

В. Г. ФЕКЛИЧЕВ

ПЛОТНОСТЬ РАЗМЕЩЕНИЯ АТОМОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ МИНЕРАЛОВ

Структурная плотность или рыхлость структуры учитывает степень заполнения структурного пространства атомами или ионами. Структурная плотность разными авторами оценивается по-разному.

В. М. Гольдшмидт [1] впервые количественно оценил степень заполнения кристаллического пространства разными атомами. Он вел расчет, исходя из размеров ионных радиусов и пришел к выводу, что основной объем минералов литосферы занимает кислород и назвал земную кору оксисферой. В. М. Гольдшмидт [1] писал: «Литосфера, состоящая из силикатов и окислов, является в физическом отношении существенно кислородной упаковкой. Образование этих чудовищных объемов кислорода вызывается наличием залегающих между ними катионов, заряды которых создают равновесие всей постройки и которые все же по отношению к действительному соответствию пространства играют только совершенно подчиненную роль.

Поэтому мы по праву литосферу могли бы назвать оксисферой» (с. 209). Объемные проценты литосферы, по В. М. Гольдшмидту, следующие:

O	Si	Al	Fe	Mg	Ca	Na	K	Ti
91,77	0,80	0,76	0,68	0,56	1,48	1,60	2,14	0,22.

Использовались и другие методы расчета. Объемный коэффициент представляет отношение объема элементарной ячейки к объему слагающих ее атомов [2, 3]. По И. Костову [4], плотность структуры характеризует (в %) упаковочный индекс D , который определяется по формуле $D = V \cdot 100 / V_0$, где V — объем ионов, V_0 — объем элементарной ячейки. В. А. Соколов и К. З. Стариков [5] предлагают вычислять так называемую фактическую плотность упаковки η , не требующую знания объема элементарной ячейки, вычисляемую по формуле $\eta = 2,52 D \Sigma r_i^3 / M$, где D — удельный вес, r_i — радиус иона, M — молекулярный вес.

Н. З. Евзикова [6] ввела понятие о структурной плотности решетки как числе узлов, входящих на 1 \AA в одномерном, двумерном и трехмерном выражении. Объемная структурная плотность η рассчитывается по формуле $\eta = 0,602 dn / M$, где d — весовая плотность, M — молекулярный вес. Используется и понятие относительная структурная рыхлость решетки $\omega = M / dn$.

В последнее время появились работы В. И. Лебедева [7, 8], в которых пересматриваются данные В. М. Гольдшмидта об оксисфере. На основании концепции об ионно-атомных радиусах [9] В. И. Лебедев пришел к выводу, что основное пространство земной коры сложено не кислородом, а металлическими атомами, прежде всего Si и Al, а в мантии — Si и Mg. В работе В. И. Лебедева [7] дается сравнительный расчет степени заполнения кристаллического пространства в окиси кремния на основании ионных радиусов В. М. Гольдшмидта и ионно-атомных радиусов (табл. 1).

Заметим, что по общему количеству атомов кислород в земной коре занимает первое место, и уже поэтому она может быть названа окси-

Таблица 1

Степень заполнения кристаллического пространства в окиси кремния, %.

Минерал	Степень заполнения пространства		Минерал	Степень заполнения пространства	
	по ионным радиусам	по ионно-атомным радиусам		по ионным радиусам	по ионно-атомным радиусам
β-кристобалит	43,3	18,3	Коэзит	57,4	24,1
α-кристобалит	46,1	19,4	Стишовит	84,7	41,0
β-тридимит	43,2	18,2	Флюоритоподобная модификация		
β-кварц	50,0	21,0		1	98,5
α-кварц	52,3	22,0	2	116,7	53,0

сферой. Кислородные атомы преобладают и в большинстве его соединений с металлами. Расчет объемных соотношений атомов в плотных структурах с использованием ионных радиусов неправилен.

Полуколичественная оценка плотности структуры делалась с учетом координации атомов или весовой плотности. Так, в связи с получением экспериментально новых плотных модификаций кремнезема и других минералов, находками некоторых из них в природе, данными по сжимаемости вещества при высоких давлениях была сделана оценка природы и поведения кристаллического вещества в породах нижней мантии, в частности о вероятности нахождения там вещества в сверхплотном состоянии с рутиловой и флюоритовой структурой.

По предположению А. Е. Рингвуда [10] и С. М. Стишова [11], нижняя мантия состоит из продуктов разложения ферромагнезиальных силикатов — периклаза, стишовита и окислов железа. Серию полиморфных и фазовых превращений вещества в нижней мантии позднее предполагал А. Е. Рингвуд [12]. Гипотеза о переходе SiO_2 не только в структуру стишовита, но и в структуру типа флюорита, появилась в конце шестидесятых годов [13, 14].

Увеличение плотности вещества нижней мантии от 4,5 на глубине 1000 км до 5,5 на глубине 2900 км предполагается в одной из работ [15]. В. С. Урусов и Н. И. Хитаров [16] предполагают переход кремнезема в нижней мантии на глубине 2200—2900 км в структуру флюорита, а на границе с ядром — в структуру PbCl_2 . В. И. Лебедев [17] обращает внимание на большую устойчивость стишовита и рингвудита в связи с наличием непосредственных связей между металлическими ионами.

Проведено исследование сжимаемости периклаза и кварца до давлений $\sim 2,5$ мбар (18). Получены значения плотности сжатия для периклаза $5,89 \text{ г/см}^3$ и кварца $5,48 \text{ г/см}^3$. Здесь

$$\rho_0 = \rho_0 D (D - U)^{-4},$$

где ρ_0 — плотность при обычных условиях, D — волновая скорость, U — массовая скорость движения вещества за фронтом ударных волн.

Определена сжимаемость при высоких давлениях рутилоподобных модификаций TiO_2 , SiO_2 , SnO_2 и MnO_2 [13, 19, 20]. Значительная сжимаемость кремнезема определена при высоких давлениях и в других работах [21, 22]. При давлении около 700 кбар получен переход α-кварца в структуру типа α — PbO_2 [23]. В табл. 2 дается зависимость плотности сжимаемого кремнезема от давления (структура конечного состояния не ясна).

Санидин KAlSi_3O_8 превращается в голландитовую модификацию при $P=120$ кбар и $t=900^\circ \text{C}$ [24]. При этом Al и Si приобретают октаэдрическую модификацию, а плотность возрастает от 2,55 до $3,84 \text{ г/см}^3$.

Таблица 2

Плотность кремнезема, сжимаемого при высоких давлениях

Сжимаемое вещество	α -кварц [26]	Стишовит [23]	Аморфный SiO_2 [25]	Кварц [21]
Давление, кбар	700	1000	≥ 2000	~ 2500
Плотность, г/см ³	4,43	5,2	5,9	5,48

Недостатком используемых формул и оценок для выражения структурной плотности являлось использование объемов ионов, реальные размеры которых непостоянны при переходе от одного вида соединения к другому (с разной степенью ионности — ковалентности). Использование узлов решетки, приходящихся на единицу объема, дает грубую оценку структурной плотности, так как размеры атомов учитываются косвенно. Суммарное количество атомов в единичном объеме также дает грубую картину, так как разные атомы разновелики. Правильнее говорить не о структурной плотности, а о плотности размещения атомов в кристаллической структуре (плотности атомного размещения).

Как правильнее оценить плотность атомного размещения, если исходить из качественного и количественного состава размещаемых атомов, размеров элементарной ячейки и количества формульных единиц в элементарной ячейке? При подсчете атомов в объеме нужно ввести поправку на размер атома. Очевидно, поправочный коэффициент есть объем атома в свободном не ионизированном состоянии, так как только этот объем можно считать постоянным у каждого атома. Перемножая количество атома в элементарной ячейке на его объем и суммируя эти произведения, мы получаем объем, занимаемый атомами данного вещества в элементарной ячейке, если бы эти атомы не взаимодействовали друг с другом. Отношение объема свободных атомов к объему элементарной ячейки и есть мера плотности размещения. Чем больше это отношение, тем больше плотность размещения атомов.

Формула, связывающая эти величины, выглядит так

$$P_A = \frac{(K_A U_A + K_B U_B + \dots) z}{U_{\text{я.я.}}},$$

где P_A — плотность атомного размещения, $U_{\text{я.я.}}$ — объем элементарной ячейки, z — число формульных единиц в элементарной ячейке, K_A, K_B — количество атомов А, В... в формуле, U_A, U_B — объем атома в неионизированном состоянии.

Полученная формула есть видоизменение формулы по (1, 2), но ей удобнее пользоваться и она нагляднее показывает какую часть реального пространства занимают условно не взаимодействующие атомы.

Объемы нейтральных атомов рассчитывались нами по данным размеров радиусов нейтральных атомов в работе С. С. Бацанова [25] и представлены в табл. 3. Объем атома водорода вычислен, исходя из его ковалентного радиуса $r = 0,31 \text{ \AA}$, взятого из работы В. Н. Кондратьева [26]. По данным Г. Герцберга [27], расстояние в молекуле водорода H_2 равно $0,7417 \text{ \AA}$. Откуда радиус одного атома равен $0,3208 \text{ \AA}$, что близко к используемой для расчета величине.

В табл. 4, 5 сведены результаты расчета плотности атомного размещения P_A в порообразующих минералах.

Результаты подсчета величины P_A увязываются со структурными данными для минералов. Минералы с рыхлыми структурами, богатыми незаполненными пустотами, имеют наименьшее значение P_A . Значение P_A ниже 0,25 имеют минералы: берилл, гиббсит, диксит, каолинит, кварц высокотемпературный, лед, лепидокрокит, накрит, пирофиллит, сера, сидерит, сколецит.

Таблица 3

Кубические радиусы и объемы атомов в свободном состоянии, Å^3

Элемент	r^3	V	Элемент	r^3	V	Элемент	r^3	V
1	2	3	1	2	3	1	2	3
H	0,0298	0,125	Cd	3,242	13,582	Pd	2,248	9,417
Li	1,521	6,372	In	2,986	12,509	Ag	3,582	15,006
Be	0,7290	3,054	Mn	1,953	8,182	W	2,571	10,771
B	0,6815	2,855	Fe	1,772	7,423	Re	2,571	10,771
C	0,4565	1,912	Co	1,728	7,239	Sn	2,863	11,994
N	0,4219	1,767	Ni	1,685	7,059	Sb	3,049	12,773
O	0,4052	1,697	Cu	2,460	10,306	Te	2,803	11,743
F	0,3732	1,563	Zn	2,248	9,417	I	2,460	10,306
Na	3,870	16,213	Ga	2,000	8,379	Cs	18,19	76,203
Mg	2,515	10,536	Ge	1,772	7,423	Ba	10,36	43,401
Al	2,000	8,379	As	1,907	1,989	La	4,827	20,222
Si	1,521	6,372	Se	1,602	6,711	Hf	3,242	13,582
P	1,368	5,731	Br	1,482	6,208	Ta	2,406	10,079
S	1,125	4,713	Rb	10,08	42,228	Os	2,147	8,994
Cl	1,0000	4,189	Sr	7,078	29,652	Ir	2,147	8,994
K	9,129	38,244	Y	4,252	17,813	Pt	2,300	9,635
Ca	5,268	22,069	Zr	3,242	13,582	Au	3,375	14,139
Sc	2,986	12,509	Nb	2,406	10,079	Hg	3,242	13,582
Ti	2,515	10,536	Mo	2,515	10,536	Tl	3,177	13,309
V	1,861	7,796	Ru	2,097	8,785	Pb	3,112	13,037
Cr	1,953	8,182	Rh	2,097	8,785	Bi	3,112	13,037

Самыми плотными оказались структуры алюминиево-магнезиальных окислов и некоторых силикатов с кальцием. Сюда же попали плотноупакованные структуры железа, а также барит, образующий плотную упаковку с группами O_4 . Значение P_A выше 0,5 оказалось у следующих минералов: аккерманит, андрадит, арагонит, барит, волластонит, геленит, гроссуляр, диопсид, железо, корунд, монтичеллит, периклаз, сфен, флюорит, шпинель.

Самым рыхлым веществом в наших расчетах оказался лед ($P_A = 0,0598$), самым плотным — периклаз ($P_A = 0,6548$). Величина P_A таких веществ как периклаз, железо настолько резко отличается от величины P_A льда и близкой воды, что невольно напрашивается параллель с вероятным распределением по другим (геофизическим и физико-химическим) данным этих веществ в зонах Земли. Железо и периклаз могут находиться в глубинных оболочках Земли, так как выдерживают большое давление без разрушения структуры благодаря высокой плотности атомного размещения. Вода и лед сосредоточены во внешней оболочке Земли, так как из-за своей рыхлости не способны выдерживать большое давление без разрушения структуры. Это усугубляется малой прочностью связей между группами атомов в структуре последних.

Плотность атомного размещения кварца и стишовита различаются почти в два раза и это еще одно подтверждение того, что более плотный стишовит может устойчиво существовать вместо кварца в глубинных оболочках Земли.

Для примерных парагенезисов различных фаций метаморфизма нами рассчитывались средние значения P_A . В табл. 6 они расположены по возрастанию величины P_A . Видно, что наименее плотными ($P_A = 0,3175 - 0,3844$) являются породы цеолитовой, санидиновой фации и фации зе-

Таблица 4

Результаты расчета плотности атомного размещения породообразующих минералов (кроме силикатов)

Минерал	Формула	z	V _{э. я.}	P _A
Железо	Fe	2	23,3937	0,6346
Алмаз	C	8	45,3770	0,3371
Сера	S	128	3324,1093	0,1815
Лед	H ₂ O	4	130,2184	0,0598
Низкий кварц	SiO ₂	3	112,7391	0,2599
Высокий кварц	SiO ₂	3	118,4255	0,2474
Стишовит	SiO ₂	2	46,5415	0,4025
Периклаз	MgO	4	74,7249	0,6548
Касситерит	SnO ₂	2	71,1458	0,4326
Корунд	Al ₂ O ₃	2	85,02659	0,5140
Гематит	Fe ₂ O ₃	2	100,665	0,3961
Ильменит	FeTiO ₃	2	105,518	0,4369
Шпинель	MgAl ₂ O ₄	8	532,0317	0,5125
Магнетит	Fe ₃ O ₄	8	591,8577	0,3928
Брусит	Mg(OH) ₂	1	40,6428	0,3489
Гиббсит	Al(OH) ₃	8	424,4627	0,2609
Диаспор	α-AlO(OH)	4	117,7123	0,4043
Бежит	γ-AlO(OH)	4	129,1736	0,3684
Гетит	α-FeO(OH)	4	137,7863	0,3176
Лепидокрокит	γ-FeO(OH)	4	148,3828	0,2950
Пирит	FeS ₂	4	158,9558	0,4240
Пирротин	FeS	64	1856,0763	0,4184
Барит	BaSO ₄	4	346,0502	0,6346
Гибс	CaSO ₄ ·2H ₂ O	4	496,0774	0,3021
Ангидрит	CaSO ₄	4	305,0946	0,4401
F-апатит	Ca ₃ (PO ₄) ₃ F	2	520,1132	0,4050
Cl-апатит	Ca ₃ (PO ₄) ₃ Cl	2	540,644	0,3994
ОН-апатит	Ca ₃ (PO ₄) ₃ OH	2	526,810	0,4008
Карбонат — апатит	Ca ₃ (PO ₄) ₃ (CO ₃) _{0,5}	2	519,7567	0,4128
Флюорит	CaF ₂	4	163,040	0,6181
Галит	NaCl	4	179,3107	0,4551
Кальцит	CaCO ₃	2	121,7609	0,4775
Магнезит	MgCO ₃	2	103,9053	0,3376
Родохрозит	MnCO ₃	2	100,7675	0,3014
Сидерит	FeCO ₃	2	99,7357	0,2893
Доломит	CaMg(CO ₃) ₂	3	323,5708	0,4321
Арагонит	CaCO ₃	4	224,359	0,5183

ленных сланцев, наиболее плотными ($P_A=0,5093—0,5397$) являются породы трапп-гранулитовой, пироксен-роговиковой и эклогитовой фаций.

Ранее расчеты структурной плотности для определения условий минералообразования использовали Н. З. Евзикова и Г. В. Ициксон [28]. Ими также были получены близкие к нашим данные по распределению величины структурной плотности для парагенезисов минералов, принадлежащих к различным фациям метаморфизма.

Следует повторить, что константа P_A естественнее характеризует плотность атомного размещения, так как оперирует отношением объемов, а не количеством атомов в объеме и не весом единицы объема.

Таблица 5

Результаты расчета плотности атомного размещения породообразующих силикатов

Минерал	Формула	z	V _{э. я.}	P _A
Форстерит	Mg ₂ SiO ₄	4	290,003	0,4722
Фаялит	Fe ₂ SiO ₄	4	308,105	0,3636
Монтчеллит	CaMgSiO ₄	4	339,841	0,5387
Альмандин	Fe ₃ Al ₂ (SiO ₄) ₃	8	1531,214	0,4102
Андрадит	Ca ₃ Fe ₂ (SiO ₄) ₃	8	1748,819	0,5514
Гроссуляр	Ca ₃ Al ₂ (SiO ₄) ₃	8	1664,428	0,5885
Пироп	Mg ₃ Al ₂ (SiO ₄) ₃	8	1504,666	0,4671
Спессартин	Mn ₃ Al ₂ (SiO ₄) ₃	8	1569,389	0,4295
Силлиманит	Al ₂ OSiO ₄	4	324,700	0,3895
Андалузит	Al ₂ OSiO ₄	4	343,210	0,3685
Кианит	Al ₂ OSiO ₄	4	290,054	0,4360
Геленит	Ca ₂ Al ₂ SiO ₇	2	300,411	0,5269
Акерманит	Ca ₂ MgSi ₂ O ₇	2	307,943	0,5150
Топаз	Al ₂ SiO ₄ F ₂	4	343,4825	0,3848
Сфен	CaTiSiO ₄ O	4	369,6265	0,5136
Ставролит	Fe ₂ Al ₉ (SiO ₄) ₄ O ₇ (OH)	2	738,808	0,4239
Эпидот	Ca ₂ FeAl ₂ O(OH)(Si ₂ O ₇)(SiO ₄)	2	469,3899	0,4671
Цоизит	Ca ₂ Al ₃ O(OH)(Si ₂ O ₇)(SiO ₄)	4	893,8256	0,4948
Клиноцоизит	Ca ₂ Al ₃ O(OH)(Si ₂ O ₇)(SiO ₄)	2	454,4533	0,4866
Лавсонит	CaAl ₂ (OH) ₂ Si ₂ O ₇ ·H ₂ O	4	658,5906	0,4193
Пумпеллит	Ca ₄ Mg _{0,5} Fe _{0,5} Al ₅ O(OH) ₃ (Si ₂ O ₇) ₂ (SiO ₄) ₂ ·2H ₂ O	2	994,0106	0,4611
Берилл	Be ₃ Al ₂ Si ₆ O ₁₈	2	671,781	0,2819
Кордиерит	Al ₃ Mg ₂ Si ₅ AlO ₁₈	4	1548,9678	0,3021
Эльбаит	NaLi _{1,5} Al _{1,5} B ₃ Al ₆ Si ₆ (OH) ₄ O ₂₇	3	1523,3299	0,1238×3
Шерл	NaFe ₃ Al ₃ B ₃ Si ₆ (OH) ₄ O ₂₇	3	1591,2507	0,1186×3
Дравит	NaMg ₃ Al ₃ B ₃ Si ₆ (OH) ₄ O ₂₇	3	1589,9418	0,1244×3
Аксинит	Ca ₂ Mn _{0,5} Fe _{0,5} Al ₂ Bo ₃ (Si ₄ O ₁₂)(OH)	2	567,2262	0,4383
Энстатит	MgSiO ₃	16	832,180	0,4230
Ферросилит	FeSiO ₃	16	878,102	0,3441
Диопсид	CaMgSi ₂ O ₆	4	437,895	0,5072
Геденберgit	CaFeSi ₂ O ₆	4	452,801	0,4631
Эгирин	NaFeSi ₂ O ₆	4	428,9728	0,4342
Пижонит	Ca _{0,2} MgFe _{0,8} Si ₂ O ₆	4	434,0999	0,4038
Сподумен	LiAlSi ₂ O ₆	4	387,433	0,3890
Жадеит	NaAlSi ₂ O ₆	4	408,890	0,4648
Волластонит	CaSiO ₃	6	388,068	0,5184
Антофиллит	Mg ₇ (Si ₄ O ₁₁) ₂ (OH) ₂	4	1748,472	0,3791
Куммингтонит	Mg ₄ Fe ₃ (Si ₄ O ₁₁) ₂ (OH) ₂	2	902,1045	0,3467
Грюнерит	Fe ₄ Mg ₃ (Si ₄ O ₁₁) ₂ (OH) ₂	2	880,5078	0,3689
Актинолит	Ca ₂ Mg ₄ Fe(Si ₄ O ₁₁) ₂ (OH) ₂	2	920,5182	0,4034
Тремолит	Ca ₂ Mg ₅ (Si ₄ O ₁₁)(OH) ₂	2	906,179	0,4166
Рогвая обманка	NaCa ₂ Mg ₃ Fe ₂ AlSi ₇ O ₂₂ (OH) ₂	2	911,6766	0,4404
Глаукофан	Na ₂ Mg ₃ Al ₂ (Si ₄ O ₁₁) ₂ (OH) ₂	2	885,272	0,3903
Флогопит	K ₂ Mg ₆ (AlSi ₃ O ₁₀) ₂ F ₄	1	496,942	0,4748
Фторфлогопит	K ₂ Mg ₆ (AlSi ₃ O ₁₀) ₂ (OH) ₄	1	487,273	0,4820
Биотит	K ₂ Mg ₄ Fe ₂ (AlSi ₃ O ₁₀) ₂ (OH) ₄	1	489,7922	0,4690
Мусковит	K ₂ Al ₄ (AlSi ₃ O ₁₀) ₂ (OH) ₄	2	937,7717	0,4398
Маргарит	Ca ₂ Al ₄ (Al ₂ Si ₂ O ₁₀) ₂ (OH) ₄	2	888,9214	0,4002
Хлоритоид	Fe ₂ Al ₄ O ₂ (SiO ₄) ₂ (OH) ₄	4	927,7203	0,3681

Таблица 5 (окончание)

Минерал	Формула	z	V _{э. я.}	P _A
Пирофиллит	Al ₄ (Si ₄ O ₁₀) ₂ (OH) ₄	2	843,183	0,2982
Тальк	Mg ₆ (Si ₄ O ₁₀) ₂ (OH) ₄	2	898,579	0,3459
Хризотил	Mg ₃ (Si ₂ O ₅)(OH) ₄	4	722,4789	0,3329
Лизардит	Mg ₃ (Si ₂ O ₅)(OH) ₄	2	357,1081	0,3367
Антигорит	Mg ₃ (Si ₂ O ₅)(OH) ₄	16	2904,9398	0,3312
Клинохлор	Mg ₆ Al ₂ Fe ₄ (AlSi ₃ O ₁₀) ₂ (OH) ₁₆	1	692,0385	0,3291
Каолинит	Al ₄ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₈	1	330,269	0,2742
Диккит	Al ₄ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₈	2	660,865	0,2740
Накрит	Al ₄ Si ₄ O ₁₀ (OH) ₈	6	1984,192	0,2738
Пренит	Ca ₂ Al ₂ Si ₃ O ₁₀ (OH) ₂	2	466,005	0,4319
Санидин	KAlSi ₃ O ₈	4	719,625	0,4409
Ортоклаз	KAlSi ₃ O ₈	4	718,419	0,4416
Микроклин	KAlSi ₃ O ₈	4	721,865	0,4395
Высокий альбит	NaAlSi ₃ O ₈	4	716,901	0,3196
Низкий альбит	NaAlSi ₃ O ₈	4	664,271	0,3449
Анортит	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	4	663,607	0,3927
Высокий нефелин	Na ₃ KAl ₄ Si ₄ O ₁₆	2	719,955	0,4807
Низкий нефелин	Na ₃ KAl ₄ Si ₄ O ₁₆	2	719,360	0,4811
Лейцит	KAlSi ₂ O ₈	16	2339,175	0,4889
Содалит	Na ₈ Al ₆ Si ₆ O ₂₄ Cl ₂	1	707,348	0,3779
Нозеан	Na ₈ Al ₆ Si ₆ O ₂₄ SO ₄	1	741,218	0,3649
Анальцим	NaAlSi ₂ O ₆ ·H ₂ O	16	2571,353	0,3078
Натролит	Na ₂ Al ₂ Si ₃ O ₁₀ ·2H ₂ O	8	2250,1314	0,3242
Сколецит	CaAl ₂ Si ₃ O ₁₀ ·3H ₂ O	8	2303,371	0,2909

Таблица 6

Расчет средней плотности размещения атомов P_A в породах фаций метаморфизма

Название фации	Количественный минералогический состав породы, %	P _A
Трапп-гранулитовая	Диопсид 60, гроссуляр 40	0,5397
Пироксен-роговиковая	Кальцит 40, волластонит 30, гроссуляр 30	0,5231
Эклогитовая	Омфацит (диопсид) 50, гранат (70% пироп, 30% гроссуляр) 50	0,5054
Гнейс-гранулитовая	Альмандин 10, кианит 30, кварц 10, ортоклаз 50	0,4186
Амфиболитовая	Роговая обманка 60, альмандин 20, олигоклаз 20	0,4172
Глаукофановых сланцев	Глаукофан 50, лавоснит 30, эпидот 20	0,4144
Эпидот-амфиболитовая	Актинолит 60, эпидот 20, альбит 20	0,4044
Зеленых сланцев (1)	Мусковит 50, хлорит 50	0,3844
Зеленых сланцев (2)	Тальк 70, магнезит 30	0,3434
Санидиновая	Санидин 30, пижонит 30, альбит 40	0,3207
Цеолитовая	Натролит 50, анальцим 50	0,3175

ЛИТЕРАТУРА

1. Гольдшмидт В. М. О заполнении пространства атомами (ионами) и природе литосферы.— В кн.: Основные идеи геохимии. Вып. 1. Л.: Госхимтехиздат, 1933, с. 201—209.
2. Sztrókaу K. I. Über die Grundprinzipien einer Zeitgemassen Systematik des Mineralreiches. T. I.—Ann. Univ. scient. Budapest, sect. geol., 1961 (1962), N 5.
3. Sztrókaу K. I. Über die Grundprinzipien einer Zeitgemassen Systematik des Mineralreiches. T. II. Ann. Univ. scient. Budapest, sect. Geol., 1962 (1963), N 6.
4. Костов И. Минералогия. Мир, 1971.
5. Соколов В. А., Стариков К. З. Плотность упаковки ионов в кристаллах.— Ученые зап. Казанск. ун-та, 1957, ч. 27.
6. Евзикова Н. З. О структурных плотностях минералов.— Минералог. сб. Львовск. ун-та, 1966, № 20, вып. 3.
7. Лебедев В. И. «Парадокс» полиморфных модификаций SiO_2 и объемная роль Si и O в земной коре и верхней мантии.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва. ч. СУ, 1976, вып. 2, с. 145—153.
8. Лебедев В. И. Некоторые закономерности поведения кристаллического вещества в условиях земной коры и верхней мантии.— Вестник ЛГУ, 1976. № 6, с. 14—27.
9. Лебедев В. И. Ионно-атомные радиусы и их значение для геохимии и химии. Л.: Изд-во ЛГУ, 1969.
10. Ringwood A. E. Mineralogical constitution of the Deep Mantle.— J. Geophys. Res., 1962, v. 67, N 10.
11. Стингов С. М. О внутреннем строении Земли.— Геохимия, 1962, № 8.
12. Ringwood A. E. Phase transformations in the mantle.— Earth and Planet. Sci. Letters, 1969, v. 5, N 6.
13. Yda Y., Syono Y., Akimoto S. Effect of pressure on the lattice parameters of stichovite.— Earth a. Planet. Sci. Lett., 1967, v. 3, N 2, p. 216—218.
14. Бенделиани Н. А. О возможных структурных трансформациях в переходном слое мантии Земли.— Геохимия, 1969, № 3.
15. Wang Chi-Yuen. Density in the Earth.— Trans. Amer. Geophys. Union. 1971, v. 52, N 4.
16. Урусов В. С., Хитаров Н. И. Полиморфные переходы кремнезема в условиях нижней мантии Земли.— Геохимия, 1973, № 9.
17. Лебедев В. И. О строении и высокой устойчивости высокоплотных модификаций SiO_2 и $(\text{Fe, Mg})_2\text{SiO}_4$.— ДАН БССР, 1976, т. XX, № 2, с. 168—171.
18. Альтшуллер Л. В., Трунин Р. Ф., Симаков Г. В. Ударное сжатие периклаза и кварца и состав нижней мантии.— Изв. АН СССР. Физика Земли, 1965, № 10, с. 1—6.
19. Clendenen R. L., Drickamer H. G. Lattice parameters of nine oxides and sulfides as a function of pressure.— J. Chem. Phys., 1966, v. 44, N 1, p. 4223—4228.
20. Mizutani H., Hamano Y. Elastic — wave velocities of polycrystalline stishovite.— J. Geophys. Res., 1972, v. 77, N 20.
21. Трунин Р. Ф., Симаков Г. В., Подурец М. А., Мусеев Б. Н., Попов Л. В. Динамическая сжимаемость кварца и кварцита при высоких давлениях.— Изв. АН СССР, Физика Земли, 1971, № 1.
22. Kawai H., Mochizuki S., Fujita H. Densification of vitreous silica under static high pressures higher than 2 mb.— Phys. Lett., 1971, v. 34A, N 2.
23. Герман В. Н., Подурец А. М., Трунин Р. Ф. Синтез высокоплотной фазы двуокиси кремния в ударных волнах.— ЖЭТФ, 1973, т. 64, вып. 1.
24. Ringwood A. E., Reid A. F., Wadsley A. D. Highpressure KAlSi_3O_8 an aluminosilicate with sixfold coordination.— Acta Crystal, 1967, v. 23, pt. 6, p. 1093—1095.
25. Бацанов С. С. Структурная рефрактометрия. Изд-во МГУ, 1959.
26. Кондратьев В. Н. Структура атомов и молекул. М.: Госиздфизматлит, 1959.
27. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. 1949.
28. Евзикова Н. З., Ицксон Г. В. Структурная плотность решетки как показатель условий минералообразования.— Зап. Всес. минерал. об-ва. ч. XCVIII, 1969, вып. 2.