

температуре и атмосферном давлении. Камера высокого давления ("чечевица") вполне позволяла проделать необходимые манипуляции. Область достижимых давлений в то время существенно завьшалась, очевидно, в рекламных целях, тем не менее, получение давления порядка 100 тыс атм было реальным. Высокие температуры в камере достигались с помощью короткозамкнутого нагревателя в виде графитовой трубки, через которую пропускается ток в сотни и тысячи ампер. Естественно, существовали проблемы с измерением давления и температуры.

Измельченный кварц загрузили непосредственно в графитовый нагреватель. Давление и температура умеренные, хотим сначала получить коэзит. Держим в режиме около часа, затем сняли давление, температуру и извлекли содержимое. Содержимое оказалось черным, как ночь. Измельчил кусочек, порошок на предметное стекло, каплю глицерина, сверху покровное стеклышко и под микроскоп. Ага, кварц и черные хлопья. Очевидно, графит. Однако есть еще что-то по краям зерен кварца. Дальнейшие исследования показали, что это коэзит. Вывод: надо как-то устранить возможность диффузии углерода в образец, взаимодействие углерода с кварцем может сильно запутать всю картину. Делаем платиновую ампулу. В следующий раз немного повышаем давление и температуру. Практически 100%-ный выход коэзита. Далее ведем эксперимент при предельном давлении и температурах 1800–2000 °С. Получаем опять коэзит, но есть важное отличие. Систематически появляется неизвестная фаза с высоким показателем преломления и высоким двупреломлением. Она либо обрастает коэзит, либо образует пластинчатые и игольчатые зерна. Обозначая эту фазу в журнале как "фазу Х". Фаза Х появляется всегда как примесь, может быть, не хватает времени. Следующий опыт планируем выдержать в режиме 3 часа. В итоге — взрыв. Еще длительный опыт — опять взрыв. Решаю: нужно сделать водяные jackets для охлаждения наружных стальных частей камеры. Итак, первый опыт с jackets. Давление, как прежде, выше последнего перехода в висмуте. Мощность на нагревателе соответствует температуре около 2000 °С. Держу два часа. Все в порядке, камера не лопнула. Наконец, извлекаю платиновую ампулу. Замечаю некоторое отличие. Если раньше достаточно было оторвать крышечку ампулы и содержимое легко высыпалось, причем стенки ампулы были чистыми, то теперь крышечки отделялись вместе с частью содержимого. Материал беру из центра ампулы. Практически чистый коэзит. Замечаю фазу Х, ее несколько больше. В течение недели ставлю второй и третий опыты. То же самое. По-прежнему игнорирую материал, прилипший к крышечкам.

Ставлю опыт при сниженной мощности на нагревателе. Достаем "чечевицу", извлекаем ампулу. Что такое? Крышечку невозможно оторвать. Пробую порвать боковую поверхность ампулы. Безрезультатно. Наконец, перекусываю ампулу кусачками, извлекаю какое-то количество вещества и под микроскоп. Нет ни кварца, ни коэзита. Неизвестный волокнистый материал с высоким показателем преломления. Да, это фаза Х, ее трудно узнать, когда ее так много. Иногда встречаются отдельные игольчатые образования и даже хорошо образованные удлиненные кристаллы. Часть кристаллов в скрещенных никелях выглядит зелеными. Двупреломление высокое. Я начинаю смутно догадываться, что же

произошло: мы поставили охлаждающие jackets с проточной водой, теплоотвод существенно увеличился, температура в камере понизилась, и мы попали в область устойчивости новой фазы. А дальше уже было дело аналитической техники. Необходимо было установить, не грязь ли это. Были опасения, что, может быть, графит диффундирует внутрь ампулы, взаимодействует с кремнеземом, возникают какие-то соединения с углеродом и так далее. В итоге после многочисленных проверок, обсуждений и колебаний мы убедились, что получили новую плотную фазу кремнезема. Была написана и послана в печать статья. Я пропускаю массу всяких осложняющих факторов, они неинтересны.

В августе 1961 г. статья была опубликована и тут же вызвала большой резонанс, а затем в декабре 1961 г. я получил письмо от Эдварда Чао, в котором он сообщил об открытии минерала — естественного аналога этой фазы в Аризонском метеоритном кратере. Чао сообщил также, что новый минерал назвали стишовитом.

На этом собственно и закончилась научная история, и началась история совсем другая...

PACS number: 81.30.Hd

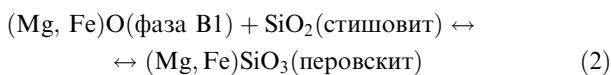
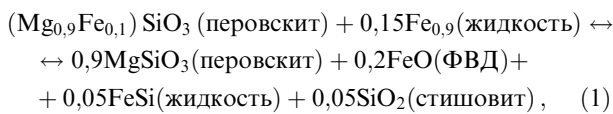
## Стишовит и его значение для геофизики. Новые результаты ударно-волновых экспериментов и численного моделирования

Ш.-Н. Луо, Дж.Л. Мосенфелдер, П.Д. Асимов,  
Т.Дж. Арэнс

### 1. Введение

В многопуансонной установке высокого давления синтезированы образцы чистых стишовита и коэзита с плотностями соответственно  $4,31 \pm 0,04$  и  $2,92 \pm 0,03$  г см<sup>-3</sup> и с размерами, удовлетворяющими условиям ударно-волновых экспериментов в плоской постановке. При динамическом нагружении до 235 ГПа получена главная ударная адиабата Гюгоньо (АГ), приведенная к плотности стишовита при нормальных условиях (НУ); по этим данным построено линейное соотношение между волновой скоростью  $U_s$  и массовой скоростью  $u_p$ :  $U_s = C_0 + su_p$ , где  $C_0 = 9,08$  км с<sup>-1</sup> и  $s = 1,23$ . Полученные нами новые данные по ударному сжатию коэзита до 140 ГПа согласуются с предшествующими исследованиями и расширяют изученный диапазон давлений для коэзита. На основе этих данных, а также результатов более ранних исследований других фаз кремнезема построены АГ для основных полиморфных модификаций SiO<sub>2</sub> (кварц, плавленый кварц, коэзит и стишовит). Параметр Грюнайзена для сжатого стишовита, полученный из разностей внутренних энергий и давлений между различными главными адиабатами полиморфных модификаций кремнезема, равен  $\gamma = 1,35(V/V_0)^q$ , где  $q = 2,6 \pm 0,2$ . Ранее из измерений температуры при ударном сжатии были получены данные о плавлении стишовита при 70 и 113 ГПа. Они согласуются с новыми результатами моделирования кривой плавления стишовита при высоких давлениях, выполненного нами методом молекулярной динамики.

Кремнезем интересен не только как основной компонент недр Земли и других планет земной группы, но также и как удобная модельная система для изучения фундаментальных физических свойств вещества, например, полиморфных фазовых превращений и потенциалов межатоминого взаимодействия [1]. Изучение термодинамики системы  $\text{MgO}-\text{SiO}_2$  чрезвычайно важно для понимания сейсмической структуры Земли и процессов переноса в ней, скажем, тепла и массы. В принципе, свободный кремнезем может существовать внутри Земли в виде стишовита (или постстишовитных фаз), начиная с глубины 300 км (верхняя мантия, 10 ГПа) до 2891 км (граница мантия–ядро, 136 ГПа). Фазы типа стишовита, по-видимому, играют ключевую роль в химических реакциях, происходящих в самых нижних слоях мантии [1–3]:



(ФВД — фаза высокого давления). Эти реакции, ответственные за переход железа из мантии в металлическое ядро и за поглощение кремнезема Mg-перовскитами, по всей вероятности, происходили в процессе аккреции в ранний период истории Земли [3]. В этом случае свободный кремнезем должен редко встречаться в нижней мантии. Синтез стишовита — это открытие первого силиката с октаэдрическим окружением иона кремния  $\text{Si}^{4+}$  ионами  $\text{O}^{2-}$ . Он является типичным представителем других силикатных фаз нижней мантии, и изучение упругих, термодинамических и кинетических свойств, которые стишовит проявляет в присутствии других веществ, актуально для сейсмических и геодинамических исследований Земли. Изучение структуры стишовита и постстишовитных фаз важно также для понимания естественных ударных процессов на планетах: исследование метеоритов и скальных пород, подвергавшихся соударению и имеющих в своем составе  $\text{SiO}_2$ , позволяет более правильно интерпретировать ударные процессы [4, 5].

Уже давно проводятся широкие и детальные исследования кремнезема с помощью различных методов [1]. Так, Мак-Квин и др. [6], пересмотрев результаты первых исследований Вакерле [7] по ударно-волновому сжатию кварца и плавленого кварца, показали, что в области давлений свыше 30 ГПа и кристаллический, и плавленый кварц ведут себя так, как будто произошел переход в фазу со структурой рутила, в то время только недавно открытую. Они предсказали для параметров АГ стишовита значения  $C_0 = 10,0 \text{ км с}^{-1}$  и  $s = 1,0$ . В дальнейших исследованиях, например, Фаулза [8], Аренса и Розенберга [9], а также в работах российских авторов (полное представление о них дает монография Трунина [10] и ссылки в ней) был продемонстрирован переход кварца, пористого кварца, плавленого кремнезема, кристобалита и коэсита в фазу стишовита, как и предполагалось в работе Мак-Квина и др. [6]. Подурец и др. [11], основываясь на результатах своих ударно-волновых экспериментов, предложили следующие параметры АГ стишовита:  $C_0 = 7,6 \text{ км с}^{-1}$  и  $s = 1,41$ . Ферниш и Ито [12] синтезировали поликристаллический стишовит для про-

ведения измерений при ударном сжатии. К сожалению, полученные ими образцы оказались неоднородными. Они отличались как по пористости, так и по содержанию стишовита, вследствие чего исходная плотность варьировалась от 3,8 до  $4,07 \text{ г см}^{-3}$ . Это привело к значительному разбросу результатов в указанных экспериментах. Хотя при ударном сжатии, несомненно, образовывался сжатый стишовит, разброс данных был слишком велик, что не позволило получить независимую информацию об уравнении состояния этой фазы. Как отметил Трунин [10], прямое измерение АГ стишовита представляет собой задачу исключительной важности.

Благодаря прогрессу в статических методах синтеза при высоких давлениях, в диагностике ударных волн, а также в компьютерном моделировании, стали возможными дальнейшие исследования высокоплотных фаз кремнезема [13, 14]. Были синтезированы чистые образцы стишовита с нужными размерами, что позволило устранить краевые эффекты и обеспечило высокую точность измерений при проведении ударно-волновых экспериментов в плоской постановке. В результате нам удалось реализовать прямое ударно-волновое сжатие стишовита [13] и исследовать уравнение состояния и переход в постстишовитную фазу вдоль АГ [10]. Ранее из экспериментов по плавлению, индуцированному ударным сжатием [15], были получены значения температуры плавления стишовита при 70 и 113 ГПа. Компьютерное моделирование плавления стишовита, выполненное нами методом молекулярной динамики [14], дополняет ударно-волновые эксперименты. В настоящем докладе кратко описаны проведенные нами эксперименты на высокоплотных фазах кремнезема и теоретические исследования фазовой диаграммы стишовита.

## 2. Статический синтез

### и динамическое сжатие коэсита и стишовита

В настоящей работе динамическое нагружение создавалось плоской ударной волной, генерируемой с помощью легкогазовой пушки. При этом, чтобы избежать краевых эффектов, отношение диаметра образца к его толщине должно быть больше 3. Точность измерения скорости фронта ударной волны (волновой скорости) определялась характеристиками стрик-камеры, которая позволяла измерять времена распространения порядка 80–100 нс в образце стишовита или коэсита толщиной 1 мм с погрешностью  $\pm 1 \text{ нс}$ . По этой причине синтез стишовита в многопуансонной установке высокого давления является сложной задачей, так как необходимо иметь образцы диаметром как минимум 3 мм и высотой 1 мм. Ранее в лабораторных многопуансонных камерах при давлениях порядка 10 ГПа обычно получали образцы диаметром  $\sim 1,5 \text{ мм}$  [16]. Поэтому мы применили новую методику и, благодаря точному определению параметров среды, передающей давление, смогли радикально упростить сборку и максимально увеличить допустимые размеры образца [13]. Успех эксперимента по синтезу определяется тем, удалось ли получить фазу высокого давления, а строгий контроль давления ( $P$ ) и температуры ( $T$ ) не имеет решающего значения. По этой причине мы отказались от элементов сборки, которые обычно применяются в современных экспериментах с многопуансонными камерами [16], — изолятора из  $\text{ZrO}_2$ , нагревателя из  $\text{LaCrO}_3$ , прокладки из  $\text{MgO}$  и платиновой ампулы, и использовали только рениевую

фольгу — и как нагревательный элемент, и как контейнер для образца. Для синтеза образцов стишовита использовались твердосплавные наковальни с рабочей поверхностью  $8 \times 8$  мм с пиррофиллитовыми прокладками между ними и внутренняя 14-миллиметровая октаэдрическая ячейка из спеченного MgO. Температура контролировалась с помощью вольфрам-рениевой термопары, а давление определялось по нагрузочной калибровочной кривой. Исходным материалом служило чистое кварцевое стекло в форме цилиндра. Образцы стишовита плотностью  $4,31 \pm 0,04$  г см<sup>-3</sup>, диаметром  $\sim 4$  мм и толщиной  $\sim 2,5$  мм были синтезированы при 14 ГПа и 1000 °С. Плотность измерялась методом гидростатического взвешивания, при этом в качестве иммерсионной жидкости использовался толуол; калибровка проводилась на образце кварца. Исследование структуры полученных образцов с помощью оптического микроскопа и рентгеновского анализа показало, что они представляют собой чистый стишовит с нулевой пористостью [13].

Образцы коэсита были синтезированы в многопуансонной установке с кубической внутренней ячейкой при давлении  $\sim 4$  ГПа и температуре около 900 °С. Средой, передающей давление, служил кубик из пиррофиллита с ребром 21 мм со вставкой из карбоната бария, внутри которой находился графитовый нагреватель. Использовались наковальни с рабочей поверхностью  $16 \times 16$  мм. Исходным материалом служило кварцевое стекло. Плотность полученного в результате синтеза материала оказалась равной  $2,92 \pm 0,03$  г см<sup>-3</sup>, на его рентгенограммах наблюдались только пики коэсита. Диаметр образцов равнялся  $\sim 5,3$  мм, длина —  $\sim 5$  мм.

Для проведения экспериментов по ударному сжатию синтезированные нами образцы коэсита и стишовита разрезались на диски и полировались. В экспериментах использовались образцы стишовита и коэсита с отношением диаметра к толщине соответственно  $\sim 4$  и  $\sim 5$ . По возможности образцы коэсита и стишовита монтировались в одной и той же сборке. В наших экспериментах, которые проводились в Калифорнийском технологическом институте, плоская ударная волна создавалась с помощью двухступенчатой легкогазовой пушки. Для измерения скорости ударной волны использовалась стрик-камера, а для определения скорости ударника применялась импульсная рентгеновская диагностика [13]. Используя ударники из различных материалов и изменяя скорость ударника, мы получали разные конечные состояния образцов сжатого коэсита и стишовита. Методом отражения [17] из непосредственно измеренных скоростей ударника и ударной волны ( $U_s$ ) были определены массовая скорость  $u_p$ , давление  $P$  и удельный объем  $V$  сжатого образца. На рисунке 1 показано соотношение  $U_s - u_p$  для стишовита и коэсита. Наши данные для коэсита согласуются с более ранними результатами Подурца и др. [11]. Линейная аппроксимация данных, полученных в настоящей работе и в [11], дает для коэсита в области стабильности стишовита

$$U_s \text{ (км с}^{-1}\text{)} = 2,52 + 1,70 u_p; \quad \rho_0 = (2,92 \pm 0,03) \text{ г см}^{-3}. \quad (3)$$

Линейная подгонка результатов для стишовита дает

$$U_s \text{ (км с}^{-1}\text{)} = 9,08 + 1,23 u_p; \quad \rho_0 = (4,31 \pm 0,04) \text{ г см}^{-3}. \quad (4)$$

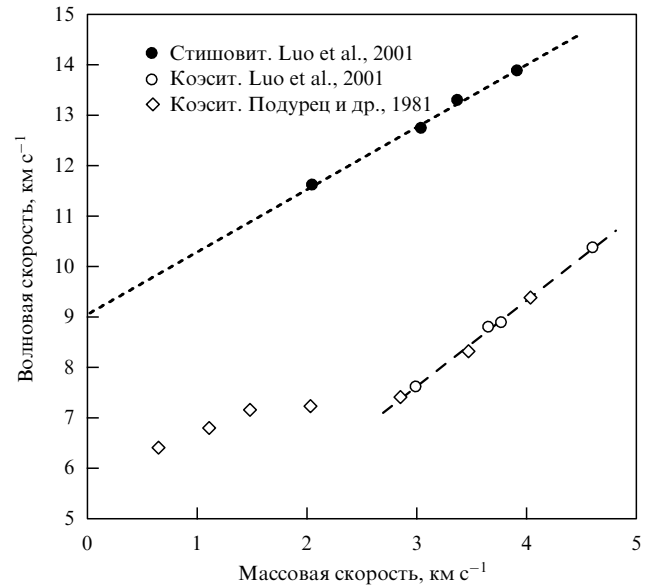


Рис. 1. Соотношение  $U_s - u_p$  для стишовита (пунктир) и коэсита (штриховая линия) [11, 13]. Стишовит:  $U_s$  (км с<sup>-1</sup>) =  $9,08 + 1,23 u_p$ ,  $\rho_0 = (4,31 \pm 0,04)$  г см<sup>-3</sup>. Коэсит в области высоких давлений:  $U_s$  (км с<sup>-1</sup>) =  $2,52 + 1,70 u_p$ ,  $\rho_0 = (2,92 \pm 0,03)$  г см<sup>-3</sup>.

На рисунке 2 приведена соответствующая АГ стишовита в плоскости  $P - V$ , а также экспериментальные результаты, полученные в алмазных наковальнях при низких давлениях. Подгонка данных для стишовита универсальным уравнением состояния Вине [18] дает значения модуля объемного сжатия  $K_0 = 326 \pm 4$  ГПа и его барической производной  $K'_0 = 4,8 \pm 0,2$ , сопоставимые с величинами  $K_0 = 298 \pm 8$  ГПа и  $K'_0 = 3,98 \pm 0,46$ , полученными Хемли и др. [1] при 300 К. Кривая подгонки уравнением Вине практически совпадает с адиабатой, построенной из зависимости  $U_s - u_p$ . Сравнение АГ стишовита с экспериментальной зависимостью (изо-

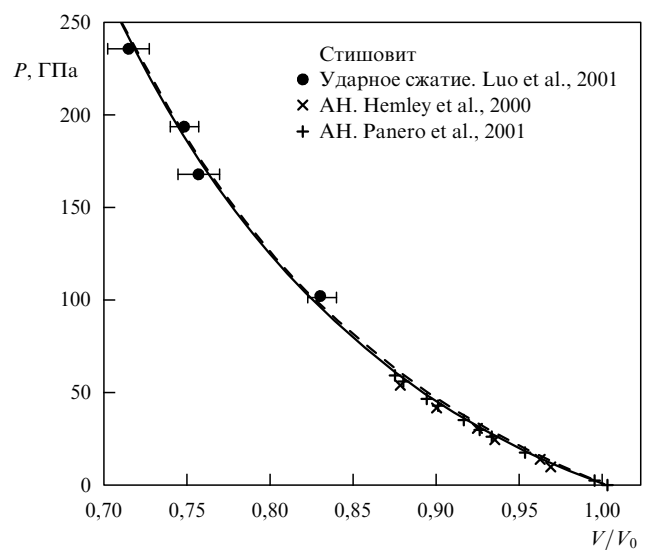


Рис. 2.  $P - V$  адиабата Гюгоньо для стишовита [13]. Сплошная кривая — аппроксимация результатов ударно-волновых экспериментов уравнением Вине; штриховая линия — АГ, построенная из зависимости  $U_s - u_p$ . Приведены также экспериментальные данные, полученные в алмазных наковальнях (АН) [24, 25].  $V_0$  — удельный объем стишовита при нормальных условиях (НУ).

терма при 300 К) при давлениях до 55 ГПа показывает, что АГ проходит чуть выше изотермы при 300 К, но очень близко к ней и, следовательно, АГ представляет собой относительно холодную кривую (приблизительная оценка температуры АГ дает  $\sim 2600$  К при 260 ГПа). Это согласуется с малой сжимаемостью стишовита. Напротив, как показали температурные измерения [15], при ударном сжатии плавленый кварц переходит в жидкое состояние при 4500 К и 70 ГПа, а  $\alpha$ -кварц — при 4750 К и 113 ГПа. На главной АГ стишовита нет четких признаков наличия постстишовитных фаз. Одной из причин может быть то, что этот переход кинетически затруднен, хотя есть также вероятность, что небольшие структурные изменения стишовита в сторону постстишовита невозможно определить из АГ в переменных  $U_s - u_p$  или  $P - V$ . Было высказано предположение, что переход в постстишовит может проявиться на главных АГ кварца и плавленого кварца [19], но он не виден на главной АГ стишовита. Это может быть обусловлено различными температурами вдоль АГ, полученных при ударно-волновом сжатии разных полиморфных модификаций кремнезема.

Затем были получены главные АГ, приведенные к плотностям четырех различных полиморфных модификаций кремнезема. На рисунке 3 показаны главные АГ кварца, коэсита и стишовита. Ударная адиабата для плавленого кварца не приводится, так как в этом случае имеется большой разброс данных. При высоких давлениях, когда все три АГ относятся к фазе стишовита, из разностей внутренних энергий и давлений при фиксированном объеме можно оценить параметр Грюнайзена  $\gamma$  для стишовита методом конечных разностей. Ударные адиабаты для кварца и коэсита в области стабильности стишовита получены путем подгонки под имеющиеся экспериментальные данные. Параметр Грюнайзена для стишовита  $\gamma(V)$  определен из ударных адиабат для пар кварц — стишовит и коэсит — стишовит (рис. 4). Аппроксимация данных зависимостью

$$\gamma = \gamma_0(V/V_0)^q, \quad \text{где } \gamma_0 = 1,35, \quad (5)$$

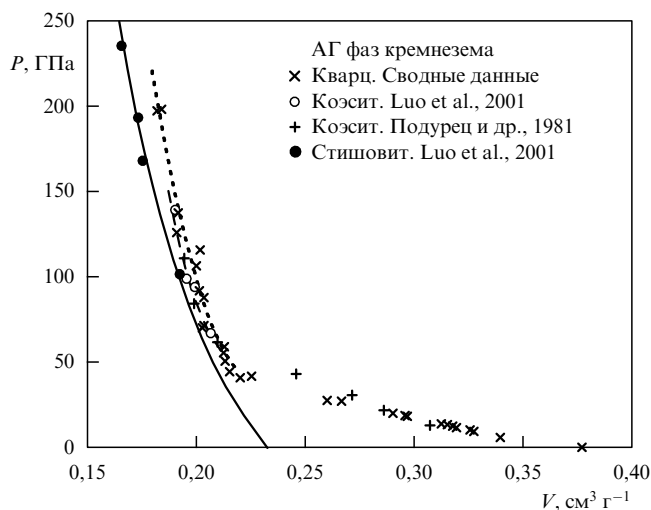


Рис. 3.  $P-V$  адиабаты Гюгоньо для кварца [7, 26, 27] (пунктир), коэсита при высоких давлениях [11, 13] (штриховая линия) и стишовита [13] (сплошная кривая).

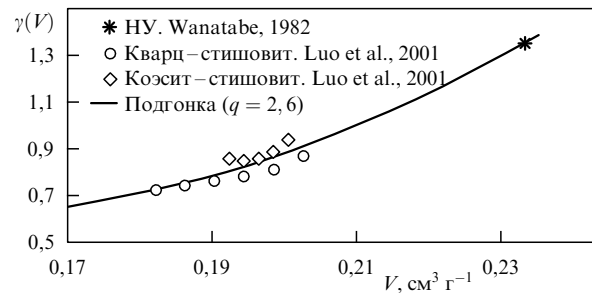


Рис. 4. Параметр Грюнайзена  $\gamma(V)$  для стишовита, полученный из  $P-V$  адиабат Гюгоньо для кварца, коэсита и стишовита с помощью уравнения состояния Ми–Грюнайзена (5) с  $q = 2, 6$  [13, 28].

дает  $q = 2,6 \pm 0,2$ . Параметры Грюнайзена  $\gamma(V)$ , полученные из АГ для пар кварц–стишовит и коэсит–стишовит, слегка отличаются друг от друга. Это может быть связано с температурной зависимостью  $\gamma$ . Определение параметра Грюнайзена для стишовита при высоких давлениях непосредственно из ударно-волновых экспериментов, задает область допустимых значений при вычислении термодинамических величин.

### 3. Кривая плавления стишовита

Плавление стишовита исследовалось с помощью таких методов, как ударное сжатие с измерением температуры [15] и статическое сжатие в алмазных наковальнях [20]. Определение фазовой диаграммы из динамических и статических экспериментов при высоких давлениях до сих пор является сложной задачей. Этот вопрос рассматривался в нескольких теоретических работах [14, 21]. В нашей работе [14] проводилось численное моделирование плавления стишовита методом молекулярной динамики (МД), при этом использовался модифицированный потенциал Морзе (MS-Q potential). Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными по плавлению стишовита, полученными при ударном сжатии и в алмазных наковальнях. Проводилось как однофазное, так и двухфазное МД-моделирование плавления стишовита. На рисунке 5 для иллюстрации приведены результаты однофазного моделирования при 120 ГПа. Здесь температура перехода стишовита из твердого в жидкое состояние, равная 7000 К, — это полученная из однофазного моделирования точка плавления  $T_m$  при 120 ГПа. Зная поведение объема и энтальпии, можно определить наклон  $dT_m/dP$  кривой плавления с помощью уравнения Клаузиуса–Клапейрона. При однофазном моделировании, особенно при высоких давлениях, может возникать перегрев твердой фазы при нагревании или недоохлаждение жидкой фазы при охлаждении, что обусловлено кинетикой перехода [22]; этот недостаток устраняется при двухфазном моделировании [23]. При проведении двухфазного моделирования мы использовали модель системы жидкость — твердое тело, которая строилась как комбинация полученных из однофазного моделирования моделей для жидкости и для твердого состояния при одних и тех же значениях давления и температуры. Результаты моделирования проиллюстрированы на рисунке 6, где приводятся также результаты предшествующих исследований по плавлению стишовита. Видно, что при 20 ГПа результаты для однофазного моделирования ближе к экспериментальным

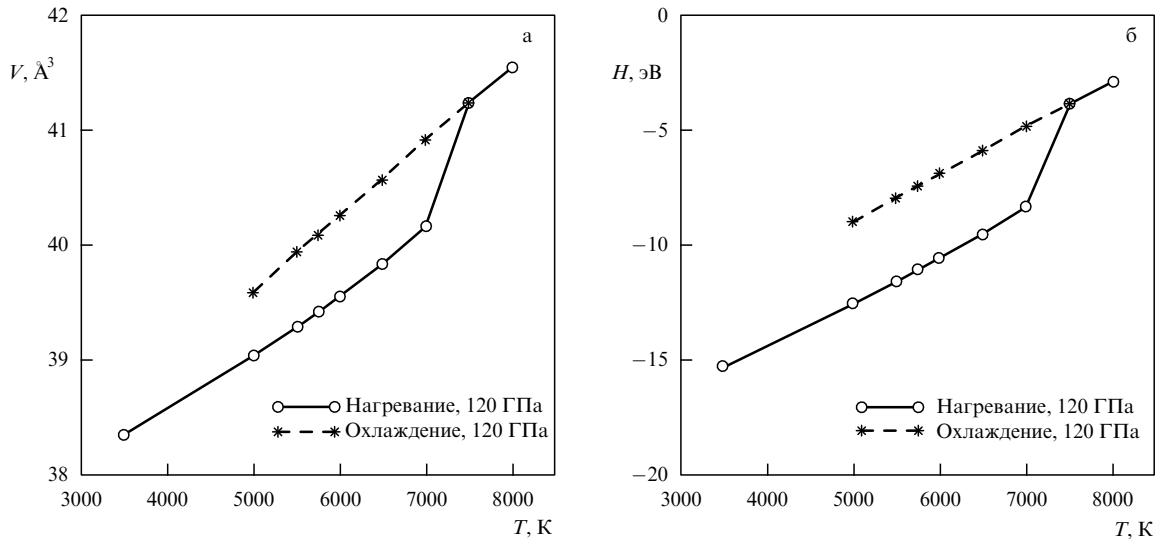


Рис. 5. Результаты однофазного моделирования плавления стишовита при 120 ГПа методом молекулярной динамики [14]: объем элементарной ячейки (две формульные единицы  $\text{SiO}_2$ ) (а); соответствующая энтальпия процесса нагревания — охлаждения (б).

данным, чем для двухфазного, возможно, из-за простоты взаимодействий или же из-за влияния межфазных границ, которое более выражено при низких давлениях [14]. При высоких давлениях более точными оказываются результаты двухфазного моделирования. Кривая плавления стишовита построена по результатам МД-моделирования и экспериментальным данным. Угол наклона

предлагаемой кривой плавления согласуется с величиной, полученной из однофазного моделирования. При низких давлениях результаты МД-моделирования близки к результатам статических экспериментов в алмазных наковальнях, а при высоких — к данным ударно-волновых экспериментов. Это, по всей видимости, подтверждает предположение о перегреве твердой

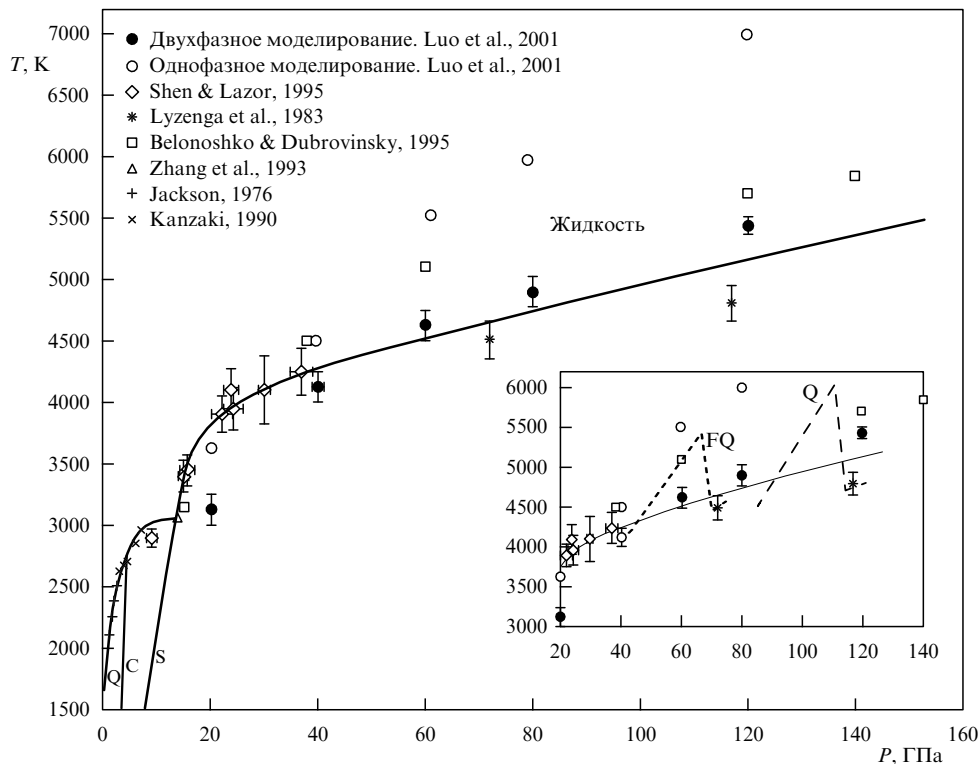


Рис. 6. Кривая плавления стишовита и фазовая диаграмма кремнезема, построенные на основе теоретических и экспериментальных исследований [14, 15, 20, 21, 29–31]. Сплошными линиями показаны границы фаз. Q — кварц, C — коэсит, S — стишовит, FQ — плавный кварц. На вставке: штриховыми линиями показаны результаты температурных измерений ударно-сжатых кварца и плавного кварца [15]. Резкое падение температуры указывает на плавление стишовита. Участки ударных адиабат Гюгоньо выше кривой плавления, показанной сплошной линией, представляют состояния перегретого твердого стишовита при ударном сжатии.

фазы, выдвинутое Лизенгой и др. при интерпретации ударных адиабат кварца и плавленого кварца [15]. Построение кривой плавления стишовита с учетом имеющихся данных представляет собой продолжение фазовой диаграммы кремнезема в мегабарную область.

#### 4. Заключение

В заключение отметим, что в экспериментах по ударному сжатию образцов чистого стишовита, синтезированных в многопуансонной установке высокого давления, получена адиабата Гюгоньо для стишовита до 235 ГПа. Наши результаты по АГ коэзита в области стабильности стишовита согласуются с предшествующими исследованиями и представляют собой продолжение АГ коэзита до 140 ГПа. Получены также АГ, приведенные к плотностям различных полиморфных модификаций кремнезема, и из этих зависимостей экспериментально определен параметр Грюнайзена для сжатого стишовита. Результаты компьютерного моделирования плавления стишовита, выполненного нами методом молекулярной динамики, подтверждают интерпретацию ударных экспериментов по плавлению кварца и плавленого кварца. Построено продолжение фазовой диаграммы кремнезема в область мегабарных давлений на твердой основе имеющихся экспериментальных и теоретических данных.

Работа выполнена при поддержке Отделения геологических и планетарных наук Калифорнийского технологического института (грант 8856).

#### Список литературы

- Hemley R J, Prewitt C T, Kingma K *Rev. Mineral.* **29** 41 (1994)
- Knittle E, Jeanloz R *Science* **251** 1438 (1991)
- Song X, Ahrens T J *Geophys. Res. Lett.* **21** 153 (1994)
- Chao E C T et al. *J. Geophys. Res.* **67** 419 (1962)
- El Goresy A et al. *Science* **288** 1632 (2000)
- McQueen R G, Fritz J N, Marsh S P J. *Geophys. Res.* **68** 2319 (1963)
- Wackerle J J. *Appl. Phys.* **33** 922 (1962)
- Fowles R J. *Geophys. Res.* **72** 5729 (1970)
- Ahrens T J, Rosenberg J T, in *Shock Metamorphism of Natural Materials* (Eds B M French, N M Short) (Baltimore: Mono Book Corp., 1968) p. 59
- Trunin R F *Shock Compression of Condensed Materials* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1998)
- Подурец М А и др. *Изв. физики Земли* **17** 9 (1981)
- Ito E, Furnish M D, Ito E, Sandia Report SAND-95-2342 (1995)
- Luo S-N et al. *Science* (2001), submitted
- Luo S-N et al. *Earth Planet. Sci. Lett.* (2001), submitted
- Lyzenga G A, Ahrens T J, Mitchell A C J. *Geophys. Res.* **88** 2431 (1983)
- Rubie D C *Phase Transitions* **68** 431 (1999)
- Ahrens T J, in *High Pressure Shock Compression of Solids* (Eds J R Asay, M Shahinpoor) (New York: Springer, 1993) p. 75–114
- Cohen R E, Gülsener O, Hemley R J *Am. Mineral.* **85** 338 (2000)
- Akins J (Private communication)
- Shen G, Lazor P J. *Geophys. Res.* **100** 17699 (1995)
- Belonoshko A B, Dubrovinsky L S *Geochim. Cosmochim. Acta* **59** 1883 (1995)
- Allen M P, Tildesley D J *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Clarendon Press, 1987)
- Strachan A, Çağın T, Goddard W A III *Phys. Rev. B* **60** 15084 (1999)
- Hemley R J et al. *Solid State Commun.* **114** 527 (2000)
- Panero W R, Benedetti L R, Jeanloz R J. *Geophys. Res.* (2001), submitted
- Marsh S P *LASL Shock Hugoniot Data* (Berkeley: Univ. of California Press, 1980)
- Альтшулер Л В, Трунин Р Ф, Симаков Г В *Изв. АН СССР. Сер. Физ. Земли* (10) 1 (1965)
- Wanatabe H, in *High-Pressure Research in Geophysics* (Adv. in Earth and Planetary Sci., Vol. 12, Eds S Akimoto, M H Manghnani) (Tokyo: Center for Acad. Publ. Japan, 1982) p. 441–464
- Zhang J et al. *J. Geophys. Res.* **98** 19785 (1993)
- Jackson I *Phys. Earth Planet Int.* **13** 218 (1976)
- Kanzaki M J. *Am. Ceram. Soc.* **3** 3706 (1990)

PACS numbers: 61.50.Ks, 91.35.Gf, 91.35.Lj

## Минералы глубинных геосфер

Д.Ю. Пушаровский

Рассматривается строение и состав мантии Земли. На основании анализа сейсмотомаграфических карт, а также данных о вещественном составе мантия делится на несколько концентрических оболочек вместо традиционно выделяемых двух: верхней и нижней. Как и в земной коре, в мантии преобладают силикаты, однако структурно силикаты мантии существенно отличаются от силикатов земной коры. Более ста тетраэдрических комплексов в силикатах земной коры сменяются не более чем 20 структурными типами этого класса минералов в мантии, главное отличие которых связано с перестройкой Si-тетраэдров в Si-октаэдры. В этом смысле стишовит может рассматриваться как родоначальник новой главы кристаллохимии силикатов. Новые данные о структурных преобразованиях минералов в глубинных геосферах свидетельствуют, что минералогическое разнообразие глубинных оболочек существенно меньше, чем в земной коре, однако мантийная минералогия совсем не так примитивна, как это допускалось еще 2–3 десятилетия назад.

Одна из наиболее интригующих проблем геологии в последние десятилетия связана с исследованием состава и строения глубинных оболочек Земли. Это направление в науках о Земле относится к числу приоритетных, поскольку более 90 % вещества во Вселенной находится под давлением, превышающим 1 ГПа. Диапазон давлений во Вселенной огромен: величины давлений изменяются на 60 порядков. В межгалактическом пространстве 1 атом приходится на объем более 1 см<sup>3</sup>, тогда как в центре нейтронных звезд состояние вещества можно сравнить с массой Солнца, которая приблизительно в 300 тыс раз больше массы Земли, сосредоточенной в объеме, меньшем, чем объем Земли (объем Земли примерно в 1 млн раз меньше объема Солнца).

Однако проблема прогноза состояния вещества в глубинных геосферах необычайно сложна, возможно, даже сложнее, чем исследование космоса, поскольку число прямых данных о веществе глубинных зон весьма ограничено. В этом плане особое место долгое время занимал минеральный агрегат из кимберлитовой трубки Лесото (Южная Африка), который рассматривается как представитель мантийных пород, залегающих на глубине ~ 250 км. Однако в декабре 1999 г. появилось сообщение о находке образца на о. Малаит (Юго-Восточная часть Тихого океана), который связан с породами нижней мантии на глубине 770 км и в котором установлены кристаллы алмаза и мейджорита [1]. Керн, поднятый из самой глубокой в мире скважины, пробуренной на Кольском полуострове и достигшей отметки