**Кристаллические фазы хрома в экстремальных *P-T* условиях**

Говорко Надежда Борисовна

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, кафедра кристаллографии и кристаллохимии, 1 курс

Научный руководитель – Марченко Екатерина Игоревна

Одной из главных задач теоретической химии, физики, кристаллохимии является предсказание кристаллических структур и их свойств. В работе рассмотрены известные на сегодняшний день по литературным данным фазы, концентрирующие Cr3+ в мантии Земли. Разработана и опробована модель потенциалов межатомного взаимодействия для моделирования кристаллических структур в системе Ca-Cr-O.

С использованием разработанной модели потенциалов межатомного взаимодействия и эволюционного алгоритма программы USPEX [*Glass et al*., 2006] были получены кристаллические структуры состава CaCr2O4, существующие по литературным данным экспериментальных исследований (рис. 1).

|  |
| --- |
|  |
| Рис. 1. Кристаллические структуры CaCr2O4, предсказанные с использованием эволюционного алгоритма (слева) и существующие по литературным данным из экспериментов. |

Такая модель будет полезна при поиске возможных структур фаз состава CanCrmOlс использованием эволюционного алгоритма программы USPEX. Визуализация кристаллических структур осуществлялась в программе VESTA [*Momma and Izumi,* 2011].

**Литература**

*Glass C.W., Oganov A.R., Hansen N.* (2006). USPEX – evolutionary crystal structure prediction // Comp. Phys. Comm. V. 175. Pp. 713-720.

*[Momma](http://dx.doi.org/10.1107/S0021889811038970)**[K., Izumi F](http://dx.doi.org/10.1107/S0021889811038970)*[. (2011). VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data // J. Appl. Crystallogr. V.](http://dx.doi.org/10.1107/S0021889811038970)**[44. Pp.](http://dx.doi.org/10.1107/S0021889811038970)** [1272-1276.](http://dx.doi.org/10.1107/S0021889811038970)