

**Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі
«Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті» КеАҚ
«Қазақстанның физика- техникалық қоғамы» ЖШС**

**Министерство науки и высшего образования Республики Казахстан
НАО «Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева»
ТОО «Физико-техническое общество Казахстана»**

ҚАТТЫ ДЕНЕ ФИЗИКАСЫ

*XV Халықаралық ғылыми конференциясының материалдары
8-10 желтоқсан 2022 жылы*

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

*Материалы XV Международной научной конференции
8-10 декабря 2022 года.*

**Астана
2022**

УДК 538.9 (075.8)
ББК 22.37 я73
Ф50

Рекомендовано к изданию решением
Физико-технического общества Казахстана

Организационный комитет

Председатель: **Сыдыков Е.Б.**

Сопредседатели: **Курмангалиева Ж.Д., Кокетай Т.А.**

Члены международного оргкомитета: **Алиев Б.** (Казахстан), **Акылбеков А.Т.** (Казахстан), **Даулетбекова А.К.** (Казахстан), **Бахтизин Р.З.** (Россия), **Балапанов М.Х.** (Россия), **Донбаев К.М.** (Казахстан), **Ибраев Н.Х.** (Казахстан), **Кидибаев М.М.** (Кыргызстан), **Купчишин А.И.** (Казахстан), **Лисицын В.М.** (Россия), **Липилин А.С.** (Россия), **Мукашев К.М.** (Казахстан), **Ногай А.С.** (Казахстан), **Онаркулов К.Э.** (Узбекистан), **Плотников С.П.** (Казахстан), **Приходько О.Ю.** (Казахстан), **Скаков М.К.** (Казахстан), **Тайиров М.М.** (Кыргызстан), **Шаршеев К.К.** (Кыргызстан), **Шункеев К.Ш.** (Казахстан), **Яр-Мухамедова Г.Ш.** (Казахстан), **Лущик А.Ч.** (Эстония), **Попов А.И.** (Латвия), **Давлетов А.Е.** (Казахстан), **Дробышев А.С.** (Казахстан), **Иванов В.Ю.** (Россия), **Ильин А.Ю.** (Казахстан), **Токмолдин С.Ж.** (Казахстан), **Ибраев Н.Х.** (Казахстан)

Секретари конференции

Садыкова Б.М., Дауренбеков Д.Х., Жаңылысов К.Б., Әлібай Т.Т., Юсупбекова Б.Н., Ахметова А.С., Шамиева Р.К.

Ф50 Қатты дене физикасы - Физика твердого тела: Материалы XV Международной научной конференции – Астана: Изд-во ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, 2022. – 189 с.

ISBN 978-601-337-782-7

В сборнике опубликованы материалы докладов участников XV Международной научной конференции «Физика твердого тела».

УДК 538.9 (075.8)
БК 22.37 я73

ISBN 978-601-337-782-7

**Евразийский
национальный
университет
имени Л.Н. Гумилева, 2022**

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1. ТОЧЕЧНЫЕ И ПРОТЯЖЕННЫЕ ДЕФЕКТЫ В ШИРОКОЩЕЛЕВЫХ СИСТЕМАХ: ОКСИДЫ, НИТРИДЫ, КЕРАМИКИ, МИНЕРАЛЫ, ОРГАНИЧЕСКИЕ И ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ; СОБСТВЕННАЯ И ПРИМЕСНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Н.Х. Юлдашев, А.С. Байгазиев, М.Ч. Осканбаев, N.Kh. Yuldashev, A.S. Baigaziev, M.Ch. Oskanbaev	
Фотолюминесценция микрокристаллов в тонких пленках CdTe	7
А.В. Стрелкова, Д.А. Мусаханов, А. М.Жунусбеков, Ж.Т.Карипбаев, Г.К. Алпысова, Т.Э. Көкөтай	
Морфология синтезированной керамики BaF ₂	10
В.И. Корепанов, Г. Гэ, Е.Ф. Полисадова	
Импульсная катодолюминесценция кристаллов LiF-WO ₃ и сопутствующие процессы	14
K.Sh. Shunkeyev, A.S. Tilep, Sh.Zh. Sagimbayeva, Zh.K. Ubayev	
Exciton-like formation in a sodium field in KCl:Na crystal with lowering lattice symmetry	15
Н. Райымкул кызы, А.С. Ганыева, У.К. Мамытбеков, М.М.Кидибаев, К.Шаршеев	
Низкотемпературная рентгено- и термостимулированная люминесценция кристаллов KNaSO ₄ :Cu	16
Ж.С. Жилгильдинов, В.М. Лисицын, Ж.Т. Карипбаев, А.М. Жунусбеков, А. Тулеуов	
Зависимость эффективности люминесценции иаг:се керамики, полученной радиационным синтезом, от предыстории прекурсоров	18
К.К. Кумарбеков, В.М. Лисицын, Т.Э. Көкөтай, Н. Қашкен, Ұ. Аман	
Радиациялық өрісте MgO оксидті оптикалық керамиканың синтезі	21
Т.Т. Әлібай, Д.А. Төлеков, Р.К. Шамиева, А.С. Нурпеисов, Ш. Рыскелді, Қ.Мекебай	
Люминесцентные характеристики Na ₂ SO ₄ Допированного редкоземельным ионом Dy ³⁺	23
Д.А.Төлеков, Т.Т. Әлібай, Р.К. Шамиева, А.С. Нурпеисов	
Электронно-дырочные центры захвата в уф облученном Li ₂ SO ₄ -Mn	26
Р.К.Шамиева, Т.Т.Әлібай, Д.А.Төлеков, А.С.Нурпеисов, А.А.Қабдулқак	
Электронно-дырочные центры захвата в K ₂ SO ₄ -NO ₃ ⁻	29
Б.Н. Юсупбекова, А.Ж. Кайнарбай, Д.Х. Дауренбеков, К.Б. Жанылысов, Б.М. Садыкова, А.С. Ахметова, С.Пазылбек	
Электронно-дырочные центры захвата в кристаллах LiNaSO ₄ :Cu и LiNaSO ₄ :Cu, Mg	32
А.К. Арыков, К. Хайдаров	
Металлизация монокристаллов синтетического алмаза адгезионно-активными элементами: Ti и Co	37
Ы. Ташполотов, Э. Садыков, Т.К. Ибраимов	
Создание наноструктурных тампонажных цементов на основе минерально-сырьевых ресурсов кыргызской республики	40

СЕКЦИЯ 2. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, РЕЛАКСАЦИЯ НОСИТЕЛЕЙ, ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, УПОРЯДОЧЕНИЕ, ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ, ПРИМЕСИ С МЕЛКИМИ И ГЛУБОКИМИ УРОВНЯМИ, СТРУКТУРНЫЕ ДЕФЕКТЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

V.A. Kalytka, Z.K. Vaimukhanov	
The influence of the proton quantum tunneling at kinetic phenomena in proton semiconductors and dielectrics	46
К.Э. Онаркулов, А.И. Зокиров	
Эффект аномального фотонапряжения в полупроводниковых поликристаллических структурах типа A ^{II} B ^{VI}	49
N.E. Alimov, J.V. Vaitkus, S.M. Otajonov	
Effect of surface recombination on the photoconductivity of CdTe nanocrystalline films with deep impurity levels	51

З. Хайдаров, Б.З. Хайдаров	
Исследование фотографического процесса в газоразрядной ячейке	54
А.И. Зокиров, А.Ж. Кайнарбай, К.Э. Онаркулов, С.М. Зайнолобидинова	
Исследование фотоэлектрических свойств пленочных структур CdTe	57
Н.К. Касмамытов, А.Ж. Календеров, К.М. Макаева, К.А. Ласанху	
Технология, структура и свойства высоковольтной фарфоровой керамики на основе сырья месторождений Кыргызской Республики	59
С.К. Тлеукенов, А.Б.Төлегенова, В.Л.Пазынин	
Генерация ТМ волн на границе кристалла класса 4m2 с магнитоэлектрическим эффектом волной те поляризации	60
И.Н. Муллагалиев, Т.Р. Салихов, Р.Б. Салихов	
Фототранзисторы на основе тонких пленок производных фуллерена со светочувствительным веществом	62
Д.Н. Какимжанов, Б.К. Рахадиллов, Ю.Н. Тюрин, О.В. Колисниченко	
Влияние импульсно-плазменной на триболгические свойства детонационных покрытия на основе Cr ₃ C ₂ -NiCr	63
А.Р. Курбангулов, Н.Н. Биккулова, Г.Р. Акманова, А.Х. Кутов	
Фазовые переходы в теллуридах меди	65
С.К. Тлеукенов	
Метод матрицанта. Единое описание упругих и Электромагнитных волновых процессов в анизотропных средах	68
А.К. Утениязов, Т.Сапарбаев, Э.С. Есенбаева, М.Т.Нсанбаев	
Вольтамперная характеристика структуры Al-Al ₂ O ₃ -pCdTe-Мо в прямом направлении тока	69
А.Р. Курбангулов, Н.Н. Биккулова, Д.И. Сафаргалиев, Г.Р. Акманова, А.Х. Кутов	
Расчет зонной структуры теллурида меди cu _{1,75} te в макро- и наносостоянии	72
Д.И. Сафаргалиев, А.Д. Давлетшина, Н.Н. Биккулова, Г.Р. Акманова, И.И. Ганеев	
Зонная структура соединений CuCrX ₂ (X = S, Se)	75
Д.И. Сафаргалиев, А.Д. Давлетшина, Н.Н. Биккулова, Г.Р. Акманова, Д.В. Насибуллин	
Химическая связь в соединениях CuCrX ₂ (X = S, Se)	76
D.Khajibaev, K.Nurimbetov, B.Ya.Yavidov	
On thickness dependence of T _c OF La _{2-x} Sr _x CuO ₄ films	78
A. Jalekeshov, K. Nurimbetov, B. Ya.Yavidov	
On doping dependence of T _c and $\partial T_c / \partial p_i$ (i = a, b, c) of cuprates	81

СЕКЦИЯ 3. ФАЗОВЫЕ И СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ, МОДИФИКАЦИЯ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

А.Ж. Миниязов, Е.А. Кожухметов, М.К. Скаков, Т.Р. Туленбергенов, И.А. Соколов	
Деградация структуры и свойств карбидных поверхностных слоев вольфрама в условиях плазменного воздействия	84
Д.Р. Байжан, А.Ж.Жасулан, Ж.Б.Сагдолдина, К.Д. Орманбеков, Д.Б. Буйткенов, Р.К. Кусаинов	
Микродуговое окисление титана в электролит-суспензиях	87
Б.М. Ахметгалиев, К.С.Назаров, М.Х. Балапанов, К.А. Кутербеков, Р.Х. Ишембетов, М.М. Кубенова	
Исследование фазовых переходов в нанокристаллических сульфидах меди Li _x Cu _{2-x} S (x=0.10, 0.16, 0.18) методом дифференциальной сканирующей калориметрии	89
М.И. Маркевич., Д.Ж. Асанов	
Воздействие лазерного излучения на фотомагнитные материалы на основе кремния легированного примесями	91
Б.К. Рахадиллов, Д.Р. Байжан, Н.Е. Бердімуратов, Р.С. Кожанова, З.А. Сатбаева, Л.Б. Баятанова	

Структурно-фазовое состояние среднеуглеродистых сталей после электролитно-плазменной обработки	94
Б.К. Рахадиллов, Н. Мұқтанова, А.Е. Кусайнов, Д.Н. Кәкімжанов Получение износостойкого покрытия WC-10Co-4Cr методом высокоскоростного газопламенного напыления	97
Д.Б. Бұйткенов, А.Б. Нәбиолдина, Н.М. Магазов, Ж.С. Тұрар Получение многослойных металлокерамических покрытий методом детонационного напыления	100
С.К. Тлеукиенов, М.С. Токашева, В.Л. Пазынин Возбуждение волн ТЕ поляризации на границе моноклинного кристалла при отражении ТМ волн	103
Қ.Ә. Қонысов, А.Е. Садыкова, А. Аужанова, Н.Х. Ибраев TiO ₂ /rGO/Ag нанокөмпозитінің фотокаталитикалық белсенділігін бояғышты фотодеградациялау әдісімен зерттеу	104
Д.К. Ескермесов, Е.Е. Табиева, З.Е. Арингожина, С.А. Пазылбек, Ж.Т. Төлеуханова Морфология поверхности и физико-механические свойства Ni-Cr-Al покрытий полученных детонационным распылением при импульсно-плазменной обработке	107

СЕКЦИЯ 4. НАНОТЕХНОЛОГИИ И НАНОМАТЕРИАЛЫ

Р.Б. Салихов, А.Д. Остальцова, Т.Р. Салихов Полимерные тонкопленочные химические сенсоры	110
S. Pazylbek, A. Kareiva, T. Nurakhmetov, D. Karoblis, D. Vistorskaja A. Zarkov Novel co-substituted yttrium gallium garnets	112
Т.И. Шарипов, Д.Ш. Кудояров, Р.Р. Гарафутдинов, И.Н. Сафаргалин Электропроводность специфических олигонуклеотидов	112
Т.Т. Юмалин, Р.Б. Салихов Тонкопленочные структуры на основе углеродных нанотрубок в составе эпоксидных смесей	115
К.С. Рожкова, А.К. Аймуханов, К.Т. Абдрахман, А.М. Абдигалиева Влияние среды на морфологию полимера PEDOT:PSS	118
И.Н. Сафаргалин, Р.Б. Салихов Тонкие пленки новых производных пани и влияние морфологии на их свойства	120
Д.А. Толеков, Д.Ш. Кудояров, Р.З. Бахтизин, Т.Н. Нурахметов, Т.И. Шарипов Изучение биомолекул с помощью сканирующей зондовой микроскопии	122
Д.А. Темирбаева, Н.Х. Ибраев Ag және Au Плазмондық нанобөлшектерінің ксантен бояғышының люминесценттік қасиеттеріне әсері	124
А.Б. Демесбек, А.С. Кенжебекова, Д.Р. Ташкеев, А.А. Баратова Исследование фрактальных свойств морфологических изменений тканей в нанометровом масштабе	126
Г.Е. Сагаева, А.А. Баратова, А. Мирзо, Р.К. Ниязбекова, Д. М. Шарифов, Ж. А. Бегайдарова, А. А. Абдигапар, Ж. Сыздыкова Исследование спектрофотометрических и люминесцентных свойств образцов углеродных нанокөмпозитных полимерных материалов	129
Э.Ж. Алихайдарова, Н.Х. Ибраев, Е.В. Селиверстова Влияние локализованного плазмонного резонанса металлических наночастиц на структурные, оптические и оптоэлектронные свойства пленок оксида графена	132
N.Kh. Ibrayev, E.V. Seliverstova Plasmon-induced photophysical processes in molecular media	134
Б.М. Сатанова, Г. Ә.Қаптағай, Ф.У. Абуова Күшті электронды корреляциясы бар гибриді графен-оксидті 2d материалдар	138
Д.Т. Жеңіс, А.Б. Құманова, М.Ш. Салауатова Ядролық медицинаның қазіргі кездегі мүмкіндіктері және болашағы	140
А.Е. Канапина, Н.Х. Ибраев, Е.В. Селиверстова, А.А. Ищенко Влияние плазмонного резонанса наночастиц металлов на внутримолекулярные электронные переходы в молекулах полиметиновых красителей различной ионности	142

А.Н. Мочалов, Д.Ш. Кудояров, Т.И. Шарипов Современное состояние исследований олигонуклеотидов методами зондовой микроскопии	145
Г.С. Аманжолова, Н.Х. Ибраев, Е.В. Селиверстова S, N- еңгізілген көміртекті нүктелердің плазмон-күшейтілген люминесценциясы	146
А.С. Ахметова, А.Ж. Қайнарбай, Д.Х. Дауренбеков, Б.Н. Юсупбекова, А.К. Оспанова, Б.Ә. Дүйсенбай Влияние длин лиганд на формирование и рост нанопластин теллурида кадмия	149
Д.М. Шарифов, Р.К. Ниязбекова, Г.М. Мухамбетов, В.Н. Михалченко, Ж.А. Бегайдарова, М.А. Серекпаева Технология получения и перспективы развития нанокompозитных материалов на полимерной основе	152
У. М. Кабылбекова, Г. И. Мухамедрахимова, К. У. Мухамедрахимов Принцип использования квантовых точек для диагностики и лечения злокачественных опухолей	155

СЕКЦИЯ 5. ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ АЛЬТЕРНАТИВНОЙ И ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

А. С. Ногай, А.А. Ногай, А.А. Буш, Д.Е. Ускенбаев, А.Б. Утегулов Проблемы повышения эффективности натрий ионных аккумуляторных батарей и пути их решения	159
А.А. Ногай, А.А. Буш Способы повышения параметров пьезоэлектрических генераторов путем модификации пьезоэлектрической керамики	162
Е.А. Кожаметов, А.Ж. Миниязов, А.С. Уркунбай Микроструктурная стабильность двухфазного (O+B2) сплава системы Ti-25Al-25Nb (АТ.%) в процессе термоциклирования в среде водорода	165
Н. В. Ермилов, Н. Н. Биккулова Скрининг перспективных термоэлектрических халькогенидов	168
Т.М. Сериков, Е.В. Селиверстова, А.Е. Садыкова, Қ. Қонысов, Н.Х. Ибраев Влияние наночастиц серебра на фотокаталитическую активность нанокompозита TiO ₂ /rGO	169
Д.Д.Айдарова, Г.Т. Бейсембаева, Т.М. Сериков, А.С. Балтабеков Влияние удельной поверхности нанотрубок TiO ₂ на ее фотокаталитическую активность	171

СЕКЦИЯ 6. СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКЕ

Н.И.Темиркулова, А.Ә.Мырзақұлов Ускоренное обучение элементам математического анализа в курсе физики средней школы	174
С. Нұрқасымова., А.Б.Жаныс Самостоятельная работа студентов как средство повышения эффективности учебной деятельности по физике	177
Б.Е. Рахымбаева, Г.М. Аралбаева, Р.Н. Сулеймен, М.Р. Кушербаева Физика пәнінен сапалы есептерді шығару арқылы орта буын оқушыларының сыни ойлауын дамыту	179
Г.Е.Сагындыкова, П.У.Баймишова Физика мен медицинаның интерграциясы негізінде оқушылардың қызығушылығын дамыту	182
Э.К.Кожабекова, Ж.К.Ермекова Физика пәнін музыкамен байланыстырып оқыту жүйесі	185
Ж. К. Ермекова, Р. Серікбол, Н. Муграж, А. Омеркулов, Д. Саяхат Болашақ физика мұғалімдерінің кәсіби құзыреттілік деңгейін арттыру жолдары	187

**СЕКЦИЯ 2. ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, РЕЛАКСАЦИЯ
НОСИТЕЛЕЙ, ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, УПОРЯДОЧЕНИЕ, ПОВЕРХНОСТНЫЕ
ЯВЛЕНИЯ, ПРИМЕСИ С МЕЛКИМИ И ГЛУБОКИМИ УРОВНЯМИ,
СТРУКТУРНЫЕ ДЕФЕКТЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ**

UDC 539.2+537.226

**THE INFLUENCE OF THE PROTON QUANTUM TUNNELING AT KINETIC
PHENOMENA IN PROTON SEMICONDUCTORS AND DIELECTRICS**

V.A. Kalytka¹, Z.K. Baimukhanov²

¹Abylkas Saginov Karaganda Technical University, Karaganda, Kazakhstan

²L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Hydrogen bonded crystals (HBC) mineralogically classified as layered crystals (layered silicates, crystalline hydrates), by electrophysical properties determined as *proton semiconductors* and dielectrics (PSCD) [1,2]. Of considerable scientific and technical interest is the use of thin films of ferroelectrics with hydrogen bonds (KDP, DKDP) in the development of memory elements for non-volatile high-speed memory devices characterized by anomalously high values of residual polarization and relaxation time (up to 10 years) and high thermal and mechanical stability [3]. According to the results of recent studies, of great scientific interest are theoretical studies of nonlinear polarization effects that manifest themselves in dielectrics with an ion-molecular type of chemical bonds (in particular, in HBC) in the ultralow temperature range (1-10 K) in weak fields (100-1000 kV / m) and in the ultrahigh temperature range (550-1500 K) in strong fields (10-100 MV/m) [2].

The *purpose* of given paper is to develop a *rigorous* (in terms of the structure of Hamiltonian and its properties) quantum-mechanical model in the form of solutions of the nonlinear quantum kinetic equation that describes, together with the Poisson equation, in order to reveal the effects of tunneling transitions of relaxators (in HBC, protons) to the theoretical temperature spectra of the density of the thermally stimulated depolarization current $J_{\text{TCDP,th}}(T)$ and dielectric loss tangent $\text{tg} \delta_{\text{th}}^{(\omega)}(T)$ in a wide range of field parameters (100 kV/m - 100 MV/m) and temperatures (1-1500 K) [1,2].

The *physical model* of *proton conductivity* and proton-relaxation polarization in HBC is the ensemble of non-interacting protons (ideal proton gas), moving in one-dimensional potential image (field of hydrogen bonds in HBC) $W_{(c;[H^+])}(x)$ with a parabolic shape perturbed by external electrical field strength $E(t)$, distributed by energy levels of quasi-discrete degenerate (by parameters n, s) energy spectra $E_{n,s}^{(0)}$. The calculating of quantum transparency for proton with energy $E_{n,s}^{(0)}$ tunneling through perturbed by nonstationary electrical field $E(t)$ potential barrier

$W_{(c;[H^+])}^{(\pm)}(x) = U_0 \left(1 - \frac{4x^2}{\delta_0^2} \right) \pm |\Delta U|$ in the WKB approximation given us $D^{(\pm)}(U_0 \pm |\Delta U|; E_{n,s}^{(0)}) = \exp \left(- \frac{\pi \delta_0 \sqrt{m} (U_0 \pm |\Delta U| - E_{n,s}^{(0)})}{\hbar \sqrt{2U_0}} \right)$ [2]. Here $|\Delta U(t)| = \frac{qE(t)a}{2}$ small correction (in

range of weak electrical fields at frequencies of an alternating field distributed in the radio frequency range) to potential $W_{(c;[H^+])}(x)$; m, q – proton mass and charge; a – crystal lattice parameter; δ_0 , U_0 – potential barrier width and height (activation energy) for the proton;

$E_{n,s}^{(0)} = E_n^{(0)} + \frac{2E_0^{(0)}}{\pi} \sqrt{D(U_0; E_n^{(0)})} \cos \left(\frac{\pi s}{N_w + 1} \right) -$ transformed by quantum tunneling into the n-th energy

band (zone) with numbers from $s=1$ to N_w , degenerate energy spectrum of the proton, where N_w – full number of potential wells in the model [1]; $E_n^{(0)}$ – energy levels of the proton localized in the

$$D(U_0; E_n^{(0)}) = \exp\left(-\frac{\pi\delta_0\sqrt{m}(U_0 - E_n^{(0)})}{\sqrt{2}U_0}\right) -$$

isolated potential well (nondegenerate energy spectrum);

quantum transparency for the proton with $E_n^{(0)}$ energy levels, where $E_0^{(0)} = \frac{1}{2}\omega_0$,

$E_{n_{\max}}^{(0)} = \omega_0\left(n_{\max} + \frac{1}{2}\right) < U_0$; ω_0 – is the circular frequency of proton oscillations in the potential well;

n_{\max} – the maximum number of energy levels in the potential well.

Averaging the nonstationary quantum transparencies $D^{(\pm)}(U_0 \pm |\Delta U|; E_{n,s}^{(0)})$ over the unperturbed energy levels $E_{n,s}^{(0)}$ using the quantum canonical Gibbs distribution and introducing an additional

dimensionless small parameter $\eta(t) = \Lambda \frac{|\Delta U(t)|}{U_0} < 1$, where $\Lambda = \frac{\pi\delta_0\sqrt{m}}{\sqrt{2}}\sqrt{U_0}$, we arrive at the temperature dependence for the quantum mechanical diffusion coefficient [2]

$$D_{diff,turn}(T) = \frac{v_0 a^2}{2} \times \frac{\langle D^{(-)}(U_0 \pm |\Delta U|; E_{n,s}^{(0)}) \rangle + \langle D^{(+)}(U_0 \pm |\Delta U|; E_{n,s}^{(0)}) \rangle}{2} = D_0 \times D_{quant}^{(0)}(T) \times \text{ch}(\eta(t)) \quad (1)$$

In (1) $D_0 = \frac{v_0 a^2}{2}$, v_0 – natural frequency of oscillations of the proton in potential well; averaged by energy levels $E_{n,s}^{(0)}$ stationary quantum transparencies has the form

$$D_{quant}^{(0)}(T) = \langle D(U_0; E_{n,s}^{(0)}) \rangle \approx \frac{\sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_w} \exp\left(-\frac{E_{n,s}^{(0)}}{k_B T}\right) \times D(U_0; E_{n,s}^{(0)})}{\sum_{n=0}^{n_{\max}} \sum_{s=1}^{N_w} \exp\left(-\frac{E_{n,s}^{(0)}}{k_B T}\right)} \quad (2)$$

In the case of a non-degenerate energy spectrum $E_{n,s}^{(0)} \rightarrow E_n^{(0)}$, assuming non-stationary

$$D(U_0 \pm |\Delta U|; E_n^{(0)}) = \exp\left(-\frac{\pi\delta_0\sqrt{m}(U_0 \pm |\Delta U| - E_n^{(0)})}{\sqrt{2}U_0}\right)$$

quantum transparency form, we transform (1) to the

$$D_{diff,turn}^{nondegenerate}(T) = D_0 \times D_{quant;nondegenerate}^{(0)}(T) \times \text{ch}(\eta(t)) \quad (3)$$

where $D_{quant;nondegenerate}^{(0)}(T) = \langle D(U_0; E_n^{(0)}) \rangle = \exp(-\Lambda) \times \sqrt{\frac{\xi_2}{\xi_1}} \times \frac{(1-\xi_1)(1-\xi_2^{n_{\max}+1})}{1-\xi_2}$; $T_{cr} = \frac{\sqrt{2}U_0}{k_B \pi \delta_0 \sqrt{m}}$ –

critical temperature [1], separating the zones of thermally activated ($T > T_{cr}$) and quantum transitions ($T < T_{cr}$) of protons during the polarization of crystals with hydrogen bonds (HBC); $\xi_1 = \exp(-\beta)$,

$\xi_2 = \exp(-\alpha)$; $\beta = \frac{\omega_0}{k_B T}$, $\alpha = \frac{\omega_0}{k_B T} \left(1 - \frac{T}{T_{cr}}\right)$. Since $\omega_0 = \sqrt{\frac{8U_0}{m\delta_0^2}}$, then $\frac{\alpha-\beta}{2} = -\frac{\omega_0}{2k_B T_{cr}} = -\pi$

, $\sqrt{\frac{\xi_2}{\xi_1}} = \exp\left(-\frac{\alpha-\beta}{2}\right) = \exp(\pi)$ and $D_{quant;nondegenerate}^{(0)}(T) = \exp(\pi) \times \exp(-\Lambda) \times \frac{(1-\xi_1)(1-\xi_2^{n_{\max}+1})}{1-\xi_2}$.

Hence, at $T \rightarrow 0$ we have $D_{quant;nondegenerate}^{(0)}(0) \approx \exp(\pi) \times \exp(-\Lambda)$, which is $\exp(\pi)$ times higher than in $D_{quant;q,-cladss}^{(0)}(0) \approx \exp(-\Lambda)$ [2,3].

For protons with a degenerate energy spectrum $E_{n,s}^{(0)}$, according to (1),(2), we obtain

$$D_{diff,tunn}^{degenerate}(T) = D_0 \times D_{quant;degenerate}^{(0)}(T) \times \text{ch}(\eta(t)) \quad (4)$$

Here $D_{quant;degenerate}^{(0)}(T) = D_{quant}^{(0)}(T) = \langle D(U_0; E_{n,s}^{(0)}) \rangle$.

Results. The shift of the theoretical maximum of stationary quantum transparency for the protons from the low-temperature range ($T=55$ K) with the amplitude of 0,11 (the model of a non-degenerate proton energy spectrum, line no.1 for function $D_{quant;nondegenerate}^{(0)}(T)$ in Fig. 1) towards the high temperature range ($T=150$ K) with an increase in amplitude to 0,14 (the model of a degenerate proton energy spectrum, line no. 2 for function $D_{quant;degenerate}^{(0)}(T)$ in Fig. 1) indicates a significant influence even the small changes in numerical values of the parameters of the crystal potential image for the proton (U_0, δ_0, v_0, a) and crystal thickness (expressed through a parameter N_w) to the proton tunneling probability, the structure and properties of the proton energy spectrum, which is most effective for nanosized HBC layers ($d=1-10$ nm) in a wide temperature range (50–1550 K).

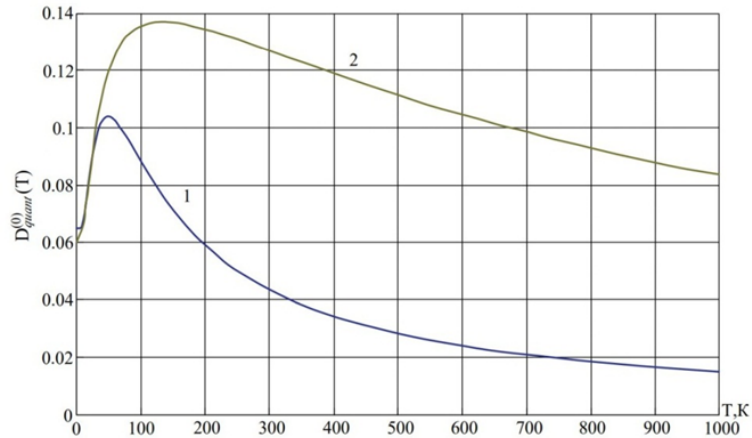


Fig. 1. Dependences of the stationary quantum-mechanical transparency coefficient $D_{quant}^{(0)}(T)$ on temperature (for a proton) in nanoscale layers of HBC

Conclusions: 1) In hydrogen bonded crystals (HBC), quantum tunneling of protons is the mechanism that determines the regularities in the formation of volume-charge polarization in a wide range of field parameters and temperatures; 2) The band (zone) structure of quasi-discrete energy spectrum of relaxators (protons) in nanosized HBC layers (1-10 nm) causes a shift of theoretical maximum of stationary quantum transparency towards the high temperature range (150-550 K) with an increase in the amplitude of the maximum from (0,05-0,1) up to (0,12-0,25), which indicates a significant in the role of quantum effects in HBC in a wide temperature range (50-1550 K).

References

1. Kalytka V.A., Korovkin M.V. Quantum effects at a proton relaxation at low temperatures // *Russian Physics Journal*, vol. 59, No.7, November, 2016. – pp. 994- 1001. DOI: 10.1007/s11182-017-1027-5.
2. Kalytka V. A. The mathematical description of the nonlinear relaxation of polarization in dielectrics with hydrogen bonds//*Bulletin of Samara University. Natural science series*. 2017, Vol. 23, No. 3. - pp. 71-83. DOI: 10.18287/2541-7525- 2017-23-3-71-83.
3. Kalytka V.A. Nonlinear kinetic phenomena under polarization in solid dielectrics //*Bulletin of Moscow Region State University. Series: Physics and Mathematics*. 2018, No. 2. - pp. 61–75. DOI: 10.18384/2310-7251-2018-2-61-75.