

**Отчет В.Ю. Комарова
о проделанной работе на кластере ИВЦ НГУ
на период до 28 февраля 2024 г.**

- Тема работы "Разработка методик рентгенодифракционных исследований образцов, имеющих неоднородности структуры различных масштабов."
- Состав коллектива
 1. Комаров Владислав Юрьевич, основное место работы: с.н.с. ИНХ СО РАН, совместительство: старший преподаватель ФЕН НГУ, канд. хим. наук, komarov@niic.nsc.ru (vukomarov, руководитель группы, учетная запись до 28.02.2024 г.);
 2. Улыбин Дмитрий Анатольевич, основное место работы: инженер 1 кат. ИНХ СО РАН, совместительство: инженер-исследователь НГУ, аспирант ФЕН НГУ, магистр химии (dauybin, учетная запись до 20.10.2025 г.)
- Работа выполнялась при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (программа базового финансирования ИНХ СО РАН, проект № 121031700313-8) и Российского научного фонда (проект № 21-13-00274, <https://rscf.ru/project/21-13-00274/>, руководитель С.Б. Артемкина)
- Научное содержание работы

Работа направлена на моделирование распределения электронной плотности в неорганических и комплексных периодических структурах. На настоящем (предварительном) этапе предполагается произвести подбор необходимого квантовохимического ПО и оценить необходимые вычислительные ресурсы для «обсчета» кристаллов с элементарными ячейками средних размеров (до 1 нм^3). После выполнения предварительной части проекта начаты попытки квантово-химического моделирования динамических свойств кристаллических структур при условиях твердофазных превращений с целью поиска вариантов микроструктурирования.

На момент начала работы имелась возможность производить рутинные вычисления распределения электронной плотности в кристаллах с малыми элементарными ячейками ($0,15\text{--}0,20 \text{ нм}^3$). Проведение вычислений для систем с большей протяженностью являлось нетривиальной задачей, требующей подбора и настройки программного обеспечения, а также грамотного контроля процесса и результата расчета квалифицированными специалистами. За время выполнения работы в различных исследовательских группах был достигнут значительный прогресс по увеличению размеров «обсчитываемой» независимой части кристаллов. Однако, предложенные методики содержат некоторое количество допущений, применимость которых в каждом конкретном расчете нуждается в подтверждении и, возможно, дополнительной «настройке» параметров вычислений. При выполнении такой работы становится возможным (а) моделирование распределения электронной плотности в кристаллах с размерами независимой части до $2\text{--}3 \text{ нм}^3$, что позволяет моделировать возможные дефекты, (б) проводить

квантово-химические динамические расчеты, позволяющие оценить влияние локальных корреляция в структурах и значимость ангармонических эффектов.

В настоящей работе были опробованы доступные квантово-химические пакеты программ: Quantum Espresso (открытый код), CP2K (открытый код), VASP (коммерческий, в сотрудничестве с к.г.-м.н. Гаврюшкиным П.Н.) с применением различных способов описания электронной плотности (PW, PAW использованием различных псевдопотенциалов) и уровней теории (LDA, GGA, meta-GGA). Программы могут использовать гибридные технологии организации параллельных вычислений, включающие OpenMP, MPI и вычисления на графических ускорителях, использование высокоэффективных математических библиотек.

По предложению вед. инженера НГУ Калюжного В.А. проведена (совместно с к.х.н. Хисамовым Р.М.) перекомпиляция и тестирование пакета CP2K для повышения эффективности расчетов.

С использованием вышеперечисленного ПО были проведены квантовохимические расчеты («точечная» оптимизация электронной плотности, релаксация атомной структуры с и без оптимизацией параметров кристаллической решетки) для модельных (С-алмаз, С-графит, Si-алмаз) и «реальных» (координационные соединения с полиароматическими лигандами, полимерные и молекулярные полиядерные комплексы V-Se-I-O и др.) фаз с применением периодических граничных условий. Полученные результаты были использованы для верификации расчетных приближений и подтверждения структурных моделей, полученных методом рентгеноструктурного анализа.

Накопленные данные будут использованы для дальнейшего поиска путей повышения производительности расчетов и планирования вычислительных заданий. Продолжение начатой работы позволит получать уникальную информацию для повышения информативности и надежности экспериментальных методов исследования строения твердых фаз и материалов на их основе.

- Эффект от использования кластера. Ожидаемые цели в достаточной степени достигнуты. Полученные результаты позволили спланировать направления дальнейших работ и уже были использованы при подготовке публикаций в научных журналах.
- Перечень публикаций, содержащих результаты работы:
 1. Komarov V., Galiev R., Artemkina S. "2d, or Not 2d: An Almost Perfect Mock of Symmetry" // *Symmetry*. 2023. V. 15. P. 508. <https://doi.org/10.3390/sym15020508>, **IF3.13, Q2**
 2. Galiev R.R., Komarov V.Y., Khisamov R.M., Ledneva A.Y., Artemkina S.B., Fedorov V.E. "Characterization of the O-centered vanadium seleniodides V₄OSe₈I₆·X (X = I₂, 3,5-dimethylpyrazole)" // *Inorg. Chim. Acta*. 2023. V. 548. P. 121366. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2022.121366> **IF2.51, Q2**
 3. Лавренова Л.Г., Комаров В.Ю., Глинская Л.А., Лавров А.Н., Артемьев А.В. "Синтез, структура и свойства комплексов меди(ii) с 2,5-бис(этилтио)-1,3,4-тиадиазолом" //

Журн. Структ. Химии. 2023. Т. 64, №5, С. 110391.
https://doi.org/10.26902/JSC_id110391
<https://doi.org/10.1134/S0022476623050086> **IFo.73, Q4**

- Впечатления от работы. ИВЦ НГУ является прозрачным и удобным для использования Центром коллективного пользования. Персонал ИВЦ оперативно отвечает на возникающие вопросы и следит за эффективностью использования оборудования. Единственным существенным недостатком ИВЦ НГУ является регулярно случающиеся простои из-за выхода из строя системы кондиционирования.