

ISSN (Print) 2616-6836  
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

# ХАБАРШЫСЫ

---

**BULLETIN**

of L.N. Gumilyov Eurasian  
National University

**ВЕСТНИК**

Евразийского национального  
университета имени Л.Н. Гумилева

**ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ** сериясы

**PHYSICS. ASTRONOMY** Series

Серия **ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

№1(126)/2019

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Астана, 2019  
Astana, 2019

*Бас редакторы*  
ф.-м.ғ. докторы  
**А.Қ. Арынгазин** (Қазақстан)

*Бас редактордың орынбасары*

**А.Т. Ақылбеков**, ф.-м.ғ.д., профессор  
(Қазақстан)

*Редакция алқасы*

<b>Алдонгаров А.А.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Балапанов М.Х.</b>	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
<b>Бахтизин Р.З.</b>	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
<b>Гиниятова Ш.Г.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Даулетбекова А.Қ.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Ержанов Қ.К.</b>	ф.-м.ғ.к., PhD (Қазақстан)
<b>Жұмаділов Қ.Ш.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Здоровец М.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Қадыржанов Қ.К.</b>	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Кутербеков Қ.А.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Лушик А.Ч.</b>	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Эстония)
<b>Морзабаев А.К.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Мырзақұлов Р.Қ.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Нұрахметов Т.Н.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Сауытбеков С.С.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Тлеукенов С.К.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Усеинов А.Б.</b>	PhD (Қазақстан)

*Редакцияның мекенжайы:* 010008, Қазақстан, Астана қ., Сатпаев к-сі, 2,349  
б., Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті.  
Тел.: +7(7172) 709-500 (ішкі 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Жауапты хатшы, компьютерде беттеген:* А. Нұрболат

**Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысы.**  
**ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы**

Меншіктенуші: ҚР БжҒМ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" ШЖҚ РМК  
Мерзімділігі: жылына 4 рет.

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігімен  
тіркелген. 27.03.2018ж. №16999-ж тіркеу куәлігі.

Тиражы: 25 дана

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Астана қ., Қажымұқан к-сі, 12/1, 349 б., Л.Н.  
Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. Тел.: +7(7172)709-500 (ішкі 31-428)

*Editor-in-Chief*  
Doctor of Phys.-Math. Sciences  
**A.K. Aryngazin** (Kazakhstan)

*Deputy Editor-in-Chief*

**A.T. Akilbekov**, Doctor of Phys.-Math. Sciences,  
Prof. (Kazakhstan)

*Editorial board*

<b>Aldongarov A.A.</b>	PhD (Kazakhstan)
<b>Balapanov M.Kh.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Russia)
<b>Bakhtizin R.Z.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Russia)
<b>Dauletbekova A.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences, PhD (Kazakhstan)
<b>Giniyatova Sh.G.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
<b>Kadyrzhanov K.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Kainarbay A.Zh.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
<b>Kuterbekov K.A.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Lushchik A.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Estonia)
<b>Morzabayev A.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
<b>Myrzakulov R.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Nurakhmetov T.N.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Sautbekov S.S.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Tleukenov S.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
<b>Useinov A.B.</b>	PhD (Kazakhstan)
<b>Yerzhanov K.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences, PhD(Kazakhstan)
<b>Zdorovets M.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
<b>Zhumadilov K.Sh.</b>	PhD (Kazakhstan)

*Editorial address:* L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2, Satpayev str., of. 349, Astana,  
Kazakhstan, 010008  
Tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Responsible secretary, computer layout:* A.Nurbolat

**Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University.**  
**PHYSICS. ASTRONOMY Series**

Owner: Republican State Enterprise in the capacity of economic conduct "L.N. Gumilyov Eurasian National University" Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan.

Registration certificate №16999-ж from 27.03.2018.

Circulation: 25 copies

Address of printing house: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 12/1 Kazhimukan str., Astana, Kazakhstan 010008;

tel.:+7(7172) 709-500 (ext. 31-428)

*Главный редактор*  
доктор ф.-м.н.  
**А.К. Арынгазин** (Казахстан)

*Зам. главного редактора*

**А.Т. Акилбеков**, доктор ф.-м.н.  
профессор (Казахстан)

*Редакционная коллегия*

<b>Алдонгаров А.А.</b>	PhD (Казахстан)
<b>Балапанов М.Х.</b>	ф.-м.н., проф. (Россия)
<b>Бахтизин Р.З.</b>	ф.-м.н., проф. (Россия)
<b>Гиниятова Ш.Г.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Даулетбекова А.К.</b>	кандидат ф.-м.н., PhD (Казахстан)
<b>Ержанов К.К.</b>	кандидат ф.-м.н., PhD (Казахстан)
<b>Жумадилов К.Ш.</b>	доктор PhD (Казахстан)
<b>Здоровец М.</b>	к.ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Кадыржанов К.К.</b>	ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Кутербеков К.А.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Лущик А.Ч.</b>	ф.-м.н., проф. (Эстония)
<b>Морзабаев А.К.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Мырзакулов Р.К.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Нурахметов Т.Н.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Сауытбеков С.С.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Тлеукенов С.К.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Усеинов А.Б.</b>	PhD (Казахстан)

*Адрес редакции:* 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Сатпаева, 2, каб. 349, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.  
Тел.: (7172) 709-500 (вн. 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Ответственный секретарь, компьютерная верстка:* А. Нурболат

**Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева.**  
**Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

Собственник РГП на ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева" МОН РК  
Периодичность: 4 раза в год

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16999-ж от 27.03.2018г.

Тираж: 25 экземпляров

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Кажимукана, 12/1, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева. тел.: +7(7172)709-500 (вн. 31-428)

Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ  
ХАБАРШЫСЫ. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

№1(126)/2019

МАЗМҰНЫ

<i>Балахаева Р., Акылбеков А., Даулетбекова А., Козловский А., Баймуханов З., Гиниятова Ш., Усеинов А., Садуова Б., Карим К.</i> SiO <sub>2</sub> /Si тректі темплэйтте екі типті электролит негізінде CdTe нанокластерлерін қалыптастыру	8
<i>Дукенов А.Б., Усеинов А.Б., Акылбеков А.Т., Даулетбекова А.К., Здоровец М.В., Ыбыраев Н.С., Оралбеков Н.Б.</i> Таза және кобальтпен легирленген MgF <sub>2</sub> -нің электрондық қасиеттерін Ab-initio есептеулері	15
<i>Доломатов М.Ю., Шуткова С.А., Шарипов Т.И., Бахтизин Р.З., Ишниязов З.З., Нураxметов Т.Н., Салиходжа Ж.М.</i> Мұнай асфальтені нанобөлшектерінің молекулалық және супрамолекулалық құрылымының ерекшеліктері	23
<i>Кайнарбай А. Ж., Нураxметов Т.Н., Юсупбекова Б., Кайнарбаева А., Турмаханбетова А., Базарбаева.Г.Е., Абдраман Б.</i> Биологиядан бастан күн энергетикасына шейін кең қолданыс табатын CdSe/CdS гетероқұрылымдардың алу әдістемесін жасау	32
<i>Мадиярова А.Е., Разина О.В., Цыба П.Ю.</i> f-эссенциялы Эйнштейн-Картан гравитация моделі	38
<i>Ногай А.С., Кутербеков К.А., Бекмырза К.Ж., Нураxметов Т.Н., Кабышев А.М., Кумисбек А., Жеткенбай А., Айдарбеков Н., Сулейменов А.</i> Жанармай жасушалары үшін кобальт халькогенидінің негізінде катализаторларды синтездеу және зерттеу	48
<i>Нураxметов Т.Н., Бахтизин Р.З., Салиходжа Ж.М., Жунусбеков А.М., Кайнарбай А.Ж., Дауренбеков Д.Х., Садыкова Б.М., Жанылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н.</i> Сілтілі металл сульфаттарының зоналық құрылымы	56
<i>Санг Мей Ли, Босунг Шин, А.Сейтжан, А.Мырзагалиева, Б.Медеубаева</i> Брэгг торларына негізделген оптофлюидтық сенсорлар	67
<i>Саттинова З.К.</i> Құю қондырғысының сақиналы каналында бериллий тотығы термопласт шликерінің изотермиялық емес қату процесін модельдеу	81
<i>Тлеукенов С.К., Балабеков К.Н., Жалғасбекова З.К.</i> Ромбылық кристалдардағы топтық жылдамдық пен электромагниттік энергия ағыны	90

BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS.  
ASTRONOMY SERIES

№1(126)/2019

CONTENTS

---

<i>Balakhayeva R., Akilbekov A., Dauletbekova A., Kozlovskii A., Baimukhanov Z., Giniyatova Sh., Usseinov A., Saduova B., Karim K.</i> Creation of CdTe nanoclusters in SiO <sub>2</sub> /Si track templates using two types of electrolyte	8
<i>Dukenov A.B., Usseinov A.B., Akilbekov A.T., Dauletbekova A.K., Zdorovets M.V., Ybyraev N.S., Oralbekov N.B.</i> Ab-initio calculations of the electronic properties of pure and cobalt doped MgF <sub>2</sub>	15
<i>Dolomatov M.Yu., Shutkova S.A., Sharipov T.I., Bakhtizin R.Z., Ishniyazov Z.Z., Nurakhmetov T.N., Salikhodzha Z.M.</i> Band structure of alkali metal sulfates	23
<i>Kainarbai A.Zh., Nurakhmetov T.H., Usupbekova B., Kainarbaeva A., Turmakhanbetova A., Bazarbayeva.G., Abdraman B.</i> Wide application areas from biology until solar cell heterojunction CdSe/CdS synthesis method	32
<i>Madiyarova A.E., Razina O.V., Tsyba P.Yu.</i> Einstein-Cartan gravity model with f-essence	38
<i>Nogai A.S., Kuterbekov K.A., Bekmyrza K.Zh., Nurakhmetov T.N., Kabyshev A.M., Kumisbek A., Zhetkenbay A., Aidarbekov N., Suleimenov A.</i> Synthesis and Investigation of Catalysts Based on Cobalt Chalcogenide for Fuel Cells	48
<i>Nurakhmetov T.N., Bakhtizin R.Z., Salikhodja Z.M., Zhunusbekov A.M., Kainarbay A.Z., Daurenbekov D.H., Sadykova B.M., Zhangylysov K.B., Yussupbekova B.N.</i> Band structure of alkali metal sulfates	56
<i>Sang Mae Lee, Bosung Shin, A.Seitkan, A.Myrzagaliyeva, B.Medeubayeva</i> Optofluidic sensors based on bragg gratings	67
<i>Sattinova Z.K.</i> Simulation of the process of non-isothermal crystallization process of thermoplastic slurry BeO in the annular cavity of the casting plant	81
<i>Tleukenov S.K., Balabekov K.N., Zhalgasbekova Z.K.</i> Group velocity and flow of electromagnetic energy in rhombic crystals	90

ВЕСТНИК ЕВРАЗИЙСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА  
ИМЕНИ Л.Н.ГУМИЛЕВА. Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

№1(126)/2019

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Балахаева Р., Акылбеков А., Даулетбекова А., Козловский А., Баймуханов З., Гиниятова Ш., Усеинов А., Садуова Б., Карим К.</i> Создание нанокластеров CdTe в трековых темплэйттах SiO <sub>2</sub> /Si с использованием двух типов электролита	8
<i>Дукенов А.Б., Усеинов А.Б., Акылбеков А.Т., Даулетбекова А.К., Здоровец М.В., Ыбыраев Н.С., Оралбеков Н.Б.</i> Ab-initio расчеты электронных свойств чистого и легированного кобальтом MgF <sub>2</sub>	15
<i>Доломатов М.Ю., Шуткова С.А., Шарипов Т.И., Бахтизин Р.З., Ишниязов З.З., Нурахметов Т.Н., Салиходжа Ж.М.</i> Особенности молекулярной и надмолекулярной структуры наночастиц нефтяных асфальтенов	23
<i>Кайнарбай А. Ж., Нурахметов Т.Н., Юсупбекова Б., Кайнарбаева А., Турмаханбетова А., Базарбаева.Г.Е., Абдраман Б.</i> Разработка методик получения гетероструктур CdSe/CdS широкого круга применения: от биологии до солнечной энергетики	32
<i>Мадиярова А.Е., Разина О.В., Цыба П.Ю.</i> Модель гравитации Эйнштейна-Картана с f-эссенцией	38
<i>Ногай А.С., Кутербекоев К.А., Бекмырза К.Ж., Нурахметов Т.Н., Кабышев А.М., Кумисбек А., Жеткенбай А., Айдарбеков Н., Сулейменов А.</i> Синтез и исследование катализаторов на основе халькогенида кобальта для топливных элементов	48
<i>Нурахметов Т.Н., Бахтизин Р.З., Салиходжа Ж.М., Жунусбеков А.М., Кайнарбай А.Ж., Дауренбеков Д.Х., Садыкова Б.М., Жанылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н.</i> Зонная структура сульфатов щелочных металлов	57
<i>Санг Мей Ли, Босунг Шин, А.Сейтжан, А.Мырзагалиева, Б.Медеубаева</i> Оптофлюидные датчики на основе Брэгговских решеток	67
<i>Саттинова З.К.</i> Моделирование процесса неизотермического отверждения термопластичного шликера BeO в кольцевом канале установки литья	81
<i>Тлеуженов С.К., Балабеков К.Н., Жалгасбекова З.К.</i> Групповая скорость и поток электромагнитной энергии в ромбических кристаллах	90

А.Б. Дуkenov<sup>1</sup>, А.Б. Усеинов<sup>1,2</sup>, А.Т. Акылбеков<sup>1</sup>, А.К. Даулетбекова<sup>1</sup>,  
М.В. Здоровец<sup>2</sup>, Н.С. Ыбыраев<sup>1</sup>, Н.Б. Оралбеков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

<sup>2</sup> Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан

(E-mail: adletd95@gmail.com, useinov\_85@mail.ru, akilbek\_ata@mail.ru,  
dauletbekova\_ak@mail.ru, zdorovets\_mv@enu.kz, ybyraevn@mail.ru, nurastana96@mail.ru)

## Ab-initio расчеты электронных свойств чистого и легированного кобальтом MgF<sub>2</sub>

**Аннотация:** В развитии твердотельных лазерных систем высокую роль играет глубокое понимание спектральных характеристик материалов. В нашей работе проведено квантово-химическое моделирование электронных и оптических свойств кристалла MgF<sub>2</sub>, легированного кобальтом (Co) для лазерных приложений в программе Crystal. В результате вычислений показано, что атом кобальта в MgF<sub>2</sub> находится в высокоспиновом квантовом состоянии (со спином 3), и создает крепкую ионно-ковалентную связь с решеткой кристалла. Рассчитанная спроецированная плотность 3d-состояний атома Co дает хорошее согласие с наблюдаемым экспериментальным спектром поглощения по расположению уровней электронных переходов. Таким образом, данный вычислительный метод позволяет качественно (а в частных случаях, и количественно) описать спектральные характеристики легированных диэлектрических материалов. Также этот метод расчета может быть использован в последующих схожих исследованиях.

**Ключевые слова:** адсорбция, спектры, энергия связи, неэмпирические расчеты.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-68-36-2019-126-1-15-22>

**1. Введение.** Исследование оптических и электронных свойств кристаллов MgF<sub>2</sub> стало одним из перспективных направлений для лазерных технологий, в частности, для твердотельных лазеров. Как выяснилось, высокую роль в получении настраиваемого лазера на основе MgF<sub>2</sub>, работающего в инфракрасном спектре, играют ионы переходных металлов, таких как Co<sup>2+</sup> и Ni<sup>2+</sup>, внедряемые в кристалл [1]. Так, в работах [2,3] был получен настраиваемый Co:MgF<sub>2</sub> лазер с концентрацией примеси 0.9% и работающий с длиной волны от 1.63 до 2.08 мкм в непрерывном режиме. Максимальная мощность в 100 мВ была достигнута при длине волны 1.84 мкм, однако КПД лазера составил всего 5% (КПД=выходная мощность/входная мощность). Позже, более высокий КПД был получен в лазере с импульсной накачкой и так называемым Q-переключением [4]. Между тем, недавно с помощью мультимодальной накачки и использования двух зеркальных резонаторов был достигнут КПД в 28% [5]. По нашим последним данным, сегодня КПД Co:MgF<sub>2</sub> лазера уже превышает 31% [6].

Знание общих спектральных свойств материалов является необходимым фактором для детального понимания свойств лазера и точного прогнозирования потенциальных систем. С этой целью, к примеру, проводились экспериментальные исследования поглощения и эмиссии [2,7,8], а также поглощения в возбужденном состоянии Co<sup>2+</sup>:KZnF<sub>3</sub> (ESA) [7]. В частности, спектр ESA представляет собой очень интересную задачу в связи с тем, что между данными ESA и данными по эмиссии существует взаимовлияние, имеющие негативное последствие для характеристик лазера в связанных системах [9]. Исследования такого типа являются очень полезными для анализа температурозависимых распадов, основанных на существовании большого количества очень точной экспериментальной информации (энергии колебательной моды, параметры Хуана-Риса и др.).

В этом контексте теоретические исследования приобретают особое значение. Используя *ab-initio* методы высокого уровня, которые включают все соответствующие взаимодействия, можно получить информацию, дополняющую и уточняющую экспериментальные результаты, чтобы можно было лучше проанализировать информацию по спектрам и надежно решить экспериментальные неопределенности. Примеры такого рода теоретических расчетов,

применяемых к системам, образованными  $V^{2+}$  и  $Cr^{3+}$  во фтор-перовскитах, можно найти в работах [10- 13], где были сделаны описания спектральных особенностей и предложены схемы для облегчения понимания некоторых спорных точек. Эти исследования и некоторые другие аспекты продемонстрировали способность квантово-химической программы *Crystal* предоставлять ценную информацию об этих материалах [14].

В данной работе мы представляем *ab-initio* расчеты электронных и оптических свойств чистого и легированного кобальтом кристалла  $MgF_2$ , выполненных в программе *Crystal*.

**2. Метод и модель расчета.** Для решения поставленной задачи были выполнены *abinitio* расчеты в приближении линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО) с использованием нелокального обменно-корреляционного функционала PBEh45%. Все расчеты выполнены в программе *Crystal*. Для описания атомных орбиталей неприводимых атомов были выбраны базисные наборы гауссовских функций Катти и МакКарти-Харрисона для атомов F и атома Mg, соответственно [15], а для атома кобальта базис из работы [16]. В расчетах самосогласования (SCF) для кулоновских и обменных интегралов были выбраны высокие пределы точности  $10^{-8}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-16}$ . Эффективные заряды атомов на чистой поверхности и с примесью были рассчитаны с помощью анализа заселенности по Малликену [17]. Интегрирование зоны Бриллюэна обратного пространства выполнено с сеткой Пэка-Монхорста –  $2 \times 2$  [18].

Кристалл  $MgF_2$  имеет структуру рутила с тетрагональной решеткой (рис.1), где каждый атом Mg окружен 6 атомами F. Для моделирования примеси Co мы использовали периодическую структуру «суперячейки», состоящей из 96 атомов и которая получается путем трансляции (копирования) примитивной ячейки состоящей из 6 атомов. Атом  $Co^{2+}$  заменяет атом  $Mg^{2+}$  в  $MgF_2$ , поэтому нет необходимости в зарядовой компенсации.

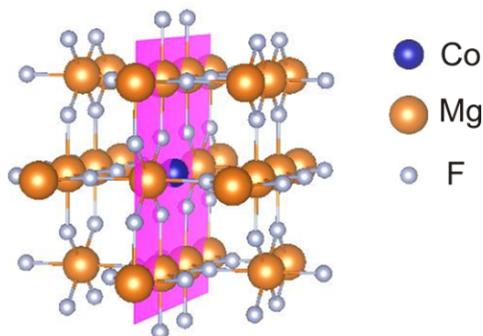


Рисунок 1 – Атомная структура  $MgF_2$  с примесью кобальта.

**3. Результаты и их анализ.** *Идеальный  $MgF_2$ .* В наших предыдущих работах [19,20] был использован гибридный обменно-корреляционный функционал V3PW с «подмешкой» точного обмена 20%. В результате расчетов были оценены параметры решетки и запрещенная зона кристалла  $MgF_2$ . Как видно из таблицы 1, данный функционал существенно недооценивает значение запрещенной зоны (9.5 эВ) в то время как экспериментальное значение составляет 12.4 эВ [21]. Точное воспроизведение запрещенной зоны кристалла является важным условием при исследовании различного рода дефектов, так как энергия образования дефектов напрямую зависит от точности оценки зонной структуры. Исследуя преимущество выбора гибридного функционала для точного описания основных свойств  $MgF_2$ , мы пришли к выбору функционала PBE с измененной подмешкой точного обмена в 45% (PBEh45%), оригинальный функционал имеет подмешку в 25% [22]. Модифицированный функционал дает более точное значение запрещенной зоны и параметров кристаллической решетки  $MgF_2$  по сравнению с экспериментом и аналогичными расчетами с другими функционалами (табл.1).

Дальнейшая проверка метода была связана с расчетом свойств упругости  $MgF_2$  (см. табл. 2). Увеличение точного обмена в функционале привело к улучшению описания модуля упругости и коэффициентов упругости по сравнению с экспериментальными данными, в то же время расчет фононов показал небольшое расхождение в сравнении с PBEh25%. Однако

Таблица 1 – Основные свойства MgF<sub>2</sub>.

	PBEh45	PBEh25	HSE06	B3PW [21]	Exprt[23]
$a, \text{Å}$	4.604	4.648	4.627	4.654	4.615
$c, \text{Å}$	3.091	3.120	3.106	3.139	3.043
$u(\text{Fluorine})$	0.43	0.43	0.43		0.3030
$E_g, \text{eV}$	<b>12.57</b>	9.84	11.17	9.5	12.4
$\varepsilon_{xx}^{\infty}$	1.54	1.60	Не считает		1.9
$\varepsilon_{zz}^{\infty}$	1.58	1.64	Не считает		1.9
$\varepsilon_{xx}^0$	4.52	4.62	Не считает		5.4
$\varepsilon_{zz}^0$	3.75	3.91	Не считает		4.6
$q_{eff} (\text{Mg/F}), e$	+1.765/-0.883	+1.748/-0.874	+1.761/-0.88		-

такое изменение ожидаемо, так как изменение точного обмена в функционале PBE с 25% до 45% приводит и к изменениям колебательной составляющей атомов кристаллической решетки и как видно из числовых данных не является критичным.

Таблица 2 – Свойства упругости MgF<sub>2</sub>

	PBEh45	PBEh25	HSE06	Exprt[23]
$B, \text{GPa}$	104.2	97.22	-	106.2
$c_{11}, \text{GPa}$	147.5	137.3	136.7	145.6
$c_{12}, \text{GPa}$	94.8	87.9	90.2	95.2
$c_{13}, \text{GPa}$	58.5	54.8	54.5	67.0
$c_{33}, \text{GPa}$	220.1	206.5	201.8	214.2
$c_{44}, \text{GPa}$	64.0	60.1	58.5	58.3
$c_{66}, \text{GPa}$	103.5	96.08	97.0	103.8

### MgF<sub>2</sub> легированный кобальтом

Результаты расчетов полной энергии системы MgF<sub>2</sub>:Co<sup>2+</sup> и других параметров представлены в таблице 3. Видно, что состояние со спином 3 является более выгодным. Разница полных энергий между разными спиновыми состояниями составила 1.3 эВ.

Таблица 3 – Рассчитанные (PBEh45) полная энергия системы MgF<sub>2</sub>:Co ( $E_{tot}$ ), эффективный атомный заряд атома кобальта ( $q_{eff}(\text{Co})$ ), магнитный момент атома кобальта ( $\mu$ ), расстояние между атомом кобальта и ближайшим соседним атомом фтора ( $r$ ).  $\Delta E$  разность полных энергий между состояниями с низким и высоким спином.

Spin state	1 (low)	3 (high)
$E_{tot}, \text{a.u.}$	- 12738.41312469	- 12738.46353831
$q_{eff}(\text{Co}), e$	+1.47	+1.52
$\mu, \mu_B$	0.952	2.905
$r, \text{Å}$	1.977	2.012
$\Delta E, \text{eV}$	1.37	

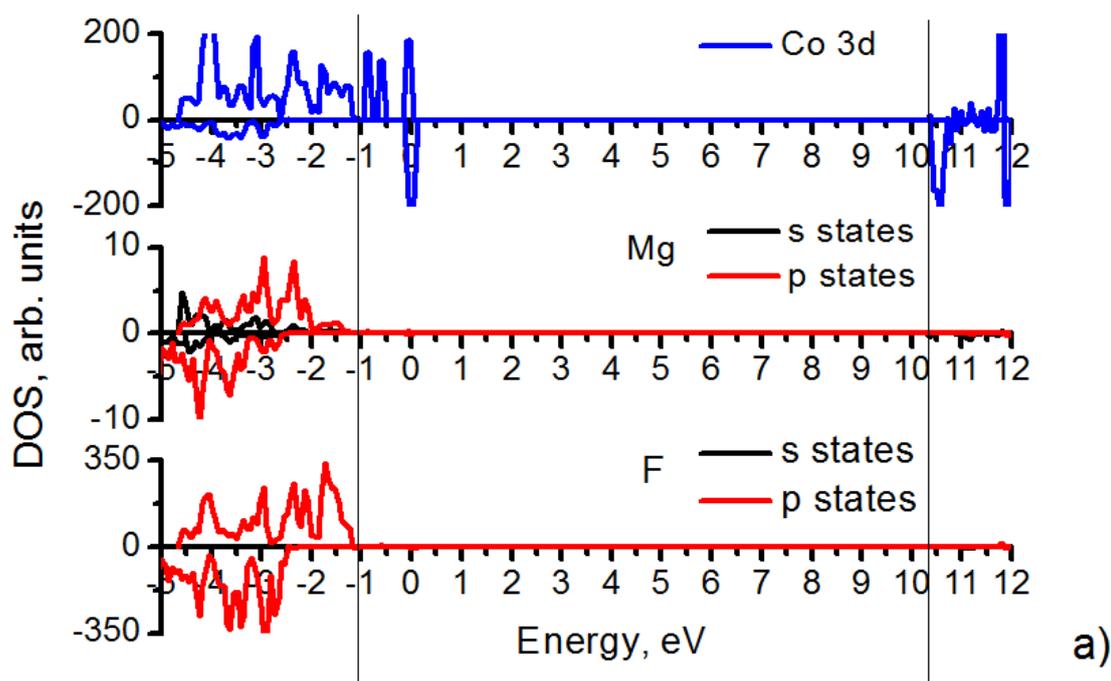
Увеличенный вид расчетных диаграмм плотности электронных состояний (в области запрещенной зоны) для MgF<sub>2</sub>: Co<sup>2+</sup> изображен на рис.3. Положение 3d-состояний Co<sup>2+</sup> в запрещенной зоне выделено, а также показано наивысшее  $e_g$  и наинизшее  $t_{2g}$  состояния. В распределении 3d-состояний четко видны два максимума, которые однозначно можно отнести к  $t_{2g}$  (самой низкой по энергии) и  $e_g$  (самой высокой по энергии) компонентам 3d-состояний, расщепленным в тетраэдрическом кристаллическом поле и находящимся в запрещенной зоне.

Разделение энергии между их максимумами можно оценить как напряженность кристаллического поля  $10Dq$  [24], значение которой на рис.13 оказывается около 0.6 эВ (или 4839 см<sup>-1</sup>), что достаточно близко к экспериментальному значению, полученному для Co:MgF<sub>2</sub>, равному около 5625 см<sup>-1</sup> [7]. Кроме того, переход с вершины валентной зоны на

нижний уровень атома Co, т.е.  ${}^4T_{1a} > {}^4T_2$  из плотности состояния составил около 0.9 эВ или  $7250 \text{ см}^{-1}$ , что также очень близко к экспериментальному значению, в интервале  $6826 - 7168 \text{ см}^{-1}$  [7]. К сожалению, более высокоэнергетические уровни находятся в зоне проводимости кристалла и не могут быть определены с необходимой точностью.

Распределение электронной плотности также изменяется при введении ионов  $\text{Co}^{2+}$  в кристаллическую решетку  $\text{MgF}_2$ , как показано на рис. 4. Изменения происходят не только в узлах кристаллической решетки, где расположены ионы Mg и Co. Разница электронной плотности на ионах фтора также изменяется и зависит от того, является ли ион Co для них ближайшим соседним атомом.

Основная причина этого заключается в том, что, хотя ионы Mg и Co имеют одинаковый формальный заряд  $^{2+}$ , их расчетный эффективный заряд Малликена различается:  $+1.76e$  для Mg и  $+1.52e$  для Co. Заряды ионов фтора, близких к ионам Mg, составляют  $-0.88e$ , а близкие к ионам Co составляют  $-0.82e$ . Уменьшение электрического заряда и небольшая разница между ними в сравнении с заселенностью связи Mg-F приводят к более высокой ковалентности связи Co-F по сравнению со связью Mg-F. Такой вывод согласуется с электронными конфигурациями этих ионов: полностью заполненная 2p-оболочка ионов Mg не оставляет места для электронов от 2p-электронов фтора и, следовательно, не участвует в связывании. Пустые 3s-состояния Mg расположены значительно выше по энергии, чем 2p-состояния фтора. В случае ионов Co, наоборот, незаполненная электронная оболочка 3d7 может быть активно вовлечена в связь Co-F. Кроме того, энергетическая щель между 3d-состояниями Co и 2p-состояниями F значительно меньше по сравнению с той же щелью между 3s-состояниями Mg и 2p-состояниями F.



Экспериментальный спектр поглощения  $\text{MgF}_2 : \text{Co}^{2+}$ , показанный на рис.3с, был записан при  $300^\circ \text{ K}$  (a) и  $15^\circ \text{ K}$  (b) с использованием спектрофотометра (Cary, модель 14R) [7]. К сожалению, инструментарий *Crystal* не позволяет рассчитать спектр поглощения, поэтому этот спектр был проанализирован с использованием теории кристаллического поля, а именно в модели обменного заряда (ЕСМ)[25], которая позволила рассчитать уровни энергии  $\text{Co}^{2+}$  и сравнить с экспериментальным спектром.

В таблице 9 приведены значения рассчитанных уровней энергии  $\text{Co}^{2+}$ . Все энергетические уровни, которые находятся вне экспериментально исследованного спектрального диапазона, предположительно расположены в зоне проводимости основного материала, заданного для полноты картины. Три наиболее заметные особенности в спектре поглощения - около  $7000 \text{ см}^{-1}$ ,  $15000 \text{ см}^{-1}$ ,  $20000 \text{ см}^{-1}$  - связаны с переходами из основного состояния  ${}^4T_{1a}$

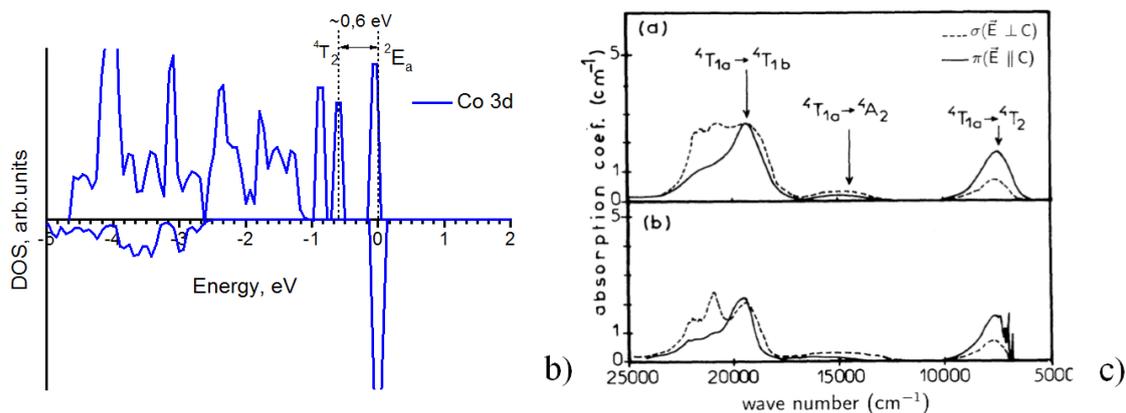


Рисунок 2 – Плотность состояний  $\text{MgF}_2:\text{Co}^{2+}$ , спроецированная на орбитали Co, Mg, F (a); увеличенный вид плотности 3d-состояний атома Co вблизи вершины валентной зоны, показана ширина перехода между уровнями  ${}^4T_2 > {}^2E_a$  (b); экспериментальный спектр адсорбции  $\text{MgF}_2:\text{Co}^{2+}$  [7] (c).

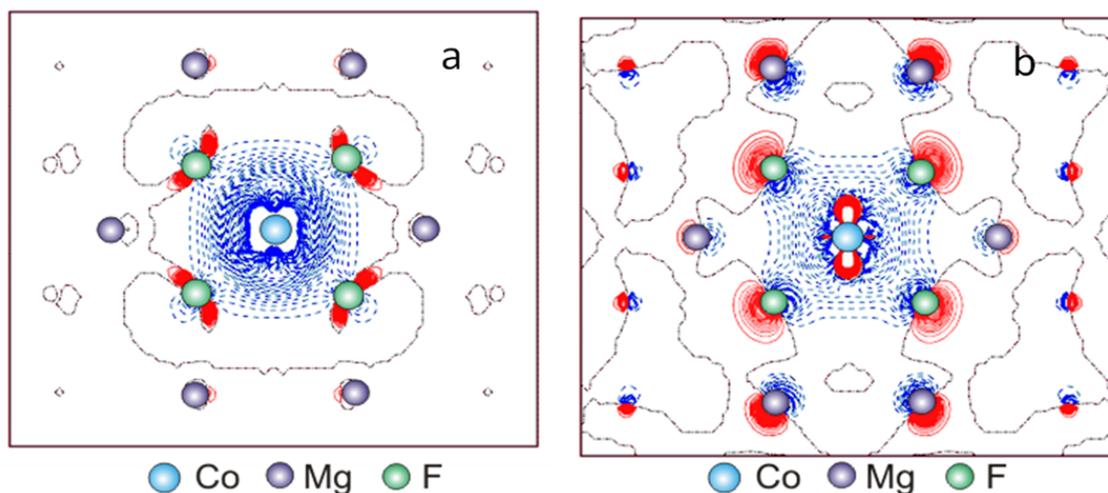


Рисунок 3 – Карты распределения электронного заряда для атома  $\text{Co}^{2+}$  в  $\text{MgF}_2$  (a) со спином 1; (b) со спином 3. Сплошная (красная) и пунктирная (синяя) изолинии соответствуют положительной (избыточной) и отрицательной (недостающей) электронной плотности соответственно. Приращение изолиний составляет 0,001e в интервале от -0.1 до 0.1e.

ионов  $\text{Co}^{2+}$  в состояния  ${}^4T_2$ ,  ${}^4A_2$  и  ${}^4T_{1b}$  соответственно. Сравнение рассчитанных уровней энергии (таблица 4) с экспериментальными данными (рис. 3c) и результатами других измерений показывает разумное согласие между всеми этими наборами данных.

Таблица 4 – Экспериментальные и вычисленные значения энергетических уровней ( $\text{cm}^{-1}$ )

Энергетические уровни $\text{Co}^{2+}$ в $\text{MgF}_2$	Расчет	Эксперимент [7]	$\Delta$
${}^4T_{1a}$	0	0	0
${}^4T_2$	6826	6801	25
${}^2E_a$	12427	12548*	- 121
${}^4A_2$	14276	14201*	75
${}^2T_{1a}$	17669	17671*	-2
${}^2T_{2a}$	18330	18331*	- 1
${}^4T_{1b}$	19501	~19000*	501

\* получено из анализа возбужденного спектра адсорбции (ESA)

**4. Выводы.** Вычисления методом теории функционала плотности являются мощным и надежным инструментом в исследовании эволюции фундаментальных свойств диэлектрических материалов, таких как  $\text{MgF}_2$ . Модификация вычислительного метода привела к лучшему описанию экспериментальных свойств чистого кристалла, при этом остальные свойства, такие как частотные, термодинамические свойства практически не изменяются, что позволило применить данный метод при вычислении примеси  $\text{Co}^{2+}$  в  $\text{MgF}_2$ . Было показано, что атом Co имеет квантовое состояние со спином 3, а еще одно возмозное состояние со спином 1 энергетически менее выгодно. При внедрении атома Co, между ним и соседними атомами F создаются крепкие ионно-ковалентные связи, которые показывает анализ Малликена. Исследование вычисленной плотности 3d-состояний атома Co вблизи вершины валентной зоны показал хорошее согласие с экспериментом по расположению энергетических уровней и шириной между ними для первых двух пиков поглощения. Из анализа распределения заряда можно заключить, что вблизи атома Co возникает достаточно сильное перераспределение заряда, что приводит к упрочнению связи Co-F со слабой поляризацией соседних Mg-F связей.

### Список литературы

- 1 DeSalvo R., Said A., Hagan D.J., Van Stryland E.W., Sheik-Bahae M., Infrared to ultraviolet measurements of two-photon absorption and  $n_2$  in wide bandgap solids, *Quantum Electronics*, IEEE. J. Quantum Electron, 32, 1324-1333(1996).
- 2 Kunzel W., Knierim W., and Durr U., CW infrared laser action of optically pumped  $\text{Co}^{2+}:\text{KZnF}_3$ , *Opt. Commun*, 36, 383 (1981).
- 3 German K.R., Durr U., and Kunzel W., Tunable single-frequency continuous-wave laser action in  $\text{Co}^{2+}:\text{KZnF}_3$ , *Opt. Lett*, 11, 12 (1986).
- 4 Moulton P. F., Pulse-pumped operation of divalent transition-metal lasers, *IEEE J. Quantum Electron*, 18, 1185 (1982).
- 5 Moulton P. F., An investigation of the  $\text{Co}:\text{MgF}_2$  laser system, *IEEE J. Quantum Electron*, 21, 1582(1985).
- 6 Fox A.M., Maciel A.M. and Ryan J.F., Efficient CW performance of a  $\text{Co}:\text{MgF}_2$  laser operating at 1.5-2.0  $\mu\text{m}$ , *Opt.Com*, 59(2), 142-144(1986).
- 7 Manaa H., Guyot Y., and Moncorge R., Spectroscopic and tunable laser properties of  $\text{Co}^{2+}$ -doped single crystals, physical review, 48, 3633(1993).
- 8 Freire P.T.C., Lemos V., Pilla O., and Vieira N.D., Jr., Pressure dependence of spin-orbit levels of  $\text{Co}^{2+}$  in  $\text{KZnF}_3$ , *J. Chem. Phys*, 110, 3995(1999).
- 9 Payne S.A., Chase L.L., and Wilke G.D., Excited-state absorption spectra of  $\text{V}^{2+}$  in  $\text{KMgF}_3$  and  $\text{MgF}_2$ , *Phys. Rev. B* 37, 37, 998(1988).
- 10 Lopez-Moraza S., Pascual J.L., and Barandiaran Z., Ab initio model potential embedded cluster study of  $\text{V}^{2+}$ -doped fluoroperovskites: Effects of different hosts on the local distortion and electronic structure of  $4T_2g-4A_2g$  laser levels, *J. Chem.Phys*, 103, 2117(1995).
- 11 Lopez-Moraza S. and Barandiaran Z., Excited state absorption spectra of  $\text{V}^{2+}$ -doped fluoroperovskites. An ab initio model potential embedded cluster study, *J. Chem. Phys*, 105, 50(1996).
- 12 Lopez-Moraza S., Seijo L., and Barandiaran Z., Multiple-excited-state absorption of  $\text{V}^{2+}$  in low-field crystals: An ab initio model-potential embedded-cluster study, *Phys. Rev*, 57, 11974(1998).
- 13 Lopez-Moraza S., Seijo L., and Barandiaran Z., Structure and spectroscopy of  $\text{Cr}^{3+}$  defects in  $\text{KMgF}_3$ ,  $\text{KZnF}_3$ , and  $\text{CsCaF}_3$  crystals. An ab initio model potential embedded cluster study, *Int. J. Quantum Chem*, Vol. 77, 961(2000).

А.Б. Дүкенов<sup>1</sup>, А.Б. Усеинов<sup>1,2</sup>, А.Т. Ақылбеков<sup>1</sup>, А.К. Даулетбекова<sup>1</sup>, М.В. Здоровец<sup>2</sup>,  
Н.С. Ыбыраев<sup>1</sup>, Н.Б. Оралбеков<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

<sup>2</sup> Ядролық физика Институтының Астаналық филиалы, Астана, Қазақстан

#### Таза және кобальтпен легирленген $\text{MgF}_2$ -нің электрондық қасиеттерін Ab-initio есептеулері

**Аңдатпа:** Қатты денелі лазерлердің дамуында, материалдардың спектрлік сипаттамаларын терең түсіну жоғары рөл атқарады. Біздің жұмысымызда Crystal бағдарламасындағы лазерлік қосымшалар үшін кобальтпен (Co) легирленген  $\text{MgF}_2$  кристаллының электрондық және оптикалық қасиеттерін кванттық-химиялық модельдеу жүргізілді. Есептеу нәтижесінде  $\text{MgF}_2$  -дегі кобальт атомы жоғары спиндік кванттық күйде (спин 3), және кристалл торымен күшті ионды-ковалентті байланыс жасайтыны көрсетілді. Co атомының 3d-күйлерінің спрциленген тығыздығы электрондық өту деңгейлерінің орналасуы бойынша байқалатын эксперименттік жұтылу спектрімен жақсы келісім береді. Осылайша, бұл есептеу әдісі легирленген диэлектрлік материалдардың спектрлік сипаттамаларын сапалы (ал жеке жағдайларда сандық) сипаттауға мүмкіндік береді. Сондай-ақ, бұл есептеу әдісі келесі ұқсас зерттеулерде қолданылуы мүмкін.

**Түйін сөздер:** адсорбция, спектрлер, байланыс энергиясы, ашық емес есептеулер.

A.B. Dukenov<sup>1</sup>, A.B. Usseinov<sup>1,2</sup>, A.T. Akilbekov<sup>1</sup>, A.K. Dauletbekova<sup>1</sup>, M.V. Zdorovets<sup>2</sup>,  
N.S. Ybyraev<sup>1</sup>, N.B. Oralbekov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

<sup>2</sup> Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics, Astana, Kazakhstan

### Ab-initio calculations of the electronic properties of pure and cobalt doped MgF<sub>2</sub>

**Abstract:** A deep understanding of the spectral characteristics of materials plays a high role in the development of solid-state laser systems. In our work, quantum-chemical modeling of the electronic and optical properties of a MgF<sub>2</sub> crystal doped with cobalt (Co) for laser applications in the Crystal program has been carried out. As a result of calculations, it has been shown that the cobalt atom in MgF<sub>2</sub> is in a high-spin quantum state (with spin 3), and creates a strong ion-covalent bond with the crystal lattice. The calculated projected density of the 3d states of the Co atom gives good agreement with the observed experimental absorption spectrum in the arrangement of the electronic transition levels. Thus, this computational method makes it possible to qualitatively (and in particular cases quantitatively) describe the spectral characteristics of doped dielectric materials. And also, this method of calculation can be used in subsequent similar studies.

**Keywords:** adsorption, spectra, binding energy, non-empirical calculations.

## References

- DeSalvo R., Said A., Hagan D.J., Van Stryland E.W., Sheik-Bahae M., Infrared to ultraviolet measurements of two-photon absorption and n<sub>2</sub> in wide bandgap solids, *Quantum Electronics, IEEE. J. Quantum Electron*, 32, 1324-1333(1996).
- Kunzel W., Knierim W., and Durr U., CW infrared laser action of optically pumped Co<sup>2+</sup>:KZnF<sub>3</sub>, *Opt. Commun*, 36, 383 (1981).
- German K.R., Durr U., and Kunzel W., Tunable single-frequency continuous-wave laser action in Co<sup>2+</sup>:KZnF<sub>3</sub>, *Opt. Lett*, 11, 12 (1986).
- Moulton P. F., Pulse-pumped operation of divalent transition-metal lasers, *IEEE J. Quantum Electron*, 18, 1185 (1982).
- Moulton P. F., An investigation of the Co:MgF<sub>2</sub> laser system, *IEEE J. Quantum Electron*, 21, 1582(1985).
- Fox A.M., Maciel A.M. and Ryan J.F., Efficient CW performance of a Co:MgF<sub>2</sub> laser operating at 1.5-2.0 μm, *Opt. Com.*, 59(2), 142-144(1986).
- Manaa H., Guyot Y., and Moncorge R., Spectroscopic and tunable laser properties of Co<sup>2+</sup>-doped single crystals, *physical review*, 48, 3633(1993).
- Freire P.T.C., Lemos V., Pilla O., and Vieira N.D., Jr., Pressure dependence of spin-orbit levels of Co<sup>2+</sup> in KZnF<sub>3</sub>, *J. Chem. Phys*, 110, 3995(1999).
- Payne S.A., Chase L.L., and Wilke G.D., Excited-state absorption spectra of V<sup>2+</sup> in KMgF<sub>3</sub> and MgF<sub>2</sub>, *Phys. Rev. B* 37, 998(1988).
- Lopez-Moraza S., Pascual J.L., and Barandiaran Z., Ab initio model potential embedded cluster study of V<sup>2+</sup>-doped fluoroperovskites: Effects of different hosts on the local distortion and electronic structure of 4T<sub>2g</sub>-4A<sub>2g</sub> laser levels, *J. Chem. Phys*, 103, 2117(1995).
- Lopez-Moraza S. and Barandiaran Z., Excited state absorption spectra of V<sup>2+</sup>-doped fluoroperovskites. An ab initio model potential embedded cluster study, *J. Chem. Phys*, 105, 50(1996).
- Lopez-Moraza S., Seijo L., and Barandiaran Z., Multiple-excited-state absorption of V<sup>2+</sup> in low-field crystals: An ab initio model-potential embedded-cluster study, *Phys. Rev*, 57, 11974(1998).
- Lopez-Moraza S., Seijo L., and Barandiaran Z., Structure and spectroscopy of Cr<sup>3+</sup> defects in KMgF<sub>3</sub>, KZnF<sub>3</sub>, and CsCaF<sub>3</sub> crystals. An ab initio model potential embedded cluster study, *Int. J. Quantum Chem*, Vol. 77, 961(2000).
- Dovesi R, Saunders V R, Roetti R, Orlando R, Zicovich-Wilson C M, Pascale F, Civalleri B, Doll K, Harrison N.M., Bush I J, D'Arco P, Llunell M. CRYSTAL14 User's Manual.(University of Torino, Torino, 2014. - 154p.)
- McCarthy, and Harrison N. M., Ab Initio Determination of the Bulk Properties of MgO, *Phys. Rev*, 49, 8574(1994).
- Dolg M., Wedig U., Stoll H., Preuss H., Energy-adjusted ab initio pseudopotentials for the first row transition elements, *J. Chem. Phys*, 86, 866(1987).
- Mulliken R. S. Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions. I, *J. Chem. Phys*, 23, 1833(1955).
- Monkhorst H. J., Pack J. D. Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B*, 13, 5188(1976).
- Dauletbekova A., Abuova F., Akilbekov A., Kotomin E. and Piskunov S., First principles modeling of H-color centers in MgF<sub>2</sub> crystals, *Phys. Status Solidi C*, 10(2), 160-164(2013).
- Fix A., Abuova F., Eglitis R., Kotomin E. and Akilbekov A., Ab initio calculations of F centers in MgF<sub>2</sub> bulk and on the (001) surface, *Phys. Scripta*, 86, 035304, 1-5(2012).
- Thomas J., Stephan G., Lemonier J. C., Nisar M., and Robin S., Optical Anisotropy of MgF, in *Its UV Absorption Region*, *Phys. Status Solidi*, 56, 163(1973).
- Perdew J. P., Burke K., and Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett*, 77(18), 3865 - 3868(1996).
- Catti et. al., Quantum-mechanical Hartree-Fock self-consistent-field study of the elastic constants and chemical bonding of MgF<sub>2</sub>, *Phys. Rev*, 44, 8(1991)

- 24 Sugano S., Tanabe Y., Kamimura H., Multiplets of Transition-Metal Ions in Crystals, (Acad. Press, New York, 1970, - 348p.)
- 25 Malkin B.Z., in: Kaplyanskii A.A., Macfarlane B.M. (Eds.), Spectroscopy of Solids Containing Rare-earth Ions, (North-Holland, Amsterdam, 1987, - 33p.)

**Сведения об авторах**

*Дукенов А.Б.* – магистрант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Байтурсынова, 33/1, Астана, Казахстан.

*Усеинов А.Б.* – доктор PhD, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Мунайтпасова, 13, корпус №3 «ЦИСИ», каб. 301, Астана, Казахстан.

*Акылбеков А.Т.* – доктор физико-математических наук, профессор, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Мунайтпасова, 13, корпус №3 «ЦИСИ», каб. 314, Астана, Казахстан.

*Даулетбекова А.К.* – доктор PhD, кандидат физико-математических наук, доцент, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Мунайтпасова, 13, корпус №3 «ЦИСИ», каб. 314, Астана, Казахстан.

*Здоровец М.В.* – кандидат физико-математических наук, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, проспект Абылай хана, 2/1, «МНИК», каб. 204, Астана, Казахстан.

*Оралбеков Н.Б.* – магистрант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Петрова, 19, Астана, Казахстан.

*Ыбыраев Н.С.* – магистрант, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Сатпаева 6/1, Астана, Казахстан.

*Dukenov A.B.* - Master of Science, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Baytursynov str. 33/1, Astana, Kazakhstan.

*Usseinov A.B.* - PhD, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Munaitpasova str. 13, Building 3 "TECT", office. 301, Astana, Kazakhstan.

*Akylbekov A.T.* - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Munaitpasova str. 13, Building 3 "TECT", office. 314, Astana, Kazakhstan.

*Dauletbekova A.K.* – Doctor PhD, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Assoc. Prof. L.N. Gumilyov Eurasian National University, Munaitpasova str. 13, Building 3 "TECT", office. 314, Astana, Kazakhstan.

*Zdorovets M.V.* - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Abylai Khan Prospect, 2/1, "IDRC", office. 204., Astana, Kazakhstan.

*Oralbekov N.B.* - Master of Science, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Petrova str. 19, Astana, Kazakhstan.

*Ybyrayev N.S.* - Master of Science, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpayev str. 6/1, Astana, Kazakhstan.

*Поступила в редакцию 21.02.2019*

«Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы»  
журналында мақала жариялау ережесі

Журнал редакциясы авторларға осы нұсқаулықпен толық танысып, журналға мақала әзірлеу мен дайын мақаланы журналға жіберу кезінде басшылыққа алуды ұсынады. Бұл нұсқаулық талаптарының орындалмауы сіздің мақалаңыздың жариялануын кідіртеді.

1. **Журнал мақсаты.** Физика мен астрономия салаларының теориялық және эксперименталды зерттелулері бойынша мұқият тексеруден өткен ғылыми құндылығы бар мақалалар жариялау.

2. Баспаға (барлық жариялаушы авторлардың қол қойылған қағаз нұсқасы және электронды нұсқа) журналдың түпнұсқалы стильдік файлының міндетті қолданысымен LaTeX баспа жүйесінде дайындалған Tex- пен Pdf-файлындағы жұмыстар ұсынылады. Стильдік файлды *bulphysast.enu.kz* журнал сайтынан жүктеп алуға болады. Сонымен қатар, автор(лар) ілеспе хат ұсынуы керек.

3. Автордың қолжазбаны редакцияға жіберуі мақаланың Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысында басуға келісімін, шетел тіліне аударылып қайта басылуына келісімін білдіреді. Автор мақаланы редакцияға жіберу арқылы автор туралы мәліметтің дұрыстығына, мақала көшірілмегендігіне (плагиаттың жоқтығына) және басқа да заңсыз көшірмелердің жоқтығына кепілдеме береді.

4. Мақаланың көлемі 18 беттен аспауға тиіс (6 беттен бастап).

ГТАМРК <http://grnti.ru/>

Автор(лар)дың аты-жөні

Мекеменің толық атауы, қаласы, мемлекеті (егер авторлар әртүрлі мекемеде жұмыс жасайтын болса, онда әр автор мен оның жұмыс мекемесі қасында бірдей белгі қойылу керек)

Автор(лар)дың E-mail-ы

Мақала атауы

**Аннотация** (100-200 сөз; күрделі формулаларсүзсіз, мақаланың атауын мейлінше қайталамауы қажет; әдебиеттерге сілтемелер болмауы қажет; мақаланың құрылысын (кіріспе мақаланың мақсаты/ міндеттері /қарастырылып отырған сұрақтың тарихы /зерттеу /әдістері нәтижелер/талқылау, қорытынды) сақтай отырып, мақаланың қысқаша мазмұны берілуі қажет).

**Түйін сөздер** (6-8 сөз не сөз тіркесі. Түйін сөздер мақала мазмұнын көрсетіп, мейлінше мақала атауы мен аннотациядағы сөздерді қайталамай, мақала мазмұнындағы сөздерді қолдану қажет. Сонымен қатар, ақпараттық-ізвестіру жүйелерінде мақаланы жеңіл табуға мүмкіндік беретін ғылым салаларының терминдерін қолдану қажет).

**Негізгі мәтін** мақаланың мақсаты/ міндеттері/ қарастырылып отырған сұрақтың тарихы, зерттеу әдістері, нәтижелер/талқылау, қорытынды бөлімдерін қамтуы қажет.

5. **Таблица, суреттер** – Жұмыстың мәтінінде кездесетін таблицалар мәтіннің ішінде жеке нөмірленіп, мәтін көлемінде сілтемелер түрінде көрсетілуі керек. Суреттер мен графиктер PS, PDF, TIFF, GIF, JPEG, BMP, PCX форматындағы стандарттарға сай болуы керек. Нүктелік суреттер кеңейтілімі 600 dpi кем болмауы қажет. Суреттердің барлығы да айқын әрі нақты болуы керек.

Мақаладағы **формулалар** тек мәтінде оларға сілтеме берілсе ғана номерленеді.

Жалпы қолданыста бар **аббревиатуралар** мен **қысқартулардан** басқалары міндетті түрде алғаш қолданғанда түсіндірілуі берілуі қажет. **Қаржылай көмек туралы** ақпарат бірінші бетте көрсетіледі.

6. Жұмыста қолданылған әдебиеттер тек жұмыста сілтеме жасалған түпнұсқалық көрсеткішке сай (сілтеме беру тәртібінде немесе ағылшын әліпбиі тәртібі негізінде толтырылады) болуы керек. Баспадан шықпаған жұмыстарға сілтеме жасауға түйым салынады.

Сілтемені беруде автор қолданған әдебиеттің бетінің нөмірін көрсетпей, келесі нұсқаға сүйеніңіз дұрыс: тараудың номері, бөлімнің номері, тармақтың номері, теораманың (лемма, ескерту, формуланың және т.б.) номері көрсетіледі. Мысалы: қараңыз [3; § 7, лемма 6]», «...қараңыз [2; 5 теорамандағы ескерту]». Бұл талап орындалмаған жағдайда мақаланы ағылшын тіліне аударғанда сілтемелерде қателіктер туындауы мүмкін.

**Қолданылған әдебиеттер тізімін рәсімдеу мысалдары**

1 Воронин С. М., Карацуба А. А. Дзета-функция Римана. –М: Физматлит, –1994, –376 стр. – **кітап**

2 Баилов Е. А., Сихов М. Б., Темиргалиев Н. Об общем алгоритме численного интегрирования функций многих переменных // Журнал вычислительной математики и математической физики –2014. –Т.54. № 7. –С. 1059-1077. - **мақала**

3 Жубанышева А.Ж., Абикенова Ш. О нормах производных функций с нулевыми значениями заданного набора линейных функционалов и их применения к поперечниковым задачам // Функциональные пространства и теория приближения функций: Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. – Москва, 2015. –С.141-142. – **конференция еңбектері**

4 Нургазина К. Рыцарь математики и информатики. –Астана: Каз.правда, 2017. 19 апреля. –С.7. – **газеттік мақала**

5 Кыров В.А., Михайличенко Г.Г. Аналитический метод вложения симплектической геометрии // Сибирские электронные математические известия –2017. –Т.14. –С.657-672. doi: 10.17377/semi.2017.14.057. – URL: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. (дата обращения: 08.01.2017). - **электронды журнал**

7. Әдебиеттер тізімінен соң автор өзінің библиографиялық мәліметтерін орыс және ағылшын тілінде (егер мақала қазақ тілінде орындалса), қазақ және ағылшын тілінде (егер мақала орыс тілінде орындалса), орыс және қазақ тілінде (егер мақала ағылшын тілінде орындалса) жазу қажет. Соңынан транслиттік аударма мен ағылшын тілінде берілген әдебиеттер тізімінен соң әр автордың жеке мәліметтері (қазақ, орыс, ағылшын тілдерінде – ғылыми атағы, қызметтік мекенжайы, телефоны, e-mail-ы) беріледі.

8. Редакцияға түскен мақала жабық (анонимді) тексеруге жіберіледі. Барлық рецензиялар авторларға жіберіледі. Автор (рецензент мақаланы түзетуге ұсыныс берген жағдайда) үш күн аралығында қайта қарап, қолжазбаның түзетілген нұсқасын редакцияға қайта жіберуі керек. Рецензент жарамсыз деп таныған мақала қайтара қарастырылмайды. Мақаланың түзетілген нұсқасы мен автордың рецензентке жауабы редакцияға жіберіледі.

**9. Төлемақы.** Басылымға рұқсат етілген мақала авторларына төлем жасау туралы ескертіледі. Төлем көлемі 2018 жылы 4500 тенге – ЕҰУ қызметкерлері үшін және 5500 тенге басқа ұйым қызметкерлеріне.

**Реквизиттер:**

"Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева" МОН РК

Столичный филиал АО "Цеснабанк"

КБЕ 16

БИН 010140003594

БИК TSES KZ KA

Счет в кодировке IBAN-

KZ91998BTV0000003104-

"За публикацию ФИО авторов"

**Provision on articles submitted to the journal "Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. Physics. Astronomy series"**

*The journal editorial board asks the authors to read the rules and adhere to them when preparing the articles, sent to the journal. Deviation from the established rules delays the publication of the article.*

**1. Purpose of the journal.** Publication of carefully selected original scientific.

2. The scientific publication office accepts the article (in electronic and printed, signed by the author) in Tex- and Pdf-files, prepared in the LaTeX publishing system with mandatory use of the original style log file. The style log file can be downloaded from the journal website [bulphysast.enu.kz](http://bulphysast.enu.kz). And you also need to provide the cover letter of the author(s).

Language of publications: Kazakh, Russian, English.

**3. Submission of articles to the scientific publication office means the authors' consent to the right of the Publisher, L.N. Gumilyov Eurasian National University, to publish articles in the journal and the re-publication of it in any foreign language. Submitting the text of the work for publication in the journal, the author guarantees the correctness of all information about himself, the lack of plagiarism and other forms of improper borrowing in the article, the proper formulation of all borrowings of text, tables, diagrams, illustrations.**

4. The volume of the article should not exceed 18 pages (from 6 pages).

**5. Structure of the article**

**GRNTI** <http://grnti.ru/>

**Initials and Surname of the author (s)**

**Full name of the organization, city, country** (if the authors work in different organizations, you need to put the same icon next to the name of the author and the corresponding organization)

**Author's e-mail (s)**

**Article title**

**Abstract** (100-200 words, it should not contain a big formulas, the article title should not repeat in the content, it should not contain bibliographic references, it should reflect the summary of the article, preserving the structure of the article - introduction/ problem statement/ goals/ history, research methods, results /discussion, conclusion).

**Key words** (6-8 words/word combination. Keywords should reflect the main content of the article, use terms from the article, as well as terms that define the subject area and include other important concepts that make it easier and more convenient to find the article using the information retrieval system).

**The main text of the article** should contain an introduction/ problem statement/ goals/ history, research methods, results / discussion, conclusion. Tables, figures should be placed after the mention. Each illustration should be followed by an inscription. Figures should be clear, clean, not scanned.

Tables are included directly in the text of the article; it must be numbered and accompanied by a reference to them in the text of the article. Figures, graphics should be presented in one of the standard formats: PS, PDF, TIFF, GIF, JPEG, BMP, PCX. Bitmaps should be presented with a resolution of 600 dpi. All details must be clearly shown in the figures.

In the article, only those **formulas** are numbered, to which the text has references.

All **abbreviations**, with the exception of those known to be generally known, must be deciphered when first used in the text.

Information on **the financial** support of the article is indicated on the first page in the form of a footnote.

**6.** The list of literature should contain only those sources (numbered in the order of quoting or in the order of the English alphabet), which are referenced in the text of the article. References to unpublished issues, the results of which are used in evidence, are not allowed. Authors are recommended to exclude the reference to pages when referring to the links and guided by the following template: chapter number, section number, paragraph number, theorem number (lemmas, statements, remarks to the theorem, etc.), number of the formula. For example, "...; see [3, § 7, Lemma 6]"; "...; see [2], a remark to Theorem 5". Otherwise, incorrect references may appear when preparing an English version of the article.

### Template

1 Воронин С. М., Карацуба А. А. Дзета-функция Римана. -М: Физматлит, -1994, -376 стр.-**book**

2 Баиллов Е. А., Сихов М. Б., Темиргалиев Н. Об общем алгоритме численного интегрирования функций многих переменных // Журнал вычислительной математики и математической физики -2014. -Т.54. № 7. -С. 1059-1077. - **journal article**

3 Жубанышева А.Ж., Абикенова Ш. О нормах производных функций с нулевыми значениями заданного набора линейных функционалов и их применения к поперечниковым задачам // Функциональные пространства и теория приближения функций: Тезисы докладов Международной конференции, посвященная 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. - Москва, 2015. -С.141-142. - - **Conferences proceedings**

4 Нургазина К. Рыцарь математики и информатики. -Астана: Каз.правда, 2017. 19 апреля. -С.7. **newspaper articles**

5 Кыров В.А., Михайличенко Г.Г. Аналитический метод вложения симплектической геометрии // Сибирские электронные математические известия -2017. -Т.14. -С.657-672. doi: 10.17377/semi.2017.14.057. - URL: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. (дата обращения: 08.01.2017). - **Internet resources**

**7.** At the end of the article, after the list of references, it is necessary to indicate bibliographic data in Russian and English (if the article is in Kazakh), in Kazakh and English (if the article is in Russian) and in Russian and Kazakh languages (if the article is English language). Then a combination of the English-language and transliterated parts of the references list and information about authors (scientific degree, office address, telephone, e-mail - in Kazakh, Russian and English) is given.

**8. Work with electronic proofreading.** Articles received by the Department of Scientific Publications (editorial office) are sent to anonymous review. All reviews of the article are sent to the author. The authors must send the proof of the article within three days. Articles that receive a negative review for a second review are not accepted. Corrected versions of articles and the author's response to the reviewer are sent to the editorial office. Articles that have positive reviews are submitted to the editorial boards of the journal for discussion and approval for publication.

**Periodicity of the journal:** 4 times a year.

**9. Payment.** Authors who have received a positive conclusion for publication should make payment on the following requisites (for ENU employees - 4,500 tenge, for outside organizations - 5,500 tenge):

**Requisites:**

L.N. Gumilyov Eurasian  
National University"  
JSC "Tsesnabank:"  
Tsesnabank КБЕ  
КБЕ 16  
БИН 010140003594  
БИК TSES KZ KA  
Счет в кодировке IBAN-  
KZ91998ВТВ0000003104-  
-За публикацию фио

**Положение о рукописях, представляемых в журнал «Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н.Гумилева. Серия: Физика. Астрономия»**

Редакция журнала просит авторов ознакомиться с правилами и придерживаться их при подготовке работ, направляемых в журнал. Отклонение от установленных правил задерживает публикацию статьи.

**1. Цель журнала.** Публикация тщательно отобранных оригинальных научных работ по актуальным проблемам теоретических и экспериментальных исследований в области физики и астрономии.

**2.** В редакцию (в бумажном виде, подписанном всеми авторами и в электронном виде) представляются Tex- и Pdf-файлы работы, подготовленные в издательской системе LaTeX, с обязательным использованием оригинального стилевого файла журнала. Стилиевой файл можно скачать со сайта журнала *bulphysast.enu.kz*. Автору (авторам) необходимо предоставить сопроводительное письмо.

**Язык публикаций:** казахский, русский, английский.

**3. Отправление статей в редакцию означает согласие авторов на право Издателя, Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, издания статей в журнале и переиздания их на любом иностранном языке. Представляя текст работы для публикации в журнале, автор гарантирует правильность всех сведений о себе, отсутствие плагиата и других форм неправомерного заимствования в рукописи, надлежащее оформление всех заимствований текста, таблиц, схем, иллюстраций.**

**4.** Объем статьи не должен превышать 18 страниц (от 6 страниц).

**5. Схема построения статьи**

**ГРНТИ** <http://grnti.ru/>

**Инициалы и фамилия автора(ов)**

**Полное наименование организации, город, страна** (если авторы работают в разных организациях, необходимо поставить одинаковый значок около фамилии автора и соответствующей организации)

**E-mail** автора(ов)

**Название статьи**

**Аннотация** (100-200 слов; не должна содержать громоздкие формулы, по содержанию повторять название статьи; не должна содержать библиографические ссылки; должна отражать краткое содержание статьи, сохраняя структуру статьи – введение/ постановка задачи/ цели/ история, методы исследования, результаты/обсуждение, заключение/выводы).

**Ключевые слова** (6-8 слов/словосочетаний. Ключевые слова должны отражать основное содержание статьи, использовать термины из текста статьи, а также термины, определяющие предметную область и включающие другие важные понятия, позволяющие облегчить и расширить возможности нахождения статьи средствами информационно-поисковой системы).

**Основной текст статьи** должен содержать введение/ постановку задачи/ цели/ историю, методы исследования, результаты/обсуждение, заключение/выводы.

Таблицы включаются непосредственно в текст работы, они должны быть пронумерованы и сопровождаться ссылкой на них в тексте работы. Рисунки, графики должны быть представлены в одном из стандартных форматов: PS, PDF, TIFF, GIF, JPEG, BMP, PCX. Точечные рисунки необходимо выполнять с разрешением 600 dpi. На рисунках должны быть ясно переданы все детали.

В статье нумеруются лишь те **формулы**, на которые по тексту есть ссылки.

Все **аббревиатуры и сокращения**, за исключением заведомо общеизвестных, должны быть расшифрованы при первом употреблении в тексте.

Сведения о **финансовой поддержке** работы указываются на первой странице в виде сноски.

**6.** Список литературы должен содержать только те источники (пронумерованные в порядке цитирования или в порядке английского алфавита), на которые имеются ссылки в тексте работы. Ссылки на неопубликованные работы, результаты которых используются в доказательствах, не допускаются.

Авторам рекомендуется при оформлении ссылок исключить упоминание страниц и руководствоваться следующим шаблоном: номер главы, номер параграфа, номер пункта, номер теоремы (леммы, утверждения, замечания к теореме и т.п.), номер формулы. Например, "..., см. [3; § 7, лемма 6]"; "..., см. [2; замечание к теореме 5]". В противном случае при подготовке англоязычной версии статьи могут возникнуть неверные ссылки.

#### **Примеры оформления списка литературы**

1 Воронин С. М., Карацуба А. А. Дзета-функция Римана. -М: Физматлит, -1994, -376 стр. - **книга**

2 Баилов Е. А., Сихов М. Б., Темиргалиев Н. Об общем алгоритме численного интегрирования функций многих переменных // Журнал вычислительной математики и математической физики -2014. -Т.54. № 7. -С. 1059-1077. - **статья**

3 Жубанышева А.Ж., Абикенова Ш. О нормах производных функций с нулевыми значениями заданного набора линейных функционалов и их применения к поперечниковым задачам // Функциональные пространства и теория приближения функций: Тезисы докладов Международной конференции, посвященной 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. - Москва, 2015. -С.141-142. - **труды конференции**

4 Нуртазина К. Рыцарь математики и информатики. -Астана: Каз.правда, 2017. 19 апреля. -С.7. - **газетная статья**

5 Кыров В.А., Михайличенко Г.Г. Аналитический метод вложения симплектической геометрии // Сибирские электронные математические известия -2017. -Т.14. -С.657-672. doi: 10.17377/semi.2017.14.057. - URL: <http://sem.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. (дата обращения: 08.01.2017). - **электронный журнал**

**7.** После списка литературы, необходимо указать библиографические данные на русском и английском языках (если статья оформлена на казахском языке), на казахском и английском языках (если статья оформлена на русском языке) и на русском и казахском языках (если статья оформлена на английском языке). Затем приводится комбинация англоязычной и транслитерированной частей списка литературы и сведения по каждому из авторов (научное звание, служебный адрес, телефон, e-mail - на казахском, русском и английском языках).

**8. Работа с электронной корректурой.** Статьи, поступившие в Отдел научных изданий (редакция), отправляются на анонимное рецензирование. Все рецензии по статьям отправляются автору. Авторам в течение трех дней

необходимо отправить корректуру статьи. Статьи, получившие отрицательную рецензию, к повторному рассмотрению не принимаются. Исправленные варианты статей и ответ автора рецензенту присылаются в редакцию. Статьи, имеющие положительные рецензии, представляются редколлегии журнала для обсуждения и утверждения для публикации.

**Периодичность журнала:** 4 раза в год.

**9. Оплата.** Авторам, получившим положительное заключение к опубликованию, необходимо произвести оплату по следующим реквизитам (для сотрудников ЕНУ – 4500 тенге, для сторонних организаций – 5500 тенге):

## Мақаланы рәсімдеу үлгісі

МРНТИ 27.25.19

А.Ж. Жубанышева<sup>1</sup>, Н. Темиргалиев<sup>2</sup>, А.Б. Утесов<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Институт теоретической математики и научных вычислений Евразийского национального университета имени Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан*

<sup>2</sup> *Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, Актюбе, Казахстан*

(Email: <sup>1</sup> *axaulezh@mail.ru*, <sup>2</sup> *ntmath10@mail.ru*, <sup>3</sup> *adilzhan\_71@mail.ru*)

**Численное дифференцирование функций в контексте Компьютерного (вычислительного) перечника**

### Введение

Текст введения...

Авторам не следует использовать нестандартные пакеты LaTeX (используйте их лишь в случае крайней необходимости)

### Заголовок секции

#### 1.1 Заголовок подсекции

Окружения.

**Теорема 1.** ...

**Лемма 1.** ...

**Предложение 1.** ...

**Определение 1.** ...

**Следствие 1.** ...

**Замечание 1.** ...

**Теорема 2** (Темиргалиев Н. [2]). *Текст теоремы.*

**Д о к а з а т е л ь с т в о.** Текст доказательства.

### 2. Формулы, таблицы, рисунки

$$\delta_N(\varepsilon_N; D_N)_Y \equiv \delta_N(\varepsilon_N; T; F; D_N)_Y \equiv \inf_{(l^{(N)}, \varphi_N) \in D_N} \delta_N \left( \varepsilon_N; \left( l^{(N)}, \varphi_N \right) \right)_Y, \quad (51)$$

где  $\delta_N(\varepsilon_N; (l^{(N)}, \varphi_N))_Y \equiv \delta_N(\varepsilon_N; T; F; (l^{(N)}, \varphi_N))_Y \equiv$

$$\equiv \sup_{\substack{f \in F \\ |\gamma_N^{(\tau)}| \leq 1 (\tau=1, \dots, N)}} \left\| Tf(\cdot) - \varphi_N \left( l_N^{(1)}(f) + \gamma_N^{(1)} \varepsilon_N^{(1)}, \dots, l_N^{(N)}(f) + \gamma_N^{(N)} \varepsilon_N^{(N)}; \cdot \right) \right\|_Y.$$

Таблицы, рисунки необходимо располагать после упоминания. С каждой иллюстрацией должна следовать надпись.

### 3. Ссылки и библиография

Для ссылок на утверждения, формулы и т. п. можно использовать метки. Например, теорема 2, Формула (51)

Таблица 1 – Название таблицы

Простые	Не простые
2, 3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29	4, 6, 8, 9, 10, 12, 14



Рисунок 1 – Название рисунка

Для руководства по  $\LaTeX$  и в качестве примера оформления ссылок, см., например, *Львовский С.М.* Набор и верстка в пакете  $\LaTeX$ . Москва: Космосинформ, 1994.

Список литературы оформляется следующим образом.

### Список литературы

- 1 Локуциевский О.М., Гавриков М.Б. Начала численного анализа. –М.: ТОО "Янус", 1995. –581 с. - **книга**
- 2 Темиргалиев Н. Компьютерный (вычислительный) поперечник как синтез известного и нового в численном анализе // Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева –2014. –Т.4. №101. –С. 16-33. doi: ... (при наличии) - **статья**
- 3 Жубанышева А.Ж., Абикинова Ш. О нормах производных функций с нулевыми значениями заданного набора линейных функционалов и их применения к поперечниковым задачам // Функциональные пространства и теория приближения функций: Тезисы докладов Международной конференции, посвященная 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. – Москва, 2015. –С.141-142. - **труды конференций**
- 4 Курмуков А.А. Ангиопротекторная и гипополипидемическая активность леукомизина. –Алматы: Бастау, 2007. –С. 3-5 - **газетные статьи**
- 5 Кыров В.А., Михайличенко Г.Г. Аналитический метод вложения симплектической геометрии // Сибирские электронные математические известия –2017. –Т.14. –С.657-672. doi: 10.17377/semi.2017.14.057. – URL: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. (дата обращения: 08.01.2017). - **электронный журнал**

**А.Ж. Жубанышева<sup>1</sup>, Н. Темиргалиев<sup>1</sup>, А.Б. Утесов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің теориялық математика және ғылыми есептеулер институты, Астана, Қазақстан

<sup>2</sup> Қ.Жубанов атындағы. Ақтөбе өңірлік мемлекеттік университеті, Ақтобе, Қазақстан

#### Компьютерлік (есептеуіш) диаметр мәнінде функцияларды сандық дифференциалдау

**Аннотация:** Компьютерлік (есептеуіш) диаметр мәнінде Соболев класында жататын функцияларды олардың тригонометриялық Фурье-Лебега коэффициенттерінің ақырлы жиынынан алынған дәл емес ақпарат бойынша жуықтау есебі толығымен шешілді [100-200 сөздер].

**Түйін сөздер:** жуықтап дифференциалдау, дәл емес ақпарат бойынша жуықтау, шектік қателік, Компьютерлік (есептеуіш) диаметр [6-8 сөз/сөз тіркестері].

**A.Zh.Zhubanysheva<sup>1</sup>, N. Temirgaliyev<sup>1</sup>, A.B. Utesov<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Institute of theoretical mathematics and scientific computations of L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

<sup>2</sup> K.Zhubanov Aktobe Regional State University, Aktobe, Kazakhstan

#### Numerical differentiation of functions in the context of Computational (numerical) diameter

**Abstract:** The computational (numerical) diameter is used to completely solve the problem of approximate differentiation of a function given inexact information in the form of an arbitrary finite set of trigonometric Fourier coefficients. [100-200 words]

**Keywords:** approximate differentiation, recovery from inexact information, limiting error, computational (numerical) diameter, massive limiting error. [6-8 words/word combinations]

## References

- 1 Lokucievskij O.M., Gavrikov M.B. *Nachala chislennogo analiza* [Elements of numerical analysis] (Yanus, Moscow, 1995). [in Russian]
- 2 Temirgaliyev N. Komp'yuternyj (vychislitel'nyj) poperechnik kak sintez izvestnogo i novogo v chislennom analize [Computational (numerical) diameter as a synthesis of the known and the new in numerical analysis], *Vestnik Evrazijskogo nacional'nogo universiteta imeni L.N. Gumileva* [Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University], 4 (101), 16-33 (2014). [in Russian]
- 3 Zhubanysheva A.Zh., AbikenovaSh.K. O normah proizvodnyh funkciy s nulevymi znachenijami zadannogo nabora linejnyh funkcionalov i ih primeneniya k poperechnikovym zadacham [About the norms of the derivatives of functions with zero values of a given set of linear functionals and their application to the width problems]. Tezisy dokladov Mezhdunarodnoj konferencii, posvjashhennaja 110-letiju so dnja rozhdenija akademika S.M.Nicol'skogo "Funkcional'nye prostranstva i teorija priblizhenija funkciy" [International conference on Function Spaces and Approximation Theory dedicated to the 110th anniversary of S. M. Nikol'skii]. Moscow, 2015, pp. 141-142. [in Russian]
- 4 Kurmukov A. A. Angioprotekturnaja i gipolipidemicheska ja aktivnost' leukomycina [Angioprotective and lipid-lowering activity of leukomycin] (Bastau, Almaty, 2007, P. 3-5). [in Russian]
- 5 Kyrov V.A., Mihajlichenko G.G. Analiticheskij metod vlozhenija simplekticheskoj geometrii [The analytic method of embedding symplectic geometry], *Cibirskie jelektronnye matematicheskie izvestija* [Siberian Electronic Mathematical Reports], 14, 657-672 (2017). doi: 10.17377/semi.2017.14.057. Available at: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. [in Russian]. (accessed 08.01.2017).

### Сведения об авторах:

*Жубаньшева А.Ж.* - Старший научный сотрудник Института теоретической математики и научных вычислений, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

*Темиргалиев Н.* - Директор Института теоретической математики и научных вычислений, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

*Утесов А.Б.* - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики, Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, пр. А.Молдагуловой, 34, Актобе, Казахстан.

*Zhubanysheva A.Zh.* - Senior researcher of the Institute of theoretical mathematics and scientific computations, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpayev str., Astana, Kazakhstan.

*Temirgaliyev N.* - Head of the Institute of theoretical mathematics and scientific computations, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpayev str., Astana, Kazakhstan.

*Utesov A.B.* - candidate of physical and mathematical sciences, Associate Professor of the Department of Mathematics, K.Zhubanov Aktobe Regional State University, A.Moldagulova Prospect, 34, Aktobe, Kazakhstan.

*Поступила в редакцию 15.05.2017*

Редакторы: А.Қ. Арынгазин  
Шығарушы редактор, дизайн: А. Нұрболат

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің  
Хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы.  
-2019 - 1(126) - Астана: ЕҰУ. 107-б.  
Шартты б.т. - 9,375 Таралымы - 25 дана.

Мазмұнына типография жауап бермейді.

Редакция мекен-жайы: 010008, Астана қ.,  
Сәтбаев көшесі, 2.  
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті  
Тел.: +7(7172) 70-95-00(ішкі 31-428)

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды