

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. ВХОДНЫЕ ФАЙЛЫ ДЛЯ РАСЧЕТА ПО ПРОГРАММЕ GULP

1-1 Кальцит

comp opti mole prop compare dist phon nofreq
cell
4.99 4.99 17.06 90.00 90.00 120.00
fractional
Ca core 0.0 0.0 0.0 2.0
C core 0.0 0.0 0.25 1.34353898
O core 0.2768 0.0 0.25 1.01848700
O shel 0.2768 0.0 0.25 -2.13300000
space
R -3 C
buck
Ca core O shel 2154.06 0.289118 0.0 0.0000 10.0000
buck
Ca core C core 120000000.0 0.12 0.0 0.0 10.0
buck intra
O core O core 4030.3000 0.245497 0.0 0.0000 2.5000
buck inter
O shel O shel 64242.454 0.1989130 21.84357 0.0000 15.0000
morse intra bond
O core C core 5.0 2.5228 1.1982 0.0
three intra bond
C core O core O core 1.7995 120.0
outofplane bond intra
C core O core O core O core 8.6892 360.0
spring
O 52.740087
cutd 3.0
shrink 2
tempetature 900

1-2 Арагонит

comp opti mole prop compare dist phon nofreq
cell
4.9618 7.9691 5.7428 90.00 90.00 90.00
fractional
Ca core 0.25 0.4150 0.7599 2.0
C core 0.25 0.7619 0.9176 1.34353898
O core 0.25 0.9224 0.9055 1.01848700
O shel 0.25 0.9224 0.9055 -2.13300000
O core 0.475 0.6801 0.9128 1.01848700
O shel 0.475 0.6801 0.9128 -2.13300000
space
P M C N
buck
Ca core O shel 2154.06 0.289118 0.0 0.0000 10.0000
buck
Ca core C core 120000000.0 0.12 0.0 0.0 10.0
buck intra
O core O core 4030.3000 0.245497 0.0 0.0000 2.5000
buck inter
O shel O shel 64242.454 0.1989130 21.84357 0.0000 15.0000
morse intra bond
O core C core 5.0 2.5228 1.1982 0.0
three intra bond
C core O core O core 1.7995 120.0
outofplane bond intra
C core O core O core O core 8.6892 360.0
spring
O 52.740087
cutd 3.0
shrink 2
tempetature 900

1-3 Стронцианит

comp opti mole prop compare dist phon nofreq
cell
5.090 8.358 5.997 90.00 90.00 90.00
fractional
Sr core 0.25 0.4150 0.7599 2.0
C core 0.25 0.7619 0.9176 1.34353898
O core 0.25 0.9224 0.9055 1.01848700
O shel 0.25 0.9224 0.9055 -2.13300000
O core 0.475 0.6801 0.9128 1.01848700
O shel 0.475 0.6801 0.9128 -2.13300000
space
P M C N
buck
Sr core O shel 2916.86 0.2907 0.0 0.0000 10.0000
buck
Sr core C core 120000000.0 0.12 0.0 0.0 10.0
buck intra
O core O core 4030.3000 0.245497 0.0 0.0000 2.5000
buck inter
O shel O shel 64242.454 0.1989130 21.84357 0.0000 15.0000
morse intra bond
O core C core 5.0 2.5228 1.1982 0.0
three intra bond
C core O core O core 1.7995 120.0
outofplane bond intra
C core O core O core O core 8.6892 360.0
spring
O 52.740087
cutd 3.0
shrink 2
tempetature 900

1-4 Bumepum

comp opti mole prop compare dist phon nofreq
cell
5.313 8.896 6.648 90.00 90.00 90.00
fractional
Sr core 0.25 0.4150 0.7599 2.0
C core 0.25 0.7619 0.9176 1.34353898
O core 0.25 0.9224 0.9055 1.01848700
O shel 0.25 0.9224 0.9055 -2.13300000
O core 0.475 0.6801 0.9128 1.01848700
O shel 0.475 0.6801 0.9128 -2.13300000
space
P M C N
buck
Ba core O shel 5255.86 0.2907 0.0 0.0000 10.0000
buck
Ba core C core 120000000.0 0.12 0.0 0.0 10.0
buck intra
O core O core 4030.3000 0.245497 0.0 0.0000 2.5000
buck inter
O shel O shel 64242.454 0.1989130 21.84357 0.0000 15.0000
morse intra bond
O core C core 5.0 2.5228 1.1982 0.0
three intra bond
C core O core O core 1.7995 120.0
outofplane bond intra
C core O core O core O core 8.6892 360.0
spring
O 52.740087
cutd 3.5
shrink 2
tempetature 900

1-5 Cudepam

comp opti mole prop compare dist phon nofreq

cell

4.69 4.69 15.37 90.00 90.00 120.00

fractional

Fe core 0.0 0.0 0.0 2.0

C core 0.0 0.0 0.25 1.34353898

O core 0.2768 0.0 0.25 1.01848700

O shel 0.2768 0.0 0.25 -2.13300000

space

R -3 C

buck

Fe core O shel 1570.1000 0.2774 0.0 0.0000 10.0000

buck

Fe core C core 95909090.910 0.12 0.0 0.0 10.0

buck intra

O core O core 4030.3000 0.245497 0.0 0.0000 2.5000

buck inter

O shel O shel 64242.454 0.1989130 21.84357 0.0000 15.0000

morse intra bond

O core C core 5.0 2.5228 1.1982 0.0

three intra bond

C core O core O core 1.7995 120.0

outofplane bond intra

C core O core O core O core 8.6892 360.0

spring

O 52.740087

cutd 3.0

shrink 2

tempetature 900

1-6 Магnezит

comp opti mole prop compare dist phon nofreq
cell
4.63 4.63 15.01 90.00 90.00 120.00
fractional
Ca core 0.0 0.0 0.0 2.0
C core 0.0 0.0 0.25 1.34353898
O core 0.2768 0.0 0.25 1.01848700
O shel 0.2768 0.0 0.25 -2.13300000
space
R -3 C
buck
Ca core O shel 1039.59 0.289329 0.0 0.0000 10.0000
buck
Ca core C core 26164795.400 0.12 0.0 0.0 10.0
buck intra
O core O core 4030.3000 0.245497 0.0 0.0000 2.5000
buck inter
O shel O shel 64242.454 0.1989130 21.84357 0.0000 15.0000
morse intra bond
O core C core 5.0 2.5228 1.1982 0.0
three intra bond
C core O core O core 1.7995 120.0
outofplane bond intra
C core O core O core O core 8.6892 360.0
spring
O 52.740087
cutd 3.0
shrink 2
tempetature 900

1-7 Смитсонит

comp opti mole prop compare dist phon nofreq
cell
4.65 4.65 15.03 90.00 90.00 120.00
fractional
Zn core 0.0 0.0 0.0 2.0
C core 0.0 0.0 0.25 1.34353898
O core 0.2768 0.0 0.25 1.01848700
O shel 0.2768 0.0 0.25 -2.13300000
space
R -3 C
buck
Zn core O shel 103960.90 0.1707 0.0 0.0000 10.0000
buck
Zn core C core 89696969.7 0.08 0.0 0.0 10.0
buck intra
O core O core 4030.3000 0.245497 0.0 0.0000 2.5000
buck inter
O shel O shel 64242.454 0.1989130 21.84357 0.0000 15.0000
morse intra bond
O core C core 5.0 2.5228 1.1982 0.0
three intra bond
C core O core O core 1.7995 120.0
outofplane bond intra
C core O core O core O core 8.6892 360.0
spring
O 52.740087
cutd 3.0
shrink 2
tempetature 900

ПРИЛОЖЕНИЕ 2. ТАБЛИЦЫ

Таблица 1. Физические свойства минералов группы кальцита
(база данных МИНКРИСТ)

	<i>формула</i>	<i>a, Å</i>	<i>c, Å</i>	<i>объём ячейки, Å³</i>	<i>молярный объём, см³/моль</i>	<i>Расчётная плотность, г/см³</i>	<i>Линейный коэффициент поглощения, см⁻¹</i>	<i>Массовый коэффициент поглощения, см²/г</i>
<i>кальцит</i>	CaCO ₃	4,9896	17,0610	367,85	36,93	2,71	192,248	70,939
<i>магнезит</i>	MgCO ₃	4,6328	15,0129	279,05	28,01	3,01	55,159	18,329
<i>доломит</i>	CaMg[CO ₃] ₂	4,8033	15,9840	319,37	64,12	2,88	134,812	46,885
<i>сидерит</i>	FeCO ₃	4,6916	15,3796	293,17	29,43	3,94	605,005	153,710
<i>родохрозит</i>	MnCO ₃	4,7682	15,6354	307,86	30,91	3,72	526,202	141,497
<i>смитсонит</i>	Zn _{0,97} Mg _{0,01} Fe _{0,02} CO ₃	4,6526	15,0257	281,68	28,28	4,41	169,185	38,344
<i>анкерит</i>	Ca(Mg,Fe)[CO ₃] ₂	4,8300	16,1670	326,63	65,58	3,10	280,587	90,511
<i>отавит</i>	CdCO ₃	4,9230	16,2870	341,85	34,32	5,02	774,187	154,121
<i>сферокобальтит</i>	CoCO ₃	4,6581	14,9580	281,07	28,22	4,21	675,160	160,191
<i>гаспеит</i>	NiCO ₃	4,5975	14,7230	269,51	27,06	4,39	187.650	42,774

Таблица 2. Химический состав минералов группы кальцита
(в вес. %)

Минерал	CaO	MgO	FeO	ZnO	MnO	CO₂
<i>кальцит</i>	56					44
<i>магнезит</i>		47,6				52,4
<i>смитсонит</i>				64,8		35,2
<i>родохрозит</i>					61,7	38,3
<i>сидерит</i>			62,1			37,9
<i>доломит</i>	30,4	21,7				47,9
<i>анкерит</i>	27,84	9,53	18,77			43,86

Таблица 3. Физические свойства минералов группы кальцита
(Лазаренко, 1971)

Минерал	Твёрдость по шкале Мооса	Плотность, г/см³	Оптические свойства		
			Nm	Np	Nm-Np
<i>кальцит</i>	3	2,6 – 2,8	1,658	1,486	0,172
<i>магнезит</i>	4 – 4,5	2,9 – 3,1	1,700	1,509	0,191
<i>смитсонит</i>	5	3,9	1,849	1,633	0,228
<i>родохрозит</i>	3,5 – 4,5	3,6 – 3,7	1,817	1,597	0,220
<i>сидерит</i>	3,5 – 4,5	4,1 – 4,5	1,875	1,633	0,242
<i>доломит</i>	3,5 – 4	2,8 – 2,9	1,681- 1,695	1,500- 1,513	0,180- 0,182
<i>анкерит</i>	3,5	2,9 – 3,1	1,741	1,536	0,205

Таблица 4. Физические свойства минералов группы арагонита
(база данных МИНКРИСТ)

	<i>формула</i>	<i>a, Å</i>	<i>b, Å</i>	<i>c, Å</i>	<i>объём ячейки, Å³</i>	<i>молярный объём, см³/моль</i>	<i>Расчётная плотность, г/см³</i>	<i>Линейный коэффициент поглощения, см⁻¹</i>	<i>Массовый коэффициент поглощения, см²/г</i>
<i>арагонит</i>	CaCO ₃	4,9611	7,9672	5,7404	226,90	34,17	2,93	207,784	70,939
<i>стронцианит</i>	SrCO ₃	5,0900	8,3580	5,9970	255,13	38,42	3,84	300,858	78,303
<i>витерит</i>	BaCO ₃	5,3126	8,8958	6,4284	303,81	45,75	2,19	155,182	70,939
<i>церуссит</i>	PbCO ₃	5,1800	8,4920	6,1340	269,83	40,63	6,58	1197,882	182,171

**Таблица 5. Химический состав минералов группы арагонита
(в вес. %)**

Минерал	CaO	SrO	PbO	BaO	CO₂
<i>арагонит</i>	56,0				44
<i>витерит</i>				77,7	22,3
<i>стронцианит</i>		70,2			29,8
<i>церуссит</i>			83,5		16,5

**Таблица 6. Физические свойства минералов группы арагонита
(Лазаренко, 1971)**

Минерал	Твёрдость по шкале Мооса	Плотность, г/см³	Оптические свойства				
			Ng	Nm	Np	Ng-Np	2V
<i>арагонит</i>	3,5 – 4	2,9 – 3,0	1,686	1,681	1,530	0,156	18°
<i>витерит</i>	3 – 3,5	4,2 – 4,3	1,677	1,676	1,529	0,148	16°
<i>стронцианит</i>	3,5 – 4	3,6 – 3,8	1,668	1,667	1,520	0,148	7°
<i>церуссит</i>	3 – 3,5	6,4 – 6,6	2,078	2,076	1,804	0,274	8°

Таблица 7. Наиболее распространенные типы короткодействующих потенциалов. Во всех случаях r – расстояние между взаимодействующей парой атомов в Å, а остальные величины – различные параметры, определяющие внешний вид парных потенциалов.

Название потенциала	Английский перевод	Формула
Букингема	Buckingham	$A \exp(-r/\rho) - C/r^6$
Леннард-Джонса	Lennard-Jones	$A/r^m - C/r^6$
Морзе	Morse	$D[1 - \exp(-\sigma(r - r_0))]^2 - 1]$
Гармонический	Harmonic	$\frac{1}{2}k_2(r - r_0)^2 + \frac{1}{6}k_3(r - r_0)^3 + \frac{1}{24}k_4(r - r_0)^4$
«Общий»	General	$\frac{A \exp(-r/\rho)}{r^m} - C/r^m$
«Пружина»	Spring	$\frac{1}{2}k_2r^2 + \frac{1}{24}k_4r^4$
3-частичный гармонический	Three harmonic	$\frac{1}{2}k_2(\Theta - \Theta_0)^2 + \frac{1}{6}k_3(\Theta - \Theta_0)^3 + \frac{1}{24}k_4(\Theta - \Theta_0)^4$

Таблица 8. Уравнения зависимости параметров (Å) и объёма (Å³) элементарной ячейки карбонатов структурного типа арагонита от давления (ГПа).

CaCO ₃	SrCO ₃	BaCO ₃
$a = -0,0113x + 5,025$	$a = -0,013x + 5,1693$	$a = -0,0113x + 5,3682$
$b = -0,0257x + 8,0606$	$b = -0,0224x + 8,499$	$b = -0,0138x + 8,9756$
$c = -0,033x + 5,8253$	$c = -0,0466x + 6,1469$	$c = -0,0762x + 6,6001$
$V = -2,5272x + 235,85$	$V = -3,3159x + 269,93$	$V = -4,6896x + 317,87$

Таблица 9. Вычисленные статистические свойства кальцита с помощью RIM и SM потенциалов, сопоставленные с экспериментальными данными (Pavese, 1992).

	Эксп.	RIM	SM
a (гекс.), Å	4,990	4,908	4,873
c (гекс.), Å	17,061	17,493	17,718
V , Å ³	367,8	364,9	364,4
C_{11} , ГПа	146,9	152,7	152,6
C_{33} , ГПа	85,5	77,8	79,0
C_{44} , ГПа	33,1	30,4	24,4
C_{66} , ГПа	45,5	48,0	47,6
C_{12} , ГПа	55,9	56,8	57,3
C_{13} , ГПа	54,1	53,9	50,8
C_{14} , ГПа	20,5	10,8	7,3
$\varepsilon(0)_{11}$, ГПа	8,5		5,7
$\varepsilon(0)_{33}$, ГПа	8,0		8,5
$\varepsilon(\infty)_{11}$, ГПа	2,75		1,37
$\varepsilon(\infty)_{33}$, ГПа	2,21		1,33

Таблица 10. Оптимизированные параметры RIM и SM потенциалов для кальцита (верхние и нижние линии соответственно); одиночные параметры относятся только к SM (Pavese, 1992).

	A_{ij} (эВ)	ρ_{ij} (Å)	c_{ij} (эВ Å ⁶)
O-O	14683,52	0,2107	3,47
	20431,77	0,2127	3,47
O-Ca	1870,29	0,2893	0
	1605,42	0,2965	0
O-C	$54129,49 \cdot 10^8$	0,0402	0
	$13258,31 \cdot 10^8$	0,0415	0
k_e (эВ рад ⁻²)	2,5500	z_c (e)	0,985
	2,8809		1,285
k_ψ (эВ)	0,0917	z_o (e)	-0,995
	0,1129		(-1,095)
K_s (эВ Å ⁻²)	177,4	z_{Os} (e)	-2,662
		z_{Oc} (e)	1,567
		x_{Os}	0,2517

Таблица 11. Оптимизированные параметры RIM1 и RIM2 потенциалов для арагонита (верхние и нижние линии соответственно) (Pavese, 1992).

	A_{ij} (эВ)	ρ_{ij} (Å)	c_{ij} (эВ Å ⁶)
O-O	$15634,61 \cdot 10^2$	0,1366	3,47
	6106,32	0,2326	3,47
O-Ca	2043,19	0,2886	0
	83062,84	0,1856	0
O-C	$14460,95 \cdot 10^7$	0,0458	0
	$31462,93 \cdot 10^9$	0,0370	0
k_e (эВ рад ⁻²)	4,0397	z_C (e)	0,817
	17,7517		0,867
k_ψ (эВ)	0,1562	z_O (e)	-0,939
	0,3336		-0,794
		Z_{Ca} (e)	2,000
			1,515

Таблица 12. Экспериментальные данные для арагонита, сопоставленные с вычисленными с помощью RIM1 и RIM2 (оптимизированные для арагонита) и RIM (оптимизированные для кальцита) потенциалы (Pavese, 1992).

	Эксп.	RIM1	RIM2	RIM
$a, \text{Å}$	4,961	4,875	4,972	4,951
$b, \text{Å}$	7,967	7,904	7,979	7,940
$c, \text{Å}$	5,740	5,896	5,730	5,736
$V, \text{Å}^3$	226,9	227,2	227,3	225,5
$C_{11}, \text{ГПа}$	159,6	164,4	157,7	194,2
$C_{22}, \text{ГПа}$	87,0	112,0	100,9	117,1
$C_{33}, \text{ГПа}$	85,0	59,2	68,3	71,3
$C_{44}, \text{ГПа}$	41,3	40,5	36,0	44,1
$C_{55}, \text{ГПа}$	25,6	33,9	24,1	34,5
$C_{66}, \text{ГПа}$	42,7	49,9	41,1	43,8
$C_{12}, \text{ГПа}$	36,6	65,3	58,0	65,9
$C_{13}, \text{ГПа}$	2,0	39,0	34,1	35,7
$C_{14}, \text{ГПа}$	15,9	48,2	50,4	50,2

Таблица 13. Параметры межатомных потенциалов, полученные оптимизацией структур и свойств кальцита и арагонита (Fisler, 2000).

Потенциалы	A_{ij} (эВ)	r_{ij} (Å)	C_{ij} (Å ⁶)	Сфера действия (Å)
Букингема О-О (межмолекулярный)	4030,30	0,2455		0–2,5
Букингема О-О (внутримолекулярный)	79158,6	0,1983	21,844	0–15
Букингема Са-О	2154,06	0,2891		0–10
Букингема Сd-О	4329,81	0,2563		0–10
Букингема Мп-О	2000,94	0,2727		0–10
Букингема Fe-О	2151,99	0,2651		0–10
Букингема Zn-О	1029,39	0,2891		0–10
Букингема Со-О	1095,60	0,2863		0–10
Букингема Ni-О	1634,46	0,2666		0–10
Букингема Mg-О	1039,59	0,2893		0–10

Примечания: Для Морзе, С-О, $D_e = 5,0$ эВ, $a = 2,5155 / \text{Å}$, и $r_0 = 1,2025 \text{ Å}$.

Для пружины О-О, $k_2 = 32,194 \text{ эВ/Å}^2$ и $k_4 = 10000 \text{ эВ/Å}^4$.

Для трёхчастичного О-С-О (межмолекулярного) $k_2 = 1,7887 \text{ эВ/рад}^2$, и $q_0 = 120^\circ$.

Для кручения О-С-О-О, $k = 0,1510 \text{ эВ}$ и $n = -2$.

Частичные заряды $Z_C = +1,3435$, $Z_O\text{-ядро} = +1,0185$, $Z_O\text{-оболочка} = -2,1330$, и $Z_{Ca} = +2,0000$.

Таблица 14. Экспериментальные и вычисленные свойства кальцита (Fisler, 2000).

	Арагонит			Кальцит		
	Экспериментальные	Вычисленные	Δ (%)	Экспериментальные	Вычисленные	Δ (%)
Упругие константы (ГПа)						
C_{11}	85,0	89,9	6,5	145,7	140,9	-3,3
C_{22}	159,6	155,3	-2,7			
C_{33}	87,0	104,2	20	85,3	85,8	0,6
C_{44}	42,7	23,3	-45	33,4	33,4	0,0
C_{55}	41,3	36,7	-11			
C_{66}	25,6	12,4	-52			
C_{12}	15,9	48,0	>100	55,9	63,7	14
C_{13}	36,6	55,9	53	53,5	62,6	17
C_{14}				-20,5	-19,5	-4,9
C_{23}	2,0	54,7				
ε_{11}^0		7,84		8,5	9,28	9,2
ε_{22}^0		22,48				
ε_{33}^0		8,26		8,0	8,30	3,7
ε_{11}^∞	2,86	3,05	6,6	2,75	2,69	-2,2
ε_{22}^∞	2,82	2,53	-10			
ε_{33}^∞	2,34	2,50	6,8	2,21	3,02	37

Таблица 16. Оптимизированные потенциалы, использованные для расчётов (Archer, 2003).

Ф-нальная форма	Атомы	Параметры			Сфера действия потенциала (Å)	
		A (эВ)	ρ (Å)	C (эВ Å ⁶)	от	до
Букингема	Ca-O об.	2402,3463	0,289118	0	0	10
	Co-O об.	2300	0,254998	0	0	10
	Zn-O об.	2300	0,256152	0	0	10
	Cd-O об.	2300	0,278795	0	0	10
	Ni-O об.	2300	0,250237	0	0	10
	Mn-O об.	2300	0,267687	0	0	10
	Sr-O об.	2300	0,304957	0	0	10
	Mg-O об.	2300	0,257449	0	0	10
	Fe-O об.	2300	0,262561	0	0	10
	Ba-O об.	2300	0,322133	0	0	10
	Pb-O об.	2300	0,309616	0	0	10
	O об.-O об.	214836,21	0,198340	70,169	0	15
	O-O (внутримолекулярный)	4030	0,245497	0		
Морзе	O-C	D (эВ) 5	A (Å ⁻¹) 2,5155	r_0 (Å) 1,20246		
	O-C-O	K_2 (эВ/рад ²) 1,7887	θ_0 120°			
	O-C-O-O	K (эВ) 0,15100	Φ_0 0°			
	O-O об.	K_2 (эВ/Å ²) 20,673989	K_4 (эВ/Å ⁴) 10000,000			
Заряды		Заряд				
Кулон-е взаим-вие	C остов O остов O об. Заряд катиона	+1,448759 +0,2330049 -1,382591 +2				

Таблица 17. Сопоставление вычисленных и экспериментальных физических параметров кальцита и арагонита (Archer, 2003).

	Арагонит		Кальцит	
	Экспериментальные	Вычисленные	Экспериментальные	Вычисленные
Упругие константы (ГПа)				
C_{11}	85,0	130,8	145,7	151,9
C_{11}	159,6	209,4		
C_{11}	87,0	123,0	85,3	96,0
C_{11}	42,7	41,7	33,4	45,3
C_{11}	41,3	56,5		
C_{11}	25,6	37,2		
C_{11}	15,9	41,4	55,9	65,1
C_{11}	36,6	58,3	53,9	62,7
C_{11}			-20,5	22,1
C_{11}	2,0	68,3		
Параметры ячейки				
Объём (Å ³)	226,9	228,70	367,8	365,26
a (Å)	5,740	5,73	4,990	4,97
b (Å)	4,961	5,00	4,990	4,97
c (Å)	7,967	7,98	17,061	17,08
Статические диэлектрические константы				
11			8,5	6,50
22				
33			8	6,20
Высокочастотные диэлектрические константы				
11	2,86	1,84	2,75	1,75
22	2,82	1,65		
33	2,34	1,65	2,21	1,85

Таблица 18. Сравнение результатов моделирования сидерита с использованием потенциалов Арчера (Ар) и разработанных в рамках данной работы (ДР).

Параметр	Ед. измерения	Эксперимент	Расчёт		Разница		Разница (%)	
			Ар	ДР	Ар	ДР	Ар	ДР
Объём	Å ³	292,78	263,76	292,78	-29,2	0	-9,97	0
<i>a</i>	Å	4,69	4,57	4,7	-0,11	0,01	-2,40	0,38
<i>b</i>	Å	4,69	4,57	4,7	-0,11	0,01	-2,40	0,38
<i>c</i>	Å	15,37	14,53	15,25	-0,84	-0,11	-5,49	-0,75
α	Градусы	90	90	90	0	0	0	0
β	Градусы	90	90	90	0	0	0	0
γ	Градусы	120	120	120	0	0	0	0
Fe	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>x</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>y</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>z</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
C	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>x</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>y</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>z</i>	Доли ячейки	0,25	0,25	0,25	0	0	0	0
O1	Доли ячейки	0,2768	0,2757	0,2677	0,001	0,009	0,37	3,27
<i>x</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>y</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>z</i>	Доли ячейки	0,25	0,25	0,25	0	0	0	0
O2	Доли ячейки	0,2768	0,2807	0,2709	0,0039	0,0058	1,41	2,10
<i>x</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>y</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>z</i>	Доли ячейки	0,25	0,25	0,25	0	0	0	0

Таблица 19. Сравнение результатов моделирования смитсонита с использованием потенциалов Арчера (Ар) и разработанных в рамках данной работы (ДР).

Параметр	Ед. измерения	Эксперимент	Расчёт		Разница		Разница (%)	
			Ар	ДР	Ар	ДР	Ар	ДР
Объём	Å ³	281,44	250,18	281,44	-31,25	0	-11,11	0
<i>a</i>	Å	4,65	4,51	4,65	-0,13	0	-2,92	0
<i>b</i>	Å	4,65	4,51	4,65	-0,13	0	-2,92	0
<i>c</i>	Å	15,03	14,17	15,03	-0,85	0	-5,67	0
α	Градусы	90	90	90	0	0	0	0
β	Градусы	90	90	90	0	0	0	0
γ	Градусы	120	120	120	0	0	0	0
Zn <i>x</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>y</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>z</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
S <i>x</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>y</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0	0
<i>z</i>	Доли ячейки	0,25	0,25	0,25	0	0	0	0
O1 <i>x</i>	Доли ячейки	0,2768	0,2801	0,2708	0,0033	0,0059	1,20	2,16
<i>y</i>	Доли ячейки	0	0	0	0	0	0,00	0,00
<i>z</i>	Доли ячейки	0,25	0,25	0,25	0	0	0	0,00
O2 <i>x</i>	Доли ячейки	0,2768	0,2864	0,274	0,0096	0,0066	3,47	1
<i>y</i>	Доли ячейки	0	0,25	0	0	0	0,00	0,00
<i>z</i>	Доли ячейки	0,25	0,25	0,25	0	0	0,00	0,00

Таблица 20. Результаты моделирования стронцианита

Параметр	Ед. измерения	Эксперимент	Расчёт	Разница	Разница (%)
Объём	Å ³	255,125	255,129	0,004	0,00
<i>a</i>	Å	5,09	5,073	-0,016	-0,32
<i>b</i>	Å	8,358	8,309	-0,048	-0,58
<i>c</i>	Å	5,997	6,051	0,054	0,91
α	Градусы	90	90	0	0
β	Градусы	90	90	0	0
γ	Градусы	90	90	0	0
Sr	x Доли ячейки	0,25	0,25	0	0
	y Доли ячейки	0,415	0,4164	0,0014	0,36
	z Доли ячейки	0,7599	0,7572	0,0026	0,35
С	x Доли ячейки	0,25	0,25	0	0
	y Доли ячейки	0,7619	0,76	0,0018	0,25
	z Доли ячейки	0,9176	0,9255	0,0079	0,87
O1	x Доли ячейки	0,25	0,25	0	0
	y Доли ячейки	0,9224	0,9106	0,0117	1,27
	z Доли ячейки	0,9055	0,9166	0,0111	1,23
O2	x Доли ячейки	0,475	0,4635	0,0114	2,40
	y Доли ячейки	0,6801	0,684	0,0039	0,58
	z Доли ячейки	0,9128	0,9259	0,0131	1,44

Таблица 21. Результаты моделирования витерита

Параметр	Ед. измерения	Эксперимент	Расчёт	Разница	Разница (%)
Объём	Å ³	314,214	314,169	-0,044	-0,01
<i>a</i>	Å	5,313	5,302	-0,01	-0,19
<i>b</i>	Å	8,896	8,822	-0,074	-0,83
<i>c</i>	Å	6,648	6,715	0,067	1,02
α	Градусы	90	90	0	0
β	Градусы	90	90	0	0
γ	Градусы	90	90	0	0
Ba	x Доли ячейки	0,25	0,25	0	0
	y Доли ячейки	0,415	0,4171	0,0021	0,51
	z Доли ячейки	0,7599	0,7558	0,004	0,53
C	x Доли ячейки	0,25	0,25	0	0
	y Доли ячейки	0,7619	0,7584	0,0034	0,46
	z Доли ячейки	0,9176	0,9321	0,0145	1,58
O1	x Доли ячейки	0,25	0,25	0	0
	y Доли ячейки	0,9224	0,9	0,0218	2,37
	z Доли ячейки	0,9055	0,9229	0,0174	1,93
O2	x Доли ячейки	0,475	0,4548	0,0201	4,24
	y Доли ячейки	0,6801	0,6868	0,0067	1,00
	z Доли ячейки	0,9128	0,932	0,0192	2,11

Таблица 22. Предсказанные упругие константы стронцианита

Индексы	1	2	3	4	5	6
1	141,67	54,20	43,13	0	0	0
2	54,20	100,00	47,87	0	0	0
3	43,13	47,87	69,46	0	0	0
4	0	0	0	35,58	0	0
5	0	0	0	0	25,43	0
6	0	0	0	0	0	30,12

Таблица 23. Предсказанные упругие константы витерита

Индексы	1	2	3	4	5	6
1	109,46	46,33	39,79	0	0	0
2	46,33	83,68	41,22	0	0	0
3	39,79	41,22	60,15	0	0	0
4	0	0	0	27,85	0	0
5	0	0	0	0	23,96	0
6	0	0	0	0	0	25,74

Таблица 24. Соотношение Sr-Me (Me = Ba, Ca) в смоделированных твёрдых растворах

	Кол-во ат. Sr	Кол-во ат. Me
Me _{0.167} Sr _{0.833} CO ₃	60	12
Me _{0.25} Sr _{0.75} CO ₃	54	18
Me _{0.333} Sr _{0.667} CO ₃	48	24
Me _{0.5} Sr _{0.5} CO ₃	36	36
Me _{0.667} Sr _{0.333} CO ₃	24	48
Me _{0.75} Sr _{0.25} CO ₃	18	54
Me _{0.833} Sr _{0.167} CO ₃	12	60

Таблица 25. Значения свойств смешения для твёрдых растворов $Ba_xSr_{(1-x)}CO_3$.

	$Ba_{0.167}Sr_{(1-0.167)}CO_3$	$Ba_{0.25}Sr_{(1-0.25)}CO_3$	$Ba_{0.333}Sr_{(1-0.333)}CO_3$	$Ba_{0.5}Sr_{(1-0.5)}CO_3$	$Ba_{0.667}Sr_{(1-0.667)}CO_3$	$Ba_{0.75}Sr_{(1-0.75)}CO_3$	$Ba_{0.833}Sr_{(1-0.833)}CO_3$
ΔH , кДж	2,843	3,746	4,242	4,876	4,098	3,672	2,696
ΔV , Å ³	-0,066	-0,079	-0,096	-0,148	-0,118	-0,074	-0,082
ΔK , ГПа	-0,797	-0,889	-1,069	-1,315	-1,323	-2,131	-2,803

Таблица 26. Значения свойств смешения для твёрдых растворов $Ca_xSr_{(1-x)}CO_3$.

	$Ca_{0.167}Sr_{(1-0.167)}CO_3$	$Ca_{0.25}Sr_{(1-0.25)}CO_3$	$Ca_{0.333}Sr_{(1-0.333)}CO_3$	$Ca_{0.5}Sr_{(1-0.5)}CO_3$	$Ca_{0.667}Sr_{(1-0.667)}CO_3$	$Ca_{0.75}Sr_{(1-0.75)}CO_3$	$Ca_{0.833}Sr_{(1-0.833)}CO_3$
ΔH , кДж	0,988	1,369	1,539	1,805	2,011	1,401	1,034
ΔV , Å ³	-0,013	-0,002	-0,007	-0,015	0,023	-0,004	-0,007
ΔK , ГПа	-0, 674	-1,287	-1,089	-1,325	-1,047	-0,803	-0,850

Таблица 27. Степень релаксации и податливость полиэдров в твёрдом растворе $Ba_xSr_{(1-x)}CO_3$.

	x=0,33		x=0,5		x=0,67	
	степень релаксации	податливость	степень релаксации	податливость	степень релаксации	податливость
SrO ₉	61%	39%	62%	38%	61%	39%
BaO ₉	68%	32%	69%	31%	69%	31%

Таблица 28. Степень релаксации и податливость полиэдров в твёрдом растворе $Ca_xSr_{(1-x)}CO_3$.

	x=0,33		x=0,5		x=0,67	
	степень релаксации	податливость	степень релаксации	податливость	степень релаксации	податливость
SrO ₉	68%	32%	61%	39%	84%	16%
CaO ₉	39%	61%	64%	36%	57%	43%