

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**

№2(127)/2019

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Нұр-Сұлтан, 2019

Nur-Sultan, 2019

Нур-Султан, 2019

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

Бас редактордың орынбасары

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

Редакция алқасы

Алдонгаров А.А.	PhD (Қазақстан)
Балапанов М.Х.	ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
Бахтизин Р.З.	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.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Кайнарбай А.Ж.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Кутербеков Қ.А.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Лущик А.Ч.	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)
Салиходжа Ж.М.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Тлеукенов С.К.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Усеинов А.Б.	PhD (Қазақстан)
Хоши М.	PhD, проф. (Жапония)

Редакцияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Сәтбаев 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 министрлігінде 27.03.2018ж.
№16999-ж тіркеу куәлігімен тіркелген.

Тиражы: 25 дана

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан 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)
Hoshi M.	PhD, Prof. (Japan)
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)
Salikhodzha Z. M	Candidate of Phys.-Math. Sciences (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,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008
Tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Responsible secretary, computer layout: A.Nurbolat

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University.

PHYSICS. ASTRONOMY Series

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

Periodicity: 4 times a year

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

Registration certificate №16999-ж from 27.03.2018.

Circulation: 25 copies

Address of printing house: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 12/1 Kazhimukan str.,
Nur-Sultan, 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.	д.ф.-м.н., проф. (Россия)
Бахтизин Р.З.	д.ф.-м.н., проф. (Россия)
Гиниятова Ш.Г.	д.ф.-м.н. (Казахстан)
Даулетбекова А.К.	д.ф.-м.н., PhD (Казахстан)
Ержанов К.К.	д.ф.-м.н., PhD (Казахстан)
Жумадилов К.Ш.	доктор PhD (Казахстан)
Здоровец М.	к.ф.-м.н. (Казахстан)
Кадыржанов К.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Кайнарбай А.Ж.	д.ф.-м.н. (Казахстан)
Кутербеков К.А.	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Луцик А.Ч.	д.ф.-м.н., проф. (Эстония)
Морзабаев А.К.	д.ф.-м.н. (Казахстан)
Мырзакулов Р.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Нурахметов Т.Н.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Сауытбеков С.С.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Салиходжа Ж.М.	д.ф.-м.н. (Казахстан)
Тлеукиенов С.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Усеинов А.Б.	PhD (Казахстан)
Хоши М.	PhD, проф. (Япония)

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

Ответственный секретарь, компьютерная верстка: А. Нурболат

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

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

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16999-ж от 27.03.2018г.

Тираж: 25 экземпляров

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, 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

№2(127)/2019

МАЗМҰНЫ

<i>Алиева Г.Ж., Кабдрахимова Г.Д., Садықов Б.М., Насурлла М., Мукан Ж., Усабаева Г., Кучук Я., Жолдыбаев Т. К.</i> $E_p = 30$ МэВ энергиялық ^{103}Rh ядросындағы (p,xp) реакциясының екінші реттік протондар эмиссиясы	8
<i>Аралбаева Г.М., Гиниятова Ш.Г.</i> TiO_2 -де латентті тректердің параметрлерін бағалауға арналған термиялық шыңның моделі	16
<i>Жексембаева А., Абуова Ф.У., Ақылбеков А.Т., Абуова А.У., Сарсебай Е.</i> LaMnO_3 кристалының (001) бетіндегі процестерді кванттық механикалық модельдеу	25
<i>Мейрамбай А., Ержанов К.К., Ержанова Ж.О.</i> Фейнмандық диаграммалар толық интегралданатын статистикалық тор жүйесі ретінде	31
<i>Аумаликова М., Ибраева Д., Жумадилов К., Шижкина Е., Бахтин М., Кашкинбаев Е.</i> Уран өндіретін және өндейтін кәсіпорындарда жұмыс істейтін қызметкерлер мен тұрғылықты халықтың дозалық жүктемесін есептеу	38
<i>Ибраева А.Д.</i> Si_3N_4 -те тректүзілу механизмін сипаттау үшін термиялық шыңның серпімсіз моделінің қолдануын зерттеу	48
<i>Мырзакулов Н.А., Мырзакулова Ш.А., Мейрбеков Б.К.</i> $(2+1)$ өлшемді $F(T)$ гравитациясының фермиондық өріспен байланысқандағы космологиялық шешім	57
<i>Рахымбеков А.Ж.</i> Суперионды өткізгіштегі электрлік өткізгіштікті есептеу	67
<i>Сарсенова С.М., Степаненко В.Ф., Жумадилов К.Ш.</i> Оптикалық стимуляцияланған люминесценттік (ОСЛ) дозиметрия әдісінің қазіргі жағдайы	72
<i>Сүйжимбаева Н.Т., Калиев А.М., Разина О.В., Цыба П.Ю.</i> Гейзенбергтің ХХХ моделіндегі 4-еуі кері аударылған спиндер үшін Бете анзацы	80

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

№2(127)/2019

CONTENTS

<i>Aliyeva G.Zh., Kabdrakhimova G.D., Sadykov B.M., Nassurlla M., Mukan Zh., Ussabaeva G., Kucuk Y., Zholdybaev T.K.</i> The emission of secondary protons from reaction (p,xp) at an energy of 30 MeV in the nucleus of ^{103}Rh	8
<i>Aralbayeva G.M., Giniyatova Sh.G.</i> The thermal spike model to estimate the parameters of latent tracks in TiO_2	16
<i>Zheksembayeva A., Abuova F.U., Akylbekov A.T., Abuova A.U., Sarsebai E.</i> Quantum mechanical modeling of processes on the surface of a LaMnO_3 (001) crystal	25
<i>Meirambay A., Yerzhanov K.K., Yerzhanova Zh.O.</i> Feynman diagrams as a completely integrable lattice statistical system	31
<i>Aumalikova M., Ibrayeva D., Zhumadilov K., Shishkina E., Bakhtin M., Kashkinbayev Ye.</i> Calculation of radiation burden of personnel and public, working and living in area of the uranium mining and uranium-processing enterprises	38
<i>Ibrayeva A.D.</i> Study of the applicability of the inelastic thermal peak model to describe the track formation mechanism in Si_3N_4	48
<i>Myrzakulov N.A., Myrzakulova Sh.A., B.K Meirbekov</i> Cosmological solutions for $F(T)$ gravity with fermion fields in (2+1) dimensions	57
<i>Rakhymbekov A.Zh.</i> Calculation of electrical conductivity of a superionic conductor	67
<i>Sarsenova S.M., Stepanenko V.F., Zhumadilov K.Sh.</i> The modern state of optically stimulated luminescence (OSL) dosimetry method	72
<i>Suikimbayeva N.T., Kaliyev A.M., Razina O.V., Tsyba P.Yu.</i> The Bethe ansatz in the XXX model of Heisenberg for the 4-inverted spins	80

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

№2(127)/2019

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Алиева Г.Ж., Кабдрахимова Г.Д., Садыков Б. М., Насурлла М., Муқан Ж., Усабаева Г., Кучук Я., Жолдыбаев Т. К.</i> Эмиссия вторичных протонов из реакции (p,xp) при энергии 30 МэВ на ядре ^{103}Rh	8
<i>Аралбаева Г.М., Гиниятова Ш.Г.</i> Модель термического пика для оценки параметров латентных треков в TiO_2	16
<i>Жексембаева А., Абуова Ф.У., Акылбеков А.Т., Абуова А.У., Сарсебай Е.</i> Квантово-механическое моделирование процессов на поверхности кристалла LaMnO_3 (001)	25
<i>Мейрамбай А., Ержанов К.К., Ержанова Ж.О.</i> Фейнмановские диаграммы как вполне интегрируемая статистическая система решетки	31
<i>Аумаликова М., Ибраева Д., Жумадилов К., Шишкина Е., Бахтин М., Кашкинбаев Е.</i> Расчет дозовой нагрузки персонала и населения, работающих и проживающих в области уранодобывающего и ураноперерабатывающего предприятий	38
<i>Ибраева А.Д.</i> Изучение применимости модели неупругого термического пика для описания механизма трекообразования в Si_3N_4	48
<i>Мырзакулов Н.А., Мырзакулова Ш.А., Мейрбеков Б.К.</i> Космологические решения для $F(T)$ гравитации с фермионными полями в (2+1) размерности	57
<i>Рахымбеков А.Ж.</i> Расчет электрической проводимости суперионного проводника	67
<i>Сарсенова С.М., Степаненко В.Ф., Жумадилов К.Ш.</i> Современное состояние метода оптически стимулированной люминесцентной (ОСЛ) дозиметрии	72
<i>Суйкимбаева Н.Т., Калиев А.М., Разина О.В., Цыба П.Ю.</i> Анзац Бете в ХХХ модели Гейзенберга для 4-х перевернутых спинов	80

А. Жексембаева, Ф.У. Абуова, А.Т. Ақылбеков, А.У. Абуова, Е. Сарсебай

*Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
(E-mail: aizhan_zheksembaeva@mail.ru)*

$LaMnO_3$ кристалының (001) бетіндегі процестерді кванттық механикалық модельдеу

Аңдатпа: Қатты оксидті отын элементтерін (ҚООЭ) жағу кезінде олардың жоғары тиімділігі мен экологиялығына байланысты айтарлықтай қызығушылық тудырады. Отын элементі химиялық энергияны электр энергиясына тікелей түрлендіретін электрохимиялық ұяшық болып табылады. Отын элементтерінің осы тобының артықшылықтары жоғары тиімділікті, ұзақ мерзімді тұрақтылықты, отын таңдауға қатысты икемділікті, қалдықтарының төмен деңгейлігін, сондай-ақ салыстырмалы төмен құндылығын қамтиды. Жұмыста $LaMnO_3$ перовскитінің электрондық құрылымы және кристалдық құрылымдарының сипаттамалары есептеу нәтижелері келтірілген.

Түйін сөздер: қатты оксидті отын элементтері, тығыздық функционалы теориясы, перовскит, квантты-механикалық модельдеу

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-68-36-2019-127-2-25-30>

Кіріспе. Соңғы уақытта дәстүрлі энергия көздеріне (көмір, мұнай, табиғи газ) бағаның тұрақты өсуіне байланысты балама энергетиканы, атап айтқанда отын элементтері негізінде электрохимиялық энергия көздеріне негізделген сутегі энергетикасын дамытуға көп көңіл бөле бастады. Аккумуляторлардан айырмашылығы отын элементтеріндегі отын және тотықтырғыш электродтарға үнемі беріледі, ал химиялық реакция өнімдері олардан бөлінеді, яғни үздіксіз жұмыс істеуі қамтамасыз етіледі. Кез келген отын элементінің негізгі компоненттері катод, анод және электролит болып табылады.

Дәстүрлі энергия көздері алдындағы отын элементтерінің негізгі артықшылығы пайдалы әсердің неғұрлым жоғары коэффициенті болып табылады. Отын элементтері шусыз жұмыс істейді, және де сутегі отын ретінде пайдаланылған жағдайда қоршаған ортаға экологиялық зиянды химиялық қосылыстар шығарылмайды.

Сонымен қатар, ҚООЭ-дегі жоғары жұмыс температурасы ($850-1000^\circ\text{C}$) осы электрохимиялық құрылғылардың елеулі кемшілігі болып табылады [1,2], осы уақытқа дейін оларды коммерцияландыруға және жеке үйлерде жылу мен энергияның аралас көздері ретінде жаппай қолдануға кедергі келтіреді. Мұндай құрылғыларға қойылатын басты талап-1000 сағат бойы үздіксіз жұмыс істегенде және жалпы қызмет ету мерзімі кемінде 5 жыл болғанда қуаттылығын 0.1 % - дан артық төмендету қажет.

Алғашқы қағидалардан (ab initio) есептеулер, басқа физикалық және физика-химиялық әдістермен бірге, кристалдардың, беттердің және жеке молекулалардың құрылымдардың қасиеттерін және реактивтілігін тек теоретиктердің ғана емес, эксперименталды химиктер мен биологтардың зерттеуіндегі тиімді құрал болды. Квантты-механикалық есептеулердің заманауи әдістері бізге қатты бөлшектер мен молекулалардың әр түрлі физика-химиялық қасиеттерін, газ фазасындағы молекулалардың және қатты денелердің электрондық және кеңістіктік құрылымын негізгі күйдегі тәжірибелік әдістердің деректерімен салыстыруға мүмкіндік береді. Кванттық-механикалық есептеу әдістерінің мүмкіндіктерін пайдалану тәжірибелік зерттеулерге қол жетімді емес немесе қиынға түсетін осындай сипаттамалар туралы ақпаратты алуға мүмкіндік береді (мысалы, өтпелі күй туралы мәліметтер). Қазіргі заманғы компьютерлік техника мүмкіндіктерінің күрт өсуі нәтижесінде, сондай-ақ есептеу әдістері мен алгоритмдерінің айтарлықтай жақсаруы, кванттық механикалық үлгілеудің қазіргі заманғы әдістері жаңа химиялық құрылымдардың, олардың құрылымы мен қасиеттерінің бар болу мүмкіндігін алдын ала болжай алатындығы көптеген авторлардың еңбектерінде көрсетілген [3].

Есептеу әдістері. Қатты оксидті отын элементтері катодтарының бетіндегі процестерді Атом деңгейінде модельдеу үшін жалпыланған градиентті жақындауда тығыздық функционалы теориясының (ТФТ) әдісі таңдалды. Барлық есептеулер VASP 5.3.3 [4] бағдарламалық кешенін пайдалану арқылы жүргізілді, мұнда ТФП әдісі периодтық шекаралық шарттарды қолдану арқылы жазық толқындар базисінде іске асырылды. Бұл бағдарламалық кешенде үнемі жаңартылып отыратын, оңтайландырылатын және толықтырылатын әртүрлі есептік әдістердің кең жиынтығы іске асырылды. VASP физика, химия және материалдар туралы ғылымның әр түрлі салаларында зерттеумен айналысатын көптеген ғылыми топтармен қолданылады.

Модельдеуде жалпыланған толқындар әдісімен (Projector-Augmented Wave, PAW) біріктіріп PBE жалпыланған градиентті жақындаудың функционалы қолданылды [5], ол жалпыланған жазық толқындардың (Linearized Augmented-Plane-Wave, LAPW) әдістері біріктірілді.

Есептеулердің дәлдігін тексеру үшін бірінші кезекте оттегі молекуласының қасиеттері зерттелді. Есептеулер PAW псевдопотенциалдарды және епор жазық толқындарын кесу энергиясын пайдалану арқылы жүргізілді. $E = 520$ эВ. Есептер O_2 молекуласының негізгі күй энергиясы синглетті энергиядан 1.14 эВ төмен O_2 ($X^3 \Sigma_g^-$), триплеттік жағдайына сәйкес келетінін көрсетті. Бұл ретте тепе-тең аралықтар 1.23 \AA және 1.24 \AA -ке тең триплет және синглет жағдайлары үшін 1.21 \AA , бұл сәйкесінше эксперименталды 1.21 \AA шамасына өте жақын. Оттегі молекуласының диссоциация энергиясы $5,62$ эВ-ге тең деп есептелінген, бұл осындай типтегі есептеулерге тән мән болып табылады. Сондай-ақ, автор Е. А. Котоминнің [6] жұмысында псевдопотенциалдық таңдауына байланысты 5.9 эВ және 5.24 эВ тең алынған. Диссоциация энергиясының соңғы шамасы $5,12$ эВ эксперименталды өлшенген мәнімен өте жақсы сәйкес болса да, бірақ бұл жағдайда теория O_2 молекуласындағы 1.29 \AA -ге тең болатын атомаралық қашықтықты сипаттайды. Осылайша, осы жұмыста келтірілген есептеу нәтижелері 10% қателікпен 2 молекуласының диссоциация энергиясын болжайды.

Біздің есептеулерімізде La, Mn_pv, O валенттік электрондары үшін келтірілген шектік энергия немесе (1-кесте) келтірілген электрондар санымен қолданылатын PAW псевдопотенциалдарының жиынтығы пайдаланылды, мұндағы pv индексі, Mn элементінің 3p деңгейлері есептеудің жоғары дәлдігін қамтамасыз ететін электрондардың валенттік күйі ретінде қарастырылады [7-8].

Кесте 1 – La, Mn_pv, O валентті электрондар үшін пайдаланылатын псевдопотенциалдардың келтірілген шектік энергиясымен электрондар саны

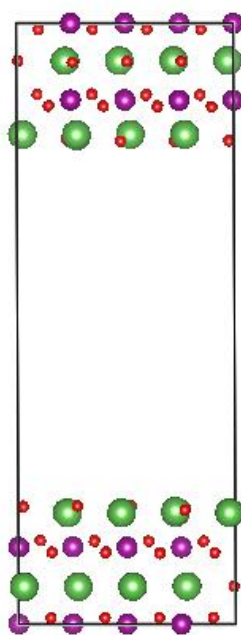
Псевдопотенциалдар	Энергия, эВ	Валенттік электрондар саны	Валенттік электрондар
La	219,292	11	$5s^2 5p^6 6s^2 5d$
Mn_pv	269,864	13	$3p^6 4s^1 3d^6$
O	400	6	$2s^2 4p^4$
Ag	249,844	11	$2s^1 d^{10}$

Модельдік ұяшыққа 10^{-3} эВ болатын есептеулердің қажетті дәлдігі жоғарыда талқыланған оттегі молекуласы сияқты жазықтық толқындарының кесу энергиясын қолдана отырып қол жеткізілді; барлық құрылымдар үшін Бриллюэннің бірінші аймағындағы k-нүктелер саны геометрияны оңтайландыру және көлем мен пластина жағдайларының тығыздығын құру кезінде Монхорст-Пак схемасының көмегімен алынған $4 \times 4 \times 1$ тор түрінде таңдап алынды [9].

LaO бетімен шектелген $LaMnO_3$ (001) бетінде оттегінің адсорбциясы

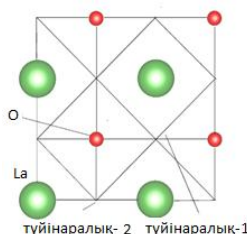
Оттегінің адсорбциясын модельдеу үшін LaO-шектеулі ($LaMn_{0.75}O_{2.5}$) стехиометриялы емес симметриялы пластинадан тұратын 7 жазықтықты пластина қарастырылды (1-сурет).

2- суретте көрсетілгендей, LaO - шектелген бет үшін оттегі атомының адсорбциясы " La ионының үстінде ", " O ионының үстінде ", "түйінаралық-1", "түйінаралық-2" позицияларында топтастырылған [10].



Сурет 1 – (001) $LaMnO_3$ жазықтық моделі

LaO - шектелген беттегі адсорбцияланған оттегінің оңтайлы конфигурациялары үшін біздің қорытындылар әдебиетте келтірілген деректермен келісіледі [11]. " La ионының үстінде" және " O ионының үстінде" позицияларындағы оттегінің атомдық адсорбциясы энергетикалық тұрғыдан тиімсіз болып шықты. Адсорбцияланған оттегі атомы жақын жердегі атомдардан 3.6 Å қашықтықта орналасқан. Адсорбент пен адсорбат арасындағы химиялық өзара іс-қимыл осы позициялар үшін мүмкін емес.



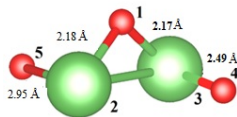
Сурет 2 – Адсорбцияның мүмкін орындары: LaO-мен шектелген бет " La ионының үстінде ", " O ионының үстінде ", "түйінаралық-1", "түйінаралық-2"

Кесте 2 – "Түйінаралық-2" позициясындағы оттегі атомының адсорбциясы. d (Å) атомдардың ығысуы, q (e) эффективті заряд

№	Атомдар	d	q
1	O		-1.27
2	La	0.45	2.01
3	La	0.38	2.02
4	O	0.06	-1.26
5	O	0.04	-1.27

LaO -шектеулі беті үшін ең энергетикалық тиімді конфигурация болып La-O арасындағы байланыс ұзындығы 2.17 Å -ге жуық "түйінаралық-2" позициясы деп анықталынды. Бұл дәл осы ұзындығы 2.68 Å-ге тең көлемдік үлгідегі байланыстан әлде қайда қысқа. Оттек атомының адсорбциясы нәтижесінде 1,27 e шамадағы заряд жақын жердегі иондардан оттегі атомымен адсорбцияланған шөгіндіден ауыстырылады (2-кесте, 2-сурет).

$LaMnO_3$ үшін "түйінаралық-1" позициясы "түйінаралық-2" қарағанда энергетикалық жағынан тиімсіздеу болды. Бұл позицияда адсорбцияланған оттегі атомы La беттік атомынан -1.24 е алады, La-O байланыс ұзындығы 2.85 Å құрайды (3-кесте).



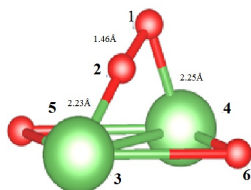
Сурет 3 – La ионы үстінде оттегі атомының адсорбциясы. Атомдар нөмірлері 3-кестеге сәйкес

Кесте 3 – "Түйінаралық-2" позициясындағы оттегі атомының адсорбциясы. d (Å) атомдардың ығысуы, q (e) эффективті заряд

№	Атомдар	d	q
1	O		-1.24
2	La	0.45	1.98
3	La	0.38	1.99
4	O	0.06	-1.27
5	O	0.04	-1.28

LaO-шектелген бетте молекулалық оттегінің адсорбциясы

Оттегінің молекулалық адсорбциясы үшін ең тиімді позиция ретінде атомдық адсорбция үшін "түйінаралық-2" позициясы таңдалды.



Сурет 4 – La ионы үстінде оттегі молекуласының адсорбциясы. Атомдар нөмірлері 4-кестеге сәйкес

Кесте 4 – "Түйінаралық-2" позициясындағы оттегі молекуласының адсорбциясы. d (Å) атомдардың ығысуы, q (e) эффективті заряд

№	Атомдар	d	q
1	O		-0.61
2	O		-0.72
3	La	0.45	2.00
4	La	0.38	2.01
5	O	0.06	-1.26
6	O	0.04	-1.25

LaO-шектелген беттегі адсорбцияланған оттегі молекуласының тепе-тең орналасуы 4-суретте көрсетілген конфигурацияны білдіреді. O₂ молекуласындағы оттегінің екі атомы да олардың әрқайсысынан жақын La ионына дейінгі қашықтық бірдей, ал молекуланың өзі 77°-ге тең нормаль көлбеу бұрышы бар. Бұл конфигурацияда адсорбцияланған молекуланың жиынтық заряды -1.33 е құрайды, ал оттегі молекуласының ішіндегі O-O байланыс ұзындығы 1.46 Å тең (5-кесте).

Қорытынды. Бізге дейінгі зерттеулерден белгілі болғандай [12, 13], $LaMnO_3$ кристаллының LaO - мен шектелген бетінде оттегінің адсорбция процесі MnO_2 -мен шектелген

Кесте 5 – "Түйінаралық-2" позициясындағы оттегі молекуласының адсорбциясы. d (Å) атомдардың ығысуы, q (e) эффективті заряд

Адсорбция энергиясы /эВ	Оттегі атомы мен молекуласының адсорбция орны	
	"түйінаралық-1"	"түйінаралық-2"
$E_{\text{адс}}^{\text{атом}}(0)$	0.06	-1.84
$E_{\text{адс}}^{\text{моп}}(0)$	-1.65	-3.35

беттегі осындай процеспен салыстырғанда энергетикалық тиімді болып табылады. Біздің жұмысымыздың нәтижелері осы нәтижелерді растайды: ең тиімді конфигурацияларда LaO терминациясы үшін адсорбция энергияларының мәндері MnO_2 терминациясымен салыстырғанда жоғары [10].

Әдебиеттер тізімі

- 1 Huang K., Goodenough J.B. Renewable power generation solid oxide fuel cell technology: principles, performance and operations //Series in Energy, Cambridge UK: Woodhead Publishing Limited.- 2009.-Vol.11. -P.1002-1006.
- 2 Singhal S.C. Advances in solid oxide fuel cell technology //Solid State Ionics.-2000.-Vol. 135.- P.305-313.
- 3 Steele B.C.H., Heinzl A. Materials for fuel-cell technologies //Nature. -2001.- Vol. 414. - P. 345-352 .
- 4 Vienna Ab initio Simulation Package. [Электрон ресурc].URL: <http://www.vasp.at/>. (дата обращения: 08.01.2019)
- 5 Kresse G., Hafner J. VASP the Guide, University of Vienna, [Electr.resourse]. URL:<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>. (дата обращения: 08.01.2019).
- 6 Blchl P. E. Projector augmented-wave method //Phys. Rev. B. - 1994. -Vol.50. -P. 17953.
- 7 Heif E., Maier J. Chapter in a book: Thermodynamics - Interaction studies - Solids, liquids and gases. - 2011.- P.491-518.
- 8 Kotomin E.A., Mastrikov, Yu., Heifets E., Maier J. Adsorption of atomic and molecular oxygen on the LaMnO3 surfaces: ab initio supercell calculations and thermodynamics //Physical Chemistry Chemical Physics. -2008.- Vol. 7. - P. 4644-4649.
- 9 Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations //Phys. Rev. B. -1976. - Vol. 13. -P. 5188-5192.
- 10 Абуова А.У. Серебро как эффективный катализатор для восстановления молекулярного кислорода на поверхности (001) LaMnO3 // Вестник Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева. - 2015.- Т. №6 105.- Стр. 145 - 150.
- 11 Piskunov S., Jacob T., Spohr E. Oxygen adsorption at La1xSrxMnO3 (001) surfaces: Predictions from first principles //Physical Review B.- 2011. -Vol. 83. - P.568-574.
- 12 Choi Y., Lynch M.E., Lin M.C., Liu M. Prediction of O-2 Dissociation Kinetics on LaMnO3-Based Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cells //Journal of Physical Chemistry C. -2009. -Vol. 113. -P. 7290-7297.
- 13 Choi Y., Mebane D.S., Lin M.C., Liu M. Oxygen reduction on LaMnO3-based cathode materials in solid oxide fuel cells //Chemistry of Materials. -2007. - Vol.19. -P. 1690-1699.

А. Жексембаева, Ф.У. Абуова, А.Т. Ақылбеков, А.У. Абуова, Е. Сарсебай

Евразийский национальный университет имени Л. Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

Квантово-механическое моделирование процессов на поверхности кристалла $LaMnO_3$ (001)

Аннотация: Твердые оксидные топливные элементы (КООЭ) представляют значительный интерес при сжигании топлива в зависимости от их высокой эффективности и экологичности. Топливным элементом является электрохимическая ячейка, которая непосредственно преобразует химическую энергию в электрическую. Преимущества данной группы топливных элементов включают высокую эффективность, долгосрочную стабильность, гибкость в отношении выбора топлива, низкий уровень выбросов, а также сравнительно низкую стоимость. В работе приведены результаты расчета характеристик кристаллических структур и электронной структуры перовскита $LaMnO_3$.

Ключевые слова: твердо-оксидные топливные элементы, теория плотности, перовскит, квантово-механическое моделирование.

A. Zheksembayeva, F.U. Abuova, A.T. Akylbekov, A.U. Abuova, E. Sarsebai

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Quantum mechanical modeling of processes on the surface of a $LaMnO_3$ (001) crystal

Abstract: Solid oxide fuel cells (COE) are of considerable interest in fuel combustion depending on their high efficiency and environmental friendliness. A fuel cell is an electrochemical cell that directly converts chemical energy into electrical energy. The advantages of this fuel cell group include high efficiency, long-term stability, flexibility in fuel selection, low emissions, and

relatively low cost. The paper presents the results of calculating the characteristics of the crystal structures and the electronic structure of the perovskite $LaMnO_3$.

Keywords: solid oxide fuel cells, density theory, perovskite, quantum mechanical modeling.

References

- 1 Huang K., Goodenough J.B. Renewable power generation solid oxide fuel cell technology: principles, performance and operations, Series in Energy, Cambridge UK: Woodhead Publishing Limited, 11, 1002-1006(2009).
- 2 Singhal S.C. Advances in solid oxide fuel cell technology, Solid State Ionics, 135, 305-313 (2000).
- 3 Steele B.C.H., A. Heinzl. Materials for fuel-cell technologies, Nature, 414, 345-352 (2001).
- 4 Vienna Ab initio Simulation Package. Available at: <http://www.vasp.at/>. (accessed: 08.01.2019).
- 5 Kresse G., Hafner J. VASP the Guide, [Electr resource], University of Vienna. Available at: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>. (accessed: 08.01.2019).
- 6 Blchl P. E. Projector augmented-wave method, Phys. Rev. B., 50, 17953 (1994).
- 7 E. Heif, J. Maier. Chapter in a book: Thermodynamics - Interaction studies - Solids, liquids and gases, 491-518 (2011).
- 8 Kotomin E.A., Mastrikov, Yu., Heifets E., Maier J. Adsorption of atomic and molecular oxygen on the LaMnO3 surfaces: ab initio supercell calculations and thermodynamics, Physical Chemistry Chemical Physics, 7, 4644-4649(2008).
- 9 Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations, Phys. Rev. B, 13, 5188-5192(1976).
- 10 Abuova A.U. Serebro kak effektivnyy katalizator dlya vosstanovleniya molekulyarnogo kisloroda na poverkhnosti (001) LaMnO3 [The Effective Catalyst for the Recovery of Molecular Oxygen (001) LaMnO3], Vestnik Yevraziyskogo natsional'nogo universiteta im. L.N. Gumileva [Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University], 6 (105), 145 - 150 [in Russian]
- 11 Piskunov S., Jacob T., Spohr E. Oxygen adsorption at La1-xSrxMnO3 (001) surfaces: Predictions from first principles, Physical Review B, 83, (2011).
- 12 Choi Y., Lynch M.E., Lin M.C., Liu M. Prediction of O-2 Dissociation Kinetics on LaMnO3-Based Cathode Materials for Solid Oxide Fuel Cells, Journal of Physical Chemistry C, 113, 7290-7297 (2009).
- 13 Choi Y., Mebane D.S., Lin M.C., Liu M. Oxygen reduction on LaMnO3-based cathode materials in solid oxide fuel cells, Chemistry of Materials, 19, 1690-1699 (2007).

Сведения об авторах

Жексембаева А. - наноматериалдар және нанотехнологиялар мамандығының 1 - курс магистранты, Физика - техникалық факультет, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш. 13, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Абуова Ф.У. - Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының доцент м.а, PhD докторы, Физика - техникалық факультет, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш. 13, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Ақылбеков А.Т. - Физика - техникалық факультетінің деканы, профессор, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш. 13, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

А.У. Абуова - Техникалық физика кафедрасының доцент м.а, PhD докторы, Физика - техникалық факультет, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш. 13, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Сарсебай Е. - Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының "Нанотехнология және наноматериалдар" мамандығының 1-ші курс студенті, Физика - техникалық факультет, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш. 13, Нұр-Сұлтан, Қазақстан.

Zhaksembayeva A. - 1st year undergraduate of nanomaterials and nanotechnologies, Physics and technical faculty, L.N. Gumilyov Eurasian National University, K. Munaytpasov str, 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Abuova F.U. - Associate Professor of the Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, PhD, Physics and Technology Faculty, L.N. Gumilyev Eurasian National University, K. Munaitpasov Str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

Akilbekov A.T. - Dean of the Faculty of Physics and Technology, Ph.D., Professor, L.N. Gumilyev, Eurasian National University K.Munaytpasov Str., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Sarsebai E. - 1st year undergraduate of the Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, specialty "Nanomaterials and Nanotechnologies". L.N. Gumilyev Eurasian National University, K. Munaytpasov str, 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Поступила в редакцию 15.05.2017

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

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

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

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

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

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

ГТАМРК <http://grnti.ru/>

Автор(лар)дың аты-жөні

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

Автор(лар)дың E-mail-ы

Мақала атауы

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

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

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

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

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

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

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

Әдебиеттер тізімін рәсімдеу мысалдары

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

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

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

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

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

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

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

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

Реквизиты:

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

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК банка: KСJBKZKX

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кпн 859- за статью

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

Бик банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

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

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

4)РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Народный Банк Казахстан"

БИК Банка: HSBKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кпн 859.

"За публикацию в Вестнике ЕНУ ФИО автора"

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., 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. - - **Conferences proceedings**

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

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

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

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

Periodicity of the journal: 4 times a year.

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

Реквизиты:

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

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК банка: КСJBKZKX

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кпн 859- за статью

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

Бик банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

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

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

4) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Народный Банк Казахстан"

БИК Банка: HSBKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кпн 859.

"За публикацию в Вестнике 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. Стилевой 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 Нургазина 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://semi.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:

Реквизиты:

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

АО "Банк ЦентрКредит"

БИК банка: KСJBKZKX

ИИК: KZ978562203105747338

Кбе 16

Кпн 859- за статью

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

Бик банка: KINCKZKA

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

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

БИК Банка: IRTYKZKA

ИИК: KZ599650000040502847

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

4) РГП ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева МОН РК АО "Народный Банк Казахстан"

БИК Банка: HSBKKZKX

ИИК: KZ946010111000382181

Кбе 16

Кпн 859.

"За публикацию в Вестнике 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

Введение

Текст введения...

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

Заголовок секции

1.1 Заголовок подсекции

Окружения.

Теорема 1. ...

Лемма 1. ...

Предложение 1. ...

Определение 1. ...

Следствие 1. ...

Замечание 1. ...

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

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

2. Формулы, таблицы, рисунки

$$\delta_N(\varepsilon_N; D_N)_Y \equiv \delta_N(\varepsilon_N; T; F; D_N)_Y \equiv \inf_{(l^{(N)}, \varphi_N) \in D_N} \delta_N \left(\varepsilon_N; \left(l^{(N)}, \varphi_N \right) \right)_Y, \quad (28)$$

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

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

$$|\gamma_N^{(\tau)}| \leq 1 (\tau=1, \dots, N)$$

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

Таблица 3 – Название таблицы

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

3. Ссылки и библиография

Для ссылок на утверждения, формулы и т. п. можно использовать метки. Например, теорема 2, Формула (28)

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

Список литературы оформляется следующим образом.



Рисунок 1 – Название рисунка

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, посвященная 110-летию со дня рождения академика С.М.Никольского, Москва, Россия, 2015. – Москва, 2015. –С.141-142. - **труды конференций**
- 4 Курмуков А.А. Ангиопротекторная и гипополидемическая 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. Жубанышева¹, Н. Темиргалиев¹, А.Б. Утесов²

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

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

Компьютерлік (есептеуіш) диаметр мәнінде функцияларды сандық дифференциалдау

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

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

A.Zh.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 chislenno go analiza [Elements of numerical analysis] (Yanus, Moscow, 1995). [in Russian]
- 2 Temirgaliyev N. Komp'yuternyj (vychislitel'nyj) poperechnik kak sintez izvestnogo i novogo v chislenno m analize [Computational (numerical) diameter as a synthesis of the known and the new in numerical analysis], Vestnik Evrazijskogo nacional'nogo universiteta imeni L.N. Gumileva [Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University], 4 (101), 16-33 (2014). [in Russian]
- 3 Zhubanysheva A.Zh., AbikenovaSh.K. O normah proizvodnyh funkciy s nulevymi znachenijami zadannogo nabora linejnyh funkcionalov i ih primenenija 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 teorija priblizhenija funkciy" [International conference on Function Spaces and Approximation Theory dedicated to the 110th anniversary of S. M. Nikol'skii]. Moscow, 2015, pp. 141-142. [in Russian]

- 4 Kurmukov A. A. Angioprotekturnaja i gipolipidemicheskaaja aktivnost' leukomizina [Angioprotective and lipid-lowering activity of leukomycin] (Bastau, Almaty, 2007, P. 3-5). [in Russian]
- 5 Kyrov V.A., Mihajlichenko G.G. Analiticheskij metod vlozhenija simplekticheskoj geometrii [The analytic method of embedding symplectic geometry], Cibirskie jelektronnye matematicheskie izvestija [Siberian Electronic Mathematical Reports], **14**, 657-672 (2017). doi: 10.17377/semi.2017.14.057. Available at: <http://semr.math.nsc.ru/v14/p657-672.pdf>. [in Russian]. (accessed 08.01.2017).

Сведения об авторах:

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

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

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

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

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

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

Поступила в редакцию 15.05.2017

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

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің
Хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы.
-2019 - 2(127) - Нұр-Сұлтан: ЕҰУ. 100-б.
Шартты б.т. - 9,375 Таралымы - 25 дана.

Мазмұнына типография жауап бермейді.

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

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды