



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ТҰҢҒЫШ ПРЕЗИДЕНТІ - ЕЛБАСЫНЫҢ ҚОРЫ

«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ – 2017»

студенттер мен жас ғалымдардың
XII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

XII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ – 2017»

PROCEEDINGS

of the XII International Scientific Conference
for students and young scholars
«SCIENCE AND EDUCATION - 2017»



14th April 2017, Astana



**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**«Ғылым және білім - 2017»
студенттер мен жас ғалымдардың
XII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2017»**

**PROCEEDINGS
of the XII International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2017»**

2017 жыл 14 сәуір

Астана

УДК 378

ББК 74.58

Ғ 96

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2017» студенттер мен жас ғалымдардың XII Халықаралық ғылыми конференциясы = The XII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2017» = XII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2017». – Астана: <http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2017. – 7466 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-827-6

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 378

ББК 74.58

ISBN 978-9965-31-827-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2017

electromagnetic environment in the region of Astana [5].

References

1. Mizin S.V. Programmnoe obespechenie priborov monitoringa kosmicheskikh luchej // Dissertacija na soiskanie uchenoj stepeni kandidata fiziko-matematicheskikh nauk. -M. - 2010. – P.140.
2. Morzabaev A.K., Giniyatova Sh.G., Shahanova G.A. Otchet o nauchno-issledovatel'skoj rabote//. –Astana. - 2016. -P.54.
3. De Mendonça R., Raulin J.P., Makhmutov V.S. Analysis of atmospheric pressure and temperature effects on cosmic ray measurements // GeoPhys.Res.: Space Physics. - 2013. - Vol.118. –P.1403–1409.
4. Osnovy jazyka programmirovaniya IDL. Uchebnoe posobie. - M.: ZAO «Kompanija «Sovzond». – 2009. – P.191.
5. R Development Core Team. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing//. Vienna, Austria. - 2009.

ӘОЖ 547.52; 539.89

ПОЛИЦИКЛДЫАРОМАТТЫ КӨМІРСУТЕКТЕРДІҢ АЛҒАШҚЫ ҚАҒИДАЛАР ӘДІСІ АРҚЫЛЫ ҚАСИЕТТЕРІНІҢ ЖІКТЕЛУІН ЗЕРТТЕУ

Абуова Фатима Усеновна

fatika_82@mail.ru

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Физика-техникалық факультетінің PhD докторы, доцент

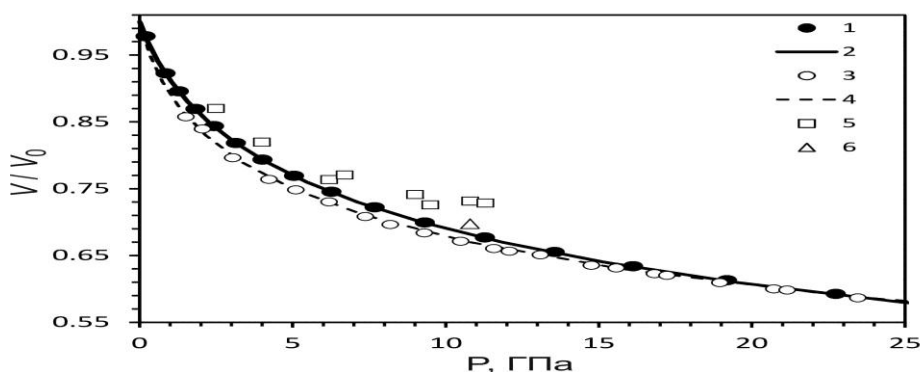
Бұл жұмыста алғаш рет молекулалық және кристалдық құрылымдарына, сонымен қатар элементар ұяшықтағы атомдар саны мен молекула өлшеміне байланысты ПАК сығылғыштық параметрлерін жүйелеу әрекеті жасалды. Бұл оларды кейінгі жоғары температура мен қысым кезіндегі эксперименталды және теориялық зерттеулер үшін критикалық мәнге ие. Жоғары қысымда көмірсутекті қосылыстарды зерттеу, оларды органикалық жартылайөткізгіш негізінде көміртекті нанотехнология, фотоника және микроэлектроникада белсенді қолданылатындығына байланысты, қатты дене химиясының негізгі міндеті болып табылады [1]. ПАК бірегей оптикалық және электрондық қасиеттер қатарына ие. Көбінесе, жоғарыбарлық түрлендіруде асқынөткізгіштік температурасы жоғарылайды, мысалы, фенантрен және пицен негізінде жасалған асқынөткізгіштерде [2].

Кристалдық құрылымдарды есептеу VASP [33, 34] программалық пакетінде орт PBE-vdW [3] формасында айырбас – корреляциялық градиенттік аппроксимациясымен тығыздық функционалы теориясы төңірегінде жүргізілді. Есептеулер жұмысында қолданылған схема бойынша VASP өндірген vdW-DF әдісі көмегімен жүзеге асырылды. Жазық толқындарды кесу энергиясы 600эВ тең болды. Электрондық құрылымды есептеу үшін Монкхорст – Пак схемасы бойынша Бриллюэн зонасында, шамамен 2000/ N тең, қажетті (затқа байланысты) k -нүктелер саны қолданылды. Мұндағы N – элементар ұяшықтағы атомдар саны. Есептеулер құрылымына байланысты ұяшықта 2 немесе 4 молекула бар бір элементар ұяшық үшін жүргізілді.

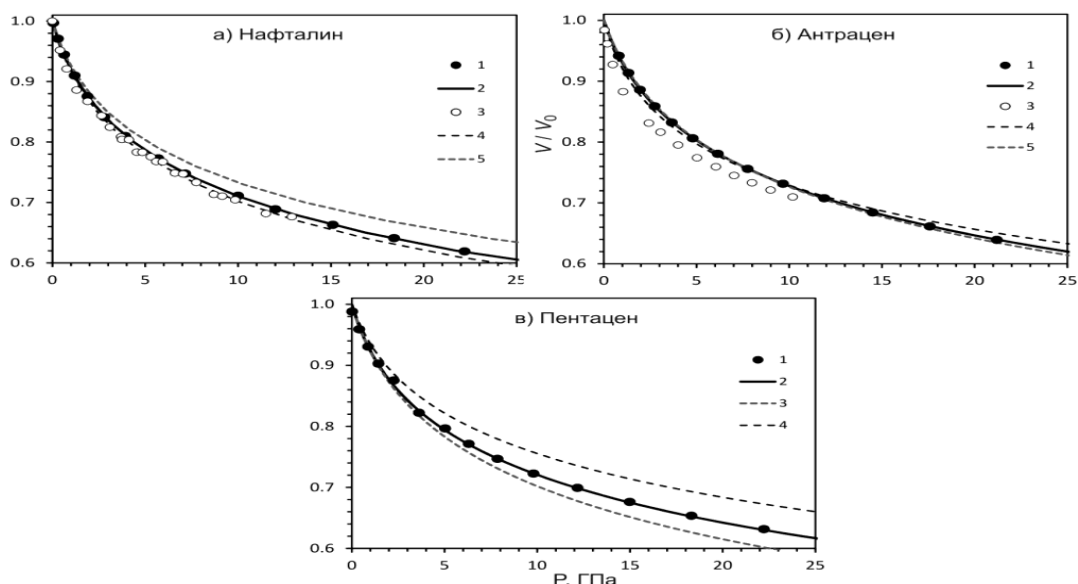
Алғашқы қағидалы есептеулер нәтижелері 1-кестеде көрсетілген. 1 кестеде нолдік қысым кезіндегі элементар ұяшық параметрлерін алдыңғы эксперименттік және теориялық деректермен салыстыру жүргізіледі. Молекулалық қосылыстардың жылулық кеңеюінің шамамен алынған мәнін ескере отырып, жүргізілген есептеулердің сенімді екендігін растайтын, есептелген және өлшенген параметрлер арасындағы өзгешелік 3%-ды құрайды. 1, 2 суретте эксперименттік және алдыңғы теориялық есептелген сығылғыштықты салыстыру көрсетілген. Ол сонымен қоса есептеу мен эксперимент арасындағы жақын сәйкестікті көрсетеді.

1 - суретте бензол III үшін деректер көрсетілген. 295 К кезіндегі [3] және 540 К кезіндегі [4] жұмыстарындағы эксперименттік өлшенген шамалардың бір-біріне ұқсастығы үлкен айырмашылыққа ие екенін атап өту керек. 540К кезіндегі деректер, 595К кезіндегі деректерге қарағанда кіші көлемге сәйкес келеді. Бензолдың сығылғыштығын анықтайтын қосымша зерттеу қажет екендігі айқын. Біздің есептеген деректеріміз [4] жұмысында өлшенген көлемдермен айтарлықтай сәйкес келеді.

Жұмыста бензол және ПАК қатарының кристалдық құрылымдар мен сығылғыштық параметрлерінің алғашқыпринципті есептеулер нәтижелері келтірілген. Орт РВЕ-vdW Ван дер Ваальстік әсерлесуді есепке ала отырып РВЕ формасында қысымның 0-20ГПа интервалында VASP программасы көмегімен айырбас-корреляциялық потенциалдың градиенттік аппроксимациясымен тығыздық функционалы теориясы қолданылды. Эксперименттік деректер мен алдындағы теориялық есептеулерді салыстыру таңдалынып алынған әдістің орынды екендігін көрсетеді.



Сурет 1. Бензол III сығылғыштығының әдебиеттегі мәліметтермен салыстыру. 1 – осы жұмыс, 2 – Винэ УС бойынша аппроксимация, 3 – 540 К кезіндегі эксперименттік мәліметтер және олардың Винэ УС бойынша аппроксимациясы (4), 5 – 294 К кезіндегі эксперименттік мәліметтер, 6 – алғашқыпринцип есептеуі.



Сурет 2. Осы жұмыста алынған, ПАК сығылғыштығын әдебиеттегі мәліметтермен салыстыру. А) Нафталин: 1 – осы жұмыс және олардың Винэ УС бойынша аппроксимациясы (2), 3 – эксперименттік мәліметтер [24, 25] және олардың Винэ УС бойынша(4), 5 – алғашқы принциптен есептеу. Б) Антрацен: 1 – осы жұмыс және олардың Винэ УС бойынша аппроксимациясы (2), 3 – эксперименттік мәліметтер және 4 – алғашқы принциптен есептеу, 5 – алғашқы принциптен есептеу. В) Пентацен: 1 – осы жұмыс және олардың Винэ УС бойынша аппроксимациясы (2), 3 – эксперименттік мәліметтер және 4 – алғашқы

принциппен есептеу.

Кесте 1

Эксперименттік мәліметтер мен алдағы теориялық есептеулермен салыстырғандағы стандартты шарттар кезінде есептелген элементар ұяшықтың параметрлері

	a, Å	b, Å	c, Å	□	□	□	V ₀ , Å ³
Бензол I	7.4	9.4	6.8		90.		48
	86	49	55		00		4.89
	7.4	9.6	7.0		90.		50
	60	60	30		00		6.61
	7.1	9.2	6.6		90.		44
	70	80	50		00		2.48
	7.4	9.7	7.0		90.		51
	90	10	70		00		4.19
	7.8	9.9	7.2		90.		56
	45	40	74		00		7.22
Бензол III	5.6	5.5	7.9		110		23
	86	95	87		.92		7.35
	5.9	5.8	8.3		117		26
	80	98	27		.70		0.03
	5.4	5.4	7.5		110		21
	81	39	82		.53		1.68
	5.4	5.3	7.5		110		20
	17	76	32		.00		6.12
Нафталин	8.2	6.0	8.7		123		35
	13	02	31		.58		8.58
	8.2	5.9	8.6		122		36
	61	87	82		.67		1.44
	8.1	5.9	8.6		124		34
	08	40	47		.38		3.70
	8.2	5.9	8.6		122		36
	59	83	74		.65		0.88
	8.0	5.8	8.5		123		33
	35	90	65		.59		7.65
	8.1	5.9	8.5		124		34
	90	99	84		.00		9.64
Антрацен	8.6	5.9	11.		124		47
	03	54	166		.51		1.30
	8.5	6.0	11.		124		47
	57	12	186		.24		5.72
	8.3	5.7	11.		121		46
	99	93	199		.87		2.75
	8.5	6.0	11.		125		46
	49	15	065		.12		5.40
Фенантрен I	8.5	6.0	9.3		97.		48
	21	68	86		96		0.65
	8.4	6.1	9.4		98.		48
	72	66	67		01		9.72
Фенантрен	12.	3.8	17.		99.		86
II*	937	22	693		13		3.71

Аценафтен	8.3 32	14. 003	7.0 90		90. 00		82 7.24
	8.2 90	14. 000	7.2 25		90. 00		83 8.53
ПиренШ	15. 350	4.0 09	8.4 12		102 .59		50 5.17
	15. 350	3.8 52	8.6 50		103 .30		49 7.74
Тетрацен	7.9 01	6.0 90	13. 505	10 1.27	113 .24	85. 63	58 5.60
	7.9 43	6.0 64	12. 650	10 1.31	99. 04	94. 15	58 6.69
	7.8 10	5.8 65	12. 770	10 1.71	98. 21	93. 38	56 4.55
Пентацен	5.8 64	7.7 24	15. 558	81 .22	86. 87	89. 69	69 5.41
	6.2 56	7.8 13	14. 615	76 .11	86. 85	84. 79	69 0.19
	5.9 71	7.7 14	14. 911	79 .05	85. 22	85. 59	67 0.65
Коронен	16. 204	4.7 29	10. 159		110 .91		72 7.25
	16. 093	4.6 84	10. 060		111 .00		70 7.87
	16. 110	4.7 00	10. 100		110 .90		71 4.42

* Бұл жұмыста 0,5ГПа – дан төмен қысым кезінде құрылымы тұрақты болмағандықтан фенантрена Параметрлері есептелмеген. А – осы жұмыс. Теор. – ОК кезіндегі теориялық есептеулер.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Watanabe M., Chang Y.J., Liu S.-W., et al. // Nature chemistry. – 2012. – **4**. – P.574-578.
2. Witte G., Woll C. // Journal of Material Research. – 2004. – **19**. – P.1889-1916.
3. Wang X., Liu R., Gui Z., et al. // Nature communications. – 2011. – **2**. – P.507.
4. Mitsuhashi R., Suzuki Y., Yamanari Y., et al. // Nature. – 2010. – **464**. – P.76-79.

УДК 533.9

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНИЗАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЫ В МОДЕЛИ ИОНИЗАЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ

Азаматов А.А.¹, Баяхметов О.С.², Сексембаев Ж.Б.³

aaa996@bk.ru, olzhhik1992@mail.ru, jandos_s90@mail.ru

¹Студент 4-го курса физико-технического факультета ЕНУ им.Л.Н.Гумилева, Астана

²Магистрант 2-го курса физико-технического факультета ЕНУ им.Л.Н.Гумилева, Астана

³Докторант 3-го курса физико-технического факультета ЕНУ им.Л.Н.Гумилева, Астана

Научный руководитель – С.Сахиев

Введение

Моделирование поведения частично ионизованных состояний плазмы мишени должно учитывать расчет ряда физических параметров, таких как степень ионизации,