



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

LCDS қосымшасында физика, ақпараттық жүйелер және информатика мамандықтарында оқитын студенттерге «Электр және магнетизм» пәні бойынша электрондық оқу құралын дайындауға болады. Бұл электрондық оқу құралында алты түрлі шаблондар (интерактивті, қайта қарау, ойын, оқу, тексеруден өткізу және сынып) қарастырылды. Интерактивті шаблондар қатары төрт, қайта қарау шаблондары төрт, ойын шаблондары екі, оқу шаблондары сегіз, тексеруден өткізу екі бөлімнен құралады, сонымен қатар сынып шаблондарына мәтінді, суретті және кестелерді фотобейне түрінде енгізуге болады. «Электр және магнетизм» пәні бойынша көптеген анимациялар ұйымдастыруға болады [3].

Зертханалық жұмыс тапсырмаларын ұйымдастыруда, оқытушы еңгізіп қойған тапсырмалардан студент өзіне берілген тапсырманы алып, қажетті ортада орындап файл түрінде қайтадан жүйеге еңгізеді.

Тест тапсырмалары жалпы тапсырмаларды құру бойынша құрылады. Содан кейін, құрылған файлда Тест тапсырмаларын еңгізу үшін, Тестті өңдеу бөліміне өтеміз.

Студенттің берген жауаптарының нәтижесі балл арқылы экранға шығады. Осы құрал негізінде студенттер курс бойынша қосымша теориялық материалдарды оқып үйрене алады. Зертханалық тапсырмалардың әдістемелік нұсқаларымен танысып, кейін тапсырмаларды орындауда пайдалана алуға үйренеді. Өз білімдерін тексеру үшін, тест сұрақтарына жауап бере отырып, білімдерін тексереді.

Аталған пән бойынша жасалынатын электрондық оқу құралын өз дәрежесінде қолдануды үйренген студенттер зерттеуге құштар, дүниені аз уақытта танып білетін, байланыс туралы жеткілікті меңгерген технология саласының білгірі болады. Сондықтан оқу сапасына жағымды әсер ететін электрондық оқу құралын физика сабағында пайдалану студенттердің физикаға деген қызығушылығын арттырудың және сабақтың қарқынды күшейтудің мықты құралы болып табылады.

Қолданылған әдебиеттер

1. «Қазақстан өз дамуындағы жаңа серпіліс жасау қарсаңында» Н.Ә.Назарбаев 01.03.2006ж
2. Исаков К. Т Давыдов В. В., Рубцов В. В., Крицкий А. Г., Психологические основы организации учебной деятельности, опосредованной использованием компьютерных систем. // Психологическая наука и образование. М., - 2010. № 2. С. 68-72.
3. Зайнутдинова Л. Х. Создание и применение электронных учебников (на примере общетехнических дисциплин).// Монография./ Астрахань: Изд-во ЦНЭП, - 2009.364 с.

УДК 524.83.

NaCl КРИСТАЛЫНДА ТҮЗІЛЕТІН РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАРДЫ КВАНТТЫ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Молданазарова Ұлсерік Сарсенбекқызы

ulyajan-9263@mail.ru

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Жалпы және теориялық физика кафедрасының ІІ-курс магистранты, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – Салиходжа Ж.М.

Қазіргі заманғы ғылым мен техника салаларының қарқынды дамуы конденсирленген күй физикасына физика-химиялық қасиеттері әр түрлі алдын-ала қойылған шарттарға сай болатын материалдарды жасау талаптарын қойып отыр. Қатты денелер негізінде жасалған өлшеуіш құралдарға әр түрлі орталарда сыртқы әсерлер болатындықтан олар барлық эксплуатациялық шарттарға сай болуы тиіс. Иондық кристалдар ХХ-ғасырдың екінші

жартысынан бастап люминесценттік лампаларда, плазмалық дисплейлерде, термолюминесценттік дозиметрлерде, сцинтилляциондық техникада және басқа да құрылғыларда жиі қолданыс табуда. Сондықтан қазіргі заманғы конденсирленген күй физикасының көкейкесті мәселелерінің бірі иондаушы сәулелер әсерінен иондық кристалдарда пайда болатын радиациялық ақаулардың түзілу процесін зерттеу болып табылады. Күрделі иондық кристалдардағы радиациялық ақаулардың түзілу және тұрақтану процестерін эксперименттік және теориялық тұрғыдан зерттеуде сілтілі-галоидты кристалдарды зерттеудегі әдістермен интерпретациялау кең қолданылуда.

Иондаушы сәуле түсірілген қатты дене көлемінде күрделі және екінші ретті ақаулардың жинақталу процесін және алғашқы радиациялық ақаулардың соққылы емес механизмдерін зерттеу үшін сілтілі-галоидты кристалдар бұрыннан келе жатқан моделді нысан болап табылады.

Сілтілі-галоидты кристалдарда алғашқы F - Н орталықтарының құрылу және тұрақтану механизмдері жақсы зерттелген. 40 К - 300К температура аралығында сәулелендірілген сілтілі-галоидты кристалдарда негізгі ақаулар – F- және X_3^- - орталықтары болып табылады. F- орталық экситон ыдыраған кезде, яғни байланысқан электрон мен кемтіктің қайта қосылуы кезінде пайда болады. Экситон ыдыраған кезде бөлінген энергия сілтілі-галоиды кристалл торының түйініндегі анионды түйінаралығына ығыстырып шағарады. Анион түйін аралығына шыққан кезде оның валеттік электроны бос орында қалып қояды, сөйтіп кристалдық торда түйінаралығына қыстырлған галоген атомы F- орталық және электрон қармаған бос орын пайда болады.

X_3^- – орталықтары екі Н-орталығының аниондық және катиондық вакансияларда түйіндік анионмен әсерлесуінен түзіледі. Ғылыми әдебиеттерде сәулелендірілген сілтілі-галоидты кристалдарда галоидтар агрегатизациясының екі бағыты талқыланады: а) X_3^- - орталығы екі Н-орталықтарды бірінен кейін бірін біріктіре отырып (X_2^- –молекулалар) X_5^- , X_7^- - орталықтарын құрайды; б) белгілі бір концентрациядан бастап (10^{18} 1/см³) X_3^- - орталықтарының статистикалық біртекті орналасуы мүмкін болмайды және X_3^- - орталықтарының кристалдың кейбір аймақтарында шоғырлануы байқалады. Эксперименттік мәліметтердің негізінде көрсетілген бағыттарға таңдау жасау қиын.

Соңғы жылдары ғылым мен техниканың қарқынды дамуы салдарынан әр түрлі кристалдардағы радиациялық ақауларды моделдеу үшін квантты-химиялық әдістер кең қолданыс табуда.

Қазіргі уақытта әр түрлі кристалдардағы радиациялық ақауларды бақылау үшін MNDO, AM1 және PM7 сияқты күрделірек жартылай эмперикалық квантты-химиялық әдістер пайдаланылады. Осы мақалада квантты-химиялық моделдеу жүргізу барысында осындай күрделі жартылай эмперикалық әдістерің ішіндегі MNDO әдісі қолданылды.

Жұмыстың негізгі мақсаты: Радиациямен сәулелендірілген NaCl кристалында F-Н жұбы мен X_3^- -орталықтарының түзілу процесін жартылай эмперикалық MNDO әдісін пайдалана отырып квантты-химиялық зерттеу және кристалдық қоршауды ескеріп моделдеу болып табылады.

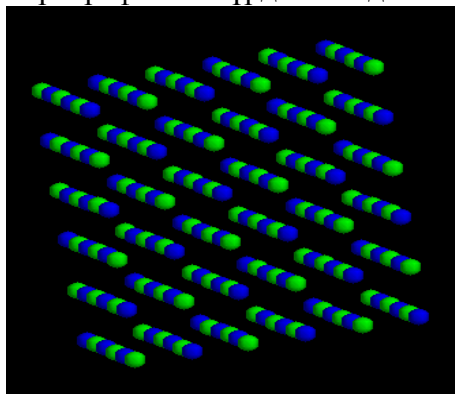
NaCl кристалы бетіне центрленген кубтық жүйеге жатады. Кристалдық торының параметрлері $a = b = 5.64 \text{ \AA}$, ал бұрыштары $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

NaCl кристалының құрылымы 108 катионнан және 108 анионнан тұратын жүйе ретінде алынды (1-сурет). Бұл жүйенің құрылымында ешқандай ақау байқалынбаған жағдайдағы жүйенің толық энергиясы -39322.27896 эВ болды.

NaCl кристалының құрылымын **Winmopac 7.21** бағдарламасында құрастыру барысында 108 Na, 108 Cl атомдарынан басқа 42 фиктивті атом пайдаланылды.

Жұмыстың негізгі мақсатына сәйкес осы құрастырылған 216 ионнан тұратын NaCl

кристалының моделінде F-Нжұбының түзілу процесі мен X_3^- - орталығының ыдырау процестері зерттелді және нәтижелері графликтік түрде алынды.

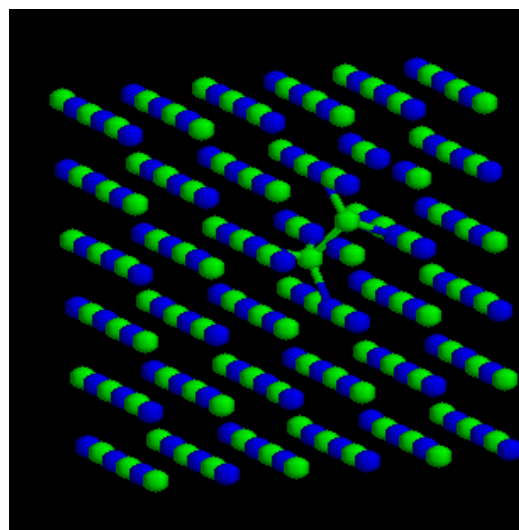
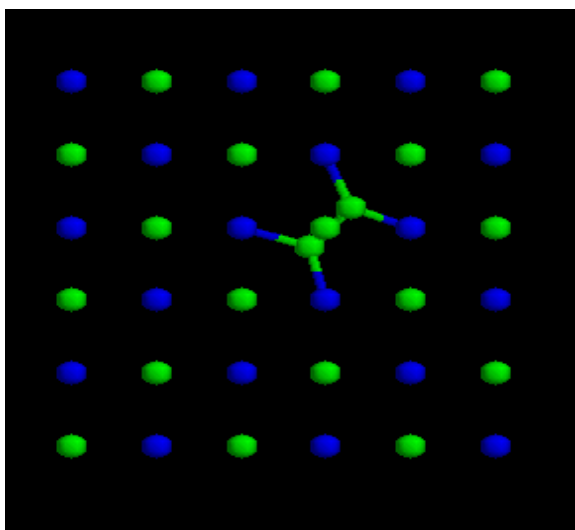


1-сурет. *NaCl кристалының құрылымы.*

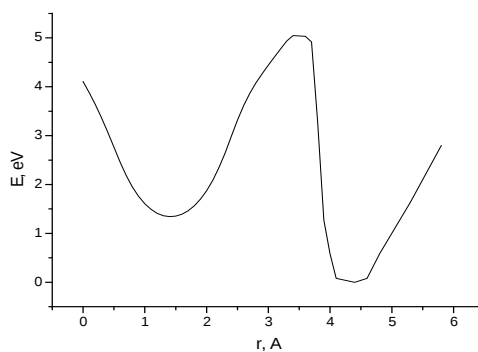
NaCl кристалында F-Н жұбының түзілуін модельдеу үшін ортаңғы кристалдық торда орналасқан бір Cl ионы (110) жазықтығында бір атомдық қатарға жоғары орналасқан катион аралық кеңістікке орналастырылды. Осыдан кейін анион (110) жазықтықта орналасқан екінші Cl ионына қарай [110] бағытында 0,05 - 0,2 Å қадаммен жылжытылды. Бұл процесс кезінде екінші Cl ионының барлық параметрлері оптимизацияланып отырды және бірінші анион жақындаған сайын екінші анион өздігінен [110] бағытында жылжып отырды. Осылайша, бірінші анионды жылжыту арқылы Cl_2^- - молекуласының немесе Н-орталығының түзілуін моделдедік. Бірінші анионның орнында электрон қармап алған аниондық ваканция, яғни F –орталығы түзілді. Осылай F-Н жұбының түзілу процесі моделденді. Бұл моделдің жалпы көрінісін 2-суреттен көруге болады.

NaCl кристалында осы процестер негізгі күйде моделденді және квантты- химиялық есептеулердің нәтижелері 3,4-суреттерде келтірілген. 3- суретте жүйенің толық энергиясының арақашықтыққа тәуелді графигі көрсетілген. Бұл графиктен F-Н жұбы түзілуі үшін шамамен $E_d = 4,3$ эВ –қа жуық энергия қажет екендігі көрінеді.

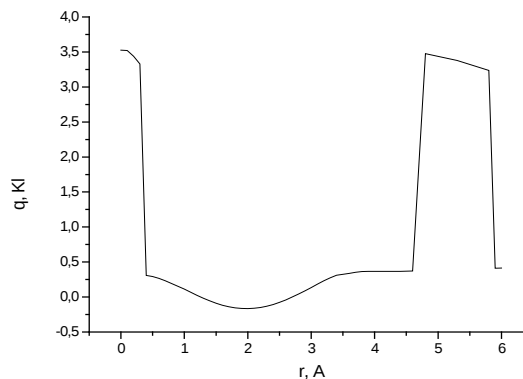
Ал 4-суретте келтірілген графикте жылжытылған атом заряды өзгерісінің арақашықтыққа тәуелділігі көрсетілген.



2-сурет. *NaCl кристалының негізгі күйінде түзілген F-Н жұбы.*



3-сурет. *NaCl* кристалында негізгі күйде *F-H* жұбының түзілуі кезіндегі жүйенің толық энергиясының арақашықтыққа тәуелді графигі.



4-сурет. *NaCl* кристалында негізгі күйде *F-H* жұбының түзілуі кезіндегі жылжытылған атом зарядының арақашықтыққа тәуелді графигі.

X_3^- - орталығының ыдырау процесін моделдеу

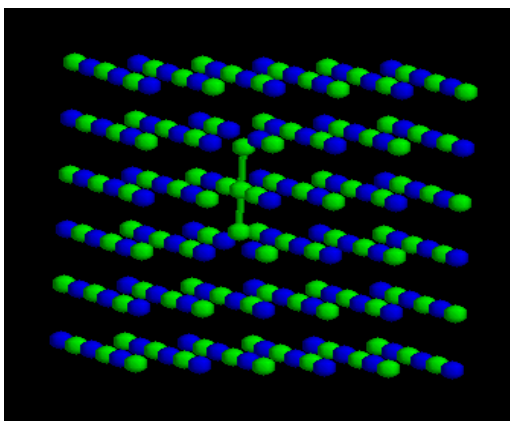
X_3^- - орталығының ыдырау процесінің моделдену кезеңдері:

1. Құрылымында ешқандай ақау жоқ идеал кристалда бір катиондық және бір аниондық ваканциялар жасалып, жүйенің толық энергиясының өзгерісі бақыланды, яғни толық энергияның мәні -38957.93864 эВ шамасына өзгерді. Бұл кезде ваканция маңайындағы атомдар тұрақты күйде ұсталынды, осыдан соң ваканция маңындағы атомдарды босату арқылы энергия мәнін анықтадық ол шама -38958.40989 эВ тең болды. Кейіннен X_3^- орталығын құруға қатысатын ваканциялармен бір жазықтықта жатқан үшінші галоид атомы босатылып жүйе энергиясы мен осы атомның зарядының өзгерісі анықталды, яғни $E_T = -38957.95333 \text{ эВ}$, $q = -0.1684$ ($q_0 = -0.1550$).

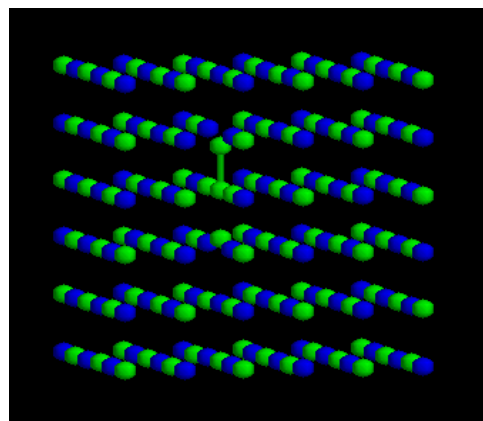
2. Осы ваканцияларға галоид атомдары орналастырылды және осы атомдар мен олардың жазықтығында жатқан үшінші галоид атомының барлық параметрлері босатылып, олардың геометриялық оптимизациясы бақыланды, яғни X_3^- орталығының түзілді. Бұл түзілу 5а – суретте көрсетілген.

3. Осыдан соң X_3^- орталығының ыдырау процесі жүргізілді, яғни 3а) Түзілген X_3^- орталығының екі атомы барлық параметрлері бойынша тұрақтандырылып, үшінші хлор ионы осы атомдарға жақын орналастырылды, кейіннен $[110]$ бағыты бойынша $0,05 \text{ Å}$ қадаммен кері қарай жылжытылды. Жылжыту арқылы өзінің бастапқы орнына келгенде алғашқы екі галоид атомы босатылып, үшінші атомды жылжыту одан әрі жалғаса берді. Осылайша Cl_3^- орталығының ыдырауын байқадық. 3б) Ыдырау нәтижесін бағалау үшін жүйенің толық энергиясы мен жылжытылған галоид атомы зарядының өзгерісін көрсететін график тұрғыздық. 6, 7-суреттерде жүйенің толық энергиясы мен жылжытылған хлор атомы зарядының арақашықтыққа тәуелділігін көрсететін графиктер келтірілген.

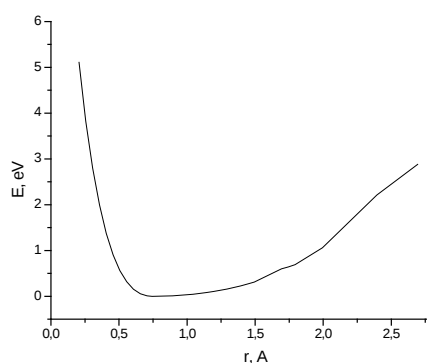
4. Кватты-химиялық моделденген бұл процестің нұскасын 5б-суреттен көруге болады. *NaCl* кристалындағы Cl_3^- орталығы Cl_2^- және Cl^0 фрагменттеріне негізгі күйде бөлінуі үшін қажетті энергия шамамен 3 эВ энергия қажет болатындығын 6-суреттен көреміз.



5а-сурет. X_3^- - орталығының түзілуі.

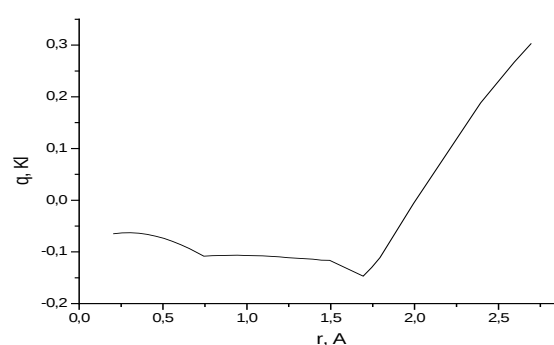


5б-сурет. X_3^- - орталығының ыдырауы.



6-сурет. $NaCl$ кристалында

негізгі күйде X_3^- - орталығының ыдырауы кезіндегі жүйенің толық энергиясының арақашықтыққа тәуелді графигі



7-сурет. $NaCl$ кристалында негізгі

күйде X_3^- - орталығының ыдырауы кезіндегі жылжытылған галоид атомы зарядының арақашықтыққа тәуелді графигі

ҚОРЫТЫНДЫ

Бұл жұмыста Winморас-7.21, МОРАС-2012 квантты-химиялық бағдарламалар пакетіндегі MNDO жартылай эмпирикалық әдісімен сәулелендірілген $NaCl$ кристалында пайда болатын радиациялық ақаулардың түзілу процесі моделденді. Сәулелендірілген сілтілі - галоидты $NaCl$ кристалында алғашқы радиациялық ақаулар - F-H жұбы түзіледі. 40-300K температуралық диапазонда радиациялық ақаулар F және X_3^- - орталықтары түрінде тұрақталады. Сондықтан, осы ақаулар квантты- химиялық жартылай эмпирикалық MNDO әдісімен моделденіп, пайда болу механизмдері анықталынды. Жұмыстың нәтижелерін былай тұжырымдауға болады.

- Квантты – химиялық әдістердің теориялық негіздері, MNDO жартылай эипирикалық әдісімен жұмыс істеудің үлгілері келтірілді;
- 108 катион және 108 анионнан тұратын $NaCl$ кристалының моделі құрастырылды. Осы кристалда F-H жұбының түзілуі және X_3^- - орталығының ыдырауы моделденді;

- NaCl кристалында F-H жұбының негізгі күйде түзілуі үшін шамамен $E_d = 4\text{эВ}$ энергия қажет екендігі анықталынды;

- NaCl кристалының негізгі күйінде X_3^- - орталықтарының ыдырауы үшін шамамен 3эВ энергиядан аз энергия жеткіліктілігі анықталынды.

Осы алынған нәтижелер ғылыми әдебиеттерде қарастырылған сілтілі- галоидты кристалдардағы радиациялық ақаулардың түзілуін зерттеуге арналған эксперименттік жұмыстарға қайшы емес.

Пайдаланылған әдебиеттер тізімі

1. Ч.Б. Лущик, А.Ч. Лущик «Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах». Москва, 1989г.
2. Алукер Э.Д., Лусис Д.Ю., Чернов С.А. «Электронные возбуждения и радиолуминесценция щелочно-галоидных кристаллов». Рига, 1979г.
3. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. «Основы кристаллофизики». Москва, 1979г.
4. Шаскольская М.П. «Кристаллография». Москва, 1984г.
5. Заградник Р, Полах Р. «Основы квантовой химии». Москва, 1979г.
6. Эверестов Р.А, Котомин Е.А, Ермошки А.Н, "Молекулярные модели точечных дефектов в широкощелевых твердых телах». РИГА, 1983г.
7. Захаров Ю.А., Невоструев В.А., Рябых С.М., Сафонов Ю.Н. Современное состояние радиационной химии неорганических твердых тел //Химия высоких энергий.- 1985.
8. Эверестов Р.А., Котомин Е.А., Ермошкин А.Н. Молекулярные модели точечных дефектов и широкощелевых твердых телах. /Физика твердого состояния. - Рига: Зинане, 1983.
9. Петрашен Н.М.,Абаренков И.В., Эверестов Р.А. Применение схемы Хартри-Фока для расчета электронных центров в сложных кристаллах. //Проблемы теоретической физики. - Л., 1974.
10. Эверестов Р.А., Ловчиков В.А. Электронная структура U -центров в кристалле KCl //Оптика и спектроскопия. 1977. Т.43. Вып.3..
11. Шлюгер А.Л., Котомин Е.А., Ермошкин А.Н., Дзелме Ю.Р., К расчету электронной структуры совершенных щелочно-галоидных кристаллов и дефектов полуэмпирическими методами //Изв.АН Латв.ССР, сер. физ. и техн. наук.- 1973, Вып. 3.
12. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. Л.: Химия. 1978.
13. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. /Под ред. Сигал Д. - М.: Мир, 1980.
14. Бактыбеков К.С. Люминесценция и радиационно-стимулированные процессы в кристаллах с комплексными анионами или катионами: Дис. Докт. физ.-мат наук. Караганда. 1996.
15. Салиходжаев Д.М.,Примова А.С.,Сыдыкова С.М.,Нуракыш Б. Квантово-химическое моделирование процессов образования радиационных дефектов в облученных кристаллах KCl, KI, KSO//Вестник АГУ-Сер.Физ.-мат, 1(7),2003.
16. Тезекеев С.М., Салиходжаев Д.М.,Нурахметов Т.Н.,Уалиев Г.У.,Сыдыкова С.М., Нуракыш Б. Экситонный механизм создания радиационных дефектов в облученном кристалле NaSO,KCl,KI,KSO// Вестник АГУ - Сер. Физ.-мат, №1(7), 2003.
17. Лущик Ч.Б., Гиндина Р.И., Ыйги Х.В., Плоом Л.А., Пунг А.А., Гийслер Э.С., Эланго А.А., Янсон Н.А.Распад электронных возбуждений на катионные френкелевские дефекты в щелочно-галоидных кристаллах.//Тр.ИФ АН ЭССР. - 1970.