



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN



Л. Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ
ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ
ЕВРАЗИЙСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Л. Н. ГУМИЛЕВА
GUMILYOV EURASIAN
NATIONAL UNIVERSITY



Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2015»
атты X Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
X Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2015»

PROCEEDINGS
of the X International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2015»

УДК 001:37.0
ББК72+74.04
Ғ 96

Ғ96

«Ғылым және білім – 2015» атты студенттер мен жас ғалымдардың X Халық. ғыл. конф. = X Межд. науч. конф. студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2015» = The X International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2015». – Астана: <http://www.eni.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie-2015/>, 2015. – 7419 стр. қазақша, орысша, ағылшынша.

ISBN 978-9965-31-695-1

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 001:37.0
ББК 72+74.04

ISBN 978-9965-31-695-1

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2015

Отсюда можно найти направление контура в точке (x,y) , которое перпендикулярно направлению вектора градиента в этой точке. А вычислить градиент изображения можно, вычислив величины частных производных для каждой точки.

Список использованных источников

1. Постановлений Правительства РФ от 19.07.2007 № 456 «Об утверждении правил физической защиты ядерных материалов, ядерных установок и пунктов хранения ядерных материалов».
2. ГОСТ 52860-2007 «Технические средства физической защиты. Общие технические требования».
3. Герман Кругль Профессиональное видеонаблюдение. Практика и технологии аналогового и цифрового CCTV. Секьюрити Фокус. 2013. С 143
4. Алексеенко В. Н. Современная концепция комплексной защиты. Технические средства защиты. М.: МИФИ, 2007
5. Р. Гонсалес, Р. Вудс Цифровая обработка изображений — М: Техносфера, 2005 – 1007с
6. Программный комплекс «Интеллект» Руководство Оператора. Версия 3.1.7. Москва 2012
7. Программный комплекс «Интеллект» Руководство Администратора. Версия 3.1.7. Москва 2012.

УДК 538.971

AB-INITIO РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ОКСИДА ЦИНКА С ПРИМЕСЬЮ СУРЬМЫ

**Сокабаева Айгерим Шариповна, Ерболатова Гулистан Жандильдаевна,
Усеинов Абай Бакытжанович**

ai-kerim1992@bk.ru

Магистрант кафедры ОиТФ, ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан
Научный руководитель – А.Т. Акылбеков

Введение

Известно, что оксид цинка (ZnO) является типичным широкощелевым полупроводником (3.44 эВ) с большой энергией связи экситона 60 мэВ при нормальных условиях [1]. В последнее время, кристалл ZnO привлек много внимания благодаря возможности его потенциального использования в оптоэлектронике, в таких устройствах как коротковолновые лазерные диоды, электроды солнечных батарей, химические и биологические детекторы [2,3]. Также известно, что ZnO обладает проводимостью n-типа, которая возникает в результате непреднамеренного допирования водородосодержащими примесями вместе с выращиванием кристалла [4]. Напротив, создание высококачественных кристаллов р-типа ZnO является серьезной проблемой, связанной главным образом с плохой растворимостью акцепторной примеси и сильной компенсацией электронных свойств от возникновения собственных дефектов, таких как междоузельный цинк (Zn_i) и кислородные вакансии (V_O). Кроме того, увеличение концентрации акцепторов параллельно ведет к увеличению сорбции водорода, в результате чего происходит так называемая пассивация, т.е. «гашение» свойств одной примеси другой [5]. Однако имеются экспериментальные и теоретические работы, в которых показано, что есть возможность создания ZnO р-типа (р- ZnO), если заменить в узле кристаллической решетки атом кислорода O элементами V группы таблицы Менделеева, такими как азот (N), фосфор (P), мышьяк (As), и сурьма (Sb).

Как нам известно, исследования по получению низкорезистивного ZnO p-типа имеют большие трудности.

На сегодняшний день, изучение p-ZnO ведется с точки зрения понимания каким образом создать хорошие образцы p-ZnO. Некоторые научные группы сообщили об успешном синтезировании ZnO, допированного N [6]. В [7] экспериментально наблюдали малое сопротивление ($2\Omega\cdot\text{см}$) и высокую концентрацию дырок ($4\cdot 10^{19}\text{ см}^{-3}$) в комнатных условиях. Теоретически, исследование влияния примеси на электронные свойства было проведено Ямомото с сотрудниками [8], которые использовали *ab-initio* методы теории функционала плотности. С другой стороны, имеются ряд работ по исследованию таких примесей как P, As, и Sb [9]. Как оказалось, допирование Sb является довольно трудной задачей за счет большой разницы ионного радиуса Sb и O, а также расположения глубокого акцепторного уровня дефекта в запрещенной зоне. В результате, было проведено сравнительно немного экспериментальных и теоретических работ и поэтому механизм связывания Sb в объеме ZnO и характер его влияния на электронное строение ZnO остается пока неясным.

В настоящей работе проведены *ab initio* расчеты ZnO допированного Sb. Электронная энергетика анализируется в терминах полной плотности состояния и в проекции на атомные орбитали. Дополнительно дается анализ распределения заряда между внедренным атомом Sb и кристаллической решеткой ZnO. Основными рассматриваемыми вопросами в работе стали: 1) Исследование энергетики образования Sb в ZnO; 2) Влияние Sb на электронные свойства ZnO; 3) природа химической связи между примесным атомом Sb и кристаллом ZnO.

Модель и метод расчета.

Для решения задачи перераспределения заряда, энергетике поверхности были выполнены *ab initio* расчеты в приближении линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО) с использованием нелокального обменно-корреляционного функционала PBE0. Все расчеты выполнены в программе Crystal2009 [10]. Для описания атомных орбиталей неприводимых атомов были выбраны следующие базисные наборы функций типа Гаусса: 8-411d1G [11] для кислорода, 86-411d31G [11] для цинка и Sb_DURAND-21d1G_causa_1991 [12] для атома сурьмы. В расчетах самосогласования (SCF) для кулоновских и обменных интегралов были выбраны следующие пределы точности 10^{-7} , 10^{-7} , 10^{-7} , 10^{-7} , 10^{-14} . Эффективные заряды атомов на чистой поверхности и с примесью были рассчитаны с помощью анализа заселенности по Малликену. Интегрирование зоны Бриллюэна обратного пространства выполнено с сеткой Пэка-Монхорста – $3\times 3\times 2$.

Для подтверждения надежности используемого метода расчета были проведены расчеты структурных и других параметров объемного ZnO, которые показаны в таблице 1 вместе с аналогичными расчетными и экспериментальными данными. Полученные параметры решетки немного переоценены в сравнении с экспериментальными данными ($\approx 1\%$). Для значения ширины запрещенной зоны ошибка составила $\approx 3.6\%$.

Таблица 1. Параметры решетки – a , c ; $q(\text{Zn})$, $q(\text{O})$ – заряды на ионах Zn и O; E_g – ширина запрещенной зоны

Параметр	PBE0	B3LYP	DFT	Эксперимент
a , Å	3.274	3.278	3.249	3.242
c , Å	5.267	5.287	5.203	5.18
$q(\text{Zn})$, e	1.00	-	-	-
$q(\text{O})$, e	-1.00	-	-	-
E_g (eV)	3.57	3.38	3.18	3.44

Для дефектной системы была посчитана энергия образования, которая определялась как:

$$E_f = E^{Sb/ZnO} - E^{ZnO} - E^{Sb}, \quad (1)$$

где $E^{Sb/ZnO}$ - энергия суперячейки ZnO с водородом; E^{ZnO} - энергия чистой суперячейки ZnO; E^{Sb} - энергия изолированного атома сурьмы в основном состоянии.

В принятой модели были выполнены расчеты оптимизации кристаллической структуры (рис. 1).

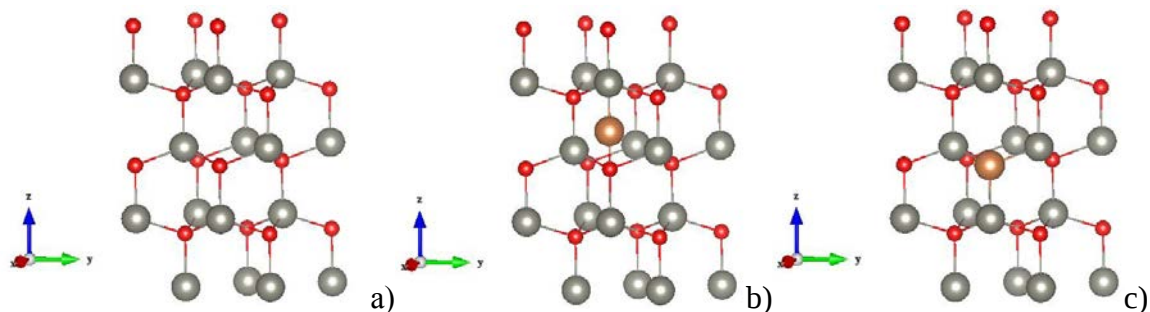


Рисунок 1. Схема а) идеальной объемной (2x2x2) суперячейки ZnO; б) с атомом Sb в междоузлии; в) с атомом Sb в вакансии кислорода.

Результаты и их анализ

Энергии образования E_f сурьмы в междоузельном положении и в вакансии кислорода 3,625, 7,843 эВ, соответственно. Очевидно, что энергия образования Sb в междоузлии и в вакансии кислорода меньше, чем в вакансии цинка (3.014 эВ). Таким образом, в случае допирования примесью Sb оксида цинка, ионы Sb предпочтительно будут занимать междоузельное положение и вакансии кислорода, что находится в согласии с экспериментальными результатами [13], энергия образования Sb в вакансии цинка значительно выше и поэтому такая структура не может быть сформирована. Мы не будем рассматривать ее в дальнейшем.

Для того чтобы показать влияние примеси Sb на электронные и оптические свойства ZnO были рассчитаны полная плотность состояния для идеального кристалла и с примесью Sb в двух положениях (рис. 2). На рис. 2 (б) видна узкая примесная полоса в запрещенной зоне. Дырки в данной полосе локализованы за счет отталкивания и образуют акцепторный уровень в середине запрещенной зоны. В случае Sb расположенного в междоузельном положении, мы видим, что появляются дополнительные максимумы вблизи уровня Ферми. Один с шириной около 2.0 эВ расположен на нижней части валентной зоны, другой с шириной около 1.2 эВ лежит выше -15 эВ. Акцепторный уровень, связанный с примесью Sb в междоузельном положении, появляется вблизи уровня Ферми, который приводит к эффекту сильной самокомпенсации. Это основная трудность в изготовлении высококачественного кристалла ZnO p-типа для случая расположения примеси Sb в междоузлии.

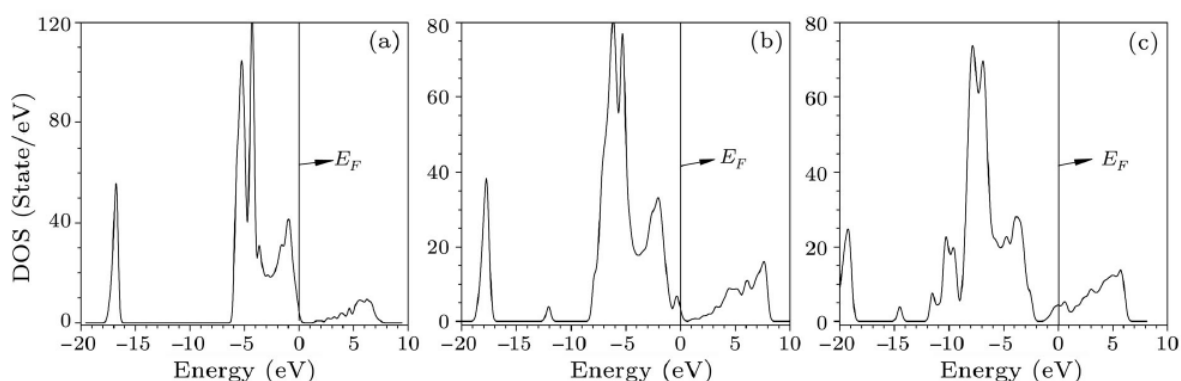


Рисунок 2. Полная плотность состояния а) идеальный ZnO; б) ZnO с примесью Sb в вакансии O; в) Sb в междоузлии ZnO

На рис. 3 показаны карты разностной электронной плотности для нелегированного ZnO, с примесью Sb в вакансии кислорода и с примесью Sb междоузельном положении,. Карта разностной плотности построена вдоль плоскости x-z, содержащая атомы Zn, O и Sb. Для нелегированного ZnO (рис. 4 а) видно, что ZnO является сильно ионным кристаллом, а химическая связь представлена сильной гибридизацией 2p-состояния кислорода и 3d-состояния цинка. Zn-Zn связи имеют более однородное распределение заряда, что указывает на металлический характер связи. В результате можно сказать, что ZnO является смешанным ионно-ковалентным кристаллом, в котором преобладает ионная составляющая.

Рисунок 3 (b) видно, что валентные электроны, введенные примесью Sb не локализуется на трех ближайших Zn. Электронное облако атомов Sb перемещается в направлении их ближайших соседних атомов Zn, указывая, что оно не является ковалентно связанным. С другой стороны, в случае Sb на междоузлии (рис. 3 в), электронный заряд изменяет свою форму значительно, также появляется небольшое взаимодействие между атомами Sb и O, что находится в хорошем согласии результатами анализа плотности состояния. Это означает, что основной вклад в p-типа проводимость ZnO производит примесь Sb.

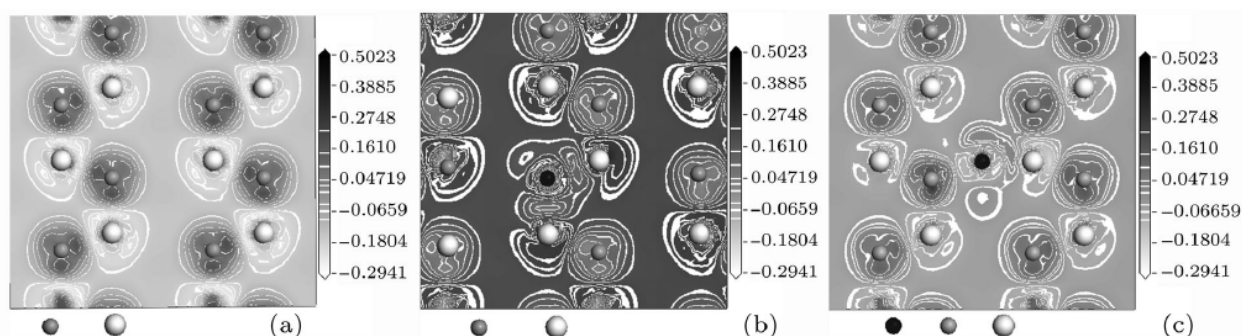


Рисунок 3. Карта разностной электронной плотности а) идеальный ZnO; б) ZnO с примесью Sb в вакансии O; в) Sb в междоузлии ZnO. Атомы кислорода (серые), атомы цинка (белые), атомы Sb (черные).

Выводы

В данной работе были проведены ab-initio расчеты с использованием гибридного обменно-корреляционного функционала PBE0. Показаны результаты расчета энергии образования примеси Sb, плотности состояния и построены карты разностной электронной плотности. Из-за введения примеси Sb, уровень Ферми смещается в более низкоэнергетическое состояние, а система характеризуется как вырожденный полупроводник p-типа. В случае расположения атома Sb в вакансии кислорода, узкая полоса

примеси Sb появляется вблизи уровня Ферми и дырки локализованы за счет отталкивания в узкой дефектной полосе. Для Sb в междоузлии, дефектный уровень Sb расширяется, и появляются донорные уровни вблизи дна зоны проводимости. Это приводит к эффекту сильной самокомпенсации. Таким образом, необходимо проведение дальнейших экспериментальных работ для анализа с теоретическими расчетами.

Список использованных источников

1. D. C. Reynolds, D. C. Look and B. Jogai // Phys. Rev. B **60** (1999) 2340-2344.
2. R Konenkamp, R C Word and C Schlegel 2004 Appl. Phys. Lett. 85 6004
3. M Pan, R Rondon, J Cloud, V Rengarajan, W Nemeth, A Valencia, J Gomez, N Spencer and J Nause // 2006 Proc. SPIE 6122 124
4. Usseinov A.B., Kotomin E.A., Zhukovskii Yu., Purans J., Akilbekov A., Hydrogen adsorption on the ZnO (1-100) surface: ab initio hybrid density functional linear combination of atomic orbitals calculations // Physica Scripta. – 2014. – Vol. 89. – P. 045801-045809
5. A Janotti and C G Walle // 2007 Phys. Rev. B 76 165202
6. Jiao S J, Lu Y M, Zhang Z Z, Li B H, Yao B, Zhang J Y, Zhao D X, Shen D Z and Fan X W // 2007 J. Appl. Phys 102 113509
7. Joseph M, Tabata H and Kawai T // 1999 Jpn. J. Appl. Phys 38 L1205
8. Yamamoto T // 2002 Thin Solid Films 420 100
9. Lopatiuk-Tirpak O, Schoenfeld W V, Chernyak L, Xiu F X, Liu J L, Jang S, Ren F, Pearton S J, Osinsky A and Chow P // 2006 Appl. Phys. Lett. 88 202110
10. R Dovesi, V R Saunders, R Roetti, R Orlando, C M Zicovich-Wilson, F Pascale, B Civalleri, K Doll, N M Harrison, I J Bush, P. D'Arco and M. Llunell // 2009 *CRYSTAL09 User's Manual* University of Torino, Torino. URL: <http://www.crystal.unito.it>
11. J E Jaffe, A C Hess // Phys. Rev. B 1993 **48** 11 7903 – 7909
12. M. Causa, R. Dovesi and C. Roetti, «Pseudopotential Hartree-Fock study of seventeen III-V and IV-IV semiconductors» // Phys. Rev. B 43, 11937-11943 (1991).
13. C L Perkins, S H Lee, X Li, S E Asher and T J Coutts // 2005 J. Appl. Phys. 97 034907

УДК 502.51

СОРБЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ ОЧИСТКЕ СТОЧНЫХ ВОД ОТ НЕФТЕПРОДУКТОВ

Телемисова Айгерим Кадыровна

aika_telemisova@mail.ru

Магистрант междунраодной кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий

ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

Научный руководитель – Сатаева Г.Е.

Наиболее характерные и широко распространенные загрязнители сточных вод промышленных предприятий - нефтепродукта. нефтепродукты принадлежат к числу десяти наиболее опасных загрязнителей окружающей среды вследствие их высокой токсичности. Под понятием «нефтепродукты» подразумевается неидентифицированная группа углеводородов нефти, мазута, керосина, масел и их смесей. Эти соединения могут находиться в растворах в эмульгированном или растворенном виде или образовывать на поверхности водной фазы плавающий слой. Для локальной очистки сточных вод от токсичных биологически жестких органических веществ, т.е. трудно поддающихся