

Базарбек Асыл-Дастан Базарбекұлының 6D072300 - «Техникалық физика» мамандығы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алуға ұсынылған «Жоғары қысымда Fe-Ni-фосфидтер және Ni-сульфидтер: планеталық ядролардың құрамын және дифференциациялауын зерттеу үшін алғашқы принциптерден есептеулер» диссертациялық жұмысының АҢДАТПАСЫ

Диссертациялық зерттеудің мақсаты

Диссертациялық зерттеудің мақсаты Fe-P, Ni-P, Ni-S жүйелеріндегі мүмкін тұрақты қосылыстар мен олардың құрылымдарын, сондай-ақ олардың Жер ядросының қысымындағы фазалық қатынастарын анықтау болып табылады.

Зерттеу міндеттері

1. 100-400 ГПа қысым диапазонында Fe-P, Ni-P және Ni-S жүйелерінде тұрақты кристалды құрылымдарды табу үшін есептеулерді жүргізу.
2. Табылған Fe_xP_y , Ni_xP_y және Ni_xS_y құрылымдары үшін тұрақтылық өрістерін анықтау.
3. Фонондық спектрлерді есептеуді және болжамды фазалардың динамикалық тұрақтылығын анықтау.
4. Магниттік моменттің жоғалу қысымын анықтау үшін спин-поляризацияланған есептеулер жүргізу.
5. Болжамды фазаларға құрылымдық талдау жүргізу.

Зерттеу әдістері

Диссертациялық жұмыста аралық қосылыстар мен кристалды құрылымдарды іздеу үшін USPEX бағдарламалық пакетінде енгізілген эволюциялық алгоритмдер қолданылды. Электрондық құрылымды оңтайландыру және есептеу жалпақ толқындардың негізін, PAW формализмін және VASP бағдарламалық пакетінде енгізілген жалпыланған градиентті жақындатуды қолдана отырып, тығыздық функционалдық теориясы аясында жүргізілді. Фонон спектрлерін есептеу үшін супер ұяшық әдісі және соңғы ығысу әдісі қолданылды. Бұл есептеу тығыздық функционалдық теориясы аясында да жүргізілді.

Негізгі ережелері (дәлелденген ғылыми гипотезалар және жаңа білім болып табылатын басқа да тұжырымдар)

1. Fe-P жүйесі Жердің ішкі ядросының қысымымен екі Fe_2P және FeP аралық қосылыстарымен сипатталады. Бұл жағдайда ең темір фосфиді Fe_2P болып табылады.

2. Ni-P жүйесі бірқатар қатты ерітінділердің болуымен және 100-400 ГПа қысымында Ni_8P_3 , Ni_2P және NiP_2 үш аралық қосылыстарымен сипатталады.

3. Ni-S жүйесі бірқатар қатты ерітінділердің болуымен және 100-400 ГПа қысым кезінде Ni_3S , Ni_2S және NiS_3 үш аралық қосылыстарымен сипатталады.

Зерттеудің негізгі нәтижелерінің сипаттамасы

Диссертациялық жұмыста алғаш рет Fe-P, Ni-P және Ni-S жүйелеріндегі жаңа құрылымдар болжанды, фондық спектрлерді есептеу арқылы олардың динамикалық тұрақтылығы орнатылды және табылған барлық құрылымдар үшін магниттік моменттің қысымға тәуелділігі көрсетілді. Табылған Fe_xP_y , Ni_xP_y және Ni_xS_y құрылымдарының тұрақтылық өрістері анықталды, онда 100-400 ГПа барлық қысым диапазонында қандай стехиометрия тұрақты және белгілі бір қысым кезінде тұрақсыз болып табылатын изохимиялық қоспаларға ыдырайтын стехиометрия көрсетілген. Сонымен қатар, диссертация Жердің ішкі ядросының қысымындағы аралық қосылыстарды көрсетеді.

Алынған нәтижелердің жаңалығы мен маңыздылығының негіздемесі

Диссертациялық жұмыста Fe-P жүйесіндегі 400 ГПа-ға дейінгі фазалық қатынастар дұрыс анықталған. Сонымен қатар, Ni-P және Ni-S жүйелері алғаш рет Жер ядросының қысымымен зерттелді және осы жүйелердегі фазалық қатынастар орнатылды. Жер ядросының қысымы мен Ni құрылымында S және P мүмкін болатын араластыру шегі белгіленді.

Осы зерттеу барысында алынған нәтижелер іргелі сипатқа ие және Жер мен планеталар ядроларының құрылымы мен құрамын одан әрі зерттеу үшін маңызды. Сондай-ақ, алынған мәліметтер болашақ зерттеулердің басым бағыттарын анықтауға көмектеседі.

Ғылымның даму бағыттарына немесе мемлекеттік бағдарламаларға сәйкестігі

Диссертациялық жұмыс Қазақстан Республикасында іске асырылатын ғылымды дамытудың басым бағыттарына сәйкес келеді және жаңа ғылыми негізделген теориялық нәтижелерді қамтиды, олардың жиынтығы зерттелетін ғылыми бағыттарды дамыту үшін маңызды.

Докторанттың әрбір жарияланымды дайындауға қосқан үлесінің сипаттамасы жазылады

Диссертациялық зерттеудің барлық теориялық есептеулерін автордың өзі Новосібір мемлекеттік университетінің Жер мантиясының эксперименттік геохимиясы мен петрологиясы зертханасының және Ресей Ғылым

академиясының Сібір филиалының В.С. Соболев атындағы Геология және минералогия институтының жоғары қысымдағы Жер затының фазалық өзгерістері мен диаграммалары зертханасының қызметкерлерінің қатысуымен жүргізді. Нәтижелерді өңдеу және талдау ғылыми кеңесшілермен бірлесіп жүргізілді.

Диссертациялық зерттеудің негізгі нәтижелері диссертация тақырыбына толық сәйкес келетін баспа жұмыстарында жарияланды: оның ішінде Web of Science және Scopus базасына кіретін және JCR Thomson Reuters сәйкес Q1 квантиліне жататын рецензияланатын ғылыми журналда 1 мақала, ҚР БҒМ-ның Білім және ғылым саласында сапаны қамтамасыз ету комитеті ұсынған ғылыми басылымдарда 4 мақала, халықаралық ғылыми конференциялардың еңбектеріндегі 10 тезис пен баяндама.