

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИКИ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В ДЕФЕКТНОЙ 10Å ФАЗЕ

*Тарарушкин Е.В.,\*<sup>1</sup> Смирнов Г.С.,<sup>1</sup> Калинин А.Г.<sup>2</sup>*

*<sup>1</sup>НИУ ВШЭ, Москва, Россия, <sup>2</sup>Лаборатория СУБАТЕХ (ИМТ Атлантик), Нант, Франция*

*\*etararushkin@hse.ru*

10Å фаза является важным представителем семейства высокобарических водосодержащих магнезиальных силикатов (DHMS), ответственных за транспорт воды в мантии Земли в зонах субдукции. Структуру 10Å фазы можно представить как триоктаэдрические Т-О-Т слои талька с некоторым количеством молекул H<sub>2</sub>O в межслоевом пространстве. Такая модель уже успешно исследовалась ранее методами молекулярной динамики [1]. Однако недавние эксперименты показывают, что тетраэдрические силикатные слои реальной 10Å фазы содержат в своей структуре замещения гидрогранатового типа в количестве до 10% от атомов кремния [2]. Силанольные группы этих структурных дефектов могут создавать сильные водородные связи с молекулами H<sub>2</sub>O в межслоевом пространстве, что, в свою очередь, несколько меняет свойства дефектной 10Å фазы по сравнению с идеальной моделью на основе структуры гидрофобного талька.

Молекулярно-динамическое моделирование свойств дефектной 10Å фазы и сравнение ее свойств с предыдущей идеальной моделью выполнялось с помощью новой версии силового поля ClayFF-МОН [3], а также с помощью теории функционала электронной плотности (DFT). Сравнение результатов моделирования показало, что силанольные группы дефектов и молекулы H<sub>2</sub>O вблизи дефектов имеет строгую ориентацию как в случае с ClayFF-МОН, так и с DFT. В тоже время применение оригинальной версии ClayFF показало, что силанольные группы имеют свойство менять ориентацию, что сказывается на поведении молекул H<sub>2</sub>O вблизи дефектов.

*Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.*

- 
1. Wang J.W., Kalinichev A.G., Kirkpatrick R.J. // Earth Planet. Sci. Lett. 2004. V. 222. P. 517.
  2. Welch M.D., Pawley A.R., Ashbrook S.E., Mason H.E., Phillips, B.L. // Amer. Mineral. 2006. V. 91. P. 1707.
  3. Cygan R.T., Greathouse, J.A., Kalinichev A. G. // J. Phys. Chem. C. 2021. V. 121. P. 17573.