Компьютерное моделирование бинарных твердых растворов системы корунд-гематит-эсколаит[1]

Талис Роман Александрович[2]
Студент
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: *murmot@mail.ru*

Природные кристаллы являются достаточно сложными объектами, представляющими собой твердые растворы переменного состава. Однако, в последние годы появились возможности точного предсказания свойств смешения твердых растворов путем атомистического компьютерного моделирования. Одним из основных подходов при этом является использование полуэмпирических потенциалов межатомного взаимодействия, которое позволяет получить необходимые сведения о свойствах смешения твердых растворов.

В настоящей работе мы применили разработанную нашей группой методику моделирования твердых растворов замещения [1-3] для оксидов системы корунд-гематит-эсколаит. Компьютерное моделирование осуществлялось при помощи программы GULP версии 3.0 [4]. Это позволило существенно улучшить по сравнению с [3] моделирование крайних членов изоморфных рядов путем введения для атомов металлов оболочечной модели, имитирующей несферичность электронной оболочки.

В ходе нашей работы мы получили ряд результатов, а именно:

1. Подгонкой под структурные, упругие и термодинамические свойства чистых компонентов при 298 K и 1 атм. разработан согласованный набор парных потенциалов для систем корунд-эсколаит-гематит.
2. Проведено моделирование термодинамических свойств (энтропия, теплоемкость) в интервале температур 298-1500 K крайних членов изоморфных рядов (корунд-эсколаит, корунд-гематит, гематит-эсколаит).
3. Проведено моделирование энергетики точечных дефектов в чистых компонентах.
4. Сконструированы в рамках сверхячейки $4a \times 4b \times 1c$ (19×19×13 Å) конфигурации составов 1:5, 1:2, 1:1, 2:1, 5:1, отвечающих неупорядоченному твердому раствору.
5. Рассчитаны свойства смешения (энтальпия, колебательная энтропия, объем, изменение модуля сжатия) для различных составов твердого раствора.
6. Проведен расчет областей стабильности твердого раствора, получены значения критических температур.
7. Для составов 1:1 сделаны анализы локальной структуры твердых растворов (корунд-эсколаит, корунд-гематит, гематит-эсколаит). Получены и проанализированы гистограммы распределений межатомных расстояний Me-O, Me-Me и O-O для первых двух координационных сфер.

Литература

1. Урусов В.С., Петрова Т.Г., Ерёмин Н.Н. (2003) Моделирование локальной структуры и свойств твердых растворов CaO-SrO и SrO-BaO. // Доклады РАН. Т.392. №1, стр1-6.
2. Урусов В.С., Еремин Н.Н., Петрова Т.Г. (2006) 4-ая Национальная кристаллохимическая конференция. Черноголовка // Сборник тезисов. Стр. 203.
3. Урусов В.С., Ерёмин Н.Н., Талис Р.А. (2007) Международная конференция «Спектроскопия и кристаллохимия минералов». Екатеринбург // Сборник тезисов. стр. 106-107.
4. Gale J.D., Rohl A.L. (2003) The General Utility Lattice Program. // Mol. Simul., V29, p. 291.

[1] - Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 05-05-64721) и фонда поддержки ведущих научных школ (грант № НШ-8091.2005.5).
[2] - автор выражает признательность научным руководителям Урусову В.С. и Ерёмину Н.Н. за помощь в выполнении работы и при подготовке тезисов.