

АТОМИСТИЧЕСКОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ СМЕШЕНИЯ И ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ СИСТЕМЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ГРАНАТОВ ГРУППЫ УГРАНДИТОВ: ГРОССУЛЯР-УВАРОВИТ

Р. А. Талис, Н. Н. Еремин, В. С. Урусов

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
Геологический факультет, talisroman@mail.ru*

Оригинальная методика атомистического компьютерного моделирования твердых растворов замещения [Еремин, Талис, Урусов, 2008] была применена к системе гроссуляр ($\text{Ca}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$) – уваровит ($\text{Ca}_3\text{Cr}_2[\text{SiO}_4]_3$). Были исследованы локальная структура и свойства смешения бинарных твердых растворов в этой системе. Для расчетов двойных составов была выбрана сверхъчейка $2 \times 2 \times 4$ структурного типа гроссуляра, содержащая 1024 катиона и 1536 аниона, в рамках которой были сконструированы оптимальные максимально неупорядоченные конфигурации с катионным соотношением 1:7, 1:3 и 1:1. Внутри сверхъчейки нетрансляционная симметрия была снята (расчет проводился в группе $P1$). Выбор атомной конфигурации для каждого состава твердого раствора осуществлялся с помощью программы Binar [Еремин, Деянов, Урусов, 2008], которая позволяет находить в рамках ячейки конечного размера максимально неупорядоченную конфигурацию произвольного состава, содержащего в эквивалентных позициях до 5 сортов атомов, изоморфно замещающих друг друга. В качестве критерия степени неупорядоченности конфигурации используется величина квадратов отклонений числа разнородных пар атомов во второй координационной сфере случайной конфигурации от статистической теоретической гистограммы (критерий согласия Пирсона).

Расчет для 7 составов твердого раствора ($\text{Ca}_3(\text{Al,Cr})_2[\text{SiO}_4]_3$) (2 состава – чистые компоненты, 5 бинарных составов) осуществлялся на суперкомпьютере «СКИФ МГУ» с помощью программы Gulp 3.0 [Gale]. Благодаря данной программе были определены значения свойств смешения твердого раствора: энергия образования, объем, модуль всестороннего сжатия и их отклонения от аддитивного значения.

На основе подхода, изложенного в [Еремин, Деянов, Урусов, 2008], с помощью программ Gistogramma и Relax был произведен анализ локальной структуры твердого раствора различных составов. Программа Gistogramma позволяет провести анализ конечного атомного расположения внутри большой по размерам ячейки и построить гистограммы межатомных расстояний с целью дальнейшего изучения локальной структуры твердого раствора и степени релаксации атомных позиций. Программа Relax позволяет провести анализ абсолютных атомных смещений атомов из их стартовых позиций.

Литература

- Еремин Н. Н., Талис Р. А., Урусов В. С.* // Кристаллография. Т. 53, № 5. 2008. С. 802–810.
Еремин Н. Н., Деянов Р. З., Урусов В. С. // Физика и химия стекла. Т. 34, № 1. 2008. С. 9–18.
Gale J. // <http://www.ivec.org/GULP/>