

Ciclo de charlas

Propiedades elásticas de la serie 2M1 Moscovita-Paragonita. Efectos de la presión.



Sala de conferencias.
Dpto. Física-UNS.



Viernes 13/11. 15hs.



Dr. Alfonso Hernández-Laguna

Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra. España
CSIC-UGR

2015

13/11

Se han estudiado las constantes elásticas (CE) a presión (P) de laboratorio de la serie Moscovita (Ms)-Paragonita (Pg).^{1,2} Se calcularon la estructura cristalina, el módulo de incompresibilidad (B) y CE de cinco miembros de la serie Ms-Pg $[K_{1-x}Na_xAl_2(Si_4Al)O_{10}(OH)_2]$, $x = 0, 0.25, 0.50, 0.75$ y 1] en función de la P con ayuda del programa Siesta (con base doble ζ + polarización, funcional de correlación y cambio PBE y pseudopotenciales de Troulier Martin).

La CE se calcularon por el método de los desplazamientos finitos a diferentes P. Los B se ajustaron a una ecuación de estado de Birch-Murnaghan de tercer orden. El comportamiento de mezcla se estudió igualmente. Las velocidades de las ondas acústicas función de las CE y las direcciones del cristal se calcularon resolviendo la ecuación de Christoffell y con ayuda del programa AWESoMe.³

Del mismo modo, se estudiaron los módulos de incompresibilidad de los enlaces y poliedros de los grupos atómicos. Los valores en la serie aumentan con el aumento del contenido en Na^+ en la interlámina y la P. Igualmente evolucionan las velocidades de la ondas acústicas. Algunos enlaces y poliedros muestran compresibilidad negativa, que pueden explicarse a partir de los cambios estructurales sufridos por el aumento de la P. A partir de todo esto, se propone un mecanismo de compresión. Las CE son más rígidas con el aumento de la P. El espacio interlaminar es el lugar estructural más blando de la estructura cristalina. La energía libre de Gibbs de exceso (Gex) se calcula de forma semiempírica usando nuestros volúmenes de exceso, la P y la entropía y entalpía de exceso experimentales. A valores determinados de la temperatura y a partir de la de los mínimos de la Gex en función de la fracción molar del catión creciente en la interlámina se deduce que los binodos de solvus de la serie deben de evolucionar a valores más cercanos a los miembros finales cuando la P aumenta, y, por tanto, a alta presión, debe de aumentar el gap de solubilidad de la serie Ms-Pg.

1. J. Ortega-Castro, N. Hernández-Haro, V. Timón, C.I. Sainz-Díaz, and A. Hernández-Laguna, *Am. Mineral.*, **2010**, 95, 249–259.
2. N. Hernández-Haro, J. Ortega-Castro, C. Pérez del Valle, D. Muñoz-Santiburcio, C.I. Sainz-Díaz and A. Hernández-Laguna, *Am. Mineral.*, **2013**, 98, 651–664.
3. D. Muñoz-Santiburcio, A. Hernández-Laguna, J. I. Soto, *Comp. Phys. Comm.* **2015**, 192, 272. doi: 10.1016/j.cpc.2015.02.024.



Departamento de Física-UNS



www.fisica.uns.edu.ar



Departamento de Física-UNS