

ISSN (Print) 2616-6836
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

ХАБАРШЫСЫ

BULLETIN

of L.N. Gumilyov Eurasian
National University

ВЕСТНИК

Евразийского национального
университета имени Л.Н. Гумилева

ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Серия **ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

№1(130)/2020

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Нұр-Сұлтан, 2020

Nur-Sultan, 2020

Нур-Султан, 2020

Бас редакторы:
ф.-м.ғ.д., профессор
А.Т. Ақылбеков (Қазақстан)

Бас редактордың орынбасары

Гиниятова Ш.Г., ф.-м.ғ.к., доцент
(Қазақстан)

Редакция алқасы

Арынгазин А.Қ.	ф.-м.ғ. докторы(Қазақстан)
Алдонгаров А.А.	PhD (Қазақстан)
Балапанов М.Х.	ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
Бахтизин Р.З.	ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
Даулетбекова А.Қ.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Ержанов Қ.К.	ф.-м.ғ.к., PhD (Қазақстан)
Жұмаділов Қ.Ш.	PhD (Қазақстан)
Здоровец М.	ф.-м.ғ.к.(Қазақстан)
Қадыржанов Қ.К.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Кайнарбай А.Ж.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Кутербеков Қ.А.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Лущик А.Ч.	ф.-м.ғ.д., проф.(Эстония)
Морзабаев А.К.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Мырзақұлов Р.Қ.	ф.-м.ғ.д., проф.(Қазақстан)
Нұрахметов Т.Н.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Сауытбеков С.С.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Салиходжа Ж.М.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Тлеукенов С.К.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Усеинов А.Б.	PhD (Қазақстан)
Хоши М.	PhD, проф.(Жапония)

Редакцияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Сәтбаев к-сі, 2, 402 б.,
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті.
Тел.: +7(7172) 709-500 (ішкі 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Жауапты хатшы, компьютерде беттеген: Г. Мендыбаева

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.
ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

Меншіктенуші: ҚР БЖҒМ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" ШЖҚ РМК
Мерзімділігі: жылына 4 рет.

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігінде 27.03.2018ж.
№16999-ж тіркеу куәлігімен тіркелген.

Ашық қолданудағы электрондық нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz/>

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Қажымұқан к-сі, 12/1, 102 б.,
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. Тел.: +7(7172)709-500 (ішкі 31-428)

Editor-in-Chief

Doctor of Phys.-Math. Sciences, Professor
A.T. Akilbekov (Kazakhstan)

Deputy Editor-in-Chief

Giniyatova Sh.G., Candidate of Phys.-Math. Sciences,
Assoc. Prof. (Kazakhstan)

Editorial Board

Aryngazin A.K.	Doctor of Phys.-Math. Sciences(Kazakhstan)
Aldongarov A.A.	PhD (Kazakhstan)
Balapanov M.Kh.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Russia)
Bakhtizin R.Z.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Russia)
Dauletbekova A.K.	Candidate of Phys.-Math. Sciences, PhD (Kazakhstan)
Hoshi M.	PhD, Prof. (Japan)
Kadyrzhanov K.K.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Kainarbay A.Zh.	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Kuterbekov K.A.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Lushchik A.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Estonia)
Morzabayev A.K.	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Myrzakulov R.K.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Nurakhmetov T.N.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Sautbekov S.S.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Salikhodzha Z. M	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Tleukenov S.K.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Useinov A.B.	PhD (Kazakhstan)
Yerzhanov K.K.	Candidate of Phys.-Math. Sciences, PhD(Kazakhstan)
Zdorovets M.	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Zhumadilov K.Sh.	PhD (Kazakhstan)

Editorial address: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2, Satpayev str., of. 402,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008
Tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Responsible secretary, computer layout: G. Mendybayeva

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University.

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Owner: Republican State Enterprise in the capacity of economic conduct "L.N. Gumilyov Eurasian National University" Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan.

Registration certificate №16999-ж from 27.03.2018.

Available at: <http://bulphysast.enu.kz/>

Address of printing house: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 12/1 Kazhimukan str.,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008;

tel.:+7(7172) 709-500 (ext. 31-428)

Главный редактор:
доктор ф.-м.н.
А.Т. Акилбеков, доктор ф.-м.н., профессор (Казахстан)

Зам. главного редактора

Ш.Г. Гиниятова к.ф.-м.н., доцент
(Казахстан)

Редакционная коллегия

Арынгазин А.К.	доктор ф.-м.н.(Казахстан)
Алдонгаров А.А.	PhD (Казахстан)
Балапанов М.Х.	д.ф.-м.н., проф. (Россия)
Бахтизин Р.З.	д.ф.-м.н., проф. (Россия)
Даулетбекова А.К.	д.ф.-м.н., PhD (Казахстан)
Ержанов К.К.	к.ф.-м.н., PhD (Казахстан)
Жумадилов К.Ш.	PhD (Казахстан)
Здоровец М.	к.ф.-м.н.(Казахстан)
Кадыржанов К.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Кайнарбай А.Ж.	к.ф.-м.н. (Казахстан)
Кутербеков К.А.	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Лущик А.Ч.	д.ф.-м.н., проф. (Эстония)
Морзабаев А.К.	д.ф.-м.н. (Казахстан)
Мырзакулов Р.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Нурахметов Т.Н.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Сауытбеков С.С.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Салиходжа Ж.М	к.ф.-м.н. (Казахстан)
Тлеукунов С.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Усеинов А.Б.	PhD (Казахстан)
Хоши М.	PhD, проф. (Япония)

Адрес редакции: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2, каб. 402, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.
Тел.: (7172) 709-500 (вн. 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Ответственный секретарь, компьютерная верстка: Г. Мендыбаева

Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева.
Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

Собственник РГП на ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева" МОН РК
Периодичность: 4 раза в год

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16999-ж от 27.03.2018г.

Электронная версия в открытом доступе: <http://bulphysast.enu.kz/>

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Кажимукана, 12/1, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева. тел.: +7(7172)709-500 (вн. 31-428)

Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ХАБАРШЫСЫ. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

№1(130)/2020

МАЗМҰНЫ

<i>Сарсенова С.М., Сүлейменов Т.Б., Жумадилов К.Ш.</i> Ақмола облысы аумағында дозиметриялық зерттеулер жүргізу үшін үлгілерді дайындау әдістемесі	8
<i>Кайнарбай А.Ж., Нуразматов Т.Н., Салиходжа Ж.М., Балабеков К.Н., Ахметова А.С., Юсупбекова Б.Н., Жунусбеков А.М., Дауренбеков Д.Х., Какимшишов Е.А.</i> Полимер матрицасындағы CdSe және CdSe/CdS жоғарылюминесцентті нанокристалдар негізіндегі гибриді композиттердің оптикалық қасиеттері	16
<i>Нуразматов Т.Н., Садықова Б.М., Жаңылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н., Әлбай Т., Таймуратова Л.У., Әділ Б., Досполов А., Төлеков Д.А.</i> CaSO ₄ және K ₂ SO ₄ кристалдарындағы меншікті люминесценция табиғаты	26
<i>Ажылбекова А., Шаяманов Б., Усеинов А., Даулетбекова А., Баймуханов З., Козловский А., Гиниятова Ш., Попов А.И., Байжуманов М.</i> ZnSe ₂ O ₅ нанокристалдарының эксперименттік және теориялық зерттеулері	34
<i>Инербаев Т.М., Базарбек А.Б., Сағатов Н.Е., Ажылбеков А.Т.</i> Жер ядросының қысымындағы темір фосфидтерінің жай-күйі теңдеулерінің алғашқы ретті есептері	44
<i>Мендибаев К.О., Уразбеков Б.А., Лукьянов С.М., Кутербеков К.А., Джансейитов Д.М., Исатаев Т.Г., Жолдыбаев Т.К., Азнабаев Д., Валиолда Д.С., Кроха В., Мразек Д., Пеннионжеквич Ю.Э., Кабышев А.М., Мұхамбетжан А.М.</i> Дейтрондардың ⁹ Be ядросымен өзара әрекеттесуі кезінде түрлі теориялық модельдер шеңберінде бір нуклонды берілістерді зерттеу	50
<i>Опахай С., Кутербеков К.А., Соловьев А.А., Нуркенов С.А., Нығыманова А.С.</i> Жұқа пленкалы материалдар негізіндегі төмен температурадағы қатты оксидті отын элементтерінің дамуы	64
<i>Ракишев Ж.Б., Аппазова Ш.Т., Бейсембаева Б.С.</i> Ғарыш ашпараттының қозғалысын сипаттау нұсқалары туралы	74
<i>Амангелді Н., Солдатхан Д., Ергалиұлы Ғ.</i> ¹⁶ O+ ¹² O ядролық жүйе үшін 20, 24 МэВ энергияларындағы серпінді шашыраудың оптикалық потенциалының параметрлерін анықтау	78
<i>Дәтей А.М., Амангалиева Р.Ж., Гиниятова Ш.Г.</i> Термоядролық реакторда қабырға маңындағы плазмалы-тозанды құрылымдардың қасиеттерін зерттеу	84
<i>Усеинов А.Б., Усеинов Б.М., Ажылбеков А.Т., Бекжанов Е.С.</i> Мырыш оксиді кристалдарының электр өткізгіштігі. «Алғашқы принциптер» зерттеу	90
<i>Балахаева Р., Кәрім Қ., Ажылбеков А., Баймуханов З., Гиниятова Ш., Байжуманов М., Даулетбекова А.</i> Температура мен тұндыру әдістерінің CdTe нанокристалдарының құрылымдық қасиеттеріне әсері	100

BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS.
ASTRONOMY SERIES

№1(130)/2020

CONTENTS

<i>Sarsenova S.M., Suleimenov T.B., Zhumadilov K.Sh.</i> Methodology of sample preparation for conducting dosimetric research on the territory of Akmola region	8
<i>Kainarbay A.Z., Nurakhmetov T.N., Ussipbekova B., Salikhodzha Z.M., Balabekov K.N., Akhmetova A.S., Yussupbekova B.N., Zhunusbekov A.M., Daurenbekov D.H., Kakimishov E.A.</i> Optical properties of hybrid composites based on highly luminescent CdSe and CdSe / CdS nanocrystals in the polymer matrix	16
<i>Nurakhmetov T.N., Sadykova B.M., Zhangylyssov K.B., Yussupbekova B.N., Alibay T.T., Taimuratova L.U., Adil B., Dospolov A., Tolekov D.A.</i> The nature of intrinsic luminescence in CaSO ₄ and K ₂ SO ₄ crystals	26
<i>Akylbekova A., Shayamanov B., Usseinov A., Dauletbekova A., Baimukhanov Z., Kozlovskiy A., Giniyatova Sh., Popov A., Baizhumanov M.</i> Experimental and theoretical studies of ZnSe ₂ O ₅ nanocrystals	34
<i>Inerbaev T.M., Bazarbek A.B., Sagatov N.E., Akilbekov A.T.</i> First principle calculations of iron phosphide state equations at earth core pressures	44
<i>Mendibayev K.O., Urazbekov B.A., Lukyanov S.M., Kuterbekov K.A., Janseitov D.M., Isataev T., Zholdybayev T., Aznabayev D., Valiolda D.S., Kroha V., Mrazek D., Penionzhkevich Yu.E., Kabyshev A.M., Mukhambetzhana A.M.</i> Study of one-nucleon transfer reaction for the interaction of deuterons with the ⁹ Be nuclei within various theoretical models	50
<i>Opakhai S., Kuterbekov K.A., Solovyev A.A., Nurkenov S.A., Nygmanova A.S.</i> Development in low-temperature solid oxide fuel cells based on thin-film materials	64
<i>Rakishev Zh.B., Appazova Sh.T., Beisembayeva B.S.</i> About some options of the probability theory of description of motion of space vehicle	74
<i>Amangeldi N., Soldatkhan D., Yergaliuly G.</i> Determination of elastic scattering potential parameter at energies of 20, 24 MeV for the nuclear system ¹⁶ O+ ¹² C	78
<i>Datey A.M., Amangaliyeva R.Zh., Giniyatova Sh.G.</i> Investigation of plasma-dust structures properties formed near the walls of a thermonuclear reactor	84
<i>Usseinov A.B., Useinov B.M., Akilbekov A.T., Bekzhanov E.S.</i> The electrical conductivity of zinc oxide crystals. First principles study	90
<i>Balakhayeva R., Karim K., Akilbekov A., Baymukhanov Z., Giniyatova Sh., Baizhumanov M., Dauletbekova A.</i> Influence of temperature and deposition methods on the structural properties of CdTe nanocrystals	100

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Сарсенова С.М., Сулейменов Т.Б., Жумадилов К.Ш.</i> Методика подготовки образцов для проведения дозиметрических исследований на территории Акмолинской области	8
<i>Кайнарбай А.Ж., Нуралиметов Т.Н., Салиходжа Ж.М., Балабеков К.Н., Ахметова А.С., Юсупбекова Б.Н., Жунусбеков А.М., Дауренбеков Д.Х., Какимишов Е.А.</i> Оптические свойства гибридных композитов на основе высоколюминесцирующих нанокристаллов CdSe и CdSe/CdS в матрице полимеров	16
<i>Нуралиметов Т.Н., Садыкова Б.М., Жанылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н., Алибай Т.Т., Таймуратова Л.У., Адиль Б., Досполов А., Толеков Д.А.</i> Природа собственной люминесценции в кристаллах CaSO ₄ и K ₂ SO ₄	26
<i>Акылбекова А., Шаяманов Б., Усеинов А., Даулетбекова А., Баймуханов З., Козловский А., Гиниятова Ш., Попов А.И., Байжуманов М.</i> Экспериментальные и теоретические исследования нанокристаллов ZnSe ₂ O ₅	34
<i>Инербаев Т.М., Базарбек А.Б., Сагатов Н.Е., Акилбеков А.Т.</i> Первопринципные расчеты уравнений состояния фосфидов железа при давлениях ядра Земли	44
<i>Мендибаев К.О., Уразбеков Б.А., Лукьянов С.М., Кутербек К.А., Джансейтов Д.М., Исатаев Т.Г., Жолдыбаев Т.К., Азнабаев Д., Валиолда Д.С., Кроха В., Мразек Д., Пеннионжскевич Ю.Э., Кабышев А.М., Мухамбетжан А.М.</i> Исследование однонуклонных передач при взаимодействии дейтронов с ядром ⁹ Be в рамках различных теоретических моделей	50
<i>Опахай С., Кутербек К.А., Соловьев А.А., Нуркенов С.А., Ныгыманова А.С.</i> Развитие низкотемпературных твердооксидных топливных элементов на основе тонкопленочных материалов	64
<i>Ракишев Ж.Б., Аппазова Ш.Т., Бейсембаева Б.С.</i> О некоторых вариантах описания движения космического аппарата	74
<i>Амангелди Н., Солдатхан Д., Ергалиұлы Ф.</i> Определение параметров потенциала упругого рассеяния при энергиях 20, 24 МэВ для ядерной системы ¹⁶ O+ ¹² C	78
<i>Датей А.М., Амангалиева Р.Ж., Гиниятова Ш.Г.</i> Исследование свойств плазменно-пылевых структур, образующихся вблизи стенок термоядерного реактора	84
<i>Усеинов А.Б., Усеинов Б.М., Акилбеков А.Т., Бекжанов Е.С.</i> Электропроводность кристаллов оксида цинка. Исследования из первых принципов	90
<i>Балахаева Р.К., Карим К.Б., Акилбеков А.Т., Баймуханов З.К., Гиниятова Ш.Г., Байжуманов М.Ж., Даулетбекова А.К.</i> Влияние температуры и способов осаждения на структурные свойства нанокристаллов CdTe	100

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы, 2020, том 130, №1, 44-49 беттер
<http://bulphysast.enu.kz>, E-mail: vest_phys@enu.kz

МРНТИ: 29.05.15

Т.М. Инербаев^{1,2}, А.Б. Базарбек¹, Н.Е. Сағатов², А.Т. Акилбеков¹

¹ Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

² Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева, Новосибирск, Россия
(E-mail: ^{1,2} talgat.inerbaev@gmail.com, ¹ asyl.bazarbek.92@mail.ru, ² sagatinho23@gmail.com,

¹ akilbekov_at@enu.kz)

Первопринципные расчеты уравнений состояния фосфидов железа при давлениях ядра Земли

Аннотация: В данной работе методами компьютерного моделирования исследуются уравнения состояния фосфида железа при давлениях, соответствующих условиям ядра Земли. Рассмотрены две структуры Fe₂P симметрии Pnma и P-62m и две структуры Fe₃P с симметрией решетки I-4 и Cmcm. Для каждой рассмотренной кристаллической решетки построено уравнение состояния P(V) без учета термических эффектов и давлений до 200 ГПа. Расчеты уравнений состояния проведены с учетом и без учета магнитного упорядочения в рассмотренных соединениях. Показано, что магнитный порядок сильно влияет на поведение функций P(V) в области низких давлений для кристаллов Fe₂P-Pnma и Fe₃P-I-4. Такая зависимость хорошо коррелирует с рассчитанной зависимостью магнитного момента рассмотренных соединений в зависимости от давления. Также исследована относительная стабильность рассмотренных структур. Показано, что в пределе пренебрежения термическими эффектами решетка Fe₂P-Pnma является более стабильной во всем диапазоне рассмотренных давлений. Структура Fe₃P-I-4 является более стабильной в области низких давлений, и переход в фазу Fe₃P-Cmcm происходит при давлении 25 ГПа.

Ключевые слова: фосфид железа, ядро Земли, первопринципные расчеты, квантово-химическое моделирование, минерал, магнитный момент, уравнение состояния.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2020-130-1-44-49>

Поступила: 29.01.2020 / Доработана: 04.02.2020 / Допущена к опубликованию: 4.03.2020

Введение. Исследование состава ядра Земли по-прежнему является актуальной темой, которая имеет важное значение для понимания процессов, происходящих на нашей планете. В течение многих лет ведутся исследования с помощью лабораторных экспериментов при высоких давлениях и температурах ядра Земли. Однако вопросы, касающиеся состава и строения ядра и нижней мантии Земли, до сих пор остаются далекими от однозначных решений и требуют еще большего внимания и исследования с использованием большого объема изотопно-геохимических и космохимических данных [1,2].

Внутренняя часть Земли состоит из скальной оболочки - мантии и коры, окружающих плотное металлическое ядро. Несмотря на то, что большинство геологических исследований сосредоточено только на внешнем сегменте планеты, наше понимание ядра Земли развивается с каждым годом. Последний прогресс особенно интересен тем, что он освещает структуру самых глубоких недр Земли. Эти достижения в основном обусловлены двумя достижениями: новыми геофизическими наблюдениями, особенно в сейсмологии и геомагнетизме, и недавними экспериментальными достижениями в исследовании материалов при сверхвысоких давлениях и температурах, существующих в недрах нашей планеты [3].

О составе ядра существуют лишь косвенные данные, полученные разными путями и в настоящее время общей точкой зрения мирового научного сообщества является то, что ядро Земли состоит преимущественно из железа и малой доли никеля в соотношении Fe/Ni ~ 16 [4,5]. Однако внешнее ядро не может состоять только из чистого железа и тем более из его сплава с никелем, поскольку плотность железа и никелистого железа метеоритного состава

при давлениях, господствующих в земном ядре, приблизительно на 10–15% выше плотности “ядерного” вещества во внешнем ядре Земли. Отсюда следует, что железные метеориты содержат карбиды, сульфиды и фосфиды железа, что привело к значительному интересу к С, S и P (а также ко многим другим элементам) как потенциальным «легким» составляющим планетарных ядер [6,7].

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 или прямых расчетов методами *ab initio* молекулярной динамики [8,9].

В последнее время все большее число исследований в области физики минералов посвящено изучению фазовых соотношений высокого давления и высоких температур и уравнений состояния минералов Fe-Ni-S-P, что дает дополнительный аргумент в пользу того, что минеральные фазы Fe-Ni-S-P действительно являются составными частями ядер планетарных тел [10].

Ввиду трудности проведения экспериментальных исследований при температуре и давлении, соответствующих условиям ядра Земли особую актуальность приобретает компьютерное моделирование при помощи современных квантово-химических методов для определения термодинамических, упругих и магнитных свойств фосфидов железа как важных составляющих ядра Земли. Одним из ключевых подходов, которые призваны создать непротиворечивые модели состава и динамики ядра и мантии Земли, являются *ab initio* расчеты методами молекулярной динамики при высокой температуре, показавшие высокую достоверность получаемых данных [11,12]. Однако в силу ограниченности возможностей современных суперкомпьютеров и доступа к ним эта методика пока не столь распространена. Учитывая прогресс в развитии техники и скорости вычислений, а также очевидную тенденцию «экспериментальные исследования становятся дороже, а теоретические расчеты дешевеют», существенный прогресс в систематических *ab initio* расчетах при высоком давлении можно ожидать уже в ближайшее десятилетие. Моделирование с использованием *ab initio* методов помогает решить задачи из первых основополагающих принципов без привлечения дополнительных эмпирических предположений, то есть через прямое решение уравнений квантовой механики.

Методы исследования. В данной работе все расчеты проводились с помощью квантово-химического моделирования из первых принципов в рамках метода функционала плотности - с использованием базиса плоских волн. Моделирование проводилось без учета движения атомов при нулевой температуре ($T = 0$ К). Были проведены как спин-поляризованные расчеты, так и расчеты без учета магнитного момента. Детали расчетов выглядят таким образом: энергия обрезания составляла 700 эВ, плотность *k*-точек - 0.2\AA^{-3} , параметр сглаживания $\sigma = 0.01$ эВ. При моделировании фосфидов железа были выбраны две структуры различной симметрии: для Fe_2P P-Pnma и P-62m, для Fe_3P P-I-4 и Cmcm. Первая из них, Fe_2P P-Pnma - это ромбический полиморф с типом структуры C23, по другому называют аллабогданит. Fe_2P P-62m - это гексагональный баррингерит с типом структуры C22 [13]. Fe_3P P-I-4 - тетрагональная сингония, также известен как шрейберзит. Fe_3P P-Cmcm - недавно найденная новая структура, имеющая по-другому ромбический полиморф [14].

Результаты расчетов. Результаты первопринципных расчетов представлены на рис. 1-4. В первую очередь мы построили уравнение состояния $P(V)$ для двух наших структур.

На рисунке 1 показана зависимость объемов ячейки от давления для обеих структур фосфида железа Fe_2P . Как видно, при высоком давлении величина магнитного момента для Pnma обращается в ноль при давлении выше 100 ГПа. Для следующей структуры P-62m магнитный момент плавно уменьшается вплоть до величины давления 140 ГПа, после чего он начинает уменьшаться быстрее. Это говорит о том, что различие в поведении $P(V)$ для фазы P-62m значительно меньше, чем для фазы Pnma.

На рисунке 2 показано уравнение состояния $P(V)$ для фосфида железа Fe_3P . Как видно при высоком давлении величина магнитного момента для фазы I-4 обращается в ноль при давлении

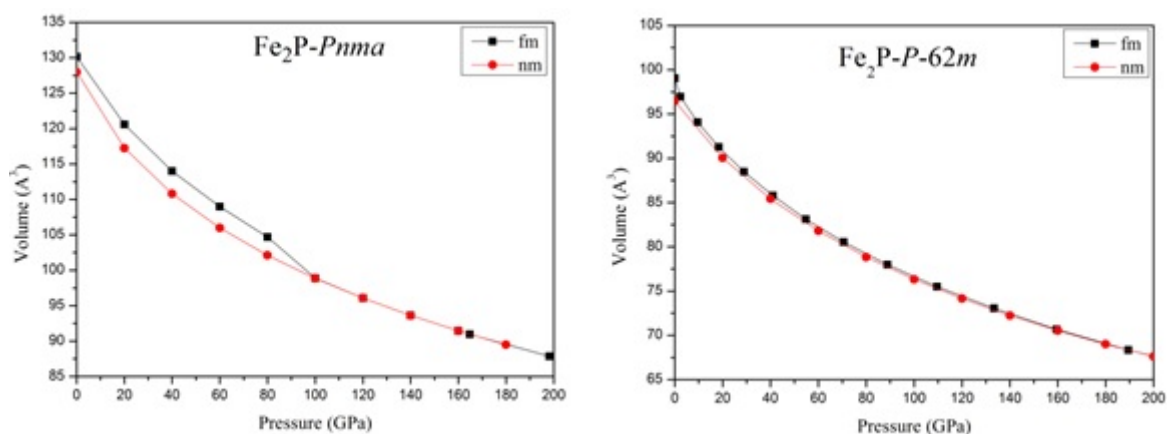


Рисунок 1 – Зависимость объема (с учетом и без учета магнитного момента) Fe_2P -Pnma и Fe_2P -P-62m от давления

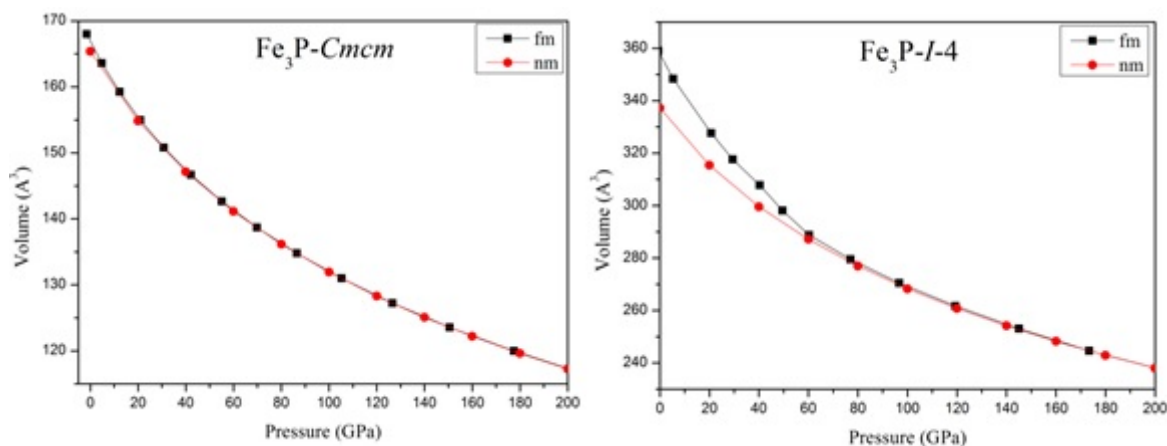


Рисунок 2 – Зависимость объема (с учетом и без учета магнитного момента) Fe_3P -I-4 и Fe_3P -Cmcm от давления

выше 175 ГПа. Что касается другой структуры, то в случае Cmcm исчезновение магнитного момента происходит при давлении 30 ГПа. Здесь же различие в поведении $P(V)$ для фазы I-4 значительно (почти в два раза) больше, чем для фазы Cmcm.

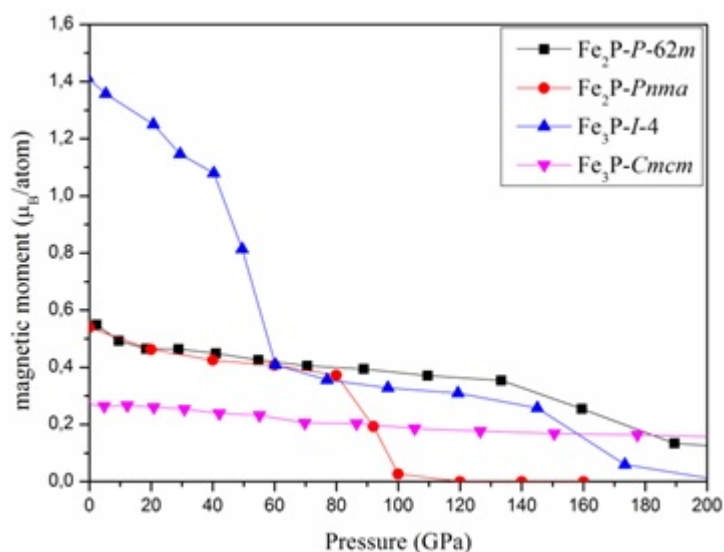


Рисунок 3 – Зависимость магнитного момента фосфидов железа от давления

На рисунке 3 показана зависимость магнитного момента от давления для исследованных фосфидов железа. Величина магнитного момента на атом при низких давлениях для фазы Fe_3P P-I-4 значительно выше, чем соответствующее значение для остальных фаз. Величина магнитного момента для фазы Fe_3P P-I-4 резко уменьшается при давлении 60 ГПа и затем его поведение практически такое же как и для остальных фаз. Для фазы Fe_2P P-Pnma магнитный момент исчезает при давлении 100 ГПа. Эти изменения магнитного момента коррелируют с изменением поведения уравнения состояния $P(V)$ для соответствующих фаз. При давлениях выше 60 и 100 ГПа для фаз Fe_3P P-I-4 и Fe_2P P-Pnma поведение $P(V)$ для расчетов с учетом и без учета магнитного порядка практически совпадают. Для фаз Fe_2P P-P-62m и Fe_3P P-Cmcm магнитное упорядочение никак не влияет на поведение уравнения состояния $P(V)$.

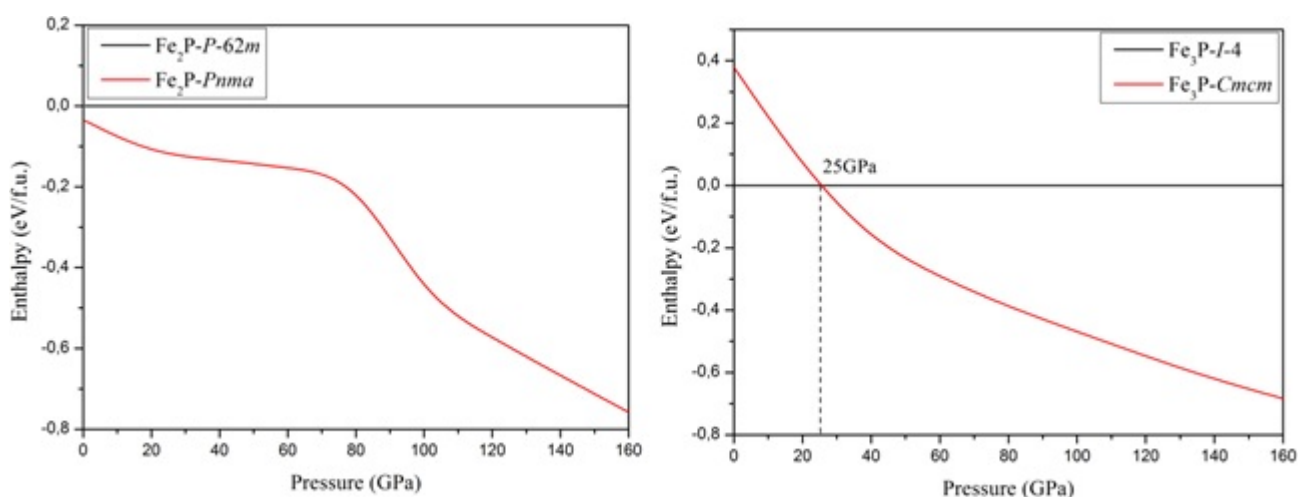


Рисунок 4 – Разность энthalпии фосфидов железа

Для установления относительной стабильности фосфидов железа при высоком давлении был произведен расчет энthalпии этих соединений вплоть до 200 ГПа. Из рис. 4 видно, как для Fe_3P структура I-4 остается при нулевом значении, однако при давлении 25 ГПа эта фаза пересекается с фазой Cmcm, которая снижается от 0.4 eV. Если не учитывать колебания, то можно заметить, что при фазе P-62m у фосфида железа Fe_2P проявляется нестабильность, так как не меняются параметры энthalпии. При другой фазе Pnma у фосфида железа Fe_2P наблюдается стабильность в виде снижения энергии в зависимости от давления (доходящего до 0,05 eV).

Заключение. Полученные результаты показали сильное влияние магнитного упорядочения на поведение уравнения состояния фосфида железа Fe_2P структуры Pnma. В случае второй рассмотренной фазы того же состава влияние магнитного упорядочения на функцию $P(V)$ значительно слабее. Для Fe_3P различие в поведении $P(V)$ для фазы I-4 значительно (почти в два раза) больше, чем для фазы Cmcm. Также было выявлено, что при расчете энthalпии соединений фосфидов железа отмечаются стабильные и нестабильные параметры энthalпии, и при давлении 25 ГПа для Fe_3P имеется фазовый переход. Однако данные расчеты - лишь малая часть, в дальнейшем будут исследованы уравнения состояния $P(V)$ в зависимости от температуры для различных полиморфов фосфидов железа, фазовые диаграммы стабильности различных фаз исследуемых соединений в плоскости T-P. Все эти расчеты важны для понимания строения и свойств ядра Земли.

Список литературы

- 1 Литасов К.Д., Шацкий А.Ф. Современные представления о составе ядра Земли// Геология и геофизика. -2016. -Т.57. № 1. - С. 31–62.

- 2 Литасов К., Попов З., Гаврюшкин П., Овчинников С., Федоров А. Первопринципные расчеты уравнений состояния и относительной стабильности карбидов железа при давлениях ядра земли // Геология и геофизика. – 2015. – Т. 56. – № 1-2. – С. 214-223
- 3 Пуцаровский Д.Ю., Пуцаровский Ю.М. Состав и строение мантии Земли. Наука о Земле // Соросовский образовательный журнал. – 1998. – № 11. – С. 111-119.
- 4 Allegre C.J., Poirier J.P., Humler E. and Hofmann A. The chemical composition of the Earth // Earth and Planetary Science Letters. – 1995. – Vol. 134. – P. 515-526.
- 5 McDonough W., Sun S. The composition of the Earth // Chemical Geology. – 1995. – Vol. 120. – P. 223-253.
- 6 Li J., Fei Y. Experimental constraints on core composition, in The Mantle and Core // R. Carlson ed. Elsevier. – 2003. – Vol.2. – P. 521-546.
- 7 Edward E., Nicolas G. Abundances of the elements: Meteoritic and solar // Geochimica et Cosmochimica Acta. – 1989. – Vol.53. – P. 197-213.
- 8 Zhang Y., Yin Q. Carbon and other light element contents in the Earth's core based on first-principles molecular dynamics // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2012. – Vol. 109. – P. 19579-19583.
- 9 Belonoshko A., Lukinov T., Rosengren A., Bryk T., Litasov K. Synthesis of heavy hydrocarbons at the core-mantle boundary // Scientific Reports. – 2015. – Vol. 5. – № 1. – P. 18382-18387.
- 10 Miettinen J., Vassilev G. Thermodynamic Description of Ternary Fe-X-P Systems. Part 6: Fe-Ni-P // Journal of Phase Equilibria and Diffusion. – 2014. – Vol. 36. – № 1. – P. 78-87.
- 11 Belonoshko A., Ahuja R. and Johansson B. Quasi-Ab Initio Molecular Dynamic Study of Fe Melting // Physical review letters. – 2000. – Vol. 84. – P. 3638-3641
- 12 Alfe D., Gillan M., Price G. Composition and temperature of the Earth's core constrained by combining ab initio calculations and seismic data // Earth and Planetary Science Letters. – 2002. – Vol. 195. – № 1-2. – P. 91-98.
- 13 Dera P., Lavina B., Lauren A., Borkowski and etc. High pressure polymorphism of Fe₂P and its implications for meteorites and Earth's core // Geophysical Research Letters. – 2008. – Vol. 35. – P.10301-10306.
- 14 Ziyuan Z., Lulu L., Shoutao Zh., Tong Y., Fei L. and Guochun Y. Phase diagram, stability and electronic properties of an Fe-P system under high pressure: a first principles study // Royal society of chemistry Advances. – 2017. – Vol. 7. – P.15986-15991.

Т.М. Инербаев^{1,2}, А.Б. Базарбек¹, Н.Е. Сагатов², А.Т. Акилбеков¹

¹ Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

² В.С. Соболев атындағы геология және минералогия институты, Новосибирск, Ресей

Жер ядросының қысымындағы темір фосфидтерінің жай-күйі теңдеулерінің алғашқы ретті есептері

Аннотация. Бұл жұмыста компьютерлік модельдеу әдістерімен жер ядросының шарттарына сәйкес келетін қысымда темір фосфидінің күй теңдеулері зерттеледі. Fe₂P үшін Pnma және P-62m симметрия құрылымдары, ал Fe₃P үшін I-4 және Cmcm симметрия құрылымдары қарастырылған. Әрбір қаралған кристалды тор үшін термиялық әсерлерді ескерместен және 200 ГПа-ға дейінгі қысымдардағы P(V) күй теңдеуі салынды. Жай-күй теңдеулерін есептеу қарастырылған қосылыстарда магнитті ретке келтіруді есепке алу және есепке алусыз жүргізілді. Магнитті тәртіп Fe₂P-Pnma және Fe₃P-I-4 кристалдарына арналған төменгі қысым аумағындағы P(V) функциясының мінез-құлқына қатты әсер ететінін көрсетеді. Мұндай тәуелділік қысымға байланысты қарастырылған қосылыстардың магниттік моментінің есептелген тәуелділігімен жақсы корреляцияланады. Сондай-ақ қарастырылған құрылымдардың салыстырмалы тұрақтылығы зерттеледі. Fe₂P-Pnma торы қарастырылған қысымның барлық диапазонында тұрақты болып табылады. Fe₃P-I-4 құрылымы төмен қысым аймағында тұрақты болып табылады және Fe₃P-Cmcm фазасына өту 25 ГПа қысымда орын алады.

Түйін сөздер: Темір фосфиді, жер ядросы, алғашқы принципті есептер, кванттық-химиялық моделдеу, минерал, магниттік момент, күй теңдеуі.

Т.М. Inerbaev^{1,2}, А.Б. Bazarbek¹, N.E. Sagatov², А.Т. Akilbekov¹

¹ L. N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

² V.S. Sobolev institute of Geology and Mineralogy, Novosibirsk, Russia

First principle calculations of iron phosphide state equations at earth core pressures

Abstract. In this article, the equations of the state of iron phosphide at pressures corresponding to the conditions of the earth's core are studied using computer modeling methods. Two Fe₂P structures of Pnma and P-62m symmetry and two Fe₃P structures with I-4 and Cmcm lattice symmetry are considered. For each considered crystal lattice, the equation of state P(V) is constructed without taking into account thermal effects and pressures up to 200 GPA. Calculations of the equations of state were carried out with and without taking into account the magnetic ordering in the considered compounds. It is shown that the magnetic order strongly affects the behavior of the P(V) functions in the low pressure region for Fe₂P-Pnma and Fe₃P-I-4 crystals. This dependence correlates well with the calculated dependence of the magnetic moment of the considered compounds as a function of pressure. The relative stability of the considered structures is also studied. It is shown that the Fe₂P-Pnma lattice is more stable over the entire range of the considered pressures in the limit of neglect of thermal effects. The Fe₃P-I-4 structure is more stable in the low pressure region and the transition to the Fe₃P-Cmcm phase occurs at a pressure of 25 GPA.

Keywords: Iron phosphide, earth's core, first principle calculations, quantum chemical modeling, mineral, magnetic moment, equation of state.

References

- 1 Litasov K.D., Shatski A.F. Sovremennyye predstavleniya o sostave yadra Zemli [Modern ideas about the composition of the Earth's core], *Geologiya i geofizika*, 57(1), 31-62(2016).
- 2 Litasov K., Popov Z., Gavryushkin P., Ovchinnikov S., Fedorov A. Pervoprintsipnyye raschetyi uravneniy sostoyaniya i otnositelnoy stabilnosti karbidov zheleza pri davleniyah yadra zemli. *Geologiya i geofizika*, 56(1), 214-223(2015).
- 3 Puscharovskiy D., Puscharovskiy Y. Sostav i stroenie mantii Zemli. *Nauka o Zemle. Sorosovskiy obrazovatelnyiy zhurnal*, 11, 111-119(1998).
- 4 Allegre C.J., Poirier J.P., Humler E. and Hofmann A., *Earth and Planetary Science Letters*, 134, 515-526(1995).
- 5 McDonough W., Sun S. The composition of the Earth., *Chemical Geology*, 120, 223-253(1995).
- 6 Li J., Fei Y. Experimental constraints on core composition, in *The Mantle and Core*, R. Carlson, ed., Elsevier, 2, 521-546(2003).
- 7 Edward E., Nicolas G. Abundances of the elements: Meteoritic and solar. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 53, 197-213(1989).
- 8 Zhang Y., Yin Q. Carbon and other light element contents in the Earth's core based on first-principles molecular dynamics. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 109. 19579-19583(2012).
- 9 Belonoshko A., Lukinov T., Rosengren A., Bryk T., Litasov K. Synthesis of heavy hydrocarbons at the core-mantle boundary. *Scientific Reports*, 5(1), 18382-18387(2015)
- 10 Miettinen J., Vassilev G. Thermodynamic Description of Ternary Fe-X-P Systems. Part 6: Fe-Ni-P. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 36(1), 78-87(2014)
- 11 Belonoshko A., Ahuja R. and Johansson B. Quasi-Ab Initio Molecular Dynamic Study of Fe Melting. *Physical review letters*, 84, 3638-3641(2000)
- 12 Alfe D., Gillan M., Price G. Composition and temperature of the Earth's core constrained by combining ab initio calculations and seismic data. *Earth and Planetary Science Letters*, 195(1-2), 91-98(2002).
- 13 Dera P., Lavina B., Lauren A., Borkowski and etc. High pressure polymorphism of Fe₂P and its implications for meteorites and Earth's core. *Geophysical Research Letters*, 35, 10301-10306(2008).
- 14 Ziyuan Z., Lulu L., Shoutao Z., Tong Y., Fei L. and Guochun Y. Phase diagram, stability and electronic properties of an Fe-P system under high pressure: a first principles study. *Royal society of chemistry Advances*, 7, 15986-15991(2017).

Сведения об авторах:

Инербаев Т.М. - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры "Техническая физика", Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Базарбек А.Б. - кафедра "Техническая физика", докторант 2 курса специальности "6D072300-Техническая физика", Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Сагатов Н.Е. - аспирант Института геологии и минералогии им. В.С.Соболева, Институт геологии и минералогии им. В.С.Соболева, пр. Коптюга, 3, Новосибирск, Россия.

Акилбеков А.Т. - доктор физико-математических наук, профессор кафедры "Техническая физика", Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Инербаев Т.М. - candidate of physical and mathematical sciences, professor of the Department of technical physics. L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

Базарбек А.Б. - PhD student of the Department of technical physics, profession-6D072300 - Technical physics. L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

Sagatov N.E. - PhD student of the institute of Geology and Mineralogy named V.S. Sobolev. V.S. Sobolev institute of Geology and Mineralogy, 3 Koptiug str., Novosibirsk, Russia.

Akilbekov A.T. - doctor of physical and mathematical sciences, professor of Technical physics Department. L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

«Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы»
журналында мақала жариялау ережесі

Журнал редакциясы авторларға осы нұсқаулықпен толық танысып, журналға мақала әзірлеу мен дайын мақаланы журналға жіберу кезінде басшылыққа алуды ұсынады. Бұл нұсқаулық талаптарының орындалмауы сіздің мақалаңыздың жариялануын кідіртеді.

1. **Журнал мақсаты.** Физика мен астрономия салаларының теориялық және эксперименталды зерттелулері бойынша мұқият тексеруден өткен ғылыми құндылығы бар мақалалар жариялау.

2. Баспаға (барлық жариялаушы авторлардың қол қойылған қағаз нұсқасы және электронды нұсқа) журналдың түпнұсқалы стильдік файлының міндетті қолданысымен LaTeX баспа жүйесінде дайындалған Tex- пен Pdf-файлындағы жұмыстар ұсынылады. Стильдік файлды және шаблонды *bulphysast.enu.kz* журнал сайтынан жүктеп алуға болады. Сонымен қатар, автор(лар) ілеспе хат ұсынуы керек.

3. Автордың қолжазбаны редакцияға жіберуі мақаланың Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысында басуға келісімін, шетел тіліне аударылып қайта басылуына келісімін білдіреді. Автор мақаланы редакцияға жіберу арқылы автор туралы мәліметтің дұрыстығына, мақала көшірілмегендігіне (плагиаттың жоқтығына) және басқа да заңсыз көшірмелердің жоқтығына кепілдеме береді.

4. Мақаланың көлемі 18 беттен аспауға тиіс (6 беттен бастап).

ГТАМРК <http://grmti.ru/>

Автор(лар)дың аты-жөні

Мекеменің толық атауы, қаласы, мемлекеті (егер авторлар әртүрлі мекемеде жұмыс жасайтын болса, онда әр автор мен оның жұмыс мекемесі қасында бірдей белгі қойылу керек)

Автор(лар)дың E-mail-ы

Мақала атауы

Аңдатпа (100-200 сөз; күрделі формулаларсызсыз, мақаланың атауын мейлінше қайталамауы қажет; әдебиеттерге сілтемелер болмауы қажет; мақаланың құрылысын (кіріспе мақаланың мақсаты/ міндеттері /қарастырылып отырған сұрақтың тарихы /зерттеу /әдістері нәтижелер/талқылау, қорытынды) сақтай отырып, мақаланың қысқаша мазмұны берілуі қажет).

Түйін сөздер (6-8 сөз не сөз тіркесі. Түйін сөздер мақала мазмұнын көрсетіп, мейлінше мақала атауы мен аннотациядағы сөздерді қайталамай, мақала мазмұнындағы сөздерді қолдану қажет. Сонымен қатар, ақпараттық-ізвестіру жүйелерінде мақаланы жеңіл табуға мүмкіндік беретін ғылым салаларының терминдерін қолдану қажет).

Негізгі мәтін мақаланың мақсаты/ міндеттері/ қарастырылып отырған сұрақтың тарихы, зерттеу әдістері, нәтижелер/талқылау, қорытынды бөлімдерін қамтуы қажет.

5. **Таблица, суреттер** – Жұмыстың мәтінінде кездесетін таблицалар мәтіннің ішінде жеке нөмірленіп, мәтін көлемінде сілтемелер түрінде көрсетілуі керек. Суреттер мен графиктер PS, PDF, TIFF, GIF, JPEG, BMP, PCX форматындағы стандарттарға сай болуы керек. Нүктелік суреттер кеңейтілімі 600 dpi кем болмауы қажет. Суреттердің барлығы да айқын әрі нақты болуы керек.

Мақаладағы **формулалар** тек мәтінде оларға сілтеме берілсе ғана номерленеді.

Жалпы қолданыста бар **аббревиатуралар** мен **қысқартулардан** басқалары міндетті түрде алғаш қолданғанда түсіндірілуі берілуі қажет. **Қаржылай көмек туралы** ақпарат бірінші бетте көрсетіледі.

6. Жұмыста қолданылған әдебиеттер тек жұмыста сілтеме жасалған түпнұсқалық көрсеткішке сай (сілтеме беру тәртібінде немесе ағылшын әліпбиі тәртібі негізінде толтырылады) болуы керек. Баспадан шықпаған жұмыстарға сілтеме жасауға тыйым салынады.

Сілтемені беруде автор қолданған әдебиеттің бетінің нөмірін көрсетпей, келесі нұсқаға сүйеніңіз дұрыс: тараудың номері, бөлімнің номері, тармақтың номері, теораманың (лемма, ескерту, формуланың және т.б.) номері көрсетіледі. Мысалы: қараңыз [3; § 7, лемма 6]», «...қараңыз [2; 5 теорамандағы ескерту]». Бұл талап орындалмаған жағдайда мақаланы ағылшын тіліне аударғанда сілтемелерде қателіктер туындауы мүмкін.

Әдебиеттер тізімін рәсімдеу мысалдары

1 Воронин С. М., Карацуба А. А. Дзета-функция Римана. –М: Физматлит, –1994, –376 стр. – **кітап**

2 Баилов Е. А., Сихов М. Б., Темиргалиев Н. Об общем алгоритме численного интегрирования функций многих переменных // Журнал вычислительной математики и математической физики –2014. –Т.54. № 7. –С. 1059-1077. – **мақала**

3 Жубанышева А.Ж., Абикенова Ш. О нормах производных функций с нулевыми значениями заданного набора линейных функционалов и их применения к поперечниковым задачам // Функциональные пространства и теория приближения функций: Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. – Москва, 2015. –С.141-142. – **конференция еңбектері**

4 Нургазина К. Рыцарь математики и информатики. –Астана: Каз.правда, 2017. 19 апреля. –С.7. – **газеттік мақала**

5 Кыров В.А., Михайличенко Г.Г. Аналитический метод вложения симплектической геометрии // Сибирские электронные математические известия –2017. –Т.14. –С.657-672. doi: 10.17377/semi.2017.14.057. – URL: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. (дата обращения: 08.01.2017). – **электронды журнал**

7. Әдебиеттер тізімінен соң автор өзінің библиографиялық мәліметтерін орыс және ағылшын тілінде (егер мақала қазақ тілінде орындалса), қазақ және ағылшын тілінде (егер мақала орыс тілінде орындалса), орыс және қазақ тілінде (егер мақала ағылшын тілінде орындалса) жазу қажет. Соңынан транслиттік аударма мен ағылшын тілінде берілген әдебиеттер тізімінен соң әр автордың жеке мәліметтері (қазақ, орыс, ағылшын тілдерінде – ғылыми атағы, қызметтік мекенжайы, телефоны, e-mail-ы) беріледі.

8. Редакцияға түскен мақала жабық (анонимді) тексеруге жіберіледі. Барлық рецензиялар авторларға жіберіледі. Автор (рецензент мақаланы түзетуге ұсыныс берген жағдайда) он күн аралығында қайта қарап, қолжазбаның түзетілген нұсқасын редакцияға қайта жіберуі керек. Рецензент жарамсыз деп таныған мақала қайтара қарастырылмайды. Мақаланың түзетілген нұсқасы мен автордың рецензентке жауабы редакцияға жіберіледі.

9. Төлемақы. Басылымға рұқсат етілген мақала авторларына төлем жасау туралы ескертіледі. Төлем көлемі 4500 тенге – ЕҰУ қызметкерлері үшін және 5500 тенге басқа ұйым қызметкерлеріне.

Реквизиты:

1)РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК банка: КСЖВКЗКХ

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кпн 859- за статью

2)РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Bank RBK"

Бик банка: КІНСКЗКА

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

3)РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "ForteBank"

БИК Банка: ІРТҮКЗКА

ИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

4)РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Народный Банк Казахстан"

БИК Банка: HSBKKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кпн 859.

"За публикацию в Вестнике ЕНУ ФИО автора"

Provision on articles submitted to the journal "Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. Physics. Astronomy series"

The journal editorial board asks the authors to read the rules and adhere to them when preparing the articles, sent to the journal. Deviation from the established rules delays the publication of the article.

1. Purpose of the journal. Publication of carefully selected original scientific.

2. The scientific publication office accepts the article (in electronic and printed, signed by the author) in Tex- and Pdf-files, prepared in the LaTeX publishing system with mandatory use of the original style log file. The style log file and template can be downloaded from the journal website *bulphysast.enu.kz*. And you also need to provide the **cover letter** of the author(s).
Language of publications: Kazakh, Russian, English.

3. Submission of articles to the scientific publication office means the authors' consent to the right of the Publisher, L.N. Gumilyov Eurasian National University, to publish articles in the journal and the re-publication of it in any foreign language. Submitting the text of the work for publication in the journal, the author guarantees the correctness of all information about himself, the lack of plagiarism and other forms of improper borrowing in the article, the proper formulation of all borrowings of text, tables, diagrams, illustrations.

4. The volume of the article should not exceed 18 pages (from 6 pages).

5. Structure of the article

GRNTI <http://grnti.ru/>

Initials and Surname of the author (s)

Full name of the organization, city, country (if the authors work in different organizations, you need to put the same icon next to the name of the author and the corresponding organization)

Author's e-mail (s)

Article title

Abstract (100-200 words, it should not contain a big formulas, the article title should not repeat in the content, it should not contain bibliographic references, it should reflect the summary of the article, preserving the structure of the article - introduction/ problem statement/ goals/ history, research methods, results /discussion, conclusion).

Key words (6-8 words/word combination. Keywords should reflect the main content of the article, use terms from the article, as well as terms that define the subject area and include other important concepts that make it easier and more convenient to find the article using the information retrieval system).

The main text of the article should contain an introduction/ problem statement/ goals/ history, research methods, results / discussion, conclusion. Tables, figures should be placed after the mention. Each illustration should be followed by an inscription. Figures should be clear, clean, not scanned.

Tables are included directly in the text of the article; it must be numbered and accompanied by a reference to them in the text of the article. Figures, graphics should be presented in one of the standard formats: PS, PDF, TIFF, GIF, JPEG, BMP, PCX. Bitmaps should be presented with a resolution of 600 dpi. All details must be clearly shown in the figures.

In the article, only those **formulas** are numbered, to which the text has references.

All **abbreviations**, with the exception of those known to be generally known, must be deciphered when first used in the text.

Information on **the financial** support of the article is indicated on the first page in the form of a footnote.

6. The list of literature should contain only those sources (numbered in the order of quoting or in the order of the English alphabet), which are referenced in the text of the article. References to unpublished issues, the results of which are used in evidence, are not allowed. Authors are recommended to exclude the reference to pages when referring to the links and guided by the following template: chapter number, section number, paragraph number, theorem number (lemmas, statements, remarks to the theorem, etc.), number of the formula. For example, "... , see [3, § 7, Lemma 6]"; "... , see [2], a remark to Theorem 5". Otherwise, incorrect references may appear when preparing an English version of the article.

Template

1 Воронин С. М., Карацуба А. А. Дзета-функция Римана. -М: Физматлит, -1994, -376 стр.-**book**

2 Баилов Е. А., Сихов М. Б., Темиргалиев Н. Об общем алгоритме численного интегрирования функций многих переменных // Журнал вычислительной математики и математической физики -2014. -Т.54. № 7. -С. 1059-1077. - **journal article**

3 Жубаньшева А.Ж., Абикинова Ш. О нормах производных функций с нулевыми значениями заданного набора линейных функционалов и их применения к поперечниковым задачам // Функциональные пространства и теория приближения функций: Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. - Москва, 2015. -С.141-142. - - **Conferences proceedings**

4 Нуртазина К. Рыцарь математики и информатики. -Астана: Каз.правда, 2017. 19 апреля. -С.7. **newspaper articles**

5 Кыров В.А., Михайличенко Г.Г. Аналитический метод вложения симплектической геометрии // Сибирские электронные математические известия -2017. -Т.14. -С.657-672. doi: 10.17377/semi.2017.14.057. - URL: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. (дата обращения: 08.01.2017). - **Internet resources**

7. At the end of the article, after the list of references, it is necessary to indicate bibliographic data in Russian and English (if the article is in Kazakh), in Kazakh and English (if the article is in Russian) and in Russian and Kazakh languages (if the article is English language). Then a combination of the English-language and transliterated parts of the references list and information about authors (scientific degree, office address, telephone, e-mail - in Kazakh, Russian and English) is given.

8. Work with electronic proofreading. Articles received by the Department of Scientific Publications (editorial office) are sent to anonymous review. All reviews of the article are sent to the author. The authors must send the proof of the article within ten days. Articles that receive a negative review for a second review are not accepted. Corrected versions of articles and the author's response to the reviewer are sent to the editorial office. Articles that have positive reviews are submitted to the editorial boards of the journal for discussion and approval for publication.

Periodicity of the journal: 4 times a year.

9. Payment. Authors who have received a positive conclusion for publication should make payment on the following requisites (for ENU employees - 4,500 tenge, for outside organizations - 5,500 tenge):

Реквизиты:

1) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК банка: КСJBKZKX

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кпн 859- за статью

2) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Bank RBK"

Бик банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

3) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "ForteBank"

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

4) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Народный Банк Казахстан"

БИК Банка: HSBKKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кпн 859.

"За публикацию в Вестнике ЕНУ ФИО автора"

Положение о рукописях, представляемых в журнал «Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н.Гумилева. Серия: Физика. Астрономия»

Редакция журнала просит авторов ознакомиться с правилами и придерживаться их при подготовке работ, направляемых в журнал. Отклонение от установленных правил задерживает публикацию статьи.

1. **Цель журнала.** Публикация тщательно отобранных оригинальных научных работ по актуальным проблемам теоретических и экспериментальных исследований в области физики и астрономии.

2. В редакцию (в бумажном виде, подписанном всеми авторами и в электронном виде) представляются Tex- и Pdf-файлы работы, подготовленные в издательской системе LaTeX, с обязательным использованием оригинального стилевого файла журнала. Стилиевой файл и шаблон можно скачать со сайта журнала *bulphysast.enu.kz*. Автору (авторам) необходимо предоставить **сопроводительное письмо**.

Язык публикаций: казахский, русский, английский.

3. Отправление статей в редакцию означает согласие авторов на право Издателя, Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, издания статей в журнале и переиздания их на любом иностранном языке. Представляя текст работы для публикации в журнале, автор гарантирует правильность всех сведений о себе, отсутствие плагиата и других форм неправомерного заимствования в рукописи, надлежащее оформление всех заимствований текста, таблиц, схем, иллюстраций.

4. Объем статьи не должен превышать 18 страниц (от 6 страниц).

5. **Схема построения статьи**

ГРНТИ <http://grnti.ru/>

Инициалы и фамилия автора(ов)

Полное наименование организации, город, страна (если авторы работают в разных организациях, необходимо поставить одинаковый значок около фамилии автора и соответствующей организации)

E-mail автора(ов)

Название статьи

Аннотация (100-200 слов; не должна содержать громоздкие формулы, по содержанию повторять название статьи; не должна содержать библиографические ссылки; должна отражать краткое содержание статьи, сохраняя структуру статьи – введение/ постановка задачи/ цели/ история, методы исследования, результаты/обсуждение, заключение/выводы).

Ключевые слова (6-8 слов/словосочетаний. Ключевые слова должны отражать основное содержание статьи, использовать термины из текста статьи, а также термины, определяющие предметную область и включающие другие важные понятия, позволяющие облегчить и расширить возможности нахождения статьи средствами информационно-поисковой системы).

Основной текст статьи должен содержать введение/ постановку задачи/ цели/ историю, методы исследования, результаты/обсуждение, заключение/выводы.

Таблицы включаются непосредственно в текст работы, они должны быть пронумерованы и сопровождаться ссылкой на них в тексте работы. Рисунки, графики должны быть представлены в одном из стандартных форматов: PS, PDF, TIFF, GIF, JPEG, BMP, PCX. Точечные рисунки необходимо выполнять с разрешением 600 dpi. На рисунках должны быть ясно переданы все детали.

В статье нумеруются лишь те **формулы**, на которые по тексту есть ссылки.

Все **аббревиатуры и сокращения**, за исключением заведомо общеизвестных, должны быть расшифрованы при первом употреблении в тексте.

Сведения о **финансовой поддержке** работы указываются на первой странице в виде сноски.

6. Список литературы должен содержать только те источники (пронумерованные в порядке цитирования или в порядке английского алфавита), на которые имеются ссылки в тексте работы. Ссылки на неопубликованные работы, результаты которых используются в доказательствах, не допускаются.

Авторам рекомендуется при оформлении ссылок исключать упоминание страниц и руководствоваться следующим шаблоном: номер главы, номер параграфа, номер пункта, номер теоремы (леммы, утверждения, замечания к теореме и т.п.), номер формулы. Например, "... см. [3; § 7, лемма 6]"; "... см. [2; замечание к теореме 5]". В противном случае при подготовке англоязычной версии статьи могут возникнуть неверные ссылки.

Примеры оформления списка литературы

1 Воронин С. М., Карацуба А. А. Дзета-функция Римана. -М: Физматлит, -1994, -376 стр. - **книга**

2 Баилов Е. А., Сихов М. Б., Темиргалиев Н. Об общем алгоритме численного интегрирования функций многих переменных // Журнал вычислительной математики и математической физики -2014. -Т.54. № 7. -С. 1059-1077. - **статья**

3 Жубанышева А.Ж., Абикенова Ш. О нормах производных функций с нулевыми значениями заданного набора линейных функционалов и их применения к поперечниковым задачам // Функциональные пространства и теория приближения функций: Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. - Москва, 2015. -С.141-142. - **труды конференции**

4 Нургазина К. Рыцарь математики и информатики. -Астана: Каз.правда, 2017. 19 апреля. -С.7. - **газетная статья**

5 Кыров В.А., Михайличенко Г.Г. Аналитический метод вложения симплектической геометрии // Сибирские электронные математические известия -2017. -Т.14. -С.657-672. doi: 10.17377/semi.2017.14.057. - URL: <http://semi.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. (дата обращения: 08.01.2017). - **электронный журнал**

7. После списка литературы, необходимо указать библиографические данные на русском и английском языках (если статья оформлена на казахском языке), на казахском и английском языках (если статья оформлена на русском языке) и на русском и казахском языках (если статья оформлена на английском языке). Затем приводится комбинация англоязычной и транслитерированной частей списка литературы и сведения по каждому из авторов (научное звание, служебный адрес, телефон, e-mail - на казахском, русском и английском языках).

8. Работа с электронной корректурой. Статьи, поступившие в Отдел научных изданий (редакция), отправляются на анонимное рецензирование. Все рецензии по статьям отправляются автору. Авторам в течение десяти дней необходимо отправить корректуру статьи. Статьи, получившие отрицательную рецензию, к повторному рассмотрению не принимаются. Исправленные варианты статей и ответ автора рецензенту присылаются в редакцию. Статьи, имеющие положительные рецензии, представляются редколлегии журнала для обсуждения и утверждения для публикации.

Периодичность журнала: 4 раза в год.

9. Оплата. Авторам, получившим положительное заключение к опубликованию, необходимо произвести оплату по следующим реквизитам (для сотрудников ЕНУ – 4500 тенге, для сторонних организаций – 5500 тенге): Реквизиты:

Реквизиты:

1) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК банка: KСJBKZKX

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кпн 859- за статью

2) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Bank RBK"

Бик банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

3) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "ForteBank"

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

4) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Народный Банк Казахстан"

БИК Банка: HSBKKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кпн 859.

"За публикацию в Вестнике ЕНУ ФИО автора"

СОПРОВОДИТЕЛЬНОЕ ПИСЬМО

Настоящим письмом авторы гарантируют, что размещение научной статьи "НАЗВАНИЕ СТАТЬИ" (Произведение) авторов ФИО АВТОРА(ОВ) в журнале "Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н.Гумилева. Серия Физика. Астрономия" не нарушает ничьих авторских прав. Авторы предоставляют издателю журнала, Евразийскому национальному университету имени Л.Н. Гумилева исключительные права на неограниченный срок:

- право на воспроизведение Произведения (опубликование, обнародование, дублирование, тиражирование или иное размножение Произведения) без ограничения тиража экземпляров, право на распространение Произведения любым способом. При этом каждый экземпляр произведения должен содержать имя автора (ов) Произведения;

- право на включение в составное произведение;

- право на доведение до всеобщего сведения;

- право на использование метаданных (название, имя автора (правообладателя), аннотации, библиографические материалы, полный текст Произведения и пр.) Произведения путем распространения и доведения до всеобщего сведения, обработки и систематизации, а также включения в различные базы данных и информационные системы, в том числе полнотекстовых версий опубликованного Произведения.

Территория, на которой допускается использование прав на Произведения, не ограничена.

Автор(ы) также предоставляют издателю журнала право хранения и обработки своих персональных данных без ограничения по сроку (фамилия, имя, отчество, сведения об образовании, сведения о месте работы и занимаемой должности). Персональные данные предоставляются для их хранения и обработки в различных базах данных и информационных системах, включения их в аналитические и статистические отчетности, создания обоснованных взаимосвязей объектов произведений науки, литературы и искусства с персональными данными и т.п.

Автор(ы) в полном объеме несут ответственность за неправомерное использование в научной статье объектов интеллектуальной собственности, объектов авторского права в соответствии с действующим законодательством Республики Казахстан.

Настоящим письмом автор(ы) дают свое согласие на проверку Произведения на предмет плагиата издателем журнала.

Автор(ы) подтверждают, что направляемое Произведение нигде ранее не было опубликовано, не направлялось и не будет направляться для опубликования в другие научные издания.

**Сопроводительное письмо оформляется на официальном бланке организации и подписывается руководителем организации (для вузов - курирующим проректором по научно-исследовательской работе).*

*** Сопроводительное письмо авторов, являющихся сотрудниками ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, заверяется деканом факультета.*

Исп.: ФИО автора(ов)

Редакторы: А.Т. Ақылбеков
Шығарушы редактор, дизайн: Г. Мендыбаева

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің
Хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы.
-2020 - 1(130) - Нұр-Сұлтан: ЕҰУ. 117-б.
Шартты б.т. - 9,375 Таралымы - 25 дана.

Ашық қолданудағы электрондық нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz/>

Мазмұнына типография жауап бермейді.

Редакция мекен-жайы: 010008, Нұр-Сұлтан қ.,
Сәтбаев көшесі, 2.
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті
Тел.: +7(7172) 70-95-00(ішкі 31-428)

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды