallization of the lunar magmasphere // *Geochim. Cosmochim. Acta*. 1992. V. 56. P. 3809-3823.

24. Khan A., Pommier A., Neumann G., Mosegaard K. The lunar moho and the internal structure of the Moon: A geophysical perspective // *Tectonophys.* 2013. V. 609. P. 331-352.
25. Khan A., Pommier A., Neumann G., Mosegaard K. The lunar moho and the internal structure of the Moon: A geophysical perspective // *Tectonophys.* 2013. V. 609. P. 331-352.
26. Kuskov O.L., Kronrod V.A., Kronrod E.V. Thermo-chemical constraints on the interior structure and composition of the lunar mantle // *Phys. Earth Planet. Inter.* 2014a. V. 235. P. 84-95. doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.pepi.2014.07.011>.
27. Кусков О.Л., Кронрод В.А. Геохимические ограничения на модели состава и теплового режима Луны по сейсмическим данным // *Физика Земли.* 2009. №9. С. 25–40.
28. Кронрод В.А., Кусков О.Л. Моделирование химического состава и размеров ядра луны инверсией сейсмических и гравитационных данных // *Физика Земли.* 2011. № 8. С. 62–80.
29. Галимов Э.М. О происхождении вещества Луны // *Геохимия.* 2004. № 7. С. 691–706.
30. Van Genechten K.A., Mortier W.J., Geerlings P. (1987) Intrinsic framework electronegativity: A novel concept in solid state chemistry. // *J. Chem. Phys.* V.86, pp. 5063-5071.