

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ

«Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ» КЕАҚ

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»
XVIII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XVIII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»**

**PROCEEDINGS
of the XVIII International Scientific Conference
for students and young scholars
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»**

**2023
Астана**

УДК 001+37
ББК 72+74
G99

**«GYLYM JÁNE BILIM – 2023» студенттер мен жас ғалымдардың
XVIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XVIII
Международная научная конференция студентов и молодых
ученых «GYLYM JÁNE BILIM – 2023» = The XVIII International
Scientific Conference for students and young scholars «GYLYM JÁNE
BILIM – 2023». – Астана: – 6865 б. - қазақша, орысша, ағылшынша.**

ISBN 978-601-337-871-8

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 001+37
ББК 72+74

ISBN 978-601-337-871-8

**©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2023**

2. F.J. Culchac, N. Porrás-Montenegro, A. Latge, GaAs-(Ga,Al)As double quantum rings: confinement and magnetic field effect, J. Phys.: Condens. Matter 20 (2008).

3. V. Serov, Inverse backscattering Born approximation for a two-dimensional magnetic Schrodinger operator, Inverse Problems 29 (2013).

4. А.А. Брызгалов, Ф.И. Карманов, Метод расщепления по физическим факторам в задаче о временной динамике волновых функций электронов двумерного квантового кольца, Матем. моделирование, 2010, том 22, номер 6, 15-26.

ӘӨЖ 61:549.21.004.14

LiF КРИСТАЛДАРЫНДАҒЫ БАСТАПҚЫ РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАРДЫ МОДЕЛЬДЕУ

Рахманкулова Алина
alino4ka13.03.01@mail.ru

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Физика – техникалық факультетінің 5 курс студенті,
Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – Абуова Ф.У

Жалпы иондаушы сәулеленуді анықтаудың көптеген әдістерінің ішінде сцинтилляциялық тіркеу әдісі және иондаушы сәулелену спектрометриясы бірқатар артықшылықтарға байланысты үлкен дамуға ие болды. Атап айтқанда: жоғарғы дәрежедегі тіркеу тиімділігі, тиеу қабілеттігі, энергетикалық ажыратымдылығы, сондай-ақ ыңғайлығы мен оңай жұмыс істеуін атап айтқан жөн.

Осылайша, соңғы онжылдықта радиациялық детекторлар ретінде вольфраматтар, молибдаттар, поливалентті иондрмен белсендірілген LiF кристалдары сияқты сцинтилляциялық материалдар кеңінен қолданылды. Көбінесе олардың шығымдылығы мен тығыздығы жоғары деңгейде болса (демек, құрылғылардың өлшемдері шағым болып келді), радиациялық фоны керісінше төмен, осыған байланысты өте сирек кездесетін оқиғаларды зерттеуге мүмкіндік берді. LiF кристалы қатты дененің іргелі физикасының көптеген мәселелерін зерттеу кезінде негізгі және модельдік матрица деп те атауға болады [1-3].

Мысалы, осы кристалдың негізінде корпускулалық және электромагниттік сәулеленудің термомлюминесцентті, сцинтилляциялық, абсорбциялық, электро-парамагниттік және термоэмиссиялық детекторлар үшін жұмыс заттары ойлап табылған болатын. Сонымен қатар, белсендірілген LiF кристалы тіңдерінің эквиваленттілігіне байланысты радиобиология мен медицинада иондаушы сәулеленудің дозметрі ретінде көп қолданылады [4, 5]. Бүгінгі таңда оптикалық материалдар ретінде сәтті қолданысқа ие болған жалғыз кристал болып есептеледі, себебі ол вакуум-ультракүлгін сәулеленуден (95 нм) инфрақызылға (2500 нм) дейінгі кең спектрлі интервалда сілтілі галоидты материалдарға қатысты.

Әдетте осы кристалдың бастапқы радиациялық ақаулары өте қарқынды зерттелісте жүр, оның ішіне F- және H-орталықтары, автокализацияланған тесіктер, сондай-ақ автолокализацияланған экситондар кіреді. Сонымен қатар бұл ақаулар электрондық қозулардың эволюциясын зерттеуіндегі маңызды болып есептеледі, себебі олардың қасиеттері мен құрылымы туралы ақпарат тек ерекшеліктерін сипаттау үшін ғана емес, сонын ішіндегі қатты денелердегі ақау түзілу процестерін талдау кезінде де маңызды. Алайда, осы ақаулардың кейбіреулері үшін параметрлері нақты өлшенбеген, атап айтқанда LiF кристалында H-центрлік ақаудағы сіңіруі эксперимент жүзінде өлшенбеген.

Негізінде, қатты денелердегі ақаулардың қасиеттеріне қатысты эксперименттік нәтижелерді түсіндіру жеткілікті теориялық зерттеу әдістерінің үздіксіз дамуын талап етеді. Бүгінгі таңда бұл бағыттағы прогресс компьютерлік технологияларды жетілдірудің және кванттық-химиялық есептеулердің заманауи бағдарламалық кешендерін әзірлеудің арқасында мүмкін болады. Бұл бағдарламалар кристалдың электронды құрылымын теориялық тұрғыдан зерттеуге

және дәлдігі бойынша эксперименттік өлшемдерден кем түспейтін нәтижелер алуға мүмкіндік беретін сенімді және сыналған құрал болып табылады.

Жоғарыда айтылғандарға сәйкес зерттеудің мақсаты - LiF кристалындағы бастапқы радиациялық ақауларды, соның ішіндегі F центірлерің Crystal бағдарламасы арқылы модельдеу. Сонымен қатар, дефект нәтижесінде кристалдық тордағы пайда болған өзгешіліктерді спиттау. Осы мақсатқа жету үшін жұмыста келесі міндеттер шешілді:

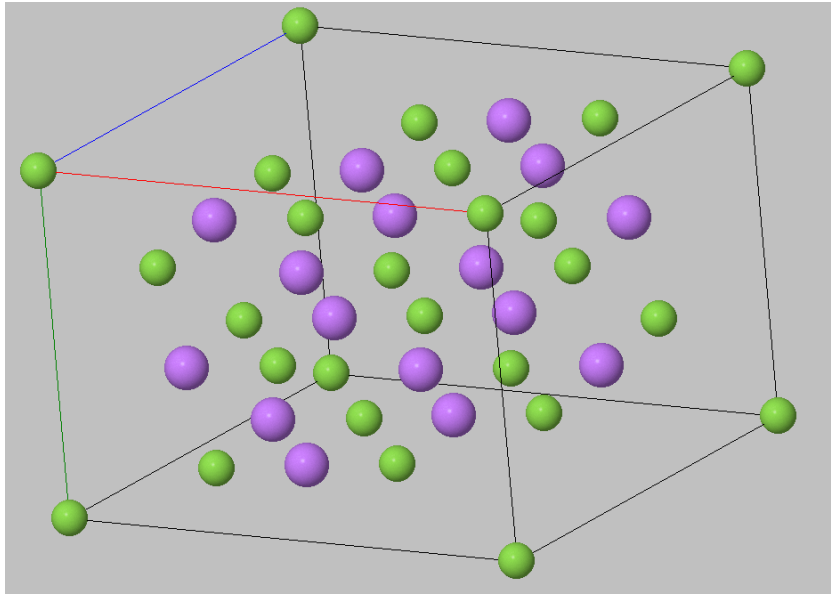
- Модельдеу нәтижелерін қолдана отырып CRYSTAL бағдарламасы арқылы литий фтор кристалының тыйым салынған зонасын есептеу;
- 32 атомға дейін үлкейтілген LiF кристалының геометриялық құрылымы мен әр атомның үш ось бойында орналасқан координаттарын табу;
- F -центірін енгізгеннен кейінгі кристалдық тордағы ығысулар мен пайда болған өзгешеліктерді сипаттау;
- Осы дефектінің түзілуіне кеткен энергиясын есептеп, теориялық жағдаймен салыстыру.

Тәжірбелік материалдары мен әдістері

F орталықтарын модельдеуде ұяшықтың өлшеміне қатысты мәселе өте маңызды болып есептеледі. Алдын ала есептеулер көрсеткендей, бұл ақауларды зерттеу үшін шамамен 32-120 атомнан тұратын кеңейтілген ұяшық қажет болды. Сондықтан бастапқы кіріс файлында кеңейтілген ұяшықты құру үшін матрица түріндегі SUPERCEL командасын қолдануға болады. Бұл жағдайда кіріс блогы келесідей жазуға болады

Файл құрамы	Түсініктемесі
LiF	Аты
CRYSTAL	Жүйенің периодтылығы
0 0 0	Кристаллографиялық мәлемет
225	Кеңістіктік топ
4.028	Тор тұрақтылары
2	Атомдар саны
9 0. 0. 0. 3 0.5 0.5 0.5	Атомдарының координаттары
SUPPERCEL -1 2 2 1 -2 2 1 2 -1	Ұшықты кеңейтуге арналған кілт сөзі
END	Блогының соны

Жалпы тордың кеңейтуі x, y, z осьтері бойынша жүргізіледі және есептеуімізде 32 атомынан тұратын LiF қолданылды, оның нақты құрылымын 3.4-суретінен көруге болады. Енді ақауды енгізу үшін біз GHOSTS командасы арқылы қандайда бір F атомын алып тастаймыз. Бірақ бұл команда тиісті базистік функцияларды сақтай отырып, тек атомының ядросы мен элнетрондарын алып тастайды. Тәжірибе жүзінде 14 атом таңдалған болатын, себебі тордың қабаттарында орналасқандықтан. Осы кезде дегенмен біздің торымызда вакансия пайда болады.



3.4 суреті - Кеңейтілген LiF торы. Күлгін және жасыл шеңберлермен сәйкесінші Li мен F атомдары берілген.

Ақауды зерттеу кезінде оның барлық көршілерінің релаксациясын ескеру маңызды. Себебі дефектіге көбінесе алшақтықта орналасқандар емес, көршілес атомдар өзгеріске ұшырайды. Соның ішіндегі көбінесе F-центрине жақын орналасқан катиондар маңызды рөл атқарады. Дәл осы катиондар бір-бірінен алшақтап, ең үлкен ығысулар жасай отырып, релаксацияның ақауға қарай жалпы бағытына әкеледі. Ал сол ақаудың түзілу энергиясы тоқтала кетсек, келесі теңдеуді қолдануға болады:

$$E_f = E^{perfect} - E^{defect} - E^{atom} \quad (1)$$

мұндағы E^{atom} -еркін атомының энергиясы, $E^{perfect}$ -идеалды кристаллдың энергиясы, E^{defect} -ақаулы кристаллдың энергиясы. Жалпы біздің жағдайымызда 32 эВ энергия шықты, бірақ бұл жалпы идеалды жаңдайынан тым көп болып есептеледі, себебі санауларымында оптимизацияны пайдаланбаған болатын. F-орталықтарының оптикалық сіңіру энергиясы тиісті эксперименттік нәтижелермен бірге 3.9-кестеде келтірілген. Нәтижесінде, мысалы, HF есептеулері экспериментті асыра бағалайды деп айтуға болады, ал B3LYP әдісі ақаудың козу параметрлерін дәлірек сипаттайды.

3.9-кесте. LiF кристалының F-центринің сіңіру энергиясы

Кристалл	Эксперимент [6]	HSE06	B3LYP	HF
LiF	5,102	37	32	38,85

Осы келтірілген жағдайда негізінде пайда болған фтор вакансиясы акцептор ретінде сипаттауға болады. Сондықтанда түзілген энергия Ферми деңгейінің жоғарлауымен керісінше кішірей бастайды.

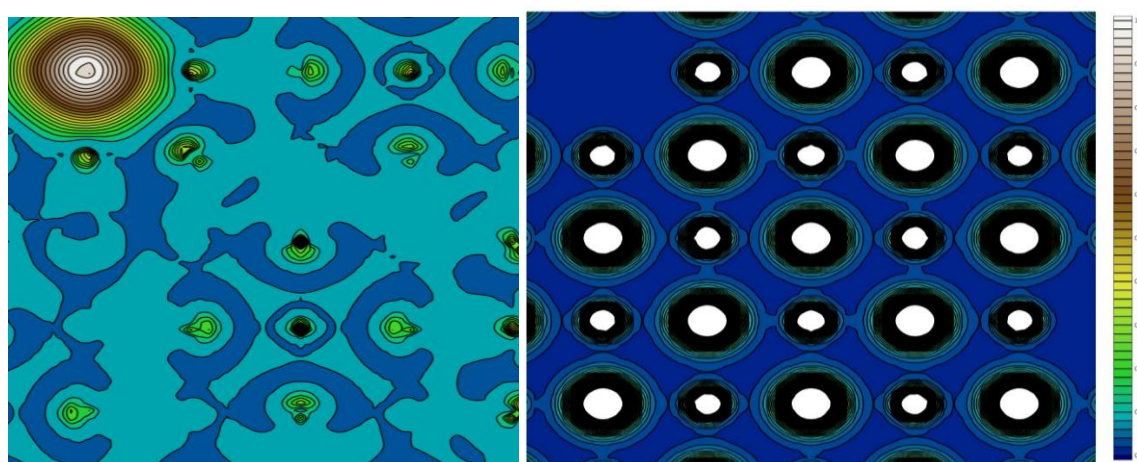
Ал зарядтарының таралуына тоқтала кетсек, біздің таңдалған атомымыз зарядының бір бөлігін тордағы көршілес орналасқан атомдарға бергенін байқауға болады (3.11-кесте). Сонымен қатар вакансияның қосылуымен кейбір атомдарының арасындағы байланыстарда өзгеріске ұшырады. Көбісі идеальды кристалмен салыстырғанда әлсірей бастаса, әсіресе ақаудың маңында, басқалары керісінше күшейе бастады. 3.6-суретінде LiF кристалының есептелген зарядтық және спиндік тығыздықтарын көруге болады.

3.11-кесте. Элементар ұяшықтағы вакансия мен атомдарының ақаудың пайда болғаннан кейінгі эффективті заряды

Номер	Атом	Эффективті заряды
1	F	9.981
2	F	9.981
3	F	9.982

4	F	9.982
5	F	9.981
6	F	9.981
7	F	9.976
8	F	9.981
9	F	9.982
10	F	9.977
11	F	9.982
12	Вака́нсия	0,906
13	F	9.976
14	F	9.981
15	F	9.981
16	F	9.981
17	Li	2.025
18	Li	2.024
19	Li	2.024
20	Li	2.025
21	Li	2.024
22	Li	2.024
23	Li	2.024
24	Li	2.025
25	Li	2.024
26	Li	2.024
27	Li	2.024
28	Li	2.025
29	Li	2.024
30	Li	2.024
31	Li	2.025
32	Li	2.025

Дегенімен кристалдың ішкі жағында пайда болған ақаулары тордың бетіне ешқашан ауыспайды. Бірақ беттегі иондар қатты ығысуға ұшырайды. Себебі жоғарыда айтылғандай F-центірі-бір электронды ұстап алатын аниондық бос орын болып саналады. Сондықтанда тордың бетіндегі орналасқан катиондар ақауға қарай, ал аниондар керсінше одан алшақ сыртқа қарай жылжи бастайды. Осылайша бастапқы идеалды тордың құрылымы күрделей бастайды.



3.6-сурет - LiF кристаллының ішіндегі F-орталықтарының зарядтық (оң жағында) және спиндік (сол жағында) тығыздығының карталары.

Сонымен, біздің кеңейтілген супер ұяшықтар үшін жүргізілген есептеулер бойынша, электрондық тығыздықтың көп бөлігі вакансияның көршілес орналасқан атомдарға шоғырланған. Дегенмен 3.11 кестесінен қарасақ, Li атомдарында тек 17, 20, 24, 28, 31 және 32 ретте орналасқандары ғана өзіне зарядтын кішкентай бөлігін қабылдап алған болатын, ал қалғандары өзгеріссіз қалды. Осы біздің кристаллымыздың бастапқы дефектілернің бірі болып есептеледі және өте терең құзығушылығыты тудырды.

Пайдаланылған әдебиеттер тізімі

1. Непомнящих А.И., Раджабов Е.А., Угранов А.В. Центры окраски и люминесценция кристаллов LiF. -Новосибирск: Наука. Сибирское отделение. 1984. – 114с.
2. Лисицына Л.А. Радиолюминесценция ионизованных электронных центров окраски в кристаллах LiF // ФТТ. – 2001. - т. 43, В. 1. - С. 25 - 29.
3. Ковальчук Б.М., Месяц Г.А., Семин Б.Н., Шпак В.Г. Сильноточный наносекундный ускоритель для исследования быстропротекающих процессов // ПТЭ. -1981. - № 4. - С. 15-18.
4. Piesch E., Burghardt B., Karabadjova S. Supralinearity and re-evaluation of different LiF dosimeter types // International conference on luminescence dosimetry.- 1975. –Vol.3. P.189
5. Rosa L. A. R., Caedoso S. C., Campos L. T., Alves V. G. L., Alves D. V. S., Batista D. V. S., Facure A. Percentage depth dose evaluation in heterogeneous media using thermoluminescent dosimetry // J. Appl. Clinical Medical Physiocs. – 2010. - Vol.11, №1.- P. 1133-1136.
6. Кузнецов А.Ю., Соболев А.Б., Макаров А.С., Ботов М.А. Квантовохимическое моделирование F-центра в кристаллах LiF, NaCl и KCl // Проблемы спектроскопии и спектрометрии: Межвузовский сборник трудов. Вып. 26. Екатеринбург: УГТУ – УПИ, 2010. С. 105-124.

ӘӨЖ 620.3

ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТ/C₆₀,C₇₀ ПЛЕНКАЛАРЫНЫҢ ОПТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ

Сыздыкова Жанерке Ерболовна
zhanerkesyzdykova@gmail.com

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 7М07140 - «Наноматериалдар және нанотехнологиялар» мамандығының 2 курс магистранты, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – Г. Е. Сатаева

Әртүрлі көміртекті нанобөлшектерді қамтитын көміртекті нанокомпозиттік полимерлік (КНКП) материалдарды зерттеуге арналған арнайы ғылыми зерттеулер кең көлемде қол жетімді бола бастады. Полимерлі матрицалардағы көміртекті наноқоспалар ретінде негізінен: әртүрлі модификациядағы фуллерендер (C₆₀, C₇₀ және т.б.), кәміртекті нанотүтіктер (КНТ), наноалмаздар және көміртегі негізіндегі басқа нанобөлшектер болуы мүмкін. Әдетте, кәміртекті наноқоспалардың түріне және олардың концентрациясына байланысты бірқатар физикалық-химиялық қосылыстар айтарлықтай өзгеруі мүмкін.

Зерттеу мен КНКП материалдарының басқа да физика-химиялық қасиеттерін, атап айтқанда, олардың оптикалық (спектрофотометриялық) қасиеттерін зерттеу ғылыми қызығушылық тудыруда.

ПММА үлгілерінің және оның негізіндегі нанокомпозиттік полимерлі материалдардың оптикалық қасиеттері оларды практикалық қолданудың маңызды аспектілерінің бірі болып табылады. Полимерлі нанокомпозитті материалдардың мәлдірлігі, жылтырлығы оптикалық қасиеттерді жақсартуға қабілетті екенін кәрсетеді. Беткі қасиеттердің нанокомпозиттердің әсерінен өзгеруі пленкалардың тегіс бетіне, ал кейбір жағдайларда микро кедір-бұдыр беттің пайда болуына әкеледі. Бұл – пленка бетінің сызаттар мен үгілуге тәзімділігін арттыруға, үйкеліс коэффициентін төмендетуге және тежеуге қарсы эффекті алуға әсер етеді. Полимерлі нанокомпозиттері бар пленкалардың бетінің микро