

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

В. Н. Ковалев

Московский государственный университет, г. Москва
kovvn99.msu16@gmail.com

Применение программного обеспечения в области вычислений твердости минералов и сверхтвердых материалов (научный руководитель проф. Н. Н. Еремин)

Твердость минералов и минеральных агрегатов привлекала людей еще на заре человеческой цивилизации и не потеряла своей актуальности до настоящего времени. Ранее это свойство использовалось для выбора подходящих материалов при создании орудий труда, затем методом царапания наши предки научились диагностировать и отличать минералы друг от друга, и в настоящий момент основы кристаллохимической теории твердости используются для синтеза сверхтвердых материалов.

Идею для данной работы автор почерпнул в своей курсовой работе, в которой путем компьютерных вычислений было доказано, что алмаз – самое твердое известное нам вещество. В настоящей работе изучена кристаллохимическая теория твердости, а именно, кристаллохимические факторы и вносимый ими вклад в формирование твердости минералов и материалов. Была выведена формула для расчета твердости минералов, включающая в себя воздействие каждого фактора. Здесь был рассмотрен программный код «USPEX» [Lyakhov, Oganov, 2011], который был апробирован на минералах, принадлежащих к группе шпинелей.

Т а б л и ц а

Вычисленные величины твердости минералов группы шпинелей

Название серии	Представитель	Твердость по Моосу	Твердость, ГПа
Алюмошпинелиды (серия шпинели)	Шпинель $MgAl_2O_4$	8–8.5	14.1268
	Герцинит $FeAl_2O_4$	7.5	12.4000
	Галаксит $MnAl_2O_4$	7.5	13.1056
	Ганит $ZnAl_2O_4$	7.5–8	13.4503
Ферришпинелиды (серия магнетита)	Магнезиоферрит $MgFe_2O_4$	5.5–6.5	11.3420
	Магнетит $FeFe_2O_4$	5.5–6.5	11.1564
	Якобсит $MnFe_2O_4$	5.5–6.5	11.1087
	Франклинит $ZnFe_2O_4$	5.5–6	10.7497
	Треворит $NiFe_2O_4$	5	8.1087
	Маггемит $\gamma-Fe_2O_3$	6	11.9969
Хромшпинелиды (серия хромита)	Магнезиохромит $MgCr_2O_4$	5.5	9.6395
	Хромит $FeCr_2O_4$	5.5	9.9342
Ванадишпинелиды	Кульсонит FeV_2O_4	4.5–5	6.8156

При выборке минералов также рассматривались кристаллохимические [Белов, 1976] и минералогические [Типоморфизм..., 1989] особенности данной группы минералов и ее серий. На основе формулы, лежащей в основе программного кода «USPEX», произведен расчет твердости минералов вышеупомянутой группы. Значения твердости, полученные при компьютерном вычислении, коррелируют со значением твердости тех же минералов по шкале Мооса (табл.).

Данный программный код является эмпирической интерпретацией теории твердости, и наши расчеты имеют недочеты, которые могут быть ликвидированы путем более детальных исследований твердости и тех величин, которые ее формируют. Решив данную проблему, можно будет определять твердость по заданным кристаллохимическим характеристикам и кристаллохимические параметры по имеющейся рассчитанной величине. Для производственной сферы решение понятия твердости облегчит синтез веществ с необходимым значением твердости и определит сферу их дальнейшего применения.

Литература

- Белов Н. В. Очерки по структурной минералогии. М.: Недра, 1976.
Типоморфизм минералов: Справочник / Под ред. Л. В. Чернышевой. М.: Недра, 1989.
Lyakhov A. O., Oganov A. R. Evolutionary search for superhard materials: methodology and applications to forms of carbon and TiO₂ // Physical Review B. 2011. Vol. 84. 092103.

А. В. Шахтиярова

*Российский университет дружбы народов, г. Москва
shakhtiyarova@bk.ru*

Текстуры руд верхних горизонтов Ново-Учалинского колчеданного месторождения, Южный Урал (научный руководитель д.г.-м.н. И. В. Викентьев)

В настоящей работе рассмотрены вопросы геологического строения Ново-Учалинского месторождения, текстурно-структурного и минерального разнообразия руд. Фактический материал собран автором при проведении полевых работ на месторождении при содействии геологической службы Учалинского ГОКа.

Ново-Учалинское медно-цинково-колчеданное месторождение находится на территории Учалинского района республики Башкортостан в 2 км южнее Учалинского месторождения. Месторождение было открыто в 1986 г. Межозерной ГРП треста «Уралцветметразведка». В настоящее время на северном фланге месторождения ведется детальная разведка с бурением скважин глубиной 100–120 м из подземных горных выработок.

Ново-Учалинское месторождение располагается в пределах Учалинского рудного поля, которое, в свою очередь, входит в состав Учалинско-Александринской структурно-формационной зоны [Пшеничный и др., 1999]. Учалинское рудное поле представляет собой колчеданоносную палеовулканическую постройку, осложненную кальдерами и эффузивно-экструзивными кремнекислыми аппаратами. Главный из таких вулканических аппаратов осложнен антиклинальной складкой, западное крыло