

Отчет

- Тема работы: фазы высокого давления карбонатов натрия и калия по экспериментальным данным
- Состав коллектива: Бехтенова Алтына Ербаяновна (ИГМ СО РАН/НГУ), к.г.-м.н., с.н.с. Гаврюшкин Павел Николаевич (ИГМ СО РАН/НГУ), к.г.-м.н., м.н.с. Ращенко Сергей Владимирович (ИГМ СО РАН/НГУ), д.г.-м.н., в.н.с. Шацкий Антон Фарисович (ИГМ СО РАН/НГУ), д.г.-м.н., в.н.с. Литасов Константин Дмитриевич (ИГМ СО РАН/НГУ).
- Научное содержание работы:
 - 1) Постановка задачи: проведение высокобарических экспериментов для карбонатов натрия и калия при 0-70 ГПа и 27-2300°C. Расчет энергии основного состояния и параметров элементарной ячейки предсказанных высокобарических фаз Na_2CO_3 и K_2CO_3 с помощью кода VASP. Индексирование экспериментальных дифрактограмм на основе теоретически предсказанных фаз.
 - 2) Современное состояние проблемы: интерес к щелочным карбонатам обусловлен существенным влиянием щелочных карбонатных расплавов на мантийные процессы, такие как плавление эклогитов и перидотитов, рост алмазов, а также тем, что карбонаты являются наиболее вероятным источником углерода для кристаллизации алмаза. Ввиду отсутствия информации об экспериментальном исследовании высокобарических фаз, актуально проведение квантово-химических исследований в этой области.
 - 3) Научная новизна: информация о кристаллических структурах простых щелочных карбонатов является отправной точкой для моделирования структур карбонатных расплавов, содержащих щелочные металлы. Также структурная информация необходима для правильной интерпретации экспериментов по определению структур двойных щелочно-щелочноземельных карбонатов, интенсивно исследующихся в последнее время.
 - 4) Описание работы: проведены высокобарические эксперименты в многопуансонном аппарате высоких давлений типа Каваи и в ячейке с алмазными наковальнями для карбонатов натрия и калия при 0-70 ГПа и 27-2300°C, а также проведено рамановское исследование карбоната калия в ячейке с алмазными наковальнями при 0-7 ГПа. С помощью теории функционала плотности и эволюционных алгоритмов были рассчитаны энергии основного состояния и параметры элементарных ячеек

высокобарических фаз Na_2CO_3 и K_2CO_3 с помощью кода VASP. На основе предсказанных фаз проведено индексирование дифрактограмм, были построены фазовые диаграммы Na_2CO_3 и K_2CO_3 .

5) Полученные результаты: для Na_2CO_3 зафиксированы фазовые переходы: 13,7 ГПа $\gamma\text{-Na}_2\text{CO}_3 \rightarrow P6_3/mcm$, 27,9 ГПа $P6_3/mcm \rightarrow P2_1/m$; в эксперименте без нагрева при 0-25 ГПа стабильна фаза $\gamma\text{-Na}_2\text{CO}_3$. Для K_2CO_3 зафиксированы фазовые переходы: 3,6 ГПа $\gamma\text{-K}_2\text{CO}_3 \rightarrow \text{K}_2\text{CO-II}$, 11,2 ГПа $\text{K}_2\text{CO}_3\text{-II} \rightarrow P 1$, 3.5 ГПа $\gamma\text{-K}_2\text{CO}_3 \rightarrow P 1$; в эксперименте без нагрева при 0-7 ГПа стабильна фаза $\gamma\text{-K}_2\text{CO}_3$; изменение рамановского спектра при 0,4 ГПа связан с образованием кристаллогидрата карбоната калия. Фазовые переходы, обнаруженные в результате эксперимента, согласуются с предсказанными фазовыми переходами.

6) Визуализация результатов

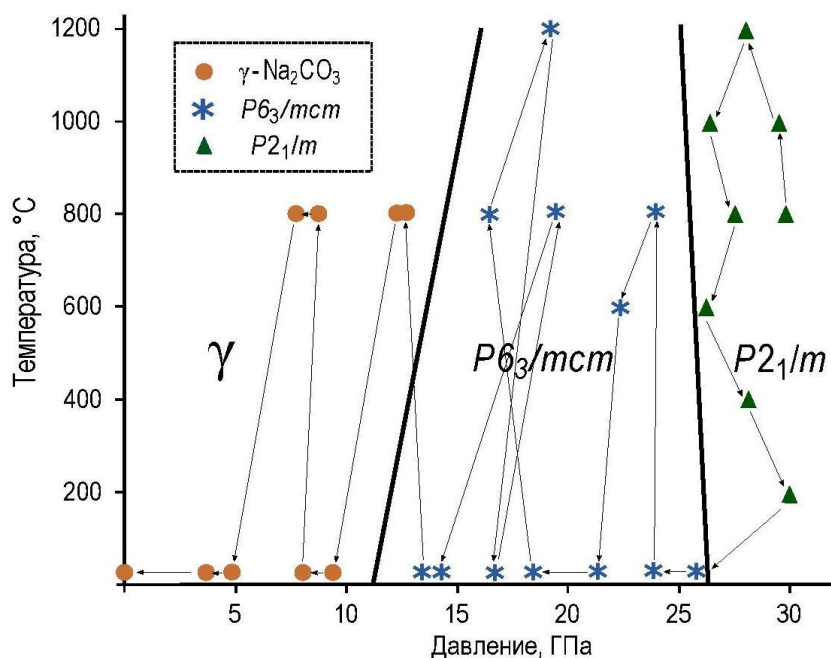


Рис.1. Фазовая P-T диаграмма Na_2CO_3 по результатам эксперимента в многопуансонном аппарате высоких давлений типа Каваи.

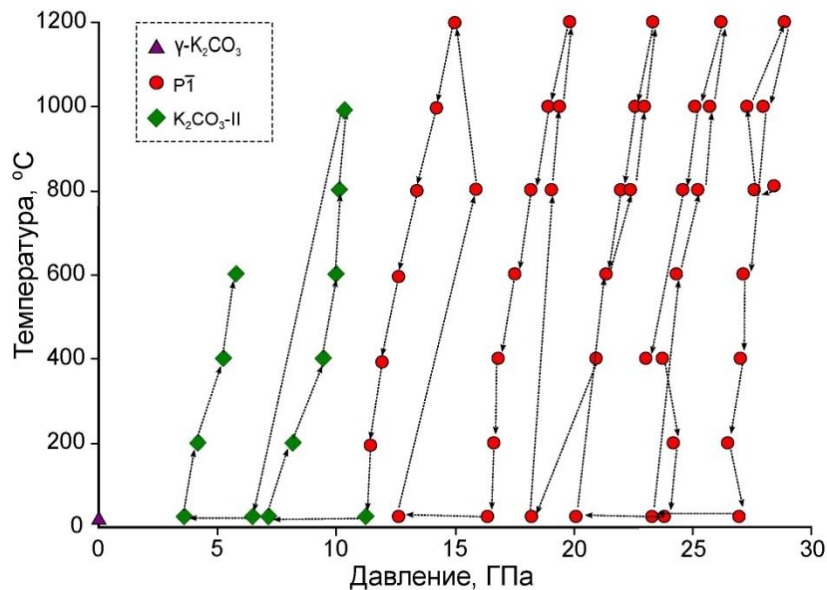


Рис.2. Фазовая P-T диаграмма K_2CO_3 по результатам эксперимента в многопуансонном аппарате высоких давлений типа Каваи.

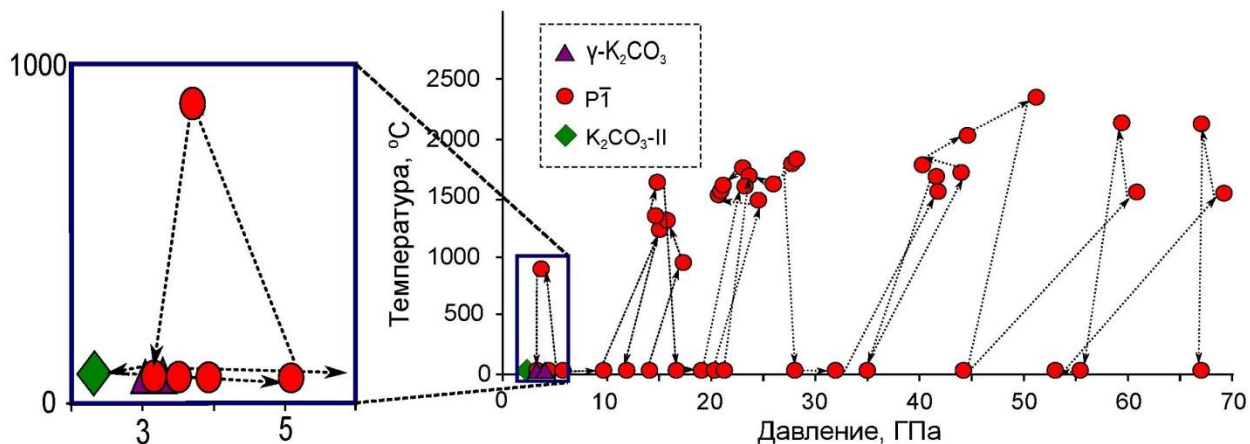


Рис.3. Фазовая P-T диаграмма K_2CO_3 по результатам эксперимента в ячейке с алмазными наковальнями.

- Расчеты на суперкомпьютере ИВЦ НГУ являются одним из основных источников для получения представленных результатов.
- Gavryushkin P.N. et.al. Structural trend of alkaline carbonates under high pressure //Acta Crystallographica Section A. – 2016. – №.72. – С. 72.

