исследования выявлен ряд закономерностей в статистическом распределении искаженных кристаллов по классам и группам ложной симметрии:

1. Статистическое распределение искаженных кристаллов между планальными и планаксиальными видами симметрии позволяет судить о степени неоднородности замещаемого кристаллами слоистого субстрата. Те же доли, взятые для метасоматической колонки, являются индикаторами проницаемости субстрата и инфильтрации гидротермальных растворов через породы в ее объеме.

2 Вероятность совпадения осей $3L_4$, $4L_3$, $6L_2$ кристаллов граната с определенным направлением в кристаллообразующей среде пропорциональна числу выходов осей истинной симметрии, и возрастает с уменьшением порядка оси, что соотносится с распространенностью кристаллов по группам ложных симметрий тетрагональной, тригональной и ромбической сингоний в пропорции 1.5 : 2 : 3.

3. В группах ложной симметрии mmm, 2*mm*, 2/*m* и *m* количественное соотношение кристаллов с тем или иным набором подформ определяется вероятностью совпадения основного элемента истинной симметрии кристалла с элементом симметрии кристаллообразующей среды и отражает пропорцию количества элементов истинной симметрии – $3L_4$: $6L_2$ или $3P(001)$: $6P(001)$ как 1 : 2.

Исследования искаженных кристаллов позволяют проводить достаточно объективную оценку процесса метасоматического кристаллообразования, выраженную в суперпозиции элементов симметрий: кристалла (в идеале – *m*3*m*); физико-химических свойств однородного (∞/*mm*) или неоднородного (∞m) слоистого субстрата; потока инфильтрационных растворов (∞m), а также результирующего продукта их диссимметрии – симметрии диффузионного поля кристаллообразующей среды.

[1] И.И. Шафрановский. Очерки по минералогической кристаллографии. Л.: Недра, 1974, с. 67.

[2] В.В. Готовцев, И.И. Шафрановский. Искаженные формы кристаллов гроссуляра // Онтогенические методы изучения минералов. М.: Наука, 1970, С. 155-161.

[3] А.Д. Павлушин, Е.В. Галускин, И.О. Галускина. Вершинники кристаллов граната // Минералогические музеи. Материалы симпозиума, СПб., 2002, С. 288-289.

RMS DPI 2007-1-31-0

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ КОМПЬЮТЕРНОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ВЕЩЕСТВА
CRYSTALLINE MATERIAL STUDY BY X-RAY COMPUTED MICROTOMOGRAPHY

Плоткина Ю.В.*, Сасов А.Ю.**
Plotkina Yu.V.*, Sasov A.Yu.**
** Institute of Precambrian Geology and Geochronology RAS, St.Petersburg, Russia, Julia@IK4843.spb.edu*
***Skyscan, Kontich, Belgium*

We present results of a computed X-ray microtomography (μCT) study of single grains (100-200 microns in size) of accessory minerals (like zircon, monazite, apatite, baddeleyite and garnet) and compare these with data obtained by traditional methods of internal structure investigations. A Skyscan-1172 microtomograph with 2 microns spatial resolution has been used. The μCT study of single grains is a powerful tool to understand the internal crystal structure. The information provided by μCT is quite comparable with (or even more) informative than results obtained by optical microscopy, SEM (BSE) and CL methods. Therefore μCT technique can be considered as a complimentary technique to traditional approaches. It can be used as a valuable method for the individual selection of appropriate objects for precise geochronological investigations for which non-altered pristine crystals are needed. These can be identified through their density characteristics and other tomographic features. Therefore future μCT investigations should be targeted to density calibration by local mineral analysis within specific parts of monocrystals.

Гетерогенность природных монокристаллов во многом обусловлена степенью совершенства их кристаллической структуры (или отдельных ее частей), связанной у циркона, в частности, с радиационными нарушениями. Выделение фрагментов внутренних частей кристаллов с различной степенью кристалличности в режимах BSE и CL возможно только на достаточно грубом уровне, т.е. в тех случаях, когда происходит почти полное разрушение исходной структуры. Методом, позволяющим выявлять тонкие различия в плотностях объектов на субмикронном уровне, является рентгеновская компьютерная микротомография (μCT). Микротомографические исследования заключаются в пошаговом получении набора 2D-изображений, на основе которых с помощью компьютерной программы осуществляется построение трехмерной модели, воспроизводящей плотностное строение объекта с пространственным разрешением 2 мкм. Чувствительность метода по плотности для выбранных нами объектов составляет 10-15%. Нами исследованы монокристаллы акцессорных минералов (таких как циркон, монацит, апатит, бадделеит, гранат) с помощью метода рентгеновской компьютерной микротомографии (томограф Skyscan-1172, Belgium) и ряда традиционных методов – оптики, электронной микроскопии (SE и BSE), катодо-

люминесценции (CL).

Сравнительный анализ результатов изучения внутреннего строения кристаллов акцессорных минералов показал, что оптические исследования, катодолюминесценция и рентгеновская компьютерная микротомография являются взаимодополняющими методами, позволяющими во многих случаях разрешить спорные вопросы интерпретации внутренней морфологии кристаллов. Учитывая, что микротомография является методом, не нарушающим целостность образца, целесообразно его использовать в качестве одного из первых при комплексном исследовании кристаллов минералов и их синтетических аналогов.

Метод был использован для изучения внутреннего строения модельных кристаллов изоморфных рядов $(Pb,Ba)(NO_3)_2$, $Na(Cl,Br)O_3$, $(Ni,Co)(NH_4)_2(SO_4)_2{\cdot}6H_2O$ и др. Были выявлены неоднородности строения как кристаллов, выросших при снижении температуры или испарении растворителя, так и монокристаллических псевдоморфоз, связанных со спецификой процессов.

Были также изучены образцы желчных камней в связи с исследованиями процессов их кристаллизации и моделированием образования холелитов в желчи in vitro.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 05-05-65347 и 07-05-00380).

RMS DPI 2007-1-25-0

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ КАТИОНОВ И АНИОНОВ В МНОГОКОМОПОНЕНТНОЙ РАСПЛАВНОЙ СРЕДЕ С ВЫСОКОЙ ДОЛЕЙ АНИОННОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ

COMPUTER MODELING INTERPOSITIONING CATIONS AND ANIONS IN MULTICOMPONENT MELTS WITH HIGH PORTION OF ANION COMPONENT

Цветков Е. Г., Давыдов А. В.

Tsvetkov E. G., Davydov A.V.

Институт геологии и минералогии СО РАН, Новосибирск, Россия

adavidov@uiggm.nsc.ru

A concept of integrated associative complexes(AC) is formalized – semiordered cation-anion groups in melts with a polycondensed anion component. Using the program ADF-2005 we optimized structural models of many elementary AC of melts ($LiBO_2$, CaB_2O_4, $Na_2Si_2O_5$, $BaPb_3Si_2O_8$ etc.) within their convergence in geometry and energy of formation, regularity of occupation of electron orbitals of complex-forming atoms. It is shown that to perform comparative estimation of integrated complexes, to establish the features of atomic interactions, and to satisfactorily interpret the radial distribution functions of melt electron density, one can use the quantum-chemical calculation of elementary structure models of these groupings.

В настоящее время процессы структурных трансформаций при плавлении и кристаллизации на атомарном уровне исследованы крайне слабо, особенно для многокомпонентных систем. В рамках разрабатываемой концепции об определяющей роли в этих процессах катион-анионных взаимодействий ранее были формализованы ассоциативные комплексы в расплавах с неполиконденсированной или слабо поликонденсированной анионной составляющей [1, 2]. Цель настоящей работы – формализовать понятие об интегрированных ассоциативных комплексах – полуупорядоченных катион-анионных сборках в расплавах с поликонденсированной анионной составляющей. Одним из методов верификации элементов строения сложных расплавов является компьютерное моделирование квазиустойчивых катион-анионных конфигураций на основе экспериментальных результатов, полученных методами in situ дифракции синхротронного излучения и спектроскопии КРС расплавов, а также КРС-, ИК- и ЭПР-спектроскопии закаленных расплавов – стекол.

Результаты спектроскопии КРС расплавов соединений с высокой долей анионной составляющей (полисиликатов, полиборатов и т.п.) свидетельствуют о доминировании в жидком состоянии крупных фрагментов поликонденсата, образованного соответствующими анионными группировками. Очевидно, что между этими фрагментами позиционируются катионы, старающиеся удержать свою противоионную оболочку. Поэтому такие более или менее упорядоченные катион-анионные сборки, образованные двумя-тремя и более фрагментами полианионных цепочек (лент, слоёв и т.д.) и "сшитые" во многих местах катионами – относительно долгоживущие образования. Полагаем, что именно такие многоатомные катион-анионные сборки следует рассматривать в качестве неких интегрированных катион-анионных ассоциативных комплексов, доминирующих в расплавах с глубоко поликонденсированной анионной составляющей.

Очевидно, что произвести исходное модельное конфигурирование многоатомного интегрированного АК, тем более – непостоянного состава, как и его адекватную расчётную оптимизацию имеющимися в настоящее время программами для квантово-химических вычислений практически невозможно. Опробованный нами подход к этой задаче сводится к её упрощению путём выделения некого "элементарного" модуля такого потенциального АК и расчёту его важнейших параметров – оптимальной геометрии и межатомных расстояний, энергии образования и фрагментарного катион-анионного взаимодействия при контроле правильности заполнения электронных орбиталей. При этом полагается, что тот или иной наблюдаемый в дифракционном или спектроскопическом эксперименте эффект будет, по сути, являться некой интегральной функцией ансамбля подобных элементарных модулей в АК доминирующих конфигураций.

Реализуя обозначенный подход к моделированию интегрированных АК в расплавах с поликонденсированной анионной составляющей, мы