



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»



14th 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.eni.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

10. Kresse, G. and D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 1999. 59(3): p. 1758-1775.
11. Kresse, G. and J. Furthmüller, Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, 1996. 6(1): p. 15-50.
12. Kresse, G. and J. Hafner, Ab initio. *Physical Review B*, 1993. 47(1): p. 558-561.
13. Zou, D., et al., Electronic structures and thermoelectric properties of layered BiCuOCh oxychalcogenides (Ch = S, Se and Te): first-principles calculations. *Journal of Materials Chemistry A*, 2013. 1(31): p. 8888-8896.
14. Dudarev, S.L., et al., Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study. *Physical Review B*, 1998. 57(3): p. 1505-1509.
15. Kumar, S. and U. Schwingenschlogl, Lattice thermal conductivity in layered BiCuSeO. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2016. 18(28): p. 19158-19164.
16. Madsen, G.K.H. and D.J. Singh, BoltzTraP. A code for calculating band-structure dependent quantities. *Computer Physics Communications*, 2006. 175(1): p. 67-71.
17. H. Kamioka, H.H., M. Hirano, K. Ueda, T. Kamiya and H. Hosono, *Journal of Luminescence* 2005(112): p. 66-70.
18. Li, J., et al., Thermoelectric properties of Mg doped p-type BiCuSeO oxyselenides. *Journal of Alloys and Compounds*, 2013. 551: p. 649-653.
19. Pei, Y.-L., et al., High thermoelectric performance of oxyselenides: intrinsically low thermal conductivity of Ca-doped BiCuSeO. *NPG Asia Mater*, 2013. 5: p. e47.
20. Li, J., et al., A high thermoelectric figure of merit $ZT > 1$ in Ba heavily doped BiCuSeO oxyselenides. *Energy & Environmental Science*, 2012. 5(9): p. 8543-8547.
21. Zhao, L.D., et al., Bi_{1-x}Sr_xCuSeO oxyselenides as promising thermoelectric materials. *Applied Physics Letters*, 2010. 97(9): p. 092118.

УДК 547.52; 539.89

СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА CaCO₃ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ВНЕШНИХ УСЛОВИЯХ. РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Бактыбаева Д.

Студент 4-го курса Физико - технического факультета, ЕНУ им. Л.Н.Гумилева,
Астана, Казахстан

Научный руководитель - А.У. Абуова

Карбонат кальция (CaCO₃) является одним из наиболее распространенных минералов на поверхности Земли, что имеет большое значение в качестве минералообразующих минералов в геологической науке. Он играет ключевую роль в глобальном круговороте углерода на Земле. Кроме того, он широко используется для многих промышленных применений, таких как наполнители и пигменты в бумагах, пластмассах, красках и покрытиях из-за его высокой яркости, эффективного рассеяния света и сравнительной дешевизны [1, 2]. Поэтому CaCO₃ интенсивно изучалось множеством исследователей в различных областях исследований. В данной работе рассматривались исследовались динамики решетки и термодинамических свойств кристалла арагонита как перспективного материала для применений в области нелинейной оптики [3, 4].

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].

В расчетах был использован набор PAW псевдопотенциалов для валентных электронов – Ca, C, O с приведенной предельной энергией и/или приведенным количеством

электронов (таблица 1). Необходимая точность расчетов, которая составила 10^{-3} эВ на модельную ячейку была достигнута при использовании энергии обрезания плоских волн, рассмотренном выше; для всех структур число k-точек в первой зоне Бриллюэна при оптимизации геометрии было выбрано в виде сетки $4 \times 4 \times 4$ для ароганита, и для пост ароганита полученной с помощью схемы Монхорста-Пака [6]. В качестве исходного пункта наших расчетов мы приняли экспериментальную кристаллическую структуру ароганита [7], имеющего пространственную группу Pmcn (рисунок 1) и пост-ароганита с пространственной группой Pmnp (рисунок 2) [8]. 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 ω_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 зависит 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 α 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 α , V и B соответственно являются расчетными коэффициентами

Таблица 1

Используемые псевдопотенциалы для валентных электронов – Ca, C, O с приведенной предельной энергией и приведенным количеством электронов

Псевдопотенциалы	Валентные электроны
Ca	$3p^6 4s^2$
C	$2s^2 2p^2$
O	$2s^2 2p^4$

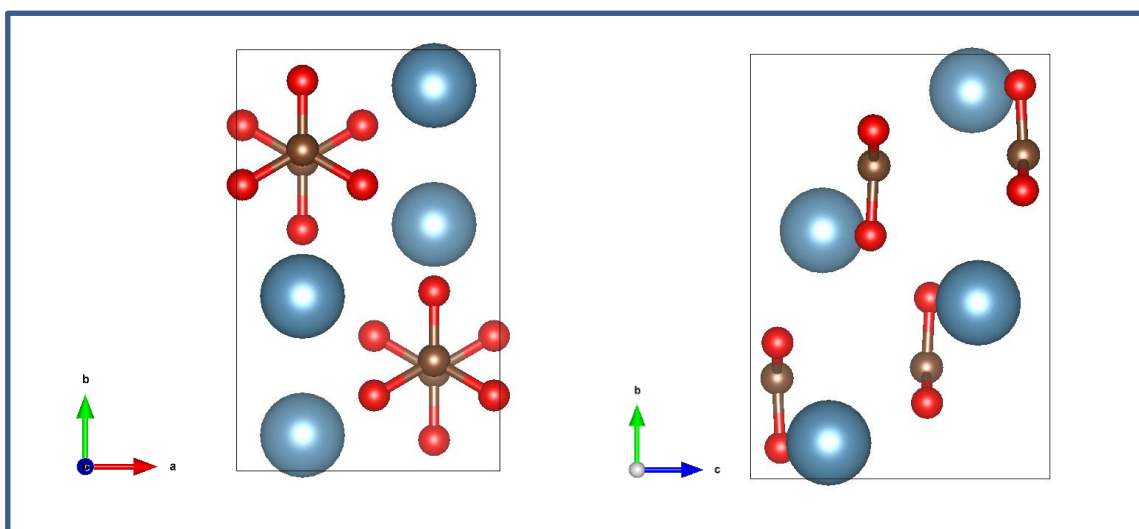


Рисунок 1 - Элементарная ячейка арагонита ($a = 4.95 \text{ \AA}$, $b = 7.96 \text{ \AA}$, $c = 5.74 \text{ \AA}$; $Z = 4$)

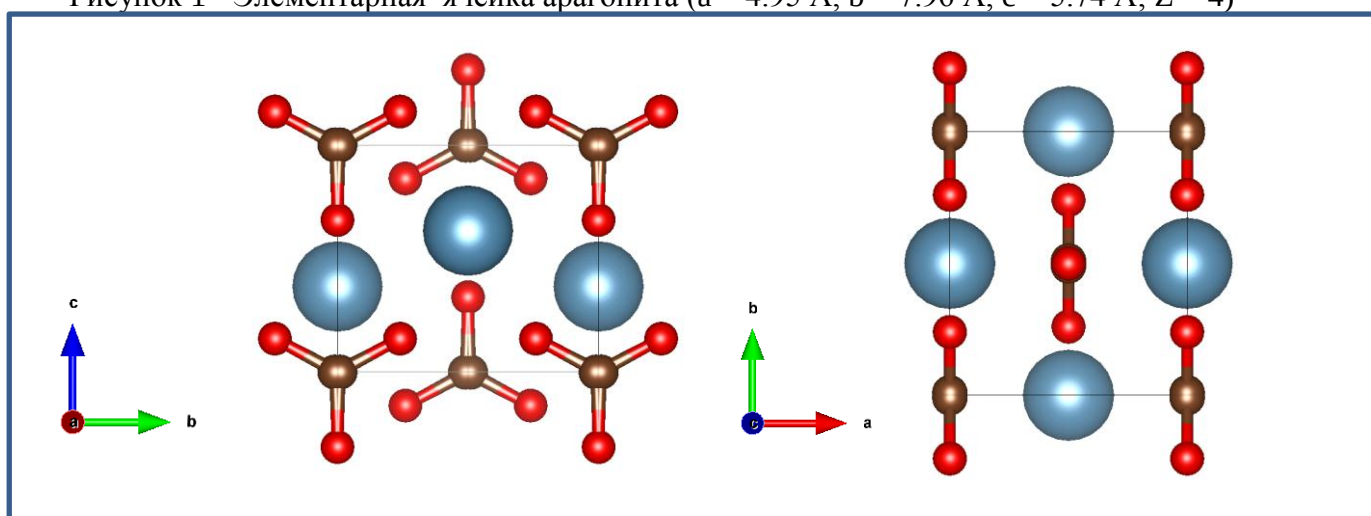


Рисунок 2 - Элементарная ячейка пост- арагонита ($a = 4.101 \text{ \AA}$, $b = 4.561 \text{ \AA}$, $c = 3.964 \text{ \AA}$; $Z = 2$)

Уравнение состояния $P(V)$ для статической решетки в диапазоне температур до 1800K, используя аппроксимацию PBE и аппроксимацию локальной плотности, было вычислено с использованием подхода динамики решетки в квазигармоническом приближении и представлено на рисунке 3. Из рисунка видно, что $P(V)$ при всех температурах наблюдаются монотонные функции. Влияние температуры вызывает равномерное смещение кривой сжимаемости, вычисленное с помощью уравнения состояния статической решетки.

Модуль объемной упругости B как функция от температуры T выше 1200 K показано на рисунке 4. При $T > 300\text{K}$ значение B значительно уменьшается с увеличением температуры, это указывает на то, что объем ячейки арагонита значительно варьируется по мере увеличения температуры. С увеличением давления, модуль объемной упругости снижается примерно на 30% в интервале температур 0-1000 K. Можно сделать вывод, что твердость арагонита уменьшается с ростом температуры и увеличивается с увеличением приложенного давления.

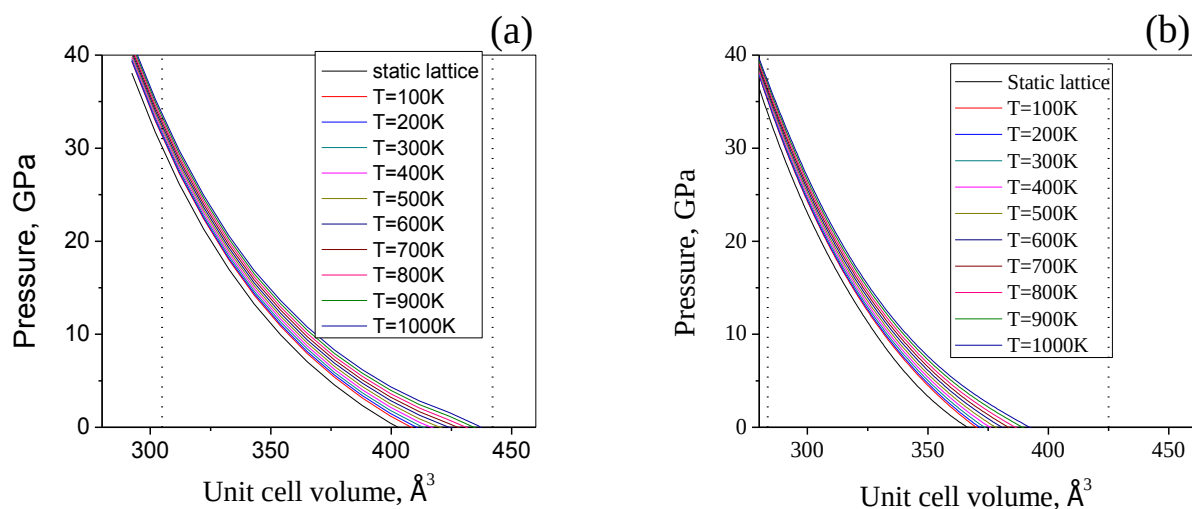


Рисунок 3 - P-V-T диаграммы арагонита полученные при помощи расчетов «из первых принципов» с использованием (a) PBE и (b) LDA обменно-корреляционных функционалов. Вертикальные линии показывают границы механической устойчивости решетки

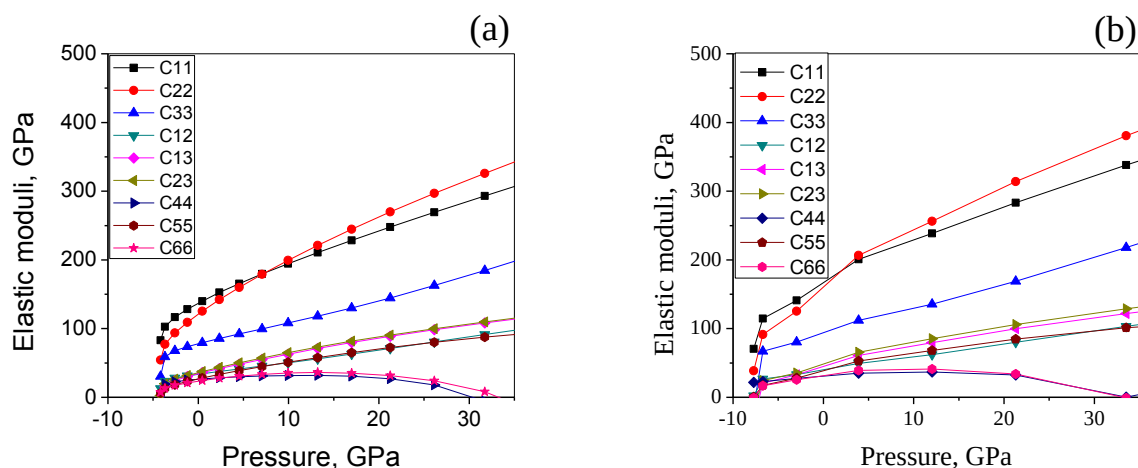


Рисунок 4 - Компоненты тензора упругих модулей, рассчитанные методами (a) PBE и (b) LDA

Как упоминалось выше, уравнение состояния $P(V)$ является монотонной функцией при всех рассматриваемых температурах, это означает, что арагонита может быть стабильным при всех значениях рассматриваемых давлений. Для определения предела абсолютной устойчивости кристалла вычислены тензор модулей упругости C_{ij} , пренебрегая температурными эффектами, и представлены на рисунке5.

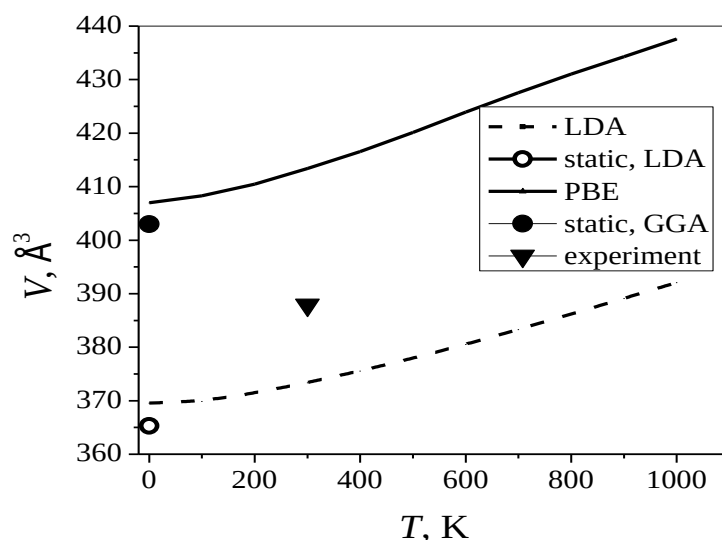


Рисунок 5 - Зависимость объема элементарной ячейки арагонита от температуры при атмосферном давлении

Арагонит CaCO_3 теоретически исследован методом функционала плотности с использованием приближения локальной плотности и обобщенного градиентного приближения. Рассчитаны параметры решетки как функции температуры при атмосферном давлении, уравнения состояния $P(V)$ в диапазоне температур до 1800 К, упругие модули, коэффициенты теплового расширения при различных давлениях и теплоемкость решетки. Сравнение с известными экспериментальными данными показало, что расчет методом PBE для статичной решетки без учета вклада решеточных колебаний дает более точное описание постоянных решетки по сравнению с LDA методом. Однако, учет вклада фононов приводит к тому, что метод LDA дает лучшее согласие с экспериментальными данными, полученными при комнатных температурах. Установлены границы абсолютной стабильности решетки арагонита. Показано, что нестабильность кристалла наступает при давлениях около 30 ГПа из-за сдвиговой неустойчивости в плоскостях XY и YZ.

Список использованных литератур

1. Norrestam, R., M. Nygren, and J. Bovin, Structural investigations of new calcium-rare earth (R) oxyborates with the composition $\text{Ca}_4\text{RO}(\text{BO}_3)_3$. Chemistry of materials, 1992. **4**(3): p. 737-743.
2. Bai, X., G. Zhang, and P. Fu, Photoluminescence properties of a novel phosphor, $\text{Na}_3\text{La}_9\text{O}_3(\text{BO}_3)_8: \text{RE}^{3+}$ (RE= Eu, Tb). Journal of Solid State Chemistry, 2007. **180**(5): p. 1792-1795.
3. Shatskiy, A., et al., New experimental data on phase relations for the system $\text{Na}_2\text{CO}_3\text{-CaCO}_3$ at 6 GPa and 900-1400 degrees C. American Mineralogist, 2013. **98**(11-12): p. 2164-2171.
4. Oganov, A.R., C.W. Glass, and S. Ono, High-pressure phases of CaCO_3 : Crystal structure prediction and experiment. Earth and Planetary Science Letters, 2006. **241**(1-2): p. 95-103.
5. Vienna Ab initio Simulation Package. <http://www.vasp.at/>
6. Kresse, G. and J. Furthmuller, Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. Computational Materials Science, 1996. **6**(1): p. 15-50.
7. Kresse, G. and D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. Physical Review B, 1999. **59**(3): p. 1758-1775.
8. Brik, M.G., First-principles calculations of structural, electronic, optical and elastic properties of magnesite MgCO_3 and calcite CaCO_3 . Physica B-Condensed Matter, 2011. **406**(4): p. 1004-1012.