

АННОТАЦИЯ

диссертационной работы Базарбека Асыл-Дастан Базарбекулы «Fe-Ni-фосфиды и Ni-сульфиды при высоких давлениях: расчеты из первых принципов для исследования состава и дифференциации планетарных ядер», представленной на соискание степени доктора философии (PhD) по специальности 6D072300 - «Техническая физика»

Цель диссертационного исследования

Целью диссертационного исследования является определение возможных стабильных соединений и их структур в системах Fe-P, Ni-P, Ni-S, а также их фазовые соотношения при давлениях ядра Земли.

Задачи исследования

1. Провести расчеты по поиску стабильных кристаллических структур в системах Fe-P, Ni-P и Ni-S в интервале давлений 100-400 ГПа.
2. Определить поля устойчивости для найденных структур Fe_xP_y , Ni_xP_y и Ni_xS_y .
3. Провести расчеты фононных спектров и определение динамической устойчивости предсказанных фаз.
4. Провести спин-поляризованные расчеты для определения давления исчезновения магнитного момента.
5. Провести структурный анализ предсказанных фаз.

Методы исследования

В работе для поиска промежуточных составов и кристаллических структур использовались эволюционные алгоритмы реализованные в программном пакете USPEX. Оптимизация и расчет электронной структуры проводились в рамках теории функционала плотности с использованием базиса плоских волн, PAW-формализма и приближения обобщенного градиента реализованных в программном пакете VASP. Для расчета фононных спектров использовались метод суперячейки и метод конечных сдвигов. Данный расчет также проводился в рамках теории функционала плотности.

Основные положения (доказанные научные гипотезы и другие выводы, являющиеся новыми знаниями), выносимые на защиту

1. Система Fe-P характеризуется двумя промежуточными соединениями Fe_2P и FeP при давлениях внутреннего ядра Земли. Наиболее железосодержащем фосфидом при этих условиях является Fe_2P .
2. Система Ni-P характеризуется наличием ряда твердых растворов и тремя промежуточными соединениями Ni_8P_3 , Ni_2P и NiP_2 при давлениях 100-400 ГПа.

3. Система Ni-S характеризуется наличием ряда твердых растворов и тремя промежуточными соединениями Ni₃S, Ni₂S и NiS₃ при давлениях 100-400 ГПа.

Описание основных результатов исследования

В диссертационной работе впервые были предсказаны новые структуры в системах Fe-P, Ni-P и Ni-S, была установлена их динамическая стабильность с помощью расчета фононных спектров и отображены зависимости магнитного момента от давления для всех найденных структур. Определены поля устойчивости найденных Fe_xP_y, Ni_xP_y и Ni_xS_y структур, где указывается какие стехиометрий являются стабильными во всем диапазоне давлений 100–400 ГПа и какие стехиометрий распадаются на изохимические смеси, являясь нестабильной при определенных давлениях. Кроме этого, в диссертации показаны промежуточные соединения при давлениях внутреннего ядра Земли.

Обоснование новизны и важности полученных результатов

В данной диссертационной работе корректно определены фазовые соотношения в системе Fe-P вплоть до 400 ГПа. Так же необходимо отметить, что в данной работе впервые исследована система Ni-P и Ni-S при давлениях ядра Земли и установлены фазовые соотношения в данных системах. Установлен возможный предел смесимости S и P в структуре Ni при давлениях ядра Земли.

Результаты, полученные в ходе данного исследования, имеют фундаментальный характер и важны для дальнейшего исследования структуры и состава ядер Земли и планет. Также полученные данные помогут определить приоритетные направления для будущих исследований.

Соответствие направлениям развития науки или государственным программам

Диссертационная работа соответствует приоритетным направлениям развития науки, которые реализуются в Республике Казахстан и содержит новые научно обоснованные теоретические результаты, совокупность которых имеет важное значение для развития исследуемых научных направлений.

Описание вклада соискателя в подготовку каждой публикации

Все теоретические расчеты диссертационного исследования проводились лично автором при участии сотрудников лаборатории экспериментальной геохимии и петрологии мантии Земли Новосибирского государственного университета и лаборатории фазовых превращений и диаграмм состояния вещества Земли при высоких давлениях Института геологии и минералогии имени В.С. Соболева Сибирского отделения

Российской академии наук. Обработка и анализ результатов были выполнены совместно с научными консультантами.

Основные результаты диссертационного исследования опубликованы в печатных работах, полностью соответствующих теме диссертации: из них 1 статья в рецензируемом научном журнале, входящий в базу Web of Science и Scopus и относящийся к квартилю Q1 в соответствии JCR ThomsonReuters, 4 статьи в научных изданиях, рекомендованных КОКСОН МОН РК, 10 тезисов и докладов в трудах международных научных конференций.