

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.

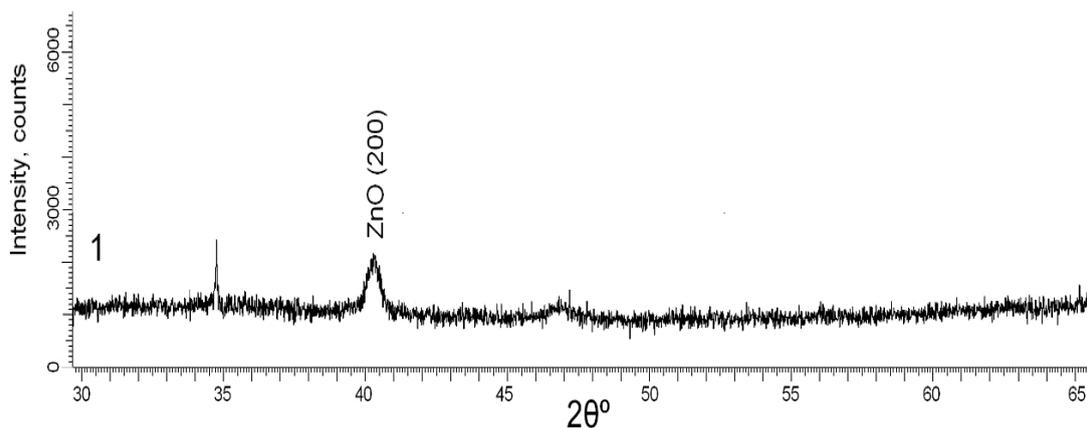
The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

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-сурет. Zn/SiO₂/Si рентгендік рентгенограммасы

Пайдалынфылған әдебиеттер тізімі:

1. Özgür, Ü., Alivov, Ya. I., Liu, C., Teke, A., Reshchikov, M. A., Doğan, S., Avrutin, V., Cho, S.-J., MorkoçH.,. A comprehensive review of ZnO materials and devices. *J. Appl. Phys.* 2005,98, 041301.
2. Zhang, L., Huang, H., Structural transformation of ZnO nanostructures. *Appl. Phys. Lett.* 90, 023115.
3. Jaffe, J. E., Hess, A.C. Hartree-Fock study of phase changes in ZnO at high pressure. 1993, *Phys. Rev. B* 48, 7903-7909.
4. Jaffe, J.E., Snyder, J.A., Lin, Z., Hess, A.C., LDA and GGA calculations for high-pressure phase transitions in ZnO and MgO. *Phys. Rev. B* 2000, 62, 1660–1665.
5. Uddin, J., Scuseria, G. E. Theoretical study of ZnO phases using a screened hybrid density functional. *Phys. Rev. B* 2006,74, 245115.
6. Qteish, A., Self-interaction-corrected local density approximation pseudopotential calculations of the structural phase transformations of ZnO and ZnS under high pressure. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2000, 12, 5639–5654.
7. Baaziz, H., Charifi, Z., Haj Hassan, F. El., Hashemifar, S.J, Akbarzadeh, H., FP-LAPW investigations of Zn_{1-x}Be_xS, Zn_{1-x}Be_xSe and Zn_{1-x}Be_xTe ternary alloys. *Phys. Stat. Sol. B* 2006,243 (6), 1296–1305.
8. Bragg, W.H., Darbyshire, J.A., 1954. *J. Met.* 6, 238.
9. Sun, X. W., Liu, Z.J., Chen, Q.F., Lu, H.W., Seong, T., Wang, C. W. Heat capacity of ZnO with cubic structure at high temperatures. *Solid State Commun.*2006, 140, 219–224.
10. Ashrafia, A., Jagadish, C., Review of zincblende ZnO: Stability of metastable ZnO phases. *J. Appl. Phys.* 2007,102, 071101.

УДК 538.91

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ
ИССЛЕДОВАНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЙ МАРГАНЦА ПРИ
ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ**

Омархан Айтолқын Шаяхметханқызы¹, Базарбек Асыл-Дастан Базарбекұлы²
asyl.bazarbek.92@mail.ru

¹ Докторант кафедры «Техническая физика» ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

² Старший преподаватель кафедры «Космическая техника и технологии», PhD ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Машинное обучение и, в частности, методы глубокого обучения превзошли человеческие возможности во многих задачах распознавания образов и обработки данных, в играх, а теперь также играют все более важную роль в научных открытиях, например в решении сложных задач в целом ряде областей, включая физику, химию и материаловедение. Лучевым применением машинного обучения в молекулярных науках является изучение поверхностей потенциальной энергии или силовых полей из исходных решений электронного уравнения Шредингера с использованием наборов данных, полученных с помощью теории функционала плотности, связанного кластера или других методов квантовой химии.

Цель вычислительной химии - предсказать свойства известных молекул и спроектировать молекулы с желаемыми свойствами. Большинство свойств молекул определяются поведением электронов, поэтому методы квантовой химии пытаются приблизить уравнение Шредингера для электронов в молекулах.

Квантовая химия является очень мощным инструментом для изучения свойств молекул, кристаллов, наноструктур, а также химических реакций, что полезно для многих областей науки и техники. Передовые способы квантовой химии помогают описывать разные химические и физические свойства молекул, электронное и пространственное строение молекул в твердых телах в основном состоянии с точностью, сопоставимой с данными экспериментальных методов [1].

Квантово-химические методы позволяют получать данные о таковых свойствах, которые иногда недоступны для экспериментального анализа (например, вещества, находящиеся в экстремальных внешних условиях – высокие температуры и/или давления). В результате развития компьютерных технологий в последние десятилетия квантово-химическое моделирование способна предсказывать возможность существования новых кристаллических структур и их строение с использованием подхода первых принципов на атомном уровне [1, с. 6].

Необходимо отметить, что экспериментальные методы не всегда доступны для определения каких-то свойств и особенностей атомной структуры материалов. В таких ситуациях может помочь методы расчетов из первых принципов, называемый также *ab initio*. Методы *Ab initio* основаны исключительно на законах квантовой механики и стремятся решить электронное уравнение Шредингера с учетом расположения ядер и количества электронов для получения необходимых данных, к примеру как плотность электронов, энергии и иные свойства системы [2].

Расчеты теории функционала плотности выполняются с использованием пакета Vienna *ab initio* simulation package (далее – VASP) для выполнения *ab-initio* квантово-механического моделирования молекулярной динамики с применением псевдопотенциалов или проекционно-дополненного волнового метода и базисного набора плоских волн [3]. Так же VASP вычисляет приближенное решение уравнения Шредингера либо в рамках теории функционала плотности, решая уравнения Кона-Шама, либо в рамках приближения Хартри-Фока. Также реализованы гибридные функционалы, которые смешивают подход Хартри-Фока с теорией функционала плотности [4]. Кроме того, в VASP доступны методы функций Грина и теория возмущений, релаксация структуры (релаксация с использованием сопряженного градиента, квази-ньютоновской или затухающей молекулярной динамики), магнетизм (коллинеарный и неколлинеарный, спин-орбитальная связь, подход с ограниченными магнитными моментами), методы функций Грина (квазичастица GW, полные энергии ACFT в RPA), теория возмущений многих тел (теория возмущений Меллера-Плессе 2-го порядка), первые производные (тензор сил и напряжений для DFT, Хартри-Фока и гибридных функционалов), линейный отклик на ионные смещения (фононы, упругие константы (включая вклады ионов), тензоры внутренних деформаций), линейный отклик на электрические поля (статические диэлектрические свойства, тензоры эффективного заряда Борна, пьезоэлектрические датчики (включая ионные вклады), оптические свойства

(частотно-зависимые диэлектрические тензоры в приближении независимых частиц, частотно-зависимые тензоры в RPA и TD-DFT [5].

Пакет VASP работает для любых систем – атомов, молекул, объемных тел, поверхностей, атомных кластеров и т.д. Он эффективно распараллеливается вплоть до 32 узлов, при этом он может обчислывать до 4000 валентных электронов (рисунок 1).



Рисунок 1 –Принцип работы VASP

Как известно, атомная структура является особо важной частью информации о кристаллических твердых телах: только из знания топологии структуры, точной структурной модели и многих физических свойств кристаллов можно вычислить с помощью современных квантово-механических методов [6]. В то же время прогнозирование вероятных структурных топологий (типов структур) на вполне теоретических основаниях остается нерешенной проблемой.

С помощью стандартных методов *ab initio* для предсказания стабильной структуры обычно рассматривают структуры, известные для аналогичных систем [7], и находят фазу с наименьшей свободной энергией. Когда неожиданные или ранее неизвестные структуры становятся устойчивыми, этот подход терпит неудачу и литература изобилует примерам таких неудач [8].

В связи с этим, предсказание устойчивых кристаллических структур при заданных давлениях и температурах, основанное только на знании химического состава является центральной проблемой физики конденсированных сред. Способность решить эту проблему открыла бы новые пути и для понимания поведения материалов в экстремальных условиях, например, в глубоких недрах планет. Эта чрезвычайно сложная задача часто называется «проблемой предсказания кристаллической структуры», и недавно разработанный эволюционный алгоритм USPEX (Universal Structure Predictor: Evolutional Xtallography) добился значительного прогресса в ее решении, позволив эффективно и надежно предсказывать структуры с числом атомов до ~40 в элементарной ячейке с использованием методов *ab initio* [9].

USPEX использует эволюционный алгоритм, разработанный А.Р. Огановым и К.В. Глассом, с основными последующими вкладами А.О. Ляхова, К.Чжу, Г.Р. Цяня, П. Бушланова, З. Аллахьяри, С. Лепешкина и А. Самцевича [10].

Основная идея эволюционного подхода состоит в том, чтобы начать с набора структур, называемых популяцией, и развить их с помощью отбора и специально разработанных вариационных операторов. USPEX имеет три различных вариационных оператора: наследственность, мутация и перестановка. Вероятности отбора для вариационных операторов выводятся из ранжирования пригодности структур, то есть их свободных энергий. В качестве оценочной функции выбран расчет свободной энергии *ab initio*. В настоящее время USPEX использует VASP для первых принципов и для атомистического моделирования. При оптимизации *ab initio* сетка k-точек изменяется в соответствии с изменениями ячеек, что повышает сопоставимость свободных энергий [11].

Код USPEX имеет минимальные входные данные: количество атомов каждого вида; давление–температурные условия и такие значения параметров алгоритма, как в размер популяции (т.е. количество структур в каждом поколении); жесткие ограничения; количество структур, используемых для производства следующего поколения; процент структур, полученных мутацией решетки, перестановкой атомов и наследственностью. Описание работы алгоритма показана на рисунке 2 в качестве блок-схемы.



Рисунок 2 –Алгоритм USPEX

С помощью вквантово-химического моделирования можно определить стабильные бориды, карбиды и нитриды марганца и их механических свойств в широком интервале давлений.

Как известно, сверхтвердый материал - это материал со значением твердости, который превышает 40 ГПа при измерении с помощью теста на твердость по Виккерсу [12]. Сверхтвердые материалы широко используются в различных отраслях промышленности, таких как режущие инструменты и твердые покрытия. Прогрессивное и, наверное, будущее

положение изготовления настоятельно просит конструктивных заключений в получении оригинальных материалов с высочайшей износостойкостью и прочностью.

В настоящее время внедряются компьютерные способы поиска структур, которые показали себя как мощнейший инструмент в прогнозировании новых материалов. Можно привести много примеров об удачных примерах обнаружения сверхтвердых материалов, которые подтверждаются серией публикаций, вышедших за последние 10-ки лет.

Недавно было успешно синтезировано несколько боридов переходных металлов (бориды переходных металлов, такие как ReB_2 , OsB_2 , TaB_2 и WB_4) [13]. Они демонстрируют высокие объемные модули и модули сдвига. Более того, бориды переходных металлов могут быть синтезированы при атмосферном давлении, что приводит к низкочастотным условиям синтеза и выгодно для их применения. Это делает бориды переходных металлов хорошими кандидатами в качестве твердых материалов. Знание фазовой стабильности, упругой и электронной структуры важно для их применения.

Повышенное давление позволяет не только получать новые полиморфные модификации известных боридов, карбидов и нитридов, но и синтез новых соединений со стехиометрией, недоступной при атмосферном давлении. Поэтому в последнее время увеличилось количество теоретических и экспериментальных работ, посвященных поиску стабильных соединений TM-X ($X = \text{B}, \text{C}, \text{N}$). Исследование боридов, карбидов и нитридов проведено практически для всех переходных металлов IV группы, за исключением марганца. В связи с этим, важно исследовать промежуточные соединения в системах Mn-X ($X = \text{B}, \text{C}, \text{N}$) и рассчитать их механические свойства. Ожидаемые результаты носят фундаментальный характер и важны для дальнейшего исследования систем переходных металлов с легкими элементами.

Заключение

Как сказано выше, изучение переходных металлов является актуальной темой в области физико-химических исследований. В будущем планируется углубленное изучение динамики решетки и оптических свойств в системе Mn-X ($X = \text{B}, \text{C}, \text{N}$), выявление взаимосвязей между составом, структурой и свойствами в системе Mn-X на основании расчетов из первых принципов динамики решетки исследуемых фаз и их оптических свойств. Это позволит выявить фазы, перспективные для практического применения.

Список литературы

1. Аминова Р.М. Основы современной квантовой химии. – Казань: КГУ, 2004. – 106 с.
2. Alfe D. The ab initio treatment of high-pressure and high-temperature mineral properties and behavior // Treatise on Geophysics. –2015. –Vol. 2. –P. 369-392.
3. Kresse G.,Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Physical review B. – 1996.– Vol. 54. – P. 11169-11186.
4. Sun G., Kurti J., Rajczy P. et al. Performance of the Vienna ab initio simulation package (VASP) in chemical applications // Journal of Molecular Structure. – 2003. – Vol. 624. – P. 37-45.
5. Сайт <https://www.vasp.at/info/about/>
6. Арефьева Л.П. Физика конденсированного состояния. – Ставрополь: СКФУ, 2017. – 130 с.
7. Lyakhov A., Oganov A., Stokes H. et al. New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX// Computer Physics Communications. – 2013. – Vol. 184. –P. 1172-1182.
8. Glass C., Oganov A., Hansen N. USPEX - Evolutionary crystal structure prediction // Computer Physics Communications. – 2006. – Vol. 175. – P. 713-720.
9. Oganov A., Lyakhov A., Valle M. How evolutionary crystal structure prediction works - and why // Accounts of Chemical Research. – 2011. – Vol. 44. – P. 227-237.

10. Lyakhov A., Oganov A. Evolutionary search for superhard materials applied to forms of carbon and TiO₂ // Physical Review B. – 2011. – Vol. 84. – P. 92103-92106.
11. Zhu Q., Oganov A., Lyakhov A. Evolutionary metadynamics: a novel method to predict crystal structures // Cryst. Eng. Comm. – 2012. – Vol. 14. – P. 3596-3601.
12. Wentorf R. H. Devries R. C. Bundy F. P. (1980). Sintered Superhard Materials. Science. 208 (4446): 873–80.
13. Bing Wang, Xiang Li, Yuan Xu Wang,* and Yu Fei Tu. Phase Stability and Physical Properties of Manganese Borides: A First-Principles Study // American Chemical Society. – 2011. Vol. 115. – P. 21429–21435.

УДК 548.735.4

ХИМИЯЛЫҚ ТҰНДЫРУ АРҚЫЛЫ КРЕМНИЙ ДИОКСИДІНДЕГІ ZnSe НАНОКРИСТАЛДАРЫНЫҢ ТҮЗІЛУ

Садуова Нурай Муратовна, Утелбаева Сымбат Бахытжановна, Ауелкан Темирлан Ахатулы
samuraikas21@mail.ru, utelbaeva.sb@gmail.com

Физика-техникалық факультетінің студенті мен магистранттары
Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекші – А.Д. Ақылбекова

A^2B^6 қосылыстары бүгінде оптоэлектроника, наноэлектроника және инфрақызыл технологиялар үшін перспективалы материалдар болып қала береді. A^2B^6 жартылай өткізгіштерін кремний технологиясына енгізудің перспективалы әдісі SiO_2/Si трек үлгілерінде сәйкес материалдардың нанокристалдарын өсіру болып табылады. A^2B^6 халькогенидтеріне негізделген нанокристалдардың бірі ZnSe болып табылады, ол сызықты емес жоғары оптикалық сезімталдыққа ие, бұл оны жақын ИҚ диапазонында ультра қысқа лазерлік импульстарды генерациялау үшін пассивті оптикалық бекітпелер үшін материал ретінде пайдалануға мүмкіндік береді.

Мырыш селениді ($ZnSe$) – 2,7 эВ тыйым салынған зоналы ашық сары бинарлы қосылысы (II-VI) бар жартылай өткізгіш [1]. Тыйым салынған зоналы, жоғары жарық сезімталдығы және төмен меншікті кедергісі секілді қасиеттері оптикалық құрылғылар үшін өте тартымды. $ZnSe$ екі кристалды түрде болады; мырышты қоспа (кубты) және вюрцит (гексагональды), ондағы кубтық фаза тұрақты болып саналады. $ZnSe$ -нің тік және кең тыйым салынған зонасының арқасында оптоэлектрондық құрылғыларда жоғары қуатты лазерлік терезе [2], инфрақызыл сенсорлар [3], жарық шығаратын диодтар [4] және көк диодты лазерлер [5] ретінде пайдалануға жарамды. Өткізу коэффициенті жоғары болғандықтан $ZnSe$ күн батареяларында терезе қабаты ретінде де қолданылады [6]. $ZnSe$ қолданудың бұл кең мүмкіндіктері соңғы онжылдықтарда мырыш селениді жұқа қабықшасын зерттеудің дамуына әкелді.

Зерттеудің өзектілігі тректі темплэйтті пайдалана отырып, жаңа нанокластерлерді алумен байланысты болып отыр.

Нанокластерлерді алудағы әдістерінің бірі темплэйтті синтез әдісі болып табылады. Темплэйтті синтез салыстырмалы түрде қарапайым және оңай процедура, соның әсерінен өте күрделі наноматериалдарды жасау кез келген зертханаға қол жетімді болды [7].

Мақалада [8] Si субстратында нанокеуекті SiO_2 алудың нәтижелері ұсынылған SiO_2/Si , Zn наноарналарға орналастырылған. Нанокеуекті SiO_2/Si , DC-60 үдеткішінде 132 Хе жылдам ауыр иондарымен сәулелендіру арқылы алынған (Астана, Қазақстан). Бүгінгі таңда $a-SiO_2/Si$ -п тректі темплэйтті арқылы энергиясы 200 МэВ болатын Хе иондарымен сәулеленген $ZnSe_2O_5$ нанокристалдары алынды [9-10].

Біздің мақсатымыз – темплэйтті синтез әдісі арқылы $ZnSe$ нанокристалдарының түзілуін және олардың негізгі қасиеттерін, құрылымын және морфологиясын зерттеу.