Секция «Кристаллография и кристаллохимия»

Атомистическое моделирование структуры шеелита.

Колупаева София Всеволодовна

Студент (магистр)

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

E-mail: blwa@yandex.ru

Структура и термодинамические свойства минерала шеелит (вольфрамат кальция Ca(WO4)) были рассчитаны в программном комплексе gulp 4.0 [1]. Были использованы две модели потенциалов [2,3]. В рамках обеих моделей разработаны потенциалы для атома вольфрама W, не включённого в начальные наборы потенциалов. Рассчитаны такие структурные данные, как параметры элементарной ячейки, координаты атомов, межатомные расстояния и пр., с погрешностями относительно экспериментальных данных не более 6,56% для [2] и 10,04% для [3]. Для различных температур рассчитаны значения энтропии.

Выводы:

1. Библиотеки потенциалов [2] и [3] были дополнены согласованным потенциалом для вольфрама.

2. Проведен сравнительный анализ результатов моделирований по обоим моделям. Обнаружено, что модель [2] лучше описывает структурные данные, также модель [2] в термодинамических свойствах даёт меньшую погрешность с экспериментальными данными [4,5].

3. Данные расчёты будут применяться в качестве основы для дальнейшей работы.

Источники и литература

1) Gale J.D. and Rohl, A.L. (2003) The general utility lattice program. Mol. Simul., 29, №5, 291–341.

2) Lewis G.V. and Catlow C.R.A. (1985) Potential models for ionic oxides. J. Phys. C: Solid State Phys., 18, 1149-1161

3) Pedone A., Malavasi G., Menziani M. C. et al. (2006) A new self-consistent empirical interatomic potential model for oxides, silicates, and silica-based glasses. J. Phys. Chem. 110, 11780-11794

4) Жидикова, А. П., и Ходаковский И. Л. (1984): "ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЕРБЕРИТА, ГЮБНЕРИТА, ШЕЕЛИТА И ПОВЕЛЛИТА."Физико-химические модели петрогенеза и рудообразования, 145.

5) Яковлева Р. А. и Резухина Т. Н. (1960) "Теплоемкость вольфраматов кальция, марганца и кобальта при высоких температурах."Журн. физ. химии 34.4, 819-822.

Слова благодарности

Выражаю благодарность Андрею Юрьевичу Бычкову.

Иллюстрации

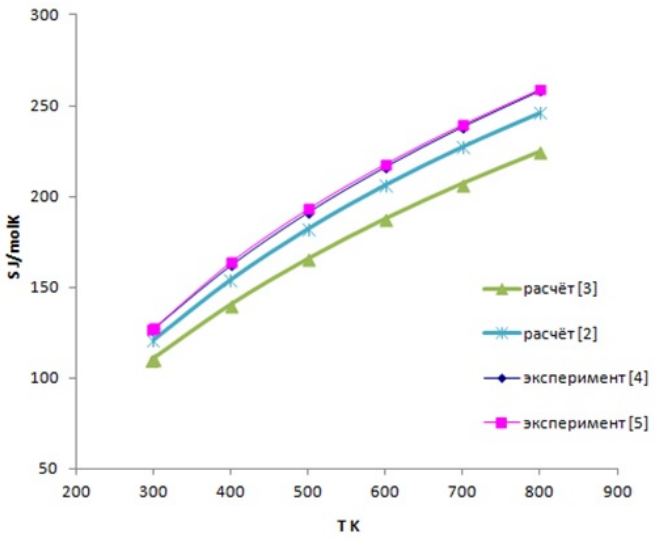

Рис. 1. Зависимость энтропии от температуры.