

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННОГО И ХИМИЧЕСКОГО РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ МОНАЦИТА

© 2012 г. Н. С. Виноградова, А. В. Поротников, Ю. В. Щапова, С. Л. Вотяков

В последние годы активно развивается метод химического (неизотопного) микронзондового датирования U-Th-минералов (см. например, [8, 10, 11]). Метод корректен при условии, что содержание нерадиоогенного Pb в минерале пренебрежимо мало, и его U-Th-Pb-система закрытая. Наиболее часто датируются монациты: в них содержание нерадиоогенного Pb менее 1 ppm, а потери радиоогенного реализуются лишь в отдельных случаях. Несмотря на широкий опыт использования метода, остается нерешенным ряд вопросов, касающихся исследования в нем особенностей кристаллохимии и изоморфизма ионов U, Th, Pb, а также физики радиационных эффектов и поиска на этой основе материаловедческих критериев замкнуто-

сти его U-Th-Pb-системы. Сложность большинства реальных физико-химических процессов при радиационном разрушении минералов не позволяет решить описанные проблемы исключительно экспериментальным путем. Представляется перспективным использовать для решения этого вопроса расчетные методы полуэмпирического структурного моделирования.

Цель работы – компьютерное моделирование идеальной структуры и оптимизация на этой основе параметров потенциалов межатомного взаимодействия в монаците; моделирование примесных и собственных дефектов структуры монацита – одиночных изоморфных примесей U^{4+} , Th^{4+} , Ca^{2+} в структурной позиции Ce^{3+} , а также Si^{4+} в позиции P^{5+} , парных дефектов $U^{4+}(Th^{4+})/Ca^{2+}$ и $U^{4+}(Th^{4+})/Si^{4+}$, одиночных вакансий атомов Ce, P и O и сложных (двойных) дефектов–вакансия катиона/вакансия кислорода; расчет пороговых энергий смещения атомов в радиационных процессах; оценка химического и радиационного факторов в разупорядочении структуры минерала.

Методика расчета. Для расчетов равновесных структур монацита использована программа GULP [5–7]; детали расчетной процедуры описаны в [2].

Таблица 1. Параметры межатомного потенциала Букингема для расчета структуры монацита

Параметр	Взаимодействующие атомы					
	P–O	Ce–O	O–O	U–O	Th–O	Ca–O
A, эВ	877.34	3096.1	22764.0	1055.0	1144.6	1227.7
ρ , Å	0.3594	0.31761	0.149	0.3949	0.3949	0.3372
C, эВ·Å	0	0	27.879	0	0	0

Таблица 2. Расчетные и экспериментальные характеристики монацита

Характеристика	Значение		
	расчет	эксперимент*	δ^{**} , %
a, Å	6.716	6.788	–1.1
b, Å	6.924	7.0164	–1.3
c, Å	6.517	6.465	0.8
β , °	105.5	103.4	2.0
Объем V, Å ³	299.5	299.49	0.0
Плотность г/см ³	5.21	5.21	0.0
P–O _i , Å	1.521 (O1)	1.530	–0.9
	1.558 (O2)	1.546	1.2
	1.532 (O3)	1.539	–0.7
	1.518 (O4)	1.535	–1.7
	2.460 (O1)	2.452	0.8
	2.527 (O1')	2.534	–0.7
	2.573 (O2)	2.563	1.0
	2.644 (O2')	2.646	–0.2
	2.776 (O2'')	2.783	–0.7
	2.481 (O3)	2.467	1.4
Ce–O _i , Å	2.685 (O3')	2.684	0.1
	2.455 (O4)	2.446	0.9
	2.526 (O4')	2.524	0.2

Примечание. * – данные [9]; ** – $\delta = [(M_{\text{расч}} - M_{\text{экс}})/M_{\text{экс}}] \times 100\%$ – отклонение расчетных параметров от экспериментальных значений.

Моделирование идеальной структуры монацита и оптимизация параметров потенциалов межатомного взаимодействия

Моделирование структуры монацита проведено в ионном приближении; использованы кулоновский потенциал притяжения-отталкивания и короткодействующий потенциал Букингема; для учета эффектов поляризации применена оболочечная модель атома кислорода [2]. Численные параметры, входящие в выражения для потенциалов, были определены путем итерационного сближения (“подгонки”) расчетных и экспериментальных значений структурных и физических характеристик монацита; использованные значения указаны в табл. 1. Заряды ионов были приняты равными формальным валентностям; заряд “оболочки” атома кислорода составлял $-2.8690e$; параметр взаимодействия “остов”–“оболочка” был равен $74.92 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^2$ [4]. Результаты расчета структурных характеристик бездефектного монацита и их сопоставление с экспериментальными данными представлены в табл. 2; наблюдается удовлетворительное совпадение результатов расчета и эксперимента; в частности, от-

клонение расчетных постоянных решетки от экспериментальных данных [9] составляет не более 3%. Таким образом, значения параметров потенциалов достаточно корректно воспроизводят структуру и могут быть использованы и при анализе дефектов примесной и собственной природы.

Моделирование дефектной структуры монацита с одиночными изоморфными примесями U^{4+} , Th^{4+} , Ca^{2+} и Si^{4+} в структурных позициях Se^{3+} и P^{5+} , с двойными дефектами $U^{4+}(Th^{4+})/Ca^{2+}$ и $U^{4+}(Th^{4+})/Si^{4+}$

Фрагмент структуры монацита, иллюстрирующий особенности его ближнего порядка, представлен на рис. 1. В монаците катионы РЗЭ, U, Th, Ca и др. координированы неправильным полиэдром из 9 атомов O; длины всех связей Me–O различны (2.446–2.783 Å для $SePO_4$); в структуре имеется четыре типа неэквивалентных атомов O1–O4. Изолированные искаженные тетраэдры PO_4 (длины связей 1.530–1.546 Å для $SePO_4$) связывают полиэдры в смешанные цепи в направлении оси *c*. Низкая симметрия структуры (моноклинная сингония, пространственная группа $P2_1/n$) и нерегулярность межатомных расстояний создают предпосылки для “подстраивания” (релаксации) позиций к особенностям примесных катионов – их размеру, заряду, электронному строению, что приводит к высокой изоморфной емкости монацита [3]. Вхождение в структуру гетеровалентных примесей Th^{4+} и U^{4+} требует компенсации их избыточного заряда, что осуществляется ионами Si^{4+} и (или) Ca^{2+} при изоморфизме хаттонитового $LREE^{3+}+P^{5+} \leftrightarrow Th^{4+}(U^{4+})+Si^{4+}$ и (или) чералитового $2LREE^{3+} \leftrightarrow Th^{4+}(U^{4+})+Ca^{2+}$ типов. Нами рассмотрен случай как одиночных гетеровалентных примесей U^{4+} , Th^{4+} , Ca^{2+} и Si^{4+} с нелокальной зарядовой компенсацией при изоморфизме чералитового и хаттонитового типа, так и случай парных дефектов $U^{4+}(Th^{4+})/Ca^{2+}$ и $U^{4+}(Th^{4+})/Si^{4+}$ с локальной зарядовой компенсацией при расположении примесей в полиэдрах, соединенных между собой общими ребрами.

Для всех случаев изоморфных замещений в монаците установлены значительные искажения размеров и формы полиэдров MeO_9 (табл. 3); наибольшие искажения катионной позиции наблюдаются при замещениях $U^{4+} \rightarrow Ce^{3+}$: в них значения среднеквадратичных отклонений межатомных расстояний S_{Me-O} от таковых в беспримесном кристалле максимальные. Замещения $Si^{4+} \rightarrow P^{5+}$ приводят к существенному (на 0.1 Å) увеличению размеров соответствующего тетраэдра. При этом изменяются и постоянные решетки минерала: в монаците с примесями Th^{4+} (Ca^{2+}) все они увеличиваются, в монаците с U^{4+} (Si^{4+}) часть из них увеличивается, а часть – уменьшается (см. табл. 3). Для парно-

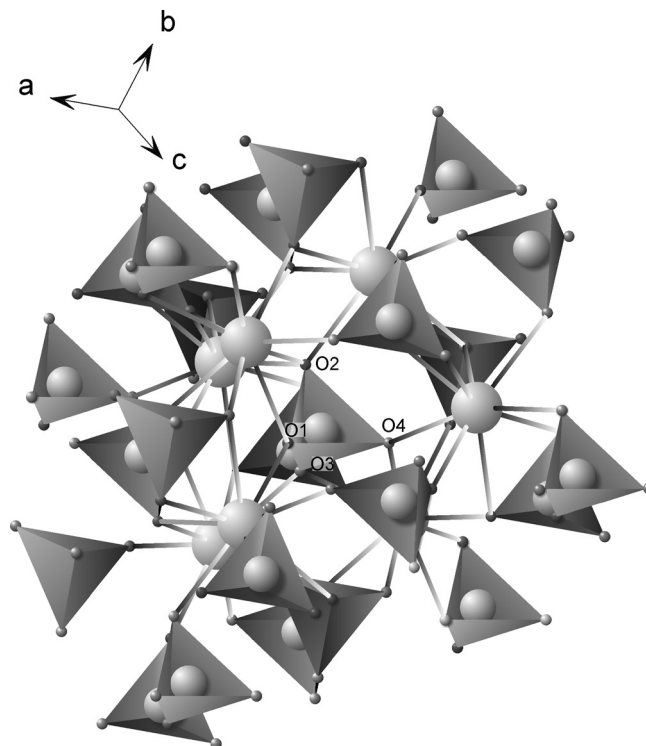


Рис. 1. Фрагмент структуры монацита.

PO_4 показаны в виде полиэдров, SeO_9 – в виде атомов со связями. O1–O4 – структурно неэквивалентные атомы кислорода в монаците.

го дефекта $U^{4+}(Th^{4+})/Ca^{2+}$ степень искажения полиэдров несколько ниже, а для $U^{4+}(Th^{4+})/Si^{4+}$ несколько выше, чем для одиночных примесей $U^{4+}(Th^{4+})$ и Ca^{2+} (см. табл. 3). Энергии связи компонентов парных дефектов U^{4+}/Ca^{2+} , Th^{4+}/Ca^{2+} и U^{4+}/Si^{4+} составляют 0.5, 0.6 и 0.8 эВ.

Наличие примесных ионов приводит к искажению длин связей P–O в тетраэдрах в окружении примеси и к значительному разупорядочению фосфоркислородной подрешетки монацита; степень этого разупорядочения можно количественно характеризовать среднеквадратичным отклонением S_{P-O_j} межатомных расстояний от таковых в беспримесном кристалле (см. табл. 3). Наибольшие значения S_{P-O_j} фиксируются для связи P–O2, то есть эта связь испытывает максимальную релаксацию при введении примесей, что может быть связано с особенностями координации атомов O2 атомом P и тремя атомами Se по сравнению с атомами O1, O3 и O4, которые окружены P и двумя атомами Se. Установлено, что искажения структуры фосфоркислородной подрешетки вокруг примесных ионов $U^{4+}(Th^{4+})$ в монаците превышают таковые для кремнекислородной подрешетки в цирконе, в частности, для U^{4+} в цирконе $S_{Si-O} = 0.007$ Å [1], а в монаците $S_{P-O} = 0.011–0.046$ Å; представляется, что это связано с различным характером изоморфизма этих примесей – гетеровалентным в монаците и изовалент-

Таблица 3. Расчетные параметры структуры монацита с примесями U⁴⁺, Th⁴⁺, Ca²⁺, Si⁴⁺ и вакансиями (V) атомов Се, Р и О1-О4

N	Тип дефекта	Расчетные параметры структуры							
		S _{Me-O*} , Å	\tilde{a}^{**} , Å	\tilde{b}^{**} , Å	\tilde{c}^{**} , Å	S _{P-Oj***} , Å			
						O1	O2	O3	O4
Одиночные примесные дефекты									
1	U ⁴⁺	0.1291	6.732 (-)	6.871 (-)	6.675 (+)	0.021	0.046	0.011	0.026
2	Th ⁴⁺	0.0882	6.773 (+)	6.915 (+)	6.712 (+)	0.020	0.046	0.019	0.028
3	Ca ²⁺	0.1155	6.776 (+)	6.918 (+)	6.694 (+)	0.016	0.040	0.015	0.023
4	Si ⁴⁺	–	6.812 (+)	6.469 (-)	6.623 (-)	0.013	0.034	0.006	0.020
Двойные примесные дефекты									
5	U ⁴⁺ /Ca ²⁺	0.109/0.098	6.776 (+)	6.873 (-)	6.689 (+)	0.015	0.043	0.011	0.028
6	Th ⁴⁺ /Ca ²⁺	0.070/0.100	6.779 (+)	6.916 (+)	6.696 (+)	0.015	0.043	0.011	0.028
7	U ⁴⁺ /Si ⁴⁺	0.136	6.924 (+)	6.658 (+)	6.766 (+)	0.016	0.044	0.013	0.025
Одиночные вакансии									
8	V _{O1} ^{••}	–	6.969(+)	7.084(+)	7.012(+)	0.045	0.030	0.025	0.021
9	V _{O2} ^{••}	–	6.984(+)	7.043(+)	7.002(+)	0.045	0.027	0.024	0.024
10	V _{O3} ^{••}	–	7.014(+)	7.060(+)	7.021(+)	0.046	0.038	0.021	0.026
11	V _{O4} ^{••}	–	6.962(+)	7.090(+)	7.013(+)	0.045	0.026	0.025	0.023
12	V _{Ce} ^{'''}	–	6.897(+)	7.021 (+)	6.779(+)	0.023	0.068	0.040	0.035
13	V _P ^{''''}	–	6.609(-)	6.684(-)	6.283(-)	0.033	0.048	0.032	0.032
Двойные вакансии катион/кислород									
14	V _{Ce/V_{O1}} ^{''''••} (2.460)	–	6.768(-)	6.704(+)	6.941(-)	0.005	0.012	0.017	0.023
15	V _{Ce/V_{O1}} ^{''''••} (2.527)	–	6.838(+)	6.963(+)	6.701(-)	0.010	0.012	0.006	0.032
16	V _{Ce/V_{O2}} ^{''''••} (2.573)	–	6.894(+)	6.724(+)	6.740(-)	0.015	0.036	0.002	0.028
17	V _{Ce/V_{O2}} ^{''''••} (2.644)	–	6.998(+)	6.945(-)	6.750(+)	0.019	0.047	0.013	0.026
18	V _{Ce/V_{O2}} ^{''''••} (2.776)	–	6.746(-)	6.973(-)	6.297(Ц)	0.015	0.035	0.013	0.027
19	V _{Ce/V_{O3}} ^{''''••} (2.481)	–	6.879(+)	6.880(-)	6.882(+)	0.013	0.013	0.015	0.032
20	V _{Ce/V_{O3}} ^{''''••} (2.585)	–	6.835(+)	6.961(-)	6.709(+)	0.016	0.009	0.007	0.019
21	V _{Ce/V_{O4}} ^{''''••} (2.455)	–	6.474(-)	7.003(-)	6.650(+)	0.019	0.015	0.008	0.009
22	V _{Ce/V_{O4}} ^{''''••} (2.526)	–	6.872(+)	6.940(-)	6.807(+)	0.018	0.010	0.010	0.004

Примечание. * $S_{Me-O} = \sqrt{\frac{\sum_i (\Delta R_{Me})^2}{9}}$ – усредненное среднеквадратичное значение отклонения расстояния Me–O_i от регулярного значения Ce–O_p, где Me – примесный катион в позиции Ce и $\Delta R_{Me} = R(Me-O_i) - R(Ce-O_i)$; ** знак + (–) означает увеличение (уменьшение) \tilde{a} , \tilde{b} , \tilde{c} – межатомных расстояний в сравнении с идеальными, совпадающих в идеальной решетке с векторами элементарных трансляций; *** $S_{P-Oj} = \sqrt{\frac{\sum_i (r_i - r_0)^2}{n}}$ – среднеквадратичные отклонения расстояний P–O_j (j = 1–4) в окружении дефекта от регулярных значений в решетке (здесь r₀ и x_i – регулярное межатомное расстояние P–O_j (j = 1–4) и расстояния P–O_j в ближайших к дефекту PO₄-тетрадрах, соответственно; n – количество таких расстояний в ближайшем окружении дефекта).

ным в цирконе. Полученные модельные результаты позволяют интерпретировать природу значительного уширения рамановских спектров монацита [1] со сложным химическим составом.

Моделирование дефектной структуры монацита с вакансиями

Радиационное повреждение структуры монацита моделировали вакансиями V_{O1}^{••}–V_{O4}^{••} атомов кислорода О1-О4 (рис. 2), вакансиями V_{Ce}^{'''} и V_P^{''''}

атомов Се и Р, а также двойными вакансионными дефектами V_{Ce/V_{O1}}^{''''••}(r_i) – V_{Ce/V_{O4}}^{''''••}(r_i), различающихся взаимным расположением компонентов двойного дефекта в пределах одного полиэдра (r_i – расстояние между ионами Се³⁺ и O²⁻ в исходном бездефектном полиэдре CeO₉). Релаксация структуры вокруг кислородной вакансии в монаците приводит к смещению центрального атома фосфора в тетраэдре PO₄, содержащем вакансию, по направлению к плоскости трех оставшихся атомов О с образованием пирамиды PO₃; аналогичный ре-

зультат получен нами для кислородной вакансии в цирконе [2]. Структура дефекта PO_3 зависит от типа атома кислорода, который формирует вакансию; минимальный сдвиг атома Р из регулярной позиции наблюдается при образовании вакансии атома O_2 , вероятно, вследствие особенностей его координации. Показано, что вакансии всех структурных типов атомов O_1 – O_4 могут приводить к увеличению постоянных решетки (см. табл. 3), причем это увеличение более значимо, чем в монаците с изоморфными примесями U^{4+} , Th^{4+} , Ca^{2+} . Степень искажения фосфоркислородной подрешетки за счет вакансий различных типов атомов О практически одинакова и близка к таковой при наличии примесей; основной вклад в разупорядочение во всех случаях вносят связи P-O_1 (P-O_2). Искажения подрешетки монацита в окружении вакансий атомов О превышают таковые для вакансии О в цирконе: значение $S_{\text{P-O}_j} = 0.021\text{--}0.046 \text{ \AA}$ в монаците, а в цирконе – $S_{\text{Si-O}} = 0.014 \text{ \AA}$ [1].

При наличии катионных вакансий расстояния между атомами кислорода в дефектных полиэдрах увеличиваются; при этом возможно как увеличение постоянных решетки монацита (случай вакансии Се), так и их уменьшение (случай вакансии Р). Установлено, что образование вакансий атомов Р и Се приводит к заметному искажению PO_4 -тетраэдров в их ближайшем окружении, причем в наибольшей степени релаксируют связи P-O_2 , что характерно и для случая примесных атомов. Значения энергии образования пар не взаимодействующих дефектов вида “вакансия + междоузельный атом” (дефектов по Френкелю), рассчитанные аналогично случаю подобных дефектов в цирконе [2], составляют 8.2, 16.3 и 5.0 эВ для Се, Р и О, соответственно. Вероятность образования вакансий атомов О получена наибольшей, вакансий Р – наименьшей; этот результат согласуется с представлениями о доминирующей роли кислородных вакансий в фосфатах и силикатах.

Анализ релаксации окружения сложных (двойных) дефектов вакансии катиона/вакансия кислорода $V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}_1}^{\bullet\bullet}(\tau)$ показал значительную перестройку структуры ближайшего окружения таких дефектов и выявил ряд особенностей матрицы монацита по сравнению с цирконом. Так, образование двойного дефекта $V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}_1}^{\bullet\bullet}$ (2.527 \AA), согласно расчету, не является энергетически выгодным; в процессе расчета вакансия кислородного атома O_1 “рекомбинирует” с ионом кислорода из позиции O_3 с образованием стабильного дефекта $V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}_3}^{\bullet\bullet}$. Кроме того, в отличие от циркона, в котором релаксация структуры окружения двойных вакансионных дефектов приводит к образованию в решетке новых связей Si-O-Si (отсутствующих в бездефектном кристалле) и “полимеризации” тетраэдров [2], в монаците не зафиксировано какого-либо образования фосфорно-кислородных “мостиков” между

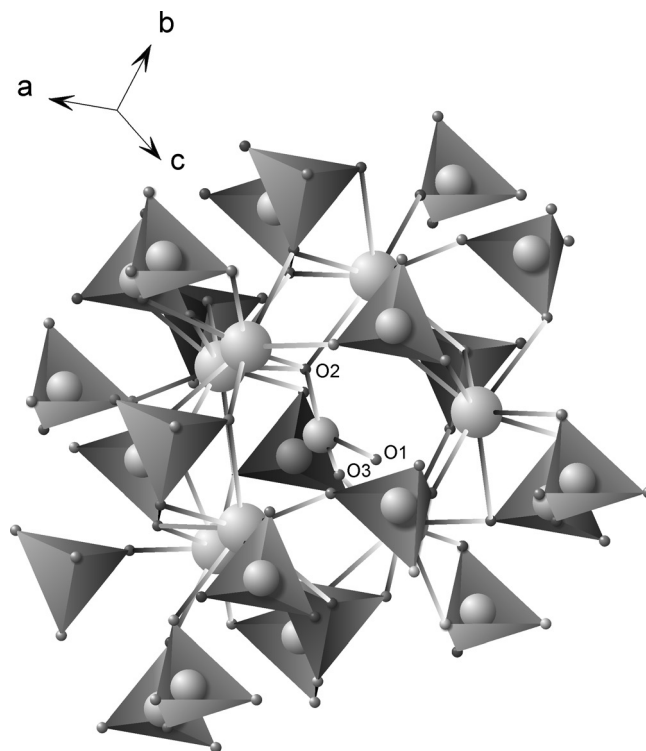


Рис. 2. Фрагмент структуры монацита с вакансией атома O_4 .

тетраэдрами.

Рассчитанные значения ΔE разности структурной энергии решетки с дефектом и без него приведены в табл. 4. Рассчитанные на их основе значения энергии образования дефектов Се, О и Р по Френкелю составляют 8.2, 5.0 и 16.3 эВ соответственно; указанные значения типичны для оксидов и близки по порядку величины к таковым для циркона. Повышенное значение энергии образования дефекта Р по Френкелю согласуется с представлениями о малой вероятности образования вакансии этого атома в жесткой структурной единице – фосфорнокислородном тетраэдре. С использованием значений ΔE рассчитаны также величины энергии связи компонентов сложных (двойных) дефектов; указанные энергии (1.7–3.2 эВ) несколько ниже значений энергии аналогичных дефектов в цирконе (3.5–5.2 эВ [2]). Из табл. 4 видно, что $E_{\text{св}}$ зависит от взаимного расположения компонентов; максимальной энергией связи компонентов характеризуется $V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}_1}^{\bullet\bullet}$ (2.527 \AA), при образовании которого происходит значительная структурная перестройка ближайшего окружения, минимальной – $V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}_2}^{\bullet\bullet}$ (2.644). С использованием значений энергии образования дефектов $\Delta E_{\text{нерел}}$, вычисленных без релаксации ближайшего окружения, как описано в [2], нами впервые рассчитаны значения пороговых энергий смещения атомов Се, Р и О в монаците (35.3, 123.7 и 30.7 эВ, соответственно), которые являются важной характеристикой взаимодействия излу-

Таблица 4. Значения разности структурной энергии решетки без дефекта и с дефектом, вычисленные без релаксации ближайшего окружения ($\Delta E_{\text{нерел}}$) и с его релаксацией (ΔE), а также значения энергии связи ($E_{\text{св}}$) компонентов в двойных дефектах

N	Дефект	ΔE , эВ	$\Delta E_{\text{нерел}}$, эВ	$E_{\text{св}}$, эВ
1	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}$	46.0	68.1	–
2	V_{P}^{IV}	165.5	266.9	–
3	$V_{\text{O}1}^{\bullet\bullet}$	20.9	38.3	–
4	$V_{\text{O}2}^{\bullet\bullet}$	20.4	–	–
5	$V_{\text{O}3}^{\bullet\bullet}$	20.5	–	–
6	$V_{\text{O}4}^{\bullet\bullet}$	20.5	–	–
7	$\text{Ce}_i^{\bullet\bullet\bullet}$	–29.6	2.5	–
8	$\text{P}_i^{\bullet\bullet\bullet}$	–132.9	–19.5	–
9	O_i^{\bullet}	–10.1	23.0	–
10	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}1}^{\bullet\bullet}$ (2.460)	64.2	–	2.70
11	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}1}^{\bullet\bullet}$ (2.527)	63.7	–	3.20
12	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}2}^{\bullet\bullet}$ (2.573)	64.3	–	2.10
13	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}2}^{\bullet\bullet}$ (2.644)	64.7	–	1.70
14	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}2}^{\bullet\bullet}$ (2.776)	63.8	–	2.60
15	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}3}^{\bullet\bullet}$ (2.481)	63.7	–	2.80
16	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}3}^{\bullet\bullet}$ (2.685)	63.7	–	2.80
17	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}4}^{\bullet\bullet}$ (2.455)	63.6	–	2.90
18	$V_{\text{Ce}}^{\text{IV}}/V_{\text{O}4}^{\bullet\bullet}$ (2.526)	64.2	–	2.30

чения с веществом и позволяют проводить численные оценки концентрации дефектов, возникающих в минерале при облучении.

Выводы. Определены параметры межатомных потенциалов, позволяющие выполнять численное моделирование дефектной структуры монацита. Установлено, что при образовании одиночных изоморфных примесных дефектов U^{4+} , Th^{4+} , Ca^{2+} в структурной позиции Ce^{3+} , а также Si^{4+} в позиции P^{5+} , парных дефектов $\text{U}^{4+}(\text{Th}^{4+})/\text{Ca}^{2+}$ и $\text{U}^{4+}(\text{Th}^{4+})/\text{Si}^{4+}$, одиночных вакансий атомов Ce, P и O и сложных (двойных) дефектов–вакансия катиона/вакансия кислорода положение ионов первой и второй координационных сфер существенно изменяется по сравнению с идеальной решеткой. Выявлено влияние перечисленных дефектов на искажения полиэдров, содержащих примесный катион, и на разброс межатомных расстояний фосфорнокислородной подрешетки монацита в области окружения дефекта. Показано, что структурное разупорядочение фосфорно-кислородной подрешетки монацита в большинстве случаев изоморфизма превышает разупорядочение кремнекислородной подрешетки циркона. Структурные искажения, возникающие в монаците за счет примесных и собственных дефектов, близки по величине,

тогда как в цирконе роль вакансионных дефектов более значительна, чем примесных. В отличие от циркона, в монаците не зафиксированы какие-либо фосфорно-кислородные “мостики” между тетраэдрами при формировании двойных вакансионных дефектов. Рассчитаны энергии образования дефектов по Френкелю (8.2, 16.3 и 5.0 эВ для Ce, P и O, соответственно) и пороговые энергии смещения атомов в монаците (35.3, 123.7 и 30.7 эВ для Ce, P и O, соответственно).

Работа выполнена в рамках федеральной программы “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” (контракт № 02.740.11.0727), а также программы Президиума РАН 23 (проект № 12-П-5-1020), междисциплинарного проекта УрО РАН № 12-М-235-2063 и при поддержке гранта РФФИ № 11-05-00035.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Вотьяков С.Л., Щапова Ю.В., Хиллер В.В.* Кристаллохимия и физика радиационно-термических эффектов в ряде U-Th-содержащих минералов как основа для их химического микрозондового датирования. Екатеринбург: УрО РАН, 2011 г. 336 с.
2. *Замятин Д.А., Поротников А.В., Щапова Ю.В., Вотьяков С.Л.* Структура и свойства радиационных дефектов в цирконе по данным компьютерного моделирования // Ежегодник-2011. Тр. ИГГ УрО РАН. Вып. 159. 2012. С. 229–235.
3. *Boatner L.A.* Synthesis, structure and properties of monazite, pretilite and xenotime // In: Phosphates. Reviews in Mineralogy and Geochemistry. 2003. V. 48. P. 87–122.
4. *Catlow C.R.A.* Library: http://www.ri.ac.uk/DFRL/research_pages/resources/Potential_database/O/index.html.
5. *Gale J.D.* GULP: a computer program for the symmetry-adapted simulation of solids // J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1997. V. 93 (4). P. 629–37.
6. *Gale J.D.* GULP: Capabilities and prospects // Z. Kristallogr. 2005. V. 220. P. 552–554.
7. *Gale J.D., Rohl A.L.* The General Utility Lattice Program // Mol. Simul. 2003. V. 29. P. 291.
8. *Montel J.-M., Foret S., Veschambre M. et al.* Electron microprobe dating of monazite // Chem. Geol. 1996. V. 131. P. 37–53.
9. *Ni Y., Hughes J.M., Mariano A.N.* Crystal chemistry of the monazite and xenotime structures // Amer. Miner. 1995. V. 80. P. 21–26.
10. *Rhede D., Wendt I., Forster H.-J.* A three-dimensional method for calculating independent chemical U/Pb- and Th/Pb-ages of accessory minerals // Chem. Geol. 1996. V. 130. P. 247–253.
11. *Suzuki K., Adachi M.* Denudation history of the high T/P Ryoike metamorphic belt, southwest Japan: constraints from CHIME monazite ages of gneisses and granitoids // J. Metamorph. Geol. 1998. V. 16. P. 23–37.