

Структурное моделирование вхождения примесей алюминия в CaSiO_3 и MgSiO_3 -перовскиты при термодинамических условиях мантии Земли

Марченко Екатерина Игоревна

Студент (магистр)

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

E-mail: marchenko-ekaterina@bk.ru

В настоящее время строение и минералогический состав мантии Земли вызывает все больший интерес среди ученых по всему миру, о чём свидетельствует возрастание числа научных работ, посвященных этой теме. Однако, несмотря на повышенную активность в сфере изучения состава мантии Земли, на сегодняшний день остается много вопросов как в минералогии, так и в геохимии глубинных оболочек. В частности, геохимическое поведение Ca в мантии до настоящего времени однозначно не определено.

Целью настоящего исследования является компьютерное моделирование структур, физических свойств и фазовой стабильности Ca- и Mg- перовскитов при вхождении примесей Al в эти кристаллические структуры. Расчеты проводились полуэмпирическими методами в программе GULP 4.0 с использованием двух наборов потенциалов межатомного взаимодействия [1, 3] и их последующей оптимизацией. В работе проведен анализ стабильности различных модификаций CaSiO_3 и MgSiO_3 в условиях мантии Земли, воспроизведена фазовая диаграмма для CaSiO_3 . Были рассчитаны энергии изолированных дефектов для CaSiO_3 и MgSiO_3 при различных термодинамических параметрах. Для расчетов энергии вхождения атомов Al в данные структуры были сконструированы сверхячейки $3 \times 3 \times 3$ (540 атомов) для MgSiO_3 и $5 \times 5 \times 5$ (625 атомов) для CaSiO_3 . Исследование энергии вхождения Al в структуру MgSiO_3 проводилось по нескольким схемам:

- 1) $\text{Al}(\text{Mg})+\text{Al}(\text{Si})$; 2) $\text{Al}(\text{Si})+\text{Al}(\text{Si})+\text{V}(\text{O})$; 3) $\text{Al}(\text{Si})+\text{Al}(\text{Si})+\text{V}(\text{O})$ (дефекты рядом)

Результаты расчетов показали, что для MgSiO_3 наиболее выгодной является схема 1), что согласуется с данными квантовохимических расчетов [2]. Для CaSiO_3 использовалась схема замещения $\text{Al}(\text{Si})+\text{Al}(\text{Si})+\text{V}(\text{O})$. Энергии вхождения атомов Al в позицию Si для CaSiO_3 , возрастают с повышением давления с 16.181 эВ (при 0 ГПа) до 19.165 эВ (при 140 ГПа) и с 15.870 эВ (при 0 ГПа) до 18.171 эВ (при 140 ГПа) для MgSiO_3 при расчетах в элементарной ячейке. Энергии вхождения примеси Al рассчитанные в элементарной и суперячейках неплохо коррелируют между собой, но несколько различаются. Значения плотностей, элементарных объемов и модулей всестороннего сжатия для CaSiO_3 с примесью Al во всей области исследуемых давлений больше, чем для MgSiO_3 с примесью Al.

Источники и литература

- 1) Урусов В.С., Еремин Н.Н. Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов // ГЕОС Москва, 2012, ISBN: 978-5-89118-581-0
- 2) Li L. et al. Phase stability of CaSiO_3 perovskite at high pressure and temperature: Insights from ab initio molecular dynamics // Physics of the Earth and Planetary Interiors, 155, 260–268, 2006.
- 3) Pedone A., Malavasi G. et al. A New Self-Consistent Empirical Interatomic Potential Model for Oxides, Silicates, and Silica-Based Glasses // J. Phys. Chem. B, 110, 11780–11795, 2006.