

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ

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

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»
XIX Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XIX Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»**

**PROCEEDINGS
of the XIX International Scientific Conference
for students and young scholars
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»**

**2024
Астана**

УДК 001

ББК 72

G99

«ǴYLYM JÁNE BILIM – 2024» студенттер мен жас ғалымдардың XIX Халықаралық ғылыми конференциясы = XIX Международная научная конференция студентов и молодых ученых «ǴYLYM JÁNE BILIM – 2024» = The XIX International Scientific Conference for students and young scholars «ǴYLYM JÁNE BILIM – 2024». – Астана: – 7478 б. - қазақша, орысша, ағылшынша.

ISBN 978-601-7697-07-5

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

ББК 72

G99

ISBN 978-601-7697-07-5

**©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2024**

PDX	RDM	Portland, OR	Bend, OR	459	26	116
-----	-----	-----------------	----------	-----	----	-----

Далее мы предоставим кейсы по данным $CAV15\alpha.b$, 15α – скидочный коэффициент, умноженный на 15, а $d \in \{U, C\}$ – момент распределения вероятностей выполнения сценариев. U – равномерное распределение вероятностей и C – уменьшающиеся вероятности. В таблице 2 показаны результаты для стохастической задачи.

Таблица 2 - Результаты для стохастической задачи.

Код	Время (сек.)	Хабы	Obj.
CAV2.U	11.87	4, 7, 12, 17, 24	963.85
CAV4.U	10.71	4, 12, 18, 24	1104.25
CAV6.U	8.59	12, 18, 21	1216.76
CAV8.U	7.61	12, 18, 21	1288.86
CAV2.C	11.54	4, 7, 12, 17, 24	961.38
CAV4.C	10.53	4, 12, 18, 24	1099.1
CAV6.C	10.08	12, 18, 21	1209.69
CAV8.C	8.16	12, 18, 21	1280.01

Время - отображает значения затраченного времени на решение соответствующей задачи. Хабы – это список узлов сети, которые выбраны в качестве хабов. Obj – целевая функция после оптимизации.

Заключение

В заключение можно сказать, что наша модель действительно хорошо рассчитывает возможные местоположения хабов, при этом учитывая другие нагрузки, в будущем она будет доработана сильнее, для более точного прогноза, но на данный момент она уже подходит для начального анализа.

Список использованных источников

1. Klinecicz JG. Hub location in backbone/tributary network design: a review. Location Science 1998; P. 307–335.
2. Ebery J, Krishnamoorthy M, Ernst A, Boland N. The capacitated multiple allocation hub location problems: formulations and algorithms. European Journal of Operational Research 2000; P. 614–631.
3. Hamacher HW, Labbé M, Nickel S, Sonneborn T. Adapting polyhedral properties from facility to hub location problems. Discrete Applied Mathematics 2004; P. 104–116.
4. O’Kelly ME, Bryan DL, Skorin-Kapov D, Skorin-Kapov J. Hub network design with single and multiple allocation: a computational study. Location Science 1996; P. 125–338.

УДК 004.94

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННОЙ ЁМКОСТИ ВОДОРОДА ЧЕШУЙКИ СКОМКАННОГО ГРАФЕНА С ЧАСТИЦАМИ ЛИТИЯ

Бассареев Азат Ахатович

bassareev@gmail.com

Магистрант первого курса физико-технического факультета ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана,
Казахстан

Научный руководитель - К.А. Крылова

Водород представляет собой один из наиболее перспективных источников энергии для будущего. Он обладает высокой энергетической плотностью и при сгорании не выделяет вредных веществ, что делает его привлекательным вариантом для экологически чистой энергетики. Однако одной из ключевых проблем в использовании водорода как энергоносителя является его хранение. Водород обладает малой плотностью в газообразном состоянии, что затрудняет его транспортировку и хранение [1].

Исследования в области нанотехнологий открывают новые возможности для улучшения хранения водорода. Углеродные нанотрубки и металлоорганические каркасы рассматриваются как потенциальные материалы для увеличения эффективности хранения водорода. Эти материалы могут абсорбировать водород при более высоких температурах и атмосферном давлении, что делает их привлекательными для практического использования [2].

Кроме того, исследования в области легирования графена литием показывают, что такие подходы могут изменять электронные свойства графена, что потенциально может быть использовано для улучшения водород-сорбционной способности материалов. Это открывает новые перспективы для создания более эффективных систем хранения водорода, которые будут иметь ключевое значение для развития водородной энергетики [3].

В данном исследовании были проанализированы процессы адсорбции водорода на скомканном графене, модифицированном литием, с использованием метода молекулярной динамики. Данный метод позволил выявить оптимальную концентрацию лития, при которой наблюдается лучшая водород-сорбционная емкость в исследуемой углеродной структуре.

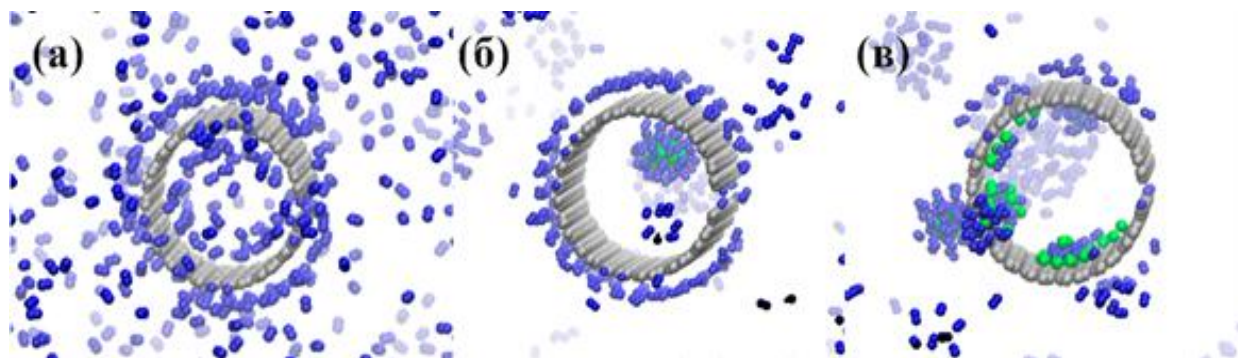


Рис. 1. Исходная структура чешуйки скомканного графена без атомов лития (а) и легированного литием: 16 (б) и 64 (в) атома Li. Атомы углерода, водорода и лития показаны серым, синим и зеленым цветом соответственно.

Для моделирования была использована чешуйка скомканного графена, полученная путем удаления двух атомных рядов из углеродной нанотрубки с диаметром 2 нм и длиной 2,5 нм. Изначально в нанотрубке насчитывалось 308 атомов углерода, после вырезания атомов углерода их количество сократилось до 286 атомов (серые атомы на Рис.1). Атомы лития были расположены внутри чешуйки скомканного графена (атомы лития представлены зеленым цветом на Рис. 1). В ходе эксперимента рассматривались чешуйки скомканного графена с различным количеством атомов лития: без лития, с 16 и 64 атомами лития. Исследуемые структуры помещались в среду водорода (атомы водорода показаны синим цветом на Рис. 1). Атмосфера водорода формировалась из отдельных атомов водорода, которые при температуре 300 К и

последующей оптимизации структуры превращались в молекулы H_2 . Изначально атмосфера водорода содержала 3 600 атомов водорода, большинство из которых после термической обработки перешло в молекулярное состояние.

Для моделирования адсорбции водорода на поверхности скомканного графена с легированного литием, использовался метод молекулярной динамики с применением свободно распространяемого пакета LAMMPS [4,5]. Межатомное взаимодействие С-С и С-Н описывалось с помощью потенциала AIREBO [6], а взаимодействие Li-Li, Li-C и Li-H описывалось потенциалом Морзе [7,8].

В ходе моделирования устанавливались периодические граничные условия, а структура скомканного графена фиксировалась для предотвращения ее деформации под воздействием температуры. Регулирование температурных условий осуществлялось с помощью термостата Носе-Гувера с использованием NPT ансамбля. Визуализация структуры проводилась с помощью программного пакета Visual Molecular Dynamics, а анализ водород-сорбционной емкости осуществлялся собственным программным кодом, позволяющим отслеживать изменения гравиметрической плотности водорода в исследуемых образцах [9,10].

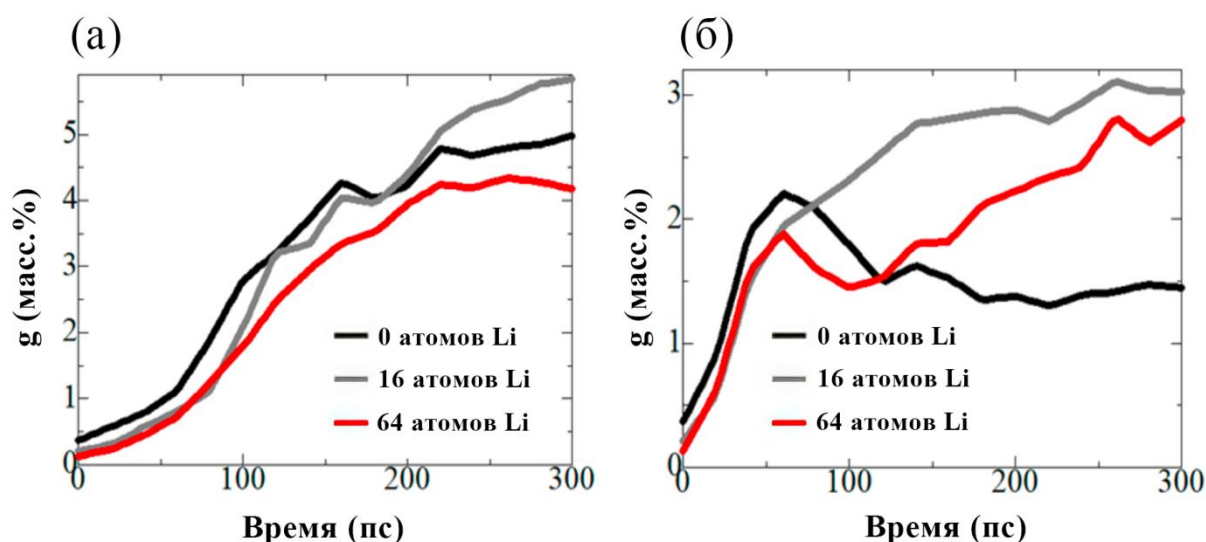


Рис. 2. Зависимость гравиметрической плотности чешуек скомканного графена легированного атомами лития и без них от времени выдержки при 77 (а) и 300 К (б).

Процесс насыщения водородом скомканного графена с литием был исследован при температурах 77 и 300 К на протяжении 300 пс. На графиках, представленных на Рис. 2 (а) и (б), показано изменение гравиметрической плотности в зависимости от времени насыщения для чешуек скомканного графена с различным содержанием лития. Видно, что максимальная гравиметрическая плотность достигается в чешуйке с 16 атомами лития, независимо от температуры насыщения. Однако, после выдержки при 77 К в течение 300 пс гравиметрическая плотность составила 6 масс.%, в то время как при 300 К она уменьшилась до 3 масс.%. При температуре 77 К гравиметрическая плотность на 20% выше, чем у образца без лития, а при 300 К гравиметрическая плотность у чешуйки скомканного графена с 16 атомами лития выше в два раза по сравнению с чешуйкой скомканного графена без атомов лития. Этот эффект возникает потому, что при снижении температуры водород накапливается на частицах лития и углеродной поверхности скомканного графена. Повышение температуры до 300 К приводит к тепловым колебаниям атомов водорода, разрушающих слабые связи ван-дер-Ваальса между водородом и углеродом. Однако, увеличение количества лития в четыре раза снижает гравиметрическую плотность из-за дисперсии частиц лития, большинство из которых адсорбируется на внутренней поверхности графена. Отметим, что гравиметрическая плотность образца с 64 атомами лития на 86% выше при 300 К, чем у образца без лития.

Полученные результаты важны для разработки новых материалов, предназначенных для хранения и транспортировки водорода. Скомканый графен с литием может быть использован в водородных топливных элементах при низких температурах, а повышение температуры приводит к разводороживанию этих систем. Продолжение исследований в этой области может привести к созданию новых, более эффективных материалов для хранения водорода.

Работа выполнена в рамках Государственного задания молодежной лаборатории ИПСМ РАН.

Список использованных источников

1. Kang, S., Lee, S. Y., & Yoo, S. H. (2019). Hydrogen storage for fuel cell vehicles. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 72, 1-11.
2. Jawhari, Ahmed Hussain. Novel Nanomaterials for Hydrogen Production and Storage: Evaluating the Futurity of Graphene/Graphene Composites in Hydrogen Energy. Department of Chemistry, Faculty of Science, Jazan University, P.O. Box 2097, Jazan 45142, Saudi Arabia.
3. Xia, Xiaodong et al. "Hydrogen Storage Properties of Li-Decorated Graphene: First-Principles Calculations." *ACS Omega* vol. 3,1 (2018): 302-309. doi:10.1021/acsomega.7b01506
4. S. Plimpton // *Journal of Computational Physics*. 1995. 117 (1). P. 1–19.
5. A. P. Thompson, et. al. // *Computer Physics Communications*. 2022. 271. P. 108171.
6. S. J. Stuart, et. al. // *J. Chem. Phys.* 2000. 112 (14). P. 6472–6486
7. A. Galashev, et. al. // *Computation*. 2019. 7. 60.
8. W.-C. Qiang, et. al. // *Physics Letters A*. 2007. 363. P. 169–176.
9. N. G. Apkadirova, et. al. // *Letters on Materials*. 2022. 12 (4s). P. 445-450.
10. N. G. Apkadirova, et. al. // *Materials Physics and Mechanics*. 2021. 47. P. 817-822.

УДК 371.38

ГЕОГЕВРА БАҒДАРЛАМАСЫНДА ҮШБҰРЫШТЫҢ МЕДИАНАСЫ МЕН БИСЕКТРИСАСЫНА КӨРНЕКІ МЫСАЛДАР

Берікқызы А.

Астана Халықаралық университеті магистранты, Астана қ., Қазақстан
Ғылыми жетекші: PhD, қауымдастырылған профессор Нұрахметов Д.Б.
E-mail: aruzhan015@gmail.com

Аннотация. Бұл мақала оқушыларға геометрия пәні бойынша үшбұрыш тақырыбына қатысты кейбір сұрақтарды Geogebra бағдарламасында көрнекті оқытуға арналған. Сонымен қатар, үшбұрыштың биіктіктерін, медианаларын және биссектрисаларын табудың мысалдары мен есептер ұсынылған.

Кілт сөздер: планиметрия, Geogebra бағдарламасы, көрнекілік, геометрия, мектепте оқыту.

Abstract. This article is designed to teach students some geometry questions related to the topic of triangles in Geogebra. In addition, examples and problems for finding the altitudes, medians and bisectors of a triangle are presented.

Key words: planimetry, Geogebra program, visualization, geometry, schooling.

Қазіргі кезде компьютерлік бағдарламаларды қолдану оқу барысының ажырамас бөлігіне айналды. Олар тиімді оқытуға, әсіресе математика саласында жаңа ақпараттарды көрнекі түсіндіруге үлкен мүмкіндіктер береді. Бұл мақалада біз 7-сынып оқушыларына геометрия сабағын оқытуда компьютерлік эксперименттерді қолданудың маңыздылығын қарастырамыз.

[1] жұмыста, мектеп оқушылары естігенінің 5%-ын, көргенінің 20%-ын есте сақтайтындығы айтылған. Ал ақпарат аудио және бейне фрагменттерімен біріктіріліп түсіндірілетін болса, онда материалдың баланың есінде сақтауы 40-50%-ға дейін артады.