

**Кристаллохимические характеристики атомов при высоких давлениях и их влияние на характер химической связи в фазах мантии Земли**

**Научный руководитель – Оганов Артём Ромаевич**

***Йосимовска Анастасия Воиславовна***

*Студент (бакалавр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

*E-mail: anastasia.iosimovska@student.msu.ru*

В исследовании предпринята попытка построения кристаллохимической классификации элементов при различных давлениях: 0 ГПа, 200 ГПа, 500 ГПа. Актуальность исследования заключается в возможном объяснении распространённости элементов, уточнении состава ядра Земли.

Геохимическая классификация, предложенная Гольдшмидтом включает в себя литофильные, халькофильные, сидерофильные и атомфильные элементы.[1].

Нами выбраны реперные элементы: Mg и O - для литофильных элементов, Fe - для сидерофильных элементов, S - для халькофильных элементов. Организация химического пространства построена так, что элементы с аналогичными свойствами определяются в одинаковые группы. Каждый элемент можно представить в виде числа, включающего в себя атомный радиус, определённый как половина кратчайшего межатомного расстояния в релаксированной кубической структуре элемента [2], электроотрицательность, химическую жесткость, энергию атомизации [4].

Кратчайшее расстояние между числами элементов определяет принадлежность к одному из реперных. Таким образом, мы организуем химическое пространство, пользуясь правилом, что свойства простых соединений меняются с давлением так, что качественно меняется соотношение по базовым классам. Кроме того, оценено изменение заряда в следующих системах: SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CaO, MgO.

При давлении 0 ГПа полученные данные коррелируются с классификацией Гольдшмидта. При повышении давления большинство элементов становятся сидерофильными. Элементы изменяют свое поведение, следовательно, повышается их концентрация в ядре. Из закона Берча [3] следует, что средняя атомная масса ядра составляет 49,3 [5], в то время как для чистого железа она равна 55,85. Для объяснения этих различий мы соглашаемся с предположениями, что в составе ядра содержится порядка 10-20 мол. % лёгких элементов.

**Источники и литература**

- 1) Урусов В. С. " Естественный отбор" минеральных видов //Записки Российского минералогического общества. – 2010. – Т. 139. – №. 1. – С. 89-110.
- 2) Allahyari Z., Oganov A. R. Nonempirical definition of the Mendeleev numbers: Organizing the chemical space //The Journal of Physical Chemistry C. – 2020. – Т. 124. – No. 43. – С. 23867-23878
- 3) Birch F J. Geophys. Res. 57 227 (1952)
- 4) Dong X. et al. Electronegativity and chemical hardness of elements under pressure //Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2022. – Т. 119. – No. 10. – С. e2117416119
- 5) Poirier J-P Introduction to the Physics of the Earth's Interior 2nd ed. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000