

Компьютерное моделирование полиморфных модификаций алюмината кальция CaAl_2O_4 .

Марченко Екатерина Игоревна

Студент

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Геологический факультет, Москва, Россия

E-mail: marchenko-ekaterina@bk.ru

Целью настоящего исследования было компьютерное структурное моделирование полиморфных модификаций алюмината кальция. Интерес к этой системе обусловлен тем, что они, как предполагается, могут образовывать отдельную фазу в условиях нижней мантии Земли [6]. На настоящее время известно несколько полиморфных модификаций CaAl_2O_4 . Среди фаз низкого давления с тетраэдрической координацией Al выделяются структурные типы кротита (P21/n) [4], дмитрийивановита (P21/c) [2] [5] и гексагональная метастабильная модификация (P63). С повышением давления и температуры наблюдаются переходы к структурному типу CaFe_2O_4 (Pnam) [1] и слоистой модификации (P21/m) с октаэдрической координацией атомов Al.

В работе был разработан набор межатомных потенциалов взаимодействия пригодный для моделирования как тетраэдрических так и октаэдрических модификаций. Структурные особенности соединений были воспроизведены с хорошей точностью; предсказаны их упругие и термодинамические свойства. В результате серии расчетов была уточнена фазовая диаграмма CaAl_2O_4 в диапазоне 0-20 ГПа (рис.1). Полученные данные согласуются с имеющимися литературными данными и существенно дополняют их [3].

Литература

1. Becker DF, Kasper JS (1957) The structure of calcium ferrite. Acta Cryst. 10: 332–337.
2. Ito S, Suzuki K, Inagaki M, Naka S (1980) High-pressure modifications of CaAl_2O_4 and CaGa_2O_4 . Materials Research Bulletin 15: 925-932.
3. Lazic B, Kahlenberg V, Konzett J, Kaindl R (2006) On the polymorphism of CaAl_2O_4 - structural investigations of two high pressure modifications Solid State Sciences 8: 589–597.
4. Ma C, Kampf AR, Connolly Jr et al (2011) Krotite, CaAl_2O_4 , a new refractory mineral from the NWA 1934 meteorite. American Mineralogist 96: 709–715.
5. Mikouchi T, Zolensky M, Ivanova M et al (2009) Dmitryivanovite: A new high-pressure calcium aluminum oxide from the Northwest Africa 470 CH3 chondrite characterized using electron backscatter diffraction analysis. American Mineralogist 94: 746–750.
6. Ringwood A. E., A. Major. Some high-pressure transformations of geophysical significance. Earth Planet. Sci. Lett. 2. 106 .1967.

Иллюстрации

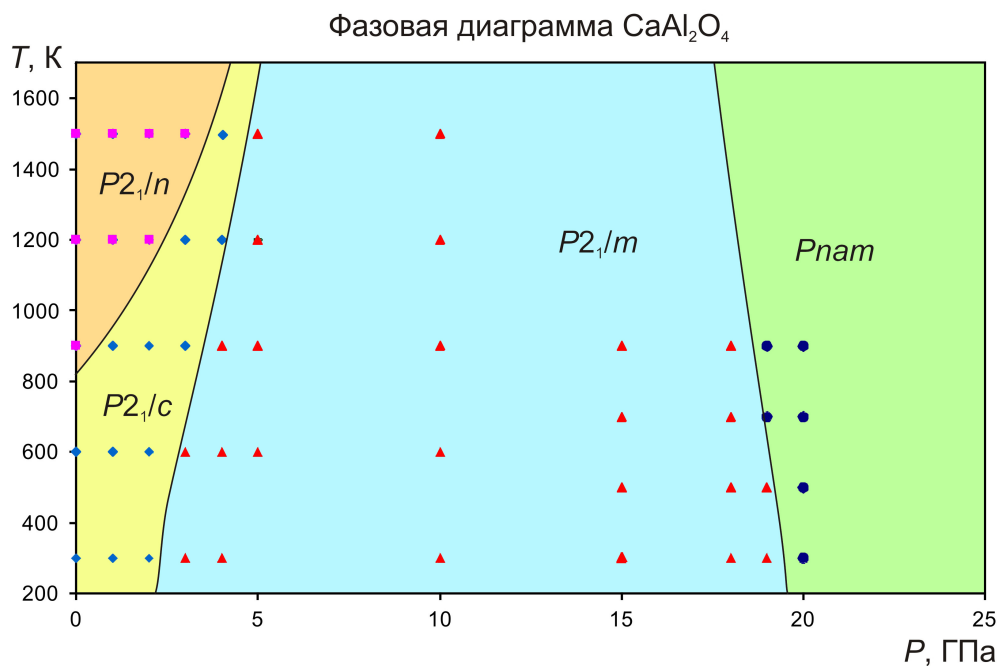


Рис. 1: Фазовая диаграмма CaAl_2O_4