



---

## Molecular Dynamics Study of Cerussite Behavior Under High-Pressure

---

Brahim Khalil Benazzouz

EasyChair preprints are intended for rapid dissemination of research results and are integrated with the rest of EasyChair.

July 25, 2022



## Etude théorique par dynamique moléculaire du comportement à hautes pressions de la roche carbonatée Cerussite

B. K. Benazzouz\*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Civil Engineering, LMgCE, National Polytechnic School (ENP), El Harrach, Algiers, Algeria

\*correspondence E-mail: [brahim\\_khalil.benazzouz@g.enp.edu.dz](mailto:brahim_khalil.benazzouz@g.enp.edu.dz)

### RÉSUMÉ:

Les roches carbonatées sont des minéraux communs qui se trouvent dans des environnements sédimentaires. L'étude de leurs comportement et propriétés élastiques intéresse plusieurs domaines d'ingénierie. La compréhension du comportement des minéraux carbonatées sous les conditions de la profondeur terrestre aide à l'interprétation de certains phénomènes physiques.

Dans ce travail, nous présentons le comportement de la Cerussite ( $PbCO_3$ ) appartenant aux carbonates naturels du groupe aragonite. Nous nous sommes, alors, focalisés sur l'évaluation de ses propriétés structurales et mécaniques puis nous avons étudié leur variation sous l'effet d'une pression hydrostatique. Le comportement du minéral carbonaté de type Cerussite sous pression est abordé dans un intervalle variant de 0 à 20 GPa.

Pour mener à bien ce travail, des simulations de type dynamique moléculaire basées sur la technique de minimisation de l'énergie ont été réalisées sur le minéral carbonatée Cerussite afin d'évaluer son comportement. La structure monocristal de Cerussite utilisée dans ce travail de recherche est basée sur les données cristallographiques de Chevrier et al [Chevrier et al, 1992]. Par la suite, cette structure a été décrite par un potentiel interatomique. Certains paramètres du potentiel sont ajustés, en employant le code GULP, de manière à minimiser la somme des carrés des différences entre les propriétés expérimentales et calculées [Gale J.D., and Rohl, 2003].

Dans un premier temps, certaines propriétés structurales et mécaniques ont été évaluées à la pression atmosphérique, à savoir les paramètres de maille, les constantes élastiques. Par la suite, l'effet d'une pression géologique a été appliqué sur l'ensemble des propriétés de  $PbCO_3$ . Le comportement du minéral  $PbCO_3$  sous l'effet des hautes pressions a révélé l'existence d'une transition de phase aux environs de 18 GPa. Lin and Liu ont montré de l'existence d'une transformation de phase de  $PbCO_3$  à la pression de 17GPa [Lin and Liu, 1997]. La baisse significative dans l'évolution de la valeur du module de rigidité de la Cerussite en fonction de la

pression donne une première indication de cette transition. Dans la figure suivante, nous présentons l' évolution du module de rigidité jusqu'au point de transition.

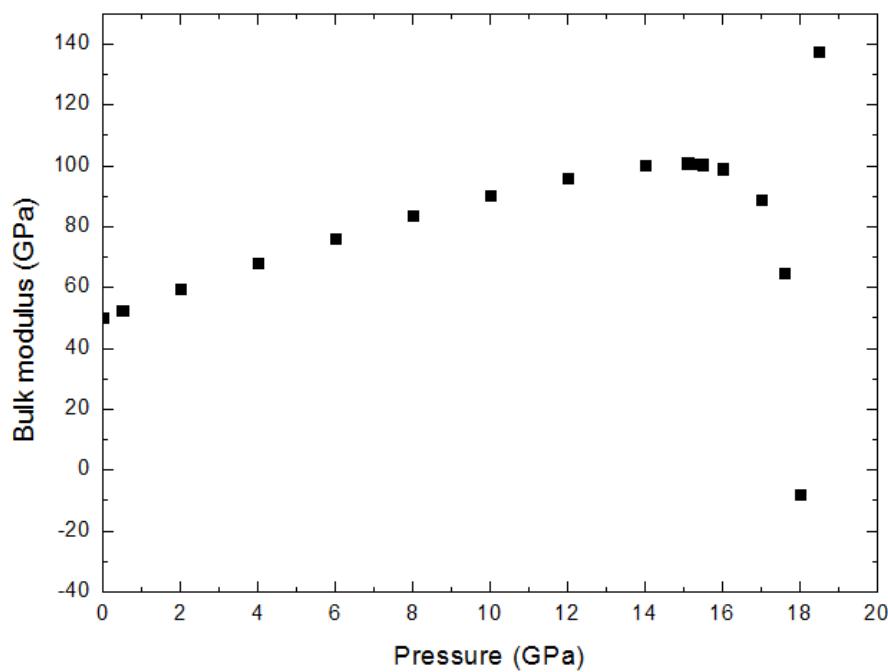


Fig.

Mots-clés :

Transition de phase ; Cerussite ; dynamique moléculaire ; effet de haute pression.

Références :

Gale J.D., and Rohl A.L., The general utility lattice program (gulp), molecular simulation, 2003, v. 29 (5), p 291–341

Chevrier G, Giester G, Heger G, Jarosch D, Wildner M, Zemann J, 1992, Neutron single-crystal refinement of cerussite, PbCO<sub>3</sub>, and comparison with other aragonite-type carbonates, Zeitschrift fur Kristallographie, 199, 67-74

Lin C and Liu L, 1997, Post-aragonite phase transitions in strontianite and cerussite—a high-pressure Raman spectroscopic study. J Phys Chem Solids 58:977–987