



Fisica dei minerali e termodinamica computazionale dell'interno della Terra

Computational mineral physics of the Earth's deep interior

Contenuti

Le proprietà fisiche e termodinamiche dei minerali dell'interno della Terra sono fondamentali per la comprensione dei processi dinamici e dell'evoluzione chimica del nostro Pianeta. Questo ambito di ricerca ha come obiettivo l'indagine e la comprensione in chiave chimico-fisica e termodinamica delle relazioni di stabilità, delle transizioni di fase, delle proprietà elastiche, dei processi di fusione e degli equilibri solido-fuso-fluido dei principali minerali dell'interno della Terra in un vasto range di condizioni P-T attraverso calcoli *ab initio* e modelli computazionali su larga scala.

Contents

Physical and thermodynamic properties of Earth's mantle minerals are crucial to understand the dynamics and chemical evolution of our planet. The main goal of this research is to gain original insights on stability relations, phase transitions, elastic properties, melting processes and solid-melt-fluid phase equilibria of deep Earth's minerals in a broad range of P-T conditions by *ab initio* calculations and multi-scale computational and thermodynamic modelling.

Parole chiave: Termodinamica computazionale, Calcolo *ab initio*, Terra profonda

Partecipanti del DISTAV. DOCENTI: Belmonte Donato. DOTTORANDI: Mattia La Fortezza

Enti finanziatori MIUR PRIN, Ateneo

Publicazioni recenti relative alla ricerca

1. Belmonte, D. (2017) First principles thermodynamics of minerals at HP-HT conditions: MgO as a prototypical material. *Minerals*, 7, 183, doi:10.3390/min710018.
2. De La Pierre, M., and Belmonte, D. (2016) Ab initio investigation of majorite and pyrope garnets: Lattice dynamics and vibrational spectra. *American Mineralogist*, 101, 162-174.
3. Belmonte, D., Ottonello, G., Vetuschi Zuccolini, M., and Attene, M. (2017) The system MgO-Al₂O₃-SiO₂ under pressure: A computational study of melting relations and phase diagrams. *Chemical Geology*, 461, 54-64,81-92.
4. Belmonte, D., Ottonello, G., and Vetuschi Zuccolini, M. (2017) Ab initio-assisted assessment of the CaO-SiO₂ system under pressure. *CALPHAD*, 59, 12-30.
5. Erba, A., Mahmoud, A., Belmonte, D., and Dovesi, R. (2014) High pressure elastic properties of minerals from ab initio simulations: The case of pyrope, grossular and andradite silicate garnets. *Journal of Chemical Physics*, 140, 124703.