

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**

№4(125)/2018

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, 2018
Astana, 2018

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

Бас редактордың орынбасары

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

Редакция алқасы

Алдонгаров А.А.	PhD (Қазақстан)
Балапанов М.Х.	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
Бахтизин Р.З.	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
Гиниятова Ш.Г.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Даулетбекова А.Қ.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Ержанов Қ.К.	ф.-м.ғ.к., PhD (Қазақстан)
Жұмаділов Қ.Ш.	PhD (Қазақстан)
Здоровец М.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Қадыржанов Қ.К.	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Кайнарбай А.Ж.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Кутербеков Қ.А.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Лушик А.Ч.	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Эстония)
Морзабаев А.К.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Мырзақұлов Р.Қ.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Нұрахметов Т.Н.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Сауытбеков С.С.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Тлеукенов С.К.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Усеинов А.Б.	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: 20 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

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

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

Responsible secretary, computer layout: A.Nurbolat

Bulletin of the 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: 20 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

Алдонгаров А.А.	PhD (Казахстан)
Балапанов М.Х.	ф.-м.н., проф. (Россия)
Бахтизин Р.З.	ф.-м.н., проф. (Россия)
Гиниятова Ш.Г.	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
Даулетбекова А.К.	кандидат ф.-м.н., PhD (Казахстан)
Ержанов К.К.	кандидат ф.-м.н., PhD (Казахстан)
Жумадилов К.Ш.	доктор PhD (Казахстан)
Здоровец М.	к.ф.-м.н. (Казахстан)
Кадыржанов К.К.	ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Кайнарбай А.Ж.	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
Кутербеков К.А.	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Лущик А.Ч.	ф.-м.н., проф. (Эстония)
Морзабаев А.К.	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
Мырзакулов Р.К.	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Нурахметов Т.Н.	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Сауытбеков С.С.	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Тлеукенов С.К.	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Усеинов А.Б.	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: 20 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

№4(125)/2018

МАЗМҰНЫ

<i>Оралбеков Н.Б., Усеинов А.Б., А.Т. Ақылбеков, А.К.Даулетбекова, М.В.Здоровец, Н.С.Ыбыраев, А.Б.Дукенов</i> ZnO (100) беттеріндегі CO ₂ адсорбциясының ашық емес есептеулері	8
<i>Мендибаев К.О., Джансейитов Д.М., Кутербеков К.А., Жолдыбаев Т.К., Исатаев Т.Г., Азнабаев Д.Т., Валиолда Д.С., Кабышев А.М., Лукьянов С.М., Пеннионжскевич Ю.Э., Уразбеков Б.</i> Оптикалық және фолдинг модельдер аясында ³ He иондарының ⁹ Be ядроларында серпімді шашырау процесстерін зерттеу	16
<i>Каргин Д.Б., Конюхов Ю.В., Нгуен Ван Минь, Мухамбетов Д.Г., Козловский А.Л., Касымханов Ж.С., Бисикен А.Б.</i> Металлургиялық өндірістің қосалқы өнімдерін қайта өңдеудің экономикалық негіздемесі	25
<i>Бактиярқызы Ж., Шаихова Г.С.</i> Локальды емес комплексті модификацияланған Кортвег-де Фриз теңдеу жүйесінің нақты шешімдері	34
<i>Нугманова Г.Н.</i> Келісімді потенциалдары бар (1+1) өлшемдегі интегралданатын спиндік жүйелер	40
<i>Саттинова З.К., Рамазанова Г.И., Асылбеков Б.К., Ордабек А.К.</i> Құю процесіндегі бериллий керамикасының құрылымын эксперименттік және теориялық нәтижелерді салыстыра отырып зерттеу	50
<i>Жадыранова А.А., Мырзақұл Ж.Р., Ануарбекова Ы.Е.</i> $n = 3$ және $N = 2$ жағдайлары үшін $V_0 \neq 0$ болғандағы WDVV ассоциативтілік теңдеуінің иерархиясы	60

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

№3(124)/2018

CONTENTS

<i>Oralbekov N.B, Usseinov A.B, Akilbekov A.T, Dauletbekova A.K, Zdorovets M.V, Ybyraev N.S, Dukenov A.B.</i> Nonempirical calculations of CO ₂ adsorption on (100) ZnO surfaces	8
<i>Mendibayev K.O, Janseitov D.M, Kuterbekov K.A, Zholdybayev T.K, Issatayev T.G, Aznabayev D.T, Valiolda D.S, Kabyshev A.M, Lukyanov S.M, Penionzhkevich Yu.E, Urazbekov B.</i> Investigation of the elastic scattering of ³ He from ⁹ Be in within the framework the optical and folding models	16
<i>Kargin D.B, Konyukhov Y.V, Nguyen Van Min, Mukhambetov D.G, Kozlovskiy A.L, Kassymkhanov Z.S</i> Economic feasibility of by-products processing of metallurgical production	25
<i>Bachtiyarkyzy Zh, Shaikhova G.S, Shaikhova G.N.</i> Exact solutions of the nonlocal complex modified Korteweg-de Vries system of equations	34
<i>Nugmanova G.N.</i> Integrable spin systems with self-consistent potentials in (1+1) dimensions	40
<i>Sattinova Z.K, Ramazanova G.I, Assilbekov B.K, Ordabek A.K.</i> Comparative analysis of experimental and theoretical data when investigating of the structure of beryllium ceramics in the channel of installation casting	50
<i>Zhadyranova A.A, Myrzakul Zh.R, Anuarbekova Y.Ye.</i> Hierarchy of WDVV associativity equations for $n = 3$ case and $N = 2$ when $V_0 \neq 0$	60

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

№4(125)/2018

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Оралбеков Н.Б, Усеинов А.Б, Акылбеков А.Т, Даулетбекова А.К, Здоровец М .В, Ыбыраев Н.С, Дукенов А.Б.</i> Неэмпирические расчеты адсорбции CO ₂ на (100) поверхности ZnO	8
<i>Мендибаев К.О, Джансейтов Д.М, Кутербекоев К.А, Жолдыбаев Т.К, Исатаев Т.Г, Азнабаев Д .Т, Валиолда Д.С, Кабышев А.М , Лукъянов С.М, Пенионжскевич Ю.Э , Уразбеков Б.</i> Исследование упругого рассеяния ³ He на ядрах ⁹ Be в рамках оптической и фолдинг - модели	16
<i>Каргин Д.Б, Конохов Ю.В, Нгуен Ван Минь, Мухамбетов Д.Г, Козловский А.Л , Касымханов Ж.С, Бисикен А.Б.</i> Экономическая целесообразность переработки побочных продуктов металлургического производства	25
<i>Бактиярқызы Ж, Шаихова Г.С, Шайхова Г.Н.</i> Точные решения нелокальной комплексной модифицированной системы уравнений Кортевег-де Фриза	34
<i>Нугманова Г.Н.</i> Интегрируемые спиновые системы с самосогласованными потенциалами в (1+1) измерениях	40
<i>Саттинова З.К, Рамазанова Г.И, Асилбеков Б.К, Ордабек А.К.</i> Сравнительный анализ экспериментальных и теоретических данных при исследовании структуры бериллиевой керамики в канале установки литья	50
<i>Жадыранова А.А, Мырзакул Ж.Р, Ануарбекова Ы.Е.</i> Иерархия уравнений ассоциативности WDVV для случая $n = 3$ и $N = 2$ при $V_0 \neq 0$	60

ФИЗИКА



МРНТИ 29.19.11

Н.Б.Оралбеков¹, А.Б.Усеинов^{1,2}, А.Т.Акылбеков¹, А.К.Даулетбекова¹,
М.В.Здоровец², Н.С.Ыбыраев¹, А.Б.Дукенов¹

¹ *Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

² *Астанинский филиал Института ядерной физики, Астана, Казахстан*

*(E-mail: nurastana96@mail.ru, useinov_85@mail.ru, akilbek_ata@mail.ru,
dauletbekova_ak@mail.ru, zdorovets_mv@enu.kz, adletd95@mail.ru, ybyraevn@mail.ru)*

Неэмпирические расчеты адсорбции CO₂ на (100) поверхности ZnO

Аннотация: В развитии твердотельных систем детектирования био - и газовых смесей высокую роль играет глубокое понимание взаимодействия данных примесей с активной поверхностью датчика на атомном уровне. В нашей работе проведено компьютерное моделирование адсорбции молекулы углекислого газа на поверхности ZnO с различной конфигурацией и расположением на поверхности. Показано, что наиболее энергетически выгодной является тридентатная конфигурация, которая, вероятно, возникает в неравновесных условиях. Кроме того, энергия связи молекулы слабо зависит от концентрации, а наличие собственных дефектов на поверхности (таких как вакансии кислорода) приводит к ослаблению энергии связи. Образование новых веществ (таких H₂CO) на поверхности хорошо согласуются с полученными данными из эксперимента, но до сих пор не подтверждены.

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

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2018-125-4-8-15>

Введение. Сегодня существует большой интерес к развитию легких газовых сенсоров, имеющих высокий диапазон чувствительности (несколько атомов молекул на миллион атомов молекул кристалла (ppm)) и расширенную функциональность при малой мощности работы. Газовые датчики на основе наноструктурного оксида цинка (ZnO) (наностержни нанопроволоки) дают возможность для высокочувствительного и селективного обнаружения широкого спектра разнообразных молекул газа и биомолекул в режиме реального времени. Принцип работы такого датчика газа зависит от электрохимического характера молекулы газа и основан на прямой модификации проводимости канала нанопроволоки полевого транзистора (ПТ) благодаря высокой химической активности наноструктур. Также благодаря большому различию отношения «поверхность-объем» наноструктуры чувствительность обнаружения био и газосенсоров полевых транзисторов может быть увеличена до обнаружения небольшого ансамбля молекул с помощью регистрации изменения малой проводимости, вызванного адсорбцией биомолекулы на канале проводимости наностержней. Все экспериментальные результаты показывают, что нанопроволоки из ZnO, в связи с большой площадью поверхности, имеют потенциал для обнаружения таких газов как NO₂ [1], NH₃ [2], NH₄ [3], CO [3], H₂ [4], H₂O [5], O₃ [6], H₂S [7], и C₂H₅OH [8].

Неполярная (100) поверхность ZnO единогласно считается способной активировать CO₂ за счет образования поверхностного карбоната [9,10,11]. Однако до сих пор идет дискуссия о конфигурации связи молекулы CO₂ с неполярной плоскостью. С помощью спектров тонкой структуры при ближнем крае рентгеновской адсорбции (NEXAFS) Дэвис и коллеги [12]

показали, что CO_2 привязан к оксидной подложке через бидентатную связь. Однако недавние теоретические исследования противоречат этому аргументу, к примеру вычисления ONIOM [13] показали монодентатную адсорбционную структуру, тогда как вычисления методами теории функционала плотности [14] обнаружили тридентатную форму адсорбции как наиболее стабильную геометрию связывания. Ранее опубликованные энергии связи CO_2 с поверхностью также расходятся. Согласно изотермам адсорбции типа Фрейндлиха, Хотан и др. [15] обнаружили, что энергия адсорбции для CO_2 над ZnO (100) при различных покрытиях лежит между -1,45 и -0,67 эВ. В этой же работе они в дальнейшем сузили диапазон до -1,04 до -0,83 эВ с использованием метода TPD. После этого другой эксперимент Вэга с соотр. по методу TPD [16] дал гораздо более сильные энергии адсорбции (-1,59 - 1,13 эВ). Опять-таки, соответствующие теоретические значения, оцененные Таффом и соавт. [13] и Wang и др. [14] на удивление гораздо слабее (-0,70-0,07 эВ), чем экспериментальные данные [15,16].

Из вышеуказанного можно сделать вывод, что механизм взаимодействия молекулы с поверхностью имеет сложный комплексный характер, требующий детального рассмотрения. В связи с этим возникает необходимость детального изучения механизма адсорбции «на атомном уровне». В данной работе, мы представляем результаты компьютерного моделирования электронных свойств тонкой пленки (слэба) ZnO с адсорбированной молекулой CO_2 с помощью численных квантово-механических методов в сравнении с доступными экспериментальными результатами. Целью нашей работы является высокоточное описание процесса адсорбции/десорбции молекулы на поверхности, определение электронных свойств и степени реакционной чувствительности поверхности в зависимости от концентрации примеси.

Детали расчетов. Для решения задачи перераспределения заряда и энергетики поверхности были выполнены *неэмпирические* расчеты в приближении линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО) с использованием гибридного нелокального обменно-корреляционного функционала PBE0 [17]. Все расчеты выполнены в программе CRYSTAL [18]. Данная программа выполняет расчеты электронной структуры кристаллических систем с использованием методов Хартри-Фока, функционала плотности (DFT) и различных гибридных аппроксимаций в сочетании с базисом (набором) локальных гауссовских функций для периодических (3D, 2D) и точечных (1D) систем и зарекомендовала себя как надежный инструмент для описания разных свойств широкого ряда материалов. Для описания атомных орбиталей неприводимых атомов были выбраны следующие базисные наборы функций типа Гаусса: ZnO : 8-411d1G [19] для кислорода, 86-411d31G [19] для цинка; CO_2 : 6-21G* [20] для атома углерода и 6-31d1 [21] для атома кислорода. В расчетах самосогласования (SCF) для кулоновских и обменных интегралов были выбраны следующие пределы точности 10^{-7} , 10^{-7} , 10^{-7} , 10^{-7} , 10^{-14} . Эффективные заряды атомов на чистой поверхности и с примесью были рассчитаны с помощью анализа заселенности по Малликену [22].

Для моделирования адсорбции водорода на поверхности ZnO с индексами Миллера (100) была смоделирована модель атомной пленки (слэба) конечной толщины по оси z и расширенной по осям x и y как (3×2) (рис.1а). В отличие от расчетов с использованием других квантово-химических программ (VASP, ABINIT и др.), где модель слэба создается разделением объемного образца на две части (2 слэба) с созданием небольшой щели между образовавшимися поверхностями, в CRYSTAL модель атомного слэба лишена недостатка спонтанного электростатического взаимодействия периодически повторяющихся слэбов. Это делает систему абсолютно изолированной, улучшая, тем самым, показатели энергетики адсорбции примеси по сравнению с экспериментом. Интегрирование обратного пространства в модели атомного слэба выполнено с сеткой Пэка-Монкхорста $2 \times 2 \times 1$ [23].

Мы рассмотрели несколько геометрических конфигураций адсорбированной молекулы CO_2 (рис.1 *a, b, c, d*). С целью экономии времени вычислений, расчеты были проведены при частичной оптимизации геометрии – были оптимизированы позиции атомов только первых верхних двух атомных слоев и молекулы адсорбата.

Энергия адсорбции водорода рассчитывалась из следующего соотношения:

$$E_{ad} = E_{ads/sub} - E_{ads} - E_{sub}, \quad (1)$$

где $E_{ads/sub}$ и E_{sub} - полная энергия пластины с адсорбированной молекулой CO_2 и чистой платины, и E_{ads} - полная энергия изолированной молекулы в основном состоянии. Из (1) следует, что адсорбция имеет место только в том случае, когда энергия адсорбции E_{ad} отрицательна.

Отметим, что во время адсорбции CO_2 на поверхности оксида происходит три изменения: структурные перестройки поверхности и молекулы, а также их взаимодействие. Соответственно, чтобы получить более глубокое понимание процесса адсорбции, мы применили следующую схему, аналогичную той, которая была впервые предложена Райбоу и др. [24], чтобы разложить энергию адсорбции на вклады в деформацию и взаимодействие. Энергия деформации для адсорбата $E_{def}(CO_2)$ оценивалась по формуле:

$$E_{def}^{CO_2} = E_{ads'} - E_{ads} \quad (2)$$

где $E_{ads'}$ обозначает энергию адсорбата с деформированной геометрической структурой, принятой в адсорбционном комплексе. По-видимому, параметр $E_{def} CO_2$ можно рассматривать как меру степени активации поверхностной молекулы CO_2 . Аналогично вычислялась энергия деформации подложки, E_{def}^{sub} . Энергия взаимодействия E_{int} между двумя частями определяется как:

$$E_{int} = E_{ads/sub} - E_{ads'} - E_{sub'} \quad (3)$$

где $E_{sub'}$ - энергия фрагмента поверхности и определяется аналогично $E_{ads'}$. При объединении уравнения (1), (2), (3), выражение для энергии адсорбции будет состоять из E_{int} и энергий деформации:

$$E_{ad} = E_{int} + E_{def}^{CO_2} + E_{def}^{sub} \quad (4)$$

Из этого уравнения очевидно, что энергия адсорбции - это адекватный баланс между тремя конкурирующими термами. Из-за негативного воздействия E_{int} на энергию адсорбции взаимодействие «адсорбат-подложка» представляет собой основную силу для любой адсорбции. Следует заметить, что энергия образования адсорбата может быть в значительной степени уравновешена электронными и структурными релаксациями большой системы. В этой ситуации, возможно, что значение конечной измеренной энергии хемосорбции близко напоминает типичные значения энергий физсорбции (от -0.43 до -0.09 эВ).

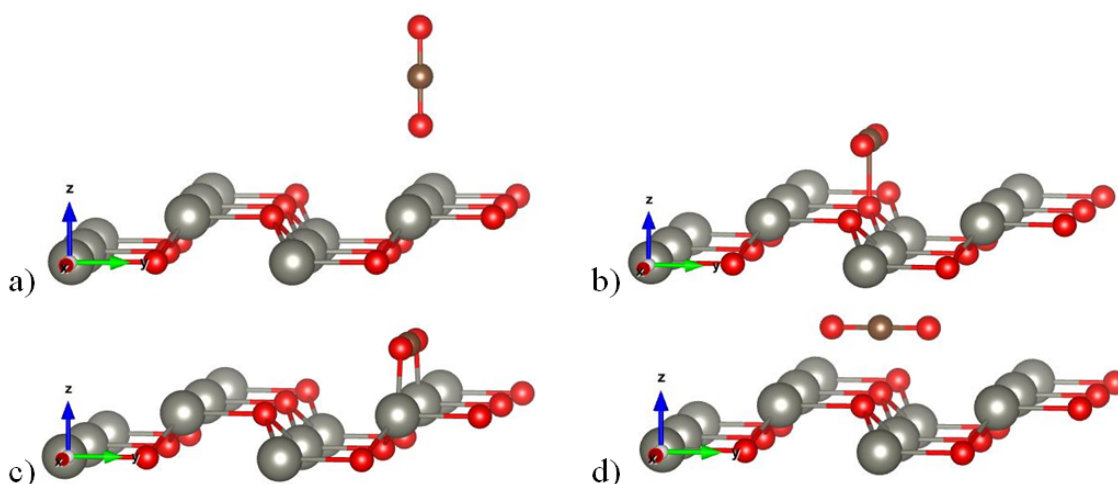


Рисунок 1 – Модели дефектных поверхностей с адсорбцией CO_2 в разной конфигурации (для упрощения показаны только верхние два слоя слэба)

Для подтверждения надежности используемого метода расчета мы провели вычисления параметров решетки (a, c, u), значения запрещенной зоны (E_g) и модуля упругости (B) объемного образца ZnO со структурой вюрцита, которые показаны в таблице 1 вместе

с аналогичными расчетными и экспериментальными данными. Для объемного образца интегрирование зоны Бриллюэна обратного пространства для элементарной ячейки ZnO выполнено с сеткой Пэка-Монхорста – $6 \times 6 \times 4$. Полученные параметры решетки немного переоценены в сравнении с экспериментальными данными ($\approx 1\%$), а для значения ширины запрещенной зоны ошибка составила $\approx 3.6\%$. Таким образом, полученные данные лежат в хорошем согласии с экспериментом и приняты как стартовое приближение в исследовании адсорбции молекулы CO_2 .

Таблица 1 – Основные свойства ZnO

Параметр	Наш расчет	расчет с V3LYP [25]	расчет с DFT [26]	Эксперимент [27]
a , Å	3.274	3.278	3.249	3.242
c , Å	5.267	5.287	5.203	5.187
u	0.382	-	-	0.381
E_g (эВ)	3.57	3.38	3.18	3.44
B , ГПа	153	-	-	143

Результаты и их анализ

Бездефектная поверхность (100) ZnO. Прежде чем приступить к расчетам адсорбции примеси на поверхности кристалла ZnO, нужно поднять вопрос связанный с решением условия стабильности поверхности от количества слоев, входящих в слэб. Для ответа на вопрос проведены тестовые расчеты поверхностной энергии и распределения заряда. Последнее не является уникальным способом проверки, однако анализ распределения заряда очень полезен, так как позволяет сравнивать полученные результаты, тем самым показывая тенденцию стабилизации выбранной системы. Результаты расчетов приведены в таблице 2, из которой видно, что поверхностная энергия слабо изменяется с ростом количества слоев. Поэтому в дальнейших расчетах релаксации геометрии поверхности и характеристик электронных свойств поверхности с примесью CO_2 была выбрана модель 5-слойной пластины.

Из анализа результатов расчета абсолютных и относительных смещений поверхностных ионов следует, что после релаксации поверхностные ионы Zn смещаются вглубь пластины, а ионы O в направлении наружу. Это приводит к небольшому искажению поверхности.

Таблица 2 – Поверхностная энергия E_s (Дж/м²) для (100) поверхности и эффективные заряды $q(e)$ ионов Zn и O на (100) поверхности ZnO

Количество слоев слэба	E_s		$q(Zn/O)$
	Наш расчет	[28]	
5	1.1674	-	0.954/- 0.916
7	1.1612	1.4	0.981/- 1.001
9	1.1613	1.4	0.981/- 1.001
11	1.1611	1.3	0.981/- 1.001

Адсорбция CO_2 на поверхности. Результаты вычислений энергии адсорбции E_{ads} , ионного заряда q_{eff} , расстояния d и углов α между поверхностью и молекулой, а также расстояние между атомами молекулы и угла изгиба молекулы $\angle(O_1-O_2)$, представлены в таблице 3. После релаксации атомы на поверхности кристалла и атомы молекулы

смещаются относительно друг друга, приводя к структурным изменениям в поверхности и в молекуле. Оптимизированные структуры после релаксации показаны на рисунке 2. Из всех рассмотренных конфигураций энергетически наиболее выгодной является последняя – тридентатная конфигурация. Малые значения энергии адсорбции для других конфигураций показывают, что на них наблюдается слабая сорбция (физадсорбция) и эти позиции менее вероятны, хотя возможны как промежуточные состояния.

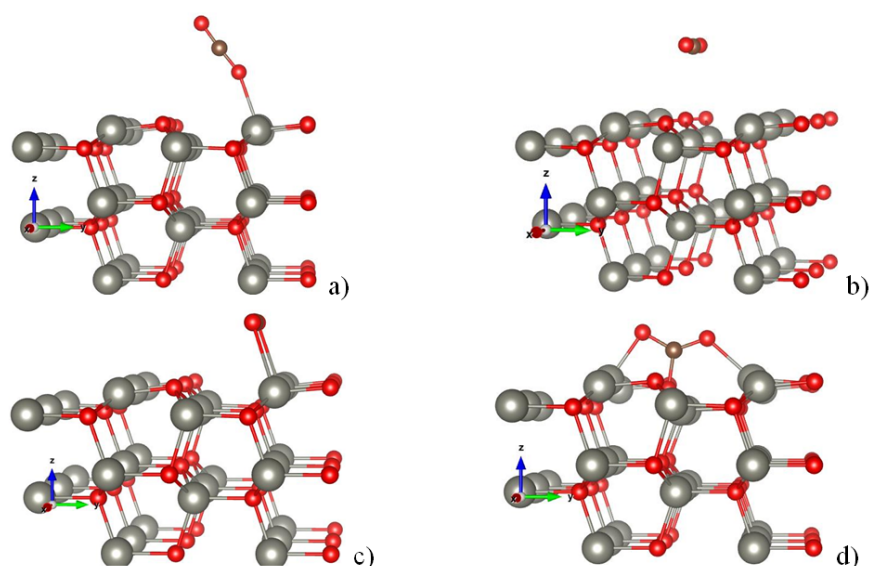
Таблица 3

Конфигурация (см. рис.2)	monoden- tate1	monoden- tate2	bidentate	triden- tate
E_{ads} (эВ)	-0.38	-0.1	-0.36	-5.39
$q_{eff}(O_1/C/O_2)$, e	-0.59/+1.2/ -0.52	-0.56/+1.1/ -0.56	-0.54/+1.2/ -0.54	-0.67/+0.9/ -0.66
$d(O_1-C-O_2)$, Å	1.16/1.17	1.16/1.16	1.16/1.16	1.26/1.25
$d(C-O_{surf})$, Å	-	2.81	-	1.38
$d(Zn_{surf}-O_1/Zn_{surf}-O_2)$, Å	2.26/-	-	2.49/2.49	2.05/2.17
α , °	68.49	0	0	-
$\angle(O_1-O_2)$	177	176	-	130

В соответствии с расчетами Ванга с сотр. (Wang) [14] наши результаты также не согласуются с экспериментальной работой на основе NEXAFS, которая обнаружила бидентатную адсорбированную конфигурацию для CO_2 на ZnO (100). Два атома O в фрагменте молекулы имеют почти эквивалентную связь с их ближайшими атомами Zn, с вновь образованными расстояниями связи с 2.05 и 2.17 Å. Внутренние C=O связи CO_2 удлинились при адсорбции от первоначального значения 1.16 Å до 1.26-1.24 Å, что на 0.12-0.14 Å короче относительно внешних связей C-O. Хемосорбированная молекула обладает изогнутой структурой O=C=O с углом около 130°.

Энергия связи для тридентатной связи CO_2 на ZnO (100) составила -5.39 эВ. Это значение превосходит диапазон энергий, полученных из экспериментов хемосорбции Хотана и др., а именно от -1.45 до -0.67 эВ, а также полученных изотермами адсорбции и от -1.04 до -0.83 эВ, оцененными измерениями TPD. Однако, тридентатная конфигурация не наблюдается в эксперименте, как было указано выше. Для тридентатной конфигурации наблюдается сильная релаксация как поверхности, так и молекулы, что может происходить при неравновесных условиях (в условиях выращивания кристалла) и соответственно в равновесных условиях практически не наблюдается. Мы продолжили исследовать влияние концентрации примеси и собственных поверхностных дефектов (в виде кислородных вакансий) на повышение стабильности адсорбированного CO_2 на ZnO (100) поверхности с использованием поверхностных моделей с покрытием 1/8 и использованием сетки k-точек ($6 \times 4 \times 1$). На бездефектной поверхности энергия адсорбции на молекулу CO_2 точно совпадает с энергией адсорбции при 1/4 покрытия, что указывает на то, что более низкая концентрация не увеличивает адсорбцию. С другой стороны, на дефектной поверхности с одной кислородной вакансией, рассматриваемой в одной элементарной ячейке, мы обнаружили, что даже если вакантный участок может адсорбировать молекулу CO_2 , энергия адсорбции будет ослаблена на 0.21 эВ, что приводит к еще большему отклонению от значений TPD (-1,59 – -1,13 эВ). Расчет показал, что наличие точечных дефектов на ZnO (100) будет препятствовать, а не облегчать процесс адсорбции. Поэтому, согласно этим результатам расчета, энергии адсорбции CO_2 , опубликованные в работах [16] и [29], кажутся, по нашему мнению, сомнительными.

Заключение. В данной работе мы провели моделирование адсорбции молекулы CO_2 на поверхности оксида цинка с использованием гибридного метода теории функционала плотности в приближении линейных комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Согласно нашим

Рисунок 2 – Энергетически стабильные конфигурации молекулы CO_2 на поверхности ZnO

результатам наиболее выгодной конфигурацией адсорбции CO_2 является тридентатная, хотя мы не исключаем возможных «промежуточных» состояний в виде других рассмотренных конфигураций. Такой результат не согласуется с наблюдаемым в эксперименте, где установлен бидентатный режим связи молекулы с поверхностью. Увеличение концентрации примеси не ведет к изменению энергии адсорбции, а собственные поверхностные дефекты только ослабляют ее. Еще одним объяснением может служить образование на поверхности нового химического продукта в результате взаимодействия CO_2 , к примеру с H_2 , с образованием H_2CO . Вычисленная энергия образования для H_2CO , а также температура ее десорбции, хорошо согласуются с наблюдаемыми экспериментальными данными, которые приписываются для CO_2 . Это говорит о том, что в эксперименте, скорее всего, наблюдается именно H_2CO .

Список литературы

- 1 Cho P.S., Kim K. W., Lee J. H. BNO2 sensing characteristics of ZnO nanorods prepared by hydrothermal method // J. Electroceram.- 2006. - V.17. - P. 975–978.
- 2 Devi G.S., Subrahmanyam V.B., Gadkari S.C., Gupta S.K., BNH3 gas sensing properties of nanocrystalline ZnO based thick films // Analytica Chimica Acta. – 2006. - V.568. -P. 41–46.
- 3 Gong H., Hu J .Q., Wang J.H., Ong C.H., and Zhu F.R., Nano-crystalline Cu-doped ZnO thin film gas sensor for CO // Sens. Actuators B, Chem. – 2006. -V.115. – P.247–251.
- 4 Wang H.T., Kang B.S., Ren F., Tien L C., Sadik P.W., Norton D.P., Pearton S.J., Lin J. BHydrogen-selective sensing at room temperature with ZnO nanorods // Appl. Phys. Lett. -2005. - V.86. - P. 243503-1–243503-3
- 5 Wang X.H., Ding Y.F., Zhang J ., Zhu Z.Q., You S.Z., Chen S.Q., Zhu J.Z. Humidity sensitive properties of ZnO nanotetrapods investigated by a quartz crystal microbalance // Sens. Actuators B, Chem. - 2006. - V.115. - P.421–427.
- 6 Christoulakis S., Sucheа M., Koudoumas E., Katharakis M., Katsarakis N., Kiriakidis G. Thickness influence on surface morphology and ozone sensing properties of nanostructured ZnO transparent thin films grown by PLD// Appl. Surface Sci. – 2006. - V.252. - P.5351–5354.
- 7 Wang C.H., Chu X.F., Wu M.W. Detection of H2S down to ppb levels at room temperature using sensors based on ZnO nanorods // Sens. Actuators B, Chem. – 2006. - V.113. - P.320–323.
- 8 Xue T.F., Hu J.F., Qin H.W., Zhou Y., An K., Zhang L., Han T., Li Y.X. Sensing properties of the ZnO based composite oxide (Al,Sb)/ZnO to C2H5OH gas // Rare Metal Mater. Eng. – 2004. - V.33. - P.1006–1008.
- 9 Esken D., Noei H., Wang Y., Wiktor C., Turner S., Van G. Tendeloo, Fischer R. // Mater A. J. Chem. – 2011. – V.21. - P.5907-5915.
- 10 Noei H., Woll C., Muhler M., Wan gY. // Phys M.J. Chem. - 2011, - V.115, - P.908-914.
- 11 Saussey J., Lavalley J. Bovet C. J. Chem. Soc // Faraday Trans. – 1982. - V.78. – P.1457-1463.
- 12 Davis R., Walsh J. F., Muryn C. A., Thornton G., Dhanak V. R., Prince K.C., K // Surf. Sci. Lett. – 1993. – V.298. - P.196-202.
- 13 Martins J.B., Longo E. O., Salmon D. R., Espinoza A. A., Taft C. A., // Chem. Phys. Lett. - 2004, - V.400, - P.481-486.

- 14 Wang Y.M., Kovacic R., Meyer B., Kotsis K., Stodt D., Staemmler V., Qiu H., Traeger F., Langenberg D., Muhler M., Woll C. // *Angew. Chem., Int. Ed.* – 2007. – V.46. – P.5624-5627.
- 15 Hotan, W.; Gopel, W.; Haul, R. *Surf. Sci.* 1979, 83, 162-180.
- 16 Bowker M., Houghton H., Waugh K. C., Giddings T., Green M. J. // *Catal.* – 1983. – V.84. – P.252-255.
- 17 Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. // *Phys. Rev.* –1996. –V.77. №18. – P.3865 - 3868.
- 18 Dovesi R., Saunders V. R., Roetti R., Orlando R., Zicovich-Wilson C. M., Pascale F., Civalieri B., Doll K., Harrison N. M., Bush I.J., D'Arco P., Llunell M. // *CRYSTAL14 User's Manual* University of Torino, Torino. – 2014.
- 19 Jaffe J. E., Hess A.C. // *Phys. Rev.* – 1993. – V.48. – P.7903.
- 20 Catti M., Pavese A., R. Dovesi, Saunders V. // *Physical Review.* – 1993. – V.47. – P.9189-9198.
- 21 Gatti C., Saunders V.R., Roetti C., Chem J. // *Phys.* – 1994. – V.101. – P.10686-10696.
- 22 Mulliken R. S. // *J. Chem. Phys.* – 1955. – V.23. №10. – P.1833.
- 23 Monkhorst H. J., Pack J. D. // *Phys. Rev. B.* – 1976. – V.13. – P.5188.
- 24 Valero M. C., Raybaud P., Sautet P. J. // *Catal.* – 2007. – V.247, - P.339-355.
- 25 Oba F., Togo A., Tanaka I., Paier J., Kresse G. Defect energetics in ZnO: A hybrid Hartree-Fock density functional study // *Phys. Rev. B.* – 2008. – V.77. – P.245202.
- 26 Janotti, Van de Walle Native C.G. point defect in ZnO // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V.76. № 16. – P.165202-165224.
- 27 Gallino F., Pacchioni G., Valentini C. Transition levels of defect centers in ZnO by hybrid functionals and localized basis set approach // *J. Chem. Phys.* – 2010. – V.133. – P. 144512(1-10).
- 28 Marana N. L. V., Longo M., Longo E., Martins J. B. L., Sambrano J. R. J. // *Phys. Chem. A.* – 2008. – V.112. – P.8958 – 8963.
- 29 Bowker M, Houghton H, Waugh K. C. J. // *Chem. Soc., Faraday Trans. 1.* – 1981. – V.77. – P.3023-3036.

Н.Б.Оралбеков¹, А.Б.Усеинов^{1,2}, А.Т.Ақылбеков¹, А.К.Даулетбекова¹, М.В.Здоровец²,
Н.С.Ыбыраев¹, А.Б.Дукенов¹

¹ Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

² Ядролық физика институтының Астаналық филиалы, Астана, Қазақстан

ZnO (100) беттеріндегі CO₂ адсорбциясының ашық емес есептеулері

Аннотация: Бұл қоспалардың атомдық деңгейде сенсордың белсенді бетімен өзара әрекеттесуін терең түсіну био-және газ қоспаларын анықтау үшін қатты күйдегі жүйелерді дамытуда маңызды рөл атқарады. Біздің жұмысымызда ZnO бетіндегі көмірқышқыл газы молекуласының адсорбциясының түрлі конфигурациясы мен бетіндегі орналасуымен компьютерлік модельдеу жүргізілді. Трифанат конфигурациясы ең қолайлы болып табылады, бұл, мүмкін, тепе-тең емес жағдайларда туындайды. Сонымен қатар, молекуланың байланыстырушы энергиясы нашар концентрацияға тәуелді және жер бетіндегі ішкі ақаулардың болуы (мысалы, оттегі бос болуы) байланыстырушы энергияның әлсіреуіне әкеледі. Жер бетіндегі жаңа заттардың (мұндай H₂CO) құрылуы эксперименттен алынған деректермен жақсы келісіледі, бірақ әлі расталмады.

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

N.B. Oralbekov¹, A.B. Usseinov^{1,2}, A.T. Akilbekov¹, A.K. Dauletbekova¹, M.V. Zdorovets², N.S. Ybyraev¹, A.B. Dukenov¹

¹ L.N.Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

² Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics, Astana, Kazakhstan

Nonempirical calculations of CO₂ adsorption on (100) ZnO surfaces

Abstract: A deep understanding of the interaction of these impurities with the active surface of the sensor at the atomic level plays a significant role in the development of solid-state systems for detecting bio- and gas mixtures. In our work, a computer simulation of the adsorption of a carbon dioxide molecule on a ZnO surface with various configurations and location on the surface was carried out. It is shown that the tridentate configuration is most energetically favorable, which probably arises in non-equilibrium conditions. In addition, the binding energy of a molecule weakly depends on concentration, and the presence of intrinsic defects on the surface (such as an oxygen vacancy) leads to a weakening of the binding energy. The formation of new substances (such H₂CO) on the surface is in good agreement with the data obtained from the experiment, but has not yet been confirmed.

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

References

- 1 P. S. Cho, K. W. Kim, and J. H. Lee. BNO₂ sensing characteristics of ZnO nanorods prepared by hydrothermal method. *J. Electroceram.*, **17**, 975–978 (2006).
- 2 Devi G. S., Subrahmanyam V.B., Gadkari S.C., Gupta S.K. BNH₃ gas sensing properties of nanocrystalline ZnO based thick films. *Analytica Chimica Acta.*, **568**, 41–46 (2006).
- 3 Gong H., Hu J. Q., Wang J.H., Ong C.H., Zhu F.R. Nano-crystalline Cu-doped ZnO thin film gas sensor for CO. *Sens. Actuators B, Chem.*, **115**, 247–251 (2006).
- 4 Wang H.T., Kang B.S., Ren F., Tien L.C., Sadik P.W., Norton D.P., Pearton S.J., Lin. J. BHydrogen-selective sensing at room temperature with ZnO nanorods. *Appl. Phys. Lett.*, **86**, 243503-1–243503-3 (2005).

- 5 Wang X.H., Ding Y.F., Zhang J., Zhu Z.Q., You S.Z., Chen S.Q., Zhu J.Z. Humidity sensitive properties of ZnO nanotetrapods investigated by a quartz crystal microbalance. *Sens. Actuators B, Chem.*, **115**, 421–427 (2006).
- 6 Christoulakis S., Suchea M., Koudoumas E., Katharakis M., Katsarakis N., Kiriakidis G. Thickness influence on surface morphology and ozone sensing properties of nanostructured ZnO transparent thin films grown by PLD. *Appl. Surface Sci.*, **252**, 5351–5354 (2006).
- 7 Wang C. H., Chu X.F., Wu M.W. Detection of H₂S down to ppb levels at room temperature using sensors based on ZnO nanorods. *Sens. Actuators B, Chem.*, **113**, 320–323 (2006).
- 8 Xue T.F., Hu J.F., Qin H.W., Zhou Y., An K., Zhang L., Han T., LiY . X. Sensing properties of the ZnO based composite oxide (Al,Sb)/ZnO to C₂H₅OH gas. *Rare Metal Mater. Eng.*, **33**, 1006–1008 (2004).
- 9 Esken D, Noei H, Wang Y, Wiktor C, Turner S, Van Tendeloo G, Fischer R. A. *J. Mater. Chem.*, **21**, 5907-5915 (2011).
- 10 Noei H, Woll C, Muhler M, Wang Y.-M. *J. Phys. Chem.*, **115**, 908-914 (2011).
- 11 Saussey J, Lavalley J.-C, Bovet C. *J. Chem. Soc, Faraday Trans.*, **78**, 1457-1463 (1982).
- 12 Davis R, Walsh J. F, Muryn C. A, Thornton, G, Dhanak V.R, Prince, K. C. *Surf. Sci. Lett.*, **298**, L196-L202 (1993).
- 13 Martins J. B. L, Longo E, Salmon O. D. R, Espinoza V. A.A, Taft C. A. *Chem. Phys. Lett.*, **400**, 481-486 (2004).
- 14 Wang Y.M, Kovacic R, Meyer B, Kotsis K, Stodt D, Staemmler V, Qiu H.-S, Traeger F, Langenberg D, Muhler M, Woll, C. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **46**, 5624-5627 (2007).
- 15 Hotan W, Gopel W, Haul R. *Surf. Sci.*, **83**, 162-180 (1979).
- 16 Bowker M, Houghton H, Waugh K. C, Giddings, T, Green M. J. *Catal.*, **84**, 252-255 (1983).
- 17 Perdew J.P, Burke K, Ernzerhof M. *Phys. Rev. Lett.*, **77**(18), 3865 – 3868 (1996).
- 18 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).
- 19 Jaffe J. E, Hess A. C. 1993 *Phys. Rev.*, **48**, 7903.
- 20 Catti M, Pavese A, Dovesi R, Saunders VC, *Physical Review.*, **47**, 9189-9198 (1993).
- 21 C. Gatti, V.R. Saunders, C. Roetti, *J. Chem. Phys.*, **101**, 10686-10696 (1994).
- 22 Mulliken R. S. *J. Chem. Phys.*, **23**(10), 1833 (1995).
- 23 Monkhorst H. J, Pack J. D. *Phys. Rev. B.*, **13**, 5188 (1976).
- 24 Valero M. C, Raybaud P, Sautet P. *J. Catal.*, **247**, 339-355 (2007).
- 25 Oba F, Togo A, Tanaka I, Paier J, Kresse G. Defect energetics in ZnO: A hybrid Hartree-Fock density functional study. *Phys. Rev. B.*, **77**, 245202(1-6) (2007).
- 26 Janotti A, Van de Walle C.G. Native point defect in ZnO. *Phys. Rev. B.*, **76**(16), 165202-165224 (2007).
- 27 Gallino F, Pacchioni G, Valentin C. Transition levels of defect centers in ZnO by hybrid functionals and localized basis set approach. *J. Chem. Phys.*, **133**, 144512(1-10) (2010).
- 28 Marana N. L. V, Longo M, Longo E, Martins J. B. L, Sambrano J. R. *J. Phys. Chem. A.*, **112**, 8958 – 8963 (2008).
- 29 Bowker M, Houghton H, Waugh K. C. *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, **77**, 3023-3036 (1981).

Сведения об авторах

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 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.

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

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

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

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

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

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

Dauletbekova A.K. – PhD of Physical and Mathematical Sciences, docent, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Munaitpasova 13, Building 3 "CISI", office. 314, Astana, Kazakhstan.

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

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

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

Поступила в редакцию 05.11.2018

«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 келісін, шетел тіліне аударылып қайта басылуына келісін 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).

ГАМРК <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 формулаларсызсыз, 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-іздістері 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 нөмірленеді.

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.

Қолданылаған 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 Нуртазина 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.

1) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК Банка: КСЖВКЗКХ

ИИК: KZ978562203105747338 (KZT)

Кнп 861

Кбе 16

"Мақала үшін (автордың аты-жөні)"

2) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Bank RBK"

БИК Банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073 (KZT)

"Мақала үшін (автордың аты-жөні)"

3) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Forte"

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847 (KZT)

"Мақала үшін (автордың аты-жөні)"

**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*. 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 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. - **journal article**

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. - - **Conferences proceedings**

4 Нуртазина 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):

Реквизиты:

1) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК Банка: КСJBKZKX

ИИК: KZ978562203105747338 (KZT)

Кнп 861

Кбе 16

"За публикацию в Вестник ЕНУ ФИО автора"

2) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Bank RBK"

БИК Банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073 (KZT)

"За публикацию в Вестник ЕНУ ФИО автора"

3) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Forte"

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847 (KZT)

"За публикацию в Вестник ЕНУ ФИО автора"

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://semr.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):

Реквизиты:

1) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК Банка: КСЖВКЗКХ

ИИК: KZ978562203105747338 (KZT)

Кнп 861

Кбе 16

"За публикацию в Вестник ЕНУ ФИО автора"

2) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Bank RBK"

БИК Банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073 (KZT)

"За публикацию в Вестник ЕНУ ФИО автора"

3) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК

АО "Forte"

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847 (KZT)

"За публикацию в Вестник ЕНУ ФИО автора"

Мақаланы рәсімдеу үлгісі

МРНТИ 27.25.19

А.Ж. Жубанышева¹, Н. Темиргалиев², А.Б. Утесов³

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

² *Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, Актюбе, Казахстан*

(Email: ¹ axaulezh@mail.ru, ² ntmath10@mail.ru, ³ adilzhan_71@mail.ru)

Численное дифференцирование функций в контексте Компьютерного (вычислительного) перечника

Аннотация: В рамках компьютерного (вычислительного) перечника полностью решена задача приближенного дифференцирования функций, принадлежащих классам Соболева по неточной информации, полученной от произвольного конечного множества тригонометрических коэффициентов Фурье-Лебега дифференцируемой функции... [100-200 слов].

Ключевые слова приближенное дифференцирование, восстановление по неточной информации, предельная погрешность, компьютерный (вычислительный) перечник. [6-8 слов/словосочетаний].

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.*

Доказательство. Текст доказательства.

2. Формулы, таблицы, рисунки

$$\delta_N(\varepsilon_N; D_N)_Y \equiv \delta_N(\varepsilon_N; T; F; D_N)_Y \equiv \inf_{(l^{(N)}, \varphi_N) \in D_N} \delta_N \left(\varepsilon_N; \left(l^{(N)}, \varphi_N \right) \right)_Y, \quad (17)$$

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

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

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

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

3. Ссылки и библиография

Для ссылок на утверждения, формулы и т. п. можно использовать метки. Например, теорема 2, Формула (17)

Для руководства по ЛАТЭХ и в качестве примера оформления ссылок, см., например, *Львовский С.М.* Набор и верстка в пакете ЛАТЭХ. 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., 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 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. Жұбанышева¹, Н. Темірғалиев¹, А.Б. Утесов²

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

² Қ.Жұбанов атындағы. Ақтөбе өңірлік мемлекеттік университеті, Ақтөбе, Қазақстан

Компьютерлік (есептеуіш) диаметр мәнмәтінінде функцияларды сандық дифференциалдау

Аннотация: Компьютерлік (есептеуіш) диаметр мәнмәтінінде Соболев класында жататын функцияларды олардың тригонометриялық Фурье-Лебег 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.Zhubanysheva¹, N. Temirgaliyev¹, A.B. Utesov²

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

² 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 chislenogo analiza [Elements of numerical analysis] (Yanus, Moscow, 1995). [in Russian]
- 2 Temirgaliyev N. Komp'juternyj (vychislitel'nyj) poperechnik kak sintez izvestnogo i novogo v chislenom 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 funkcij 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.Nikol'skogo "Funkcional'nye prostranstva i teoriya priblizheniya funkcij" [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. Angioprotekornaja i gipolipidemicheskaja aktivnost' leukomizina [Angioprotective and lipid-lowering activity of leukomycin] (Bastau, Almaty, 2007, P. 3-5). [in Russian]
- 5 Kyrov V.A., Mihajlischenko G.G. Analiticheskij metod vložhenija 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:

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

Темірғалиев 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. Жұбанова, пр. А.Молдагуловой, 34, Ақтөбе, Қазақстан.

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.
-2018 - 4(125) - Астана: ЕҰУ. 75-б.
Шартты б.т. - 9,375 Таралымы - 20 дана.

Мазмұнына типография жауап бермейді.

Редакция мекен-жайы: 010008, Астана қ.,
Сәтпаев 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