



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ  
ТҰҢҒЫШ ПРЕЗИДЕНТІ - ЕЛБАСЫНЫҢ ҚОРЫ

**«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ – 2017»**

студенттер мен жас ғалымдардың  
XII Халықаралық ғылыми конференциясының  
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ**

XII Международной научной конференции  
студентов и молодых ученых  
**«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ – 2017»**

**PROCEEDINGS**

of the XII International Scientific Conference  
for students and young scholars  
**«SCIENCE AND EDUCATION - 2017»**



14<sup>th</sup> April 2017, Astana



**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ  
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**«Ғылым және білім - 2017»  
студенттер мен жас ғалымдардың  
XII Халықаралық ғылыми конференциясының  
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ  
XII Международной научной конференции  
студентов и молодых ученых  
«Наука и образование - 2017»**

**PROCEEDINGS  
of the XII International Scientific Conference  
for students and young scholars  
«Science and education - 2017»**

**2017 жыл 14 сәуір**

**Астана**

**УДК 378**

**ББК 74.58**

**Ғ 96**

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2017» студенттер мен жас ғалымдардың XII Халықаралық ғылыми конференциясы = The XII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2017» = XII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2017». – Астана: <http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2017. – 7466 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-827-6

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

УДК 378

ББК 74.58

ISBN 978-9965-31-827-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия  
ұлттық университеті, 2017

## ИССЛЕДОВАНИЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИИ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Аманкелді Салтанат

Студент 4-го курса Физико-технического факультета

ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

Научный руководитель - А.У. Абуова

Принято считать, что ядро Земли железное, внутреннее ядро - в кристаллическом состоянии, внешнее – в виде расплава. Считается, что знание упругости и реологии железа при давлении характерном для ядра Земли очень важно для понимания сейсмологических наблюдений, таких как малое затухание сейсмических волн, малые величины скоростей сдвиговых волн и анизотропия скорости распространения волн сжатия. Многочисленные группы геофизиков экспериментаторов и теоретиков получили значительное количество новых данных по реологии железа и, тем не менее, до сих пор остается не совсем ясным, как устроена Земля и её ядро, в частности. Само образование ядра является главным событием ранней истории Земли и актуальной темой для исследований. Согласно геофизическим данным, внешнее жидкое ядро Земли имеет дефицит плотности и сейсмических скоростей 5—12 %, а внутреннее твердое ядро — 3—5 % за счет присутствия одного или нескольких легких элементов [1]. Проблему легких элементов можно решить с помощью детального термодинамического описания твердых соединений железа и никеля, а также металлических расплавов на основании данных по их уравнениям состояния (УС) и границам фазовых переходов [2]. В данной работе были исследованы УС железа и проведен анализ структурных и магнитных фазовых переходов при давлениях до 500 ГПа с помощью квантово-химических расчетов из первых принципов (*ab initio*). На основании результатов расчетов и сравнения с экспериментальными данными проведен анализ стабильности и физических свойств железа в качестве потенциальных компонентов в составе внутреннего ядра Земли. Поскольку экспериментальные данные о свойствах вещества в условиях нижней мантии и ядра Земли дают весьма противоречивые результаты, то простая модель является первым приближением в расчете их термодинамических функций [3].

Для проведение расчетов был выбран метод теории функционала плотности (ТФП) с использованием метода проекционно-присоединенных *плоских волн* с функционалами LDA и PBE. Все расчеты были проведены с использованием программного комплекса VASP 5.3.3 [5, 6].

В расчетах был использован набор PAW [5, 7] псевдопотенциалов для валентных электронов с приведенной предельной энергией и/или приведенным количеством электронов. Необходимая точность расчетов, которая составила  $10^{-3}$  эВ на модельную ячейку была достигнута при использовании энергии обрезания плоских волн которая равна 700 эВ. Свободная энергия  $F_{qh}$  кристалла в этой модели вычисляется в рамках подхода динамики решетки в квазигармоническом приближении в виде

$$F_{qh} = E_0 + F_{vib} \quad (1)$$

где энергия основного состояния  $E_0$  является колебательным вкладом,

$$F_{vib} = \frac{1}{2} \sum_j \hbar \omega_j + kT \sum_j \ln[1 - \exp\left(\frac{\hbar \omega_j}{kT}\right)] \quad (2)$$

где  $\omega_j$ - $j$ -ая частота колебания кристалла.

линейного теплового расширения, постоянной равновесия решетки и модуля объемный упругости.

В квазигармоническом приближении свободная энергия кристалла имеет ту же форму, как и в гармоническом приближении, но структурные параметры в фиксированном объеме зависят от температуры. Эта зависимость определяется самосогласованно при расчете свободной энергии системы. Чтобы получить уравнение состояния  $P(V)$  при фиксированной температуре используется выражение  $P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ . Коэффициент теплового расширения  $\alpha$  определяется выражением

$$\alpha(T) = \frac{1}{V} \frac{dV}{dT}, \quad (3)$$

Постоянный объем и тепловая мощность постоянного давления были вычислены из уравнения 1 в виде

$$C_v = -T \left( \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V \quad (4)$$

$$C_p = C_v + \alpha^2 BVT \quad (5)$$

где  $\alpha$ ,  $V$  и  $B$  соответственно являются расчетными коэффициентами

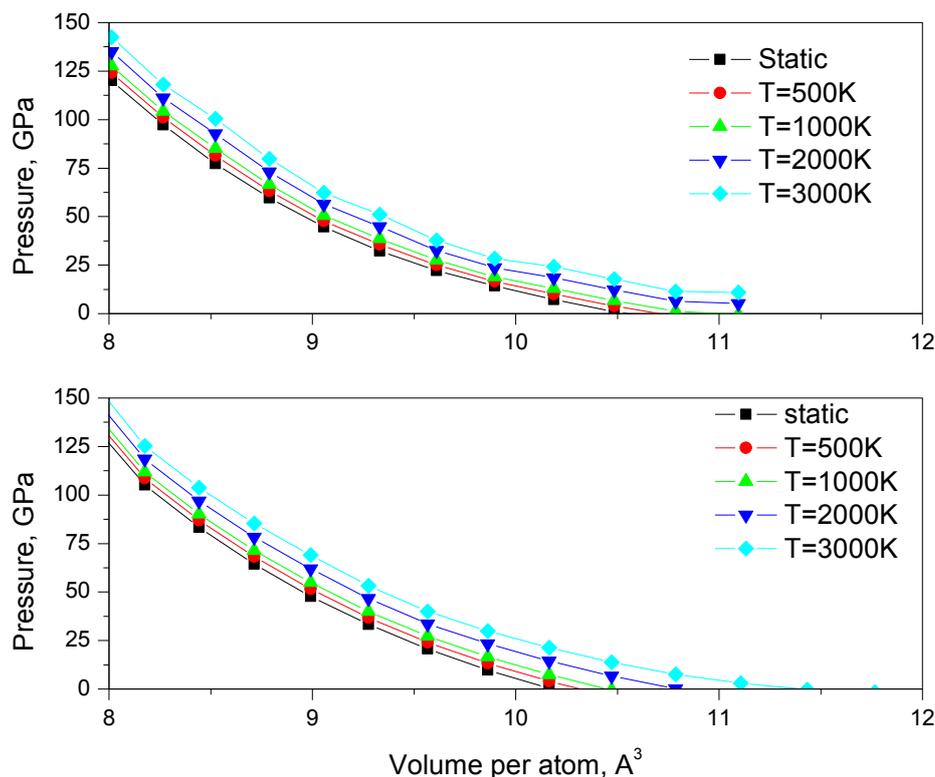


Рисунок 1 - Зависимость объемов ячейки от давления для магнитной и немагнитной фазы железа при разных температурах

Результаты расчетов представлены на рисунке 1. Ab initio расчеты обычно завышают (GGA) или занижают (LDA) значения  $V_0$  для большинства фаз, что существенно затрудняет сравнение термодинамических данных для соединений железа с сейсмическими данными

для ядра Земли. Зависимость объемов ячейки от давления для магнитной и немагнитной фазы железа при разных температурах показаны на рисунке 1-2.

#### Список использованных источников

1. Добрецов Н.Л., Шацкий А.Ф. Глубинный цикл углерода и глубинная геодинамика: роль ядра и карбонатитовых расплавов в нижней мантии // Геология и геофизика, 2012, т. 53 (11), с. 1455—1475.
2. Литасов К.Д., Шарыгин И.С., Шацкий А.Ф., Гаврюшкин П.Н., Дорогокупец П.И., Соколова Т.С., Отани Э., Дымшиц А.М., Алифирова Т.А. P-V-T-уравнения состояния карбидов железа  $Fe_3C$  и  $Fe_7C_3$  и их соотношения в условиях мантии и ядра Земли // ДАН, 2013, т. 453, № 6, с. 666—670.
3. Acet M., Herper H., Entel P., Wassermann E.F. The phase stability of  $\epsilon$ -Fe alloys // J. De Physique IV, 2001, v. 11, p. 229—234.
4. Badro J., Côté A.S., Brodholt J.P. A seismologically consistent compositional model of Earth's core // Proceedings of the National Academy of Sciences, 2014, v. 111, p. 7542—7545.
5. Blochl P.E. Projector augmented-wave method // Phys. Rev., 1994, v. B 50, p. 17953—17979.
6. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev., 1965, v. 140, p. A1133—A1138.
7. Kresse G., Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a planewave basis set // Phys. Rev., 1996, v. B 54, p. 11169—11186.
8. Chabot N.L., Campbell A.J., McDonough W.F., Draper D.S., Agee C.B., Humayun M., Watson H.C., Cottrell E., Saslow S.A. The Fe—C system at 5 GPa and implications for Earth's core // Geochim. Cosmochim. Acta, 2008, v. 72, p. 4146—4158.

ӘОЖ 541.182.023.4.

#### УРАНМЕН АКТИВТЕНДІРІЛГЕН ЛИТИЙ ФТОРИДІ КРИСТАЛДАРЫНЫҢ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯСЫ

Арыстан Әйгерім Асқарқызы

[arystanova\\_1995@mail.ru](mailto:arystanova_1995@mail.ru)

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Физика-техникалық факультетінің 4 курс студенті,

Астана, Қазақстан

Ғылыми жетекші - Ж.Т. Карипбаев

Поливалентті иондармен активтендірілген литий фториді кристалдары көрінетін жарық диапазонында қатты радиацияның энергия ағының эффективті түрлендіргіштері болып табылады. Кристалдар медицинада сцинтилляциялық материалдар ретінде пайдалануға болашағы зор, себебі олар тінгееквивалентті. Басқа жағынан LiF кристалдары құрамында күрделі комплекстік ақаулары бар мольдері ретінде қолдануға да жарамды [1]. Қазіргі уақытта зарядтық күйлерді және серпімді кернеулерді толықтыру үшін гидроксильді топ иондарымен бірге уранмен активтендірілген литий фториді кристалдарының люминесценцияның спектралды және кинетикалық сипаттамалары келтірілген.

*Зерттеу әдістері:* Люминесценция және қозу спектрлері CM2203 спектрофлуориметрімен жарық көзі ретінде импульстік ксенондық лампа қолданылып өлшенді.  $4000 - 2000 \text{ см}^{-1}$  аймағында үлгілердің өткізу спектрлері JASCO фирмасының спектрометрін қолдану арқылы өлшенген болатын. 195-ден 1200 нм-ге дейінгі диапазондағы оптикалық жұтылу спектрлері СФ-256 және SPECORD 250 PLUS спектрофотометрлерімен өлшенді. Кристалдардың люминесценция сөнуінің кинетикалық сипаттамалары электрондардың импульс шоғырының ағынымен 10 нс ұзақтығы кезінде өлшенді.