

Отчёт об использовании ресурсов комплекса ИВЦ НГУ

DFT-расчёты микроструктуры кристаллов арагонита

1. Тема работы

DFT-моделирование энергетики и стабильности двойниковых и монокристалльных структур арагонита и их связь с явлениями наблюдаемые в эксперименте.

В ходе работы проведены вычисления методом функционала плотности (DFT) для анализа энергетики и стабильности двойниковых и бездвойниковых структур арагонита, а также сопоставление теоретических данных с результатами современных методов структурного анализа (SCXRD, TEM, оптическая микроскопия) геологических образцов из Марокко, Испании и России. Показано, что разность свободной энергии между двойниковой и бездвойниковой структурами минимальна, что объясняет возможность формирования высоких плотностей двойниковых границ за счёт флуктуационных процессов при кристаллизации арагонита. Экспериментальные данные подтверждают находятся в полном соответствии с этим результатом.

2. Состав коллектива (DFT-расчёты)

- **Гаврюшкин Павел Николаевич**

Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН, Новосибирский государственный университет (НГУ), ведущий научный сотрудник, к.ф.-м.н.

E-mail: gavryushkin@g.nsu.ru, gavryushkin@igm.nsc.ru

- **Сагатов Нурсултан Ермекович**

Институт геологии и минералогии СО РАН, НГУ, м. н.с

- **Сагатова Динара Нурлановна**

Институт геологии и минералогии СО РАН, НГУ, м.н.с.

- **Банаев Максим Валерьевич**

НГУ, аспирант

- **Мезенцева Анастасия Сергеевна**

НГУ, аспирант

- **Берников Илья Александрович**
НГУ, магистрант

3. Финансовая поддержка

Работа поддержана государственным заданием ИГМ СО РАН (122041400176-0).

4. Научное содержание работы

4.1. Постановка задачи

Провести DFT-расчёты для определения энергетических характеристик двойниковых и бездвойниковых структур арагонита, чтобы объяснить наблюдаемую высокую плотность двойниковых границ в геологических образцах. Сопоставить теоретические данные с результатами современных методов структурного анализа (SCXRD, ТЕМ, оптическая микроскопия).

4.2. Современное состояние проблемы

Ранее считалось, что высокая плотность двойников характерна только для биогенного арагонита. Не существовало теоретического объяснения возможности формирования множественных двойниковых границ в геологических образцах, а экспериментальные данные были ограничены локальными методами.

4.3. Описание выполненной работы и используемых алгоритмов

DFT-расчёты:

- Пакет VASP 5.4.4, функционал GGA-PBE.
- Моделировались три структуры: монокристалльный арагонит, 2O двойниковых поитип и 6O двойниковый политип.
- Критерии сходимости:
 - 2O: 10^{-7} эВ/ячейку, энергия обрезания 800 эВ
 - 6O: 10^{-5} эВ/ячейку, энергия обрезания 600 эВ
- Сетка k-точек Монкхорста-Пака:
 - 2O: $4 \times 4 \times 5$

- 6O: 1×2×2
- Смазывание Гаусса: $\sigma = 0.05$ эВ
- Фононные спектры и температурная зависимость свободной энергии Гиббса рассчитывались с помощью пакета PHONOPY (метод конечных смещений, суперячейки 3×1×1 для 2O и 2×1×1 для 6O).

5. Полученные результаты

- Разность полной энергии между структурами с различной плотностью двойникования (6O- и 2O-политипы) минимальна (менее 0,1 кДж/моль), а разность свободной энергии Гиббса при комнатной температуре практически отсутствуют (см. рис. 5 основной статьи и SI Appendix Fig. S7).
- Фононные спектры обеих структур показывают отсутствие мнимых частот колебаний, что подтверждает их динамическую стабильность.
- Малая разница энергий объясняет возможность образования периодических двойниковых границ за счёт процессов флуктуации при кристаллизации арагонита в природных условиях.

6. Иллюстрации и визуализация результатов

- Схемы двойниковых и бездвойниковых структур, графики энергетических различий и температурной зависимости свободной энергии (рис. 5 основной статьи, SI Appendix Fig. S7).
- ТЕМ и оптические снимки двойниковых границ подтверждающие соответствие теоретических и экспериментальных результатов (рис. 1–4 основной статьи, SI Appendix).

7. Эффект от использования кластера

Все DFT-расчёты в рамках проекта выполнены на кластере ИВЦ НГУ и его использование оказалось критически важным для достижения целей проекта.

8. Перечень публикаций, содержащих результаты DFT-расчётов

По итогам работы была опубликована статья в журнале Proceedings of the National Academy of Science, входящем в Q1 и имеющем IF>12

- Gavryushkin P.N., Sagatov N.E., Sagatova D.N., Mezentseva A.S., Bernikov I.A., et al.
The intrinsic twinning and enigmatic twisting of aragonite crystals.
Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA (PNAS), 2024, Vol. 121, No. 6, e2311738121.
DOI: [10.1073/pnas.2311738121](https://doi.org/10.1073/pnas.2311738121).
Импакт-фактор: 12.779.

9. Впечатления и предложения

Обслуживание кластера и устранение проблем на высшем уровне и по нашему опыту является лучшим среди общедоступных суперкомпьютеров России. Из некоторых неудобств можно отметить лишь отключения кластера в виду перегрева в летние месяцы и продолжительный ремонт в связи с ремонтом системы кондиционирования.