



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ТҰҢҒЫШ ПРЕЗИДЕНТІ - ЕЛБАСЫНЫҢ ҚОРЫ

«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ – 2017»

студенттер мен жас ғалымдардың
XII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

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

PROCEEDINGS

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



14th April 2017, Astana



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

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

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

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

2017 жыл 14 сәуір

Астана

УДК 378

ББК 74.58

Ғ 96

Ғ 96

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

ISBN 978-9965-31-827-6

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

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

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

УДК 378

ББК 74.58

ISBN 978-9965-31-827-6

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

4. Бичурин М.И., Петров В.М., Филиппов Д.А., Srinivasan G., Nan C.W. Магнитоэлектрические материалы - М.: Академия Естествознания, 2006. - 296 с.
5. Bichurin M.I., Petrov V.M., Srinivasan G. Theory of low-frequency magnetoelectric coupling in magnetostrictive-piezoelectric bilayers // Phys. Rev. B, 2003, v. 68, p. 054402 (1-13).
6. Bichurin M. I., Petrov V. M., Ryabkov O. V., Averkin S. V., and Srinivasan G. Theory of Magnetoelectric Effects at Magnetoacoustic Resonance in Ferromagnetic-Ferroelectric Heterostructures // G.. Phys. Rev. B, 2005, V. 72, P. 060408 (R).
7. Бичурин М.И., Петров В.М., Филиппов Д.А., Srinivasan G., Nan C.W. Магнитоэлектрические материалы – М.: Академия Естествознания, 2006. – 296 с.
8. Б. А. Князев, А. В. Кузьмин. Поверхностные электромагнитные волны: от видимого диапазона до микроволн Физика. 2007. Том 2, выпуск 1
9. Thomson W.T. Transmission of elastic waves through a stratified solid material // JN Sound Vibr. – 1965, N2. – P. 210-226.

ӘОЖ 538.9

НҮКТЕЛІК АҚАУЛАРЫ БАР SI НАНОКРИСТАЛЫН КВАНТТЫҚ – ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Кабельдинов Валихан

Физика-техникалық факультетінің 2 курс магистранты

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан.

Ғылыми жетекші – Ж. М. Салиходжа

Нанотехнология компьютерлік техникадағы революциялық өзгерістер негізінде қалыптасқан болатын. Транзисторлар пайда болғаннан бері жартылай өткізгіш техникасы қарқынды дамып, оптикалық материалдардың жұмыс істеуі жылдамдады. Алайда жартылай өткізгіш құрылғылардың өлшемі 1 микронға жақындаған сайын, оларда заттардың кванттық-механикалық қасиеттері байқала бастады. Жартылай өткізгіштер осындай қарқынды дамиды болса, бірнеше жыл ішінде фундаменталды сипатты қиыншылыққа тап болуы мүмкін және соның себебінен ғылым мен техникада үлкен дамудың қажеттілігі туындайды. Соның негізі болып нанотехнологиялар есебінен іске аса алады. Жалпы нанотехнологиялар жартылай өткізгішті есептеу қондырғыларының негізгі сипаты мен қасиеттерінің 1000 есе артуына себепкер болады.

Бүгінгі таңда өлшемдері нанометрлі жартылай өткізгіштер физикасының интенсивті дамуы қарқын алуда. Жартылай өткізгішті наноөлшемді бөлшектер қатты дене мен молекулалық құрылымдардың өтуінің аймағында орналасқан. Жартылай өткізгішті нанокристалдардың оптикалық, электронды және каталикалық қасиеттері макрокристалдық заттардың осындай қасиеттерінен ерекшеленеді және бөлшектердің өлшемдеріне (өлшемдік кванттау эффектісі) тәуелді болып табылады. Мұндай жартылай өткізгіштер олардың бөлшектерінің өлшемдірін өзгерте отырып, оптикалық, электрлік және құрылымдық қасиеттерін басқаруға мүмкіндік береді.

Жартылай өткізгіш нанокристалдар кванттық эффект әсері салдарынан көлемдік аналогтеріне қарағанда түрлі оптикалық қасиеттерге ие. Нанокристалдардың өлшемдерінің азаюы кезінде оптикалық жұтылу жоғары энергияларға өтеді. Органикалық молекулалар, полимерлер және бейорганикалық байланыстар сияқты беттік дефекттерді жою үшін нанобөлшектер үшін қорғаушы қабатты қолданады. Беті нанокристалдарының тыйым салынған зонасы өте жоғары болатын бейорганикалық ядро/қабықша типті материалдармен жабылған (сыртынан) нанокристалдар беттік сәулеленбейтін рекомбинациясын эффективті жою салдарынан жоғары интенсивтілікке ие болатыны мәлім болған [1].

Кристалдық кремний электрониканың негізгі материалы болып табылатыны белгілі. Оның негізінде түрлі қондырғылар мен заманауи күн панельдері жасалады. Нанокұрылымдардың басты сипаттамасы наноөлшемді құрылымдардың геометриялық конфигурацияларын өзгерту арқылы қасиеттерін басқару болып табылады. Бүгінгі таңда кремний транзисторларының қлшемдері бірнеше нанометрлерге дейін жеткен және жаңа қондырғылар пайда болды (мысалы, бірэлектронды транзистор мен жүзбелі жад қақпасы (floating gate memory)), олар кремнийлік нанокристалдарды қосады [2].

Зерттеу әдісі. Бұл мақалада жартылайэмпирикалық кванттық-химиялық PM7 әдісін қолдану арқылы жасалған нәтижелер көрсетілген. Оның барлығы MORAC 2016 (Molecular Orbital PACkage) бағдарламалық кешенінде кремний нанокұрылымын модельдеу үшін іске асырылған. Эмпирикалық емес (*ab initio*) әдістер кванттық химияның айтарлықтай дәл және жүйелі есептеу әдістері болғанымен, соған қарамастан, оларды кең көлемде қолданылуын қиындататын түбегейлі кемшіліктері бар.

Жартылай эмпирикалық әдістер *ab initio* қарағанда келесідей маңызды ерекшеліктері бар:

- Екі электронды интегралдардың санын азайтатын ($\mu\nu|\rho\sigma$) жуықтау енгізіледі;
- Кейбір екіэлектронды интегралдар, $H_{\mu\nu} = \langle \varphi_\mu | \hat{H} | \varphi_\nu \rangle$ бір электронды интегралы және қабысу интегралдары $S_{\mu\nu} = \langle \varphi_\mu | \varphi_\nu \rangle$ есептелмей, тәжірибе деректеріне сәйкес бағаланады.

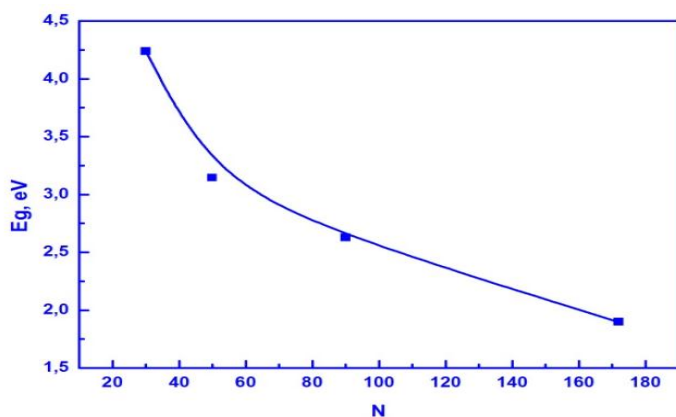
Қазіргі кезде PM7 әдісі NDDO әдістерінің ішінде, уақыт бойынша шыққан ең соңғы әдісі болып табылады. Бұл әдісте дисперсиялық әсерлесулерді сипаттау, сонымен қатар параметрлендіру кезеңінде қажетті түзетулерді енгізу есебінен сутектік және галогендік байланыстардың пайда болуы жетілдірілген. Ең алдымен, дисперсиялық әсерлесуде осындай түзетулерді қолдану ойы PM6 әдісінде сәтті тексерілген болатын. Кейінірек PM6-да сутектік және галогендік байланыстарды сипаттайтын түзетулер сәтті тексерілді. Көптеген артықшылықтарына қарамай, бұл түзетулерсіз PM6 әдісі ковалентті емес молекула аралық байланыстарды сипаттауда сәтсіздіктерге ұшырады, бірақ барлық элемент топтарына және өтпелі металдарға қосымша эмпирикалық түзетулердің енгізілуі жағдайды айтарлықтай жақсартты. PM7 әдісі PM6 жасалған қателіктерді болдырмайтындай етіліп арнайы жасалды. Бұл әдіс жақын байланыстар мен алыс байланыстардың жақсы келісім көрсетуге негізделген [3,4].

Модельдеу нәтижелері және оларды талқылау. 30; 50; 90; 130; 172; 188; 214 кремний (Si) атомдарынан тұратын кластерлер, тор тұрақтысы $a = b = c = 5,43 \text{ \AA}$ кубтық құрылым жасалды. Әр кремний атомы көршілес атомдардың тетраэдрлық қоршауы болып табылады. Si - Si арасындағы қашықтық $2,35 \text{ \AA}$ тең. Үш өлшемді 3D кластерлердің өлшемдері кестеде көрсетілген.

Кесте №1

Si_N нанокластерлерінің өлшемдері

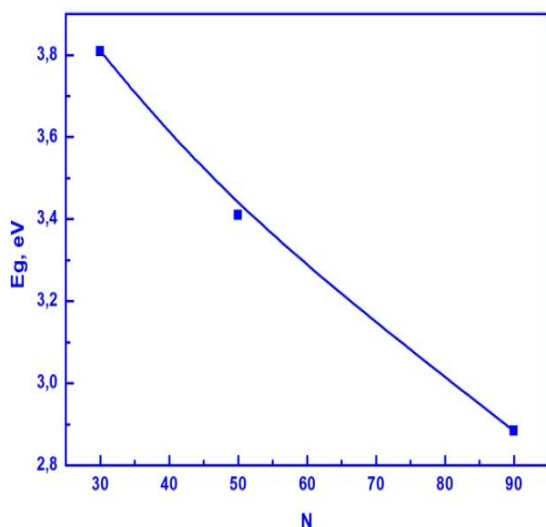
№	Кластерлер	Нанокұрылым өлшемі, Ангстрем		
1	Si ₃₀	14.87258	9.19484	7.02729
2	Si ₅₀	15.36034	15.36034	5.43070
3	Si ₉₀	16.29210	16.29210	16.29210
4	Si ₁₃₀	20.31982	18.35912	15.45604
5	Si ₁₇₂	24.88659	19.68796	15.03693
6	Si ₁₈₈	23.67187	23.63906	15.45604
7	Si ₂₁₄	29.74517	22.69660	17.08137



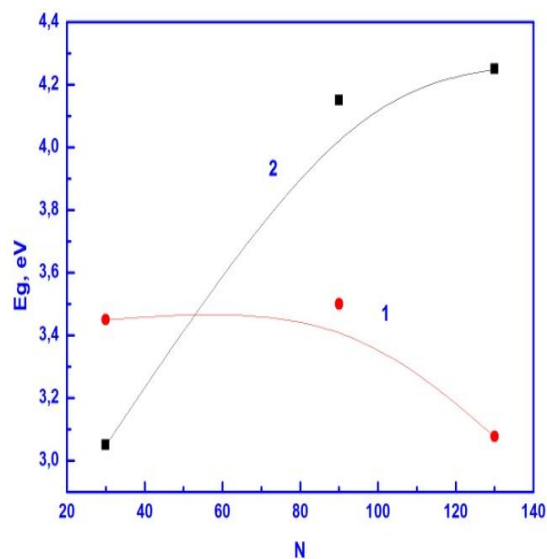
1 – сурет. Тыйым салынған зона енінің Si_N нанокластеріндегі атомдар санына тәуелділігі

Si_{30} нанокластерлері көлемі $\sim 1,12 \text{ nm}^3$ болатын екі элементар ұяшықтан тұрады. Тыйым салынған зонаның ені HOMO және LUMO энергияларының айырмасымен анықталады, бұл құрылым үшін оның мәні 4,238 эВ тең. Si_{50} нанокластері үшін тыйым салынған зона ені 3.144 эВ, Si_{90} - 2.626 эВ, Si_{172} - 1,899 эВ. Жалпы жартылай өткізгіштерде тыйым салынған зонаның ені 0,1 - 4 эВ екені белгілі. Бөлме температурасында кремний кристалының тыйым салынған зонасының ені 1,12 эВ құрайды. 1 – суретте Si_N нанокластерлерінің тыйым салынған зонасының N атомдар санына тәуелділігі көрсетілген.

Анық болғандай, тыйым салынған зонаның ені атомдар санының өсуі кезінде азаятындығы көрсетілген.



2 – сурет. Тыйым салынған зона енінің 1-вакансиялы Si_N нанокластерінің атомдар санына тәуелділігі



3 – сурет. Тыйым салынған зона енінің Si_NP_1 (2) және Si_NB_1 (1) нанокластеріндегі атомдар санына тәуелділігі

Біз құрылымның ортасында вакансия бар нанокластерлерді де зерттедік. Вакансиялар құрылымның атомдар санына байланысты өзгеріп отырды, неғұрлым атом саны көп болса, соғұрлым вакансия саны да көбейді. Мысалы, Si_{30} - 1 вакансия, Si_{50} - 1 және 2 вакансия, Si_{90} - 1,2 және 3 вакансиядан, Si_{130} - 1,2,3 және 4 вакансия, Si_{172} - 1,2,3 және 4, Si_{214} - 1,2,3,4,5 вакансиялардан құралған. 2 - суретте Si_N нанокластерінің тыйым салынған зонасының тәуелділігі 1 вакансиядан тұратын құрылым көрсетілген. Гарфиктен көрініп тұрғандай, тыйым салынған зонаның ені атом саны өскен сайын азаяды. Сонымен қатар, біз ішінде III

және V топ элементтері Р және В бар кремний нанокластерлерін де қарастырдық. Фосфор және бор атомдары тор ішінде орналасты. Енгізілген атомдар саны нанокластердің өлшеміне тәуелді. 3 - суретте 1 қисықта (қара түсті) Si_NP_1 атомдарынан тұратын кремний нанокластерінің тыйым салынған зонасы енінің атомдар санына тәуелділігі көрсетілген. Жалпы Р атомдарын енгізу тыйым салынған зонаның шамасын үлкейтеді. 3 – суретте 2 қисықта (қызыл түсті) Si_NB_1 атомдарынан тұратын кремний нанокластері көрсетілген. Байқағанымыздай тыйым салынған зонаның ені атомдар саны ұлғайған сайын азаюда.

Қорытынды. Бұл жұмыста түрлі кремний атомдарынан тұратын, сәйкесінше өлшемдері үлкен емес (1~2 нм) Si_{18} , Si_{30} , Si_{50} , Si_{90} , Si_{130} , Si_{172} , Si_{188} , Si_{214} кремний нанокластерлері модельденді. Кремний нанокластеріне вакансия енгізу, 3 және 5 топ элементтерімен ауыстыру сияқты модельдеулер жасалды. Модельдеу (есептеулер) нәтижелері жалпы атомдар санының көбеюі кезінде тыйым салынған зона енінің азаятындығын көрсетті. Кристалдық торға вакансия мен басқа элемент атомдарын енгізу торды деформацияға ұшырататын, тыйым салынған зонаның аздаған өзгерісіне ұшырататынын көрсетті.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Ремпель А.А., Квантовые точки для техники и медицины // Вестник уральского отделения РАН, 2010, №2 (32), стр.45-51
2. Ostraat, M.L.; De Blauwe, J.W.; Green, M.L.; Bell, L.D.; Brongersma, M.L.; Casperson, J.; Flagan, R.C.; Atwater, H.A. Appl. Phys. Lett. 2001, 79, 433.
3. Sparkle/PM7 Lanthanide Parameters for the Modeling of Complexes and Materials José Diogo L. Dutra , Manoel A. M. Filho , Gerd B. Rocha , Ricardo O. Freire , Alfredo M. Simas, and James J. P. Stewart
4. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters. Stewart JJ

УДК 541.182.023.4

УРАВНЕНИЕ ИНДИКАТРИС ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В АНИЗОТРОПНЫХ СРЕДАХ С МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ЭФФЕКТОМ (НА ПРИМЕРЕ КУБИЧЕСКОЙ И ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИММЕТРИИ)

Казбекова Асем

Студент 4-го курса Физико-технического факультета,
ЕНУ им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казакстан
Научный руководитель – С.К. Тлеуменов

Магнитоэлектрический эффект состоит в линейной связи между магнитным и электрическим полями в веществе, которая приводит к появлению в электрическом поле пропорциональной ему намагниченности. Этот эффект описывается членом в термодинамическом потенциале, линейном как по электрическому, так и по магнитному полям:

$$F_{\text{мэ}} = -\alpha_{ik} E_i H_k ,$$

где α_{ik} – несимметричный магнитоэлектрический тензор; E_i – тензор электрического поля; H_k – тензор магнитного поля.

При этом магнитоэлектрическая восприимчивость, или магнитоэлектрический тензор может быть представлен как

$$\alpha_{ik} = \frac{\partial^2 F_{\text{мэ}}}{\partial E_i \partial H_k}$$