

Структурные характеристики монацитов и ксенотимов лантаноидов и актиноидов по данным атомистического расчета

Научный руководитель – Ерёмин Николай Николаевич

Уланова А.С.¹, Михайлова П.С.²

1 - Филиал Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова в городе Душанбе, Душанбе, Таджикистан; 2 - Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра геохимии, Москва, Россия

С использованием оригинального собственного набора частично ионных потенциалов-межатомного взаимодействия [1] для структурного моделирования редкоземельных монацитов и ксенотимов, обеспечивающего отличное описание структур, упругих и термодинамических свойств этих кристаллов, проведено предсказание «виртуальных» монацитов ряда Tb-Lu и ксенотимов ряда La-Gd, которые не реализуются в природных условиях. Для каждого модельного соединения предсказаны структурные характеристики (параметры элементарных ячеек и координаты атомов), упругие характеристики (модули все-стороннего сжатия, сдвига, Юнга, скорости прохождения акустических колебаний через монокристалл и индивидуальные упругие константы), а также термодинамические свойства (энтропия и теплоемкость при различных температурах). Дополнительно были разработаны наборы потенциалов для структурного моделирования монацитов и ксенотимов актиноидов. Проведенные расчеты показали хорошее согласие расчетной и ограниченной экспериментальной информации по этим соединениям.

Результаты проведенного исследования могут быть использованы для оценки энергетических параметров взаимодействия в двойных и тройных системах твердых растворов замещения монацитов и ксенотимов лантаноидов с примесями радиоактивных актиноидов.

Источники и литература

1) 1. Марченко Е.И., Уланова А.С., Еремин Н.Н. Разработка библиотеки межатомных потенциалов для структурного моделирования монацитов и ксенотимов переменного состава. Тезисы докладов IX Всероссийской конференции "Минералы: строение, свойства, методы исследования", Екатеринбург, 2018, с. 188-190.