

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ**

**«Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ» КЕАҚ**

**Студенттер мен жас ғалымдардың  
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»  
XVIII Халықаралық ғылыми конференциясының  
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ  
XVIII Международной научной конференции  
студентов и молодых ученых  
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»**

**PROCEEDINGS  
of the XVIII International Scientific Conference  
for students and young scholars  
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»**

**2023  
Астана**

**УДК 001+37**  
**ББК 72+74**  
**G99**

**«GYLYM JÁNE BILIM – 2023» студенттер мен жас ғалымдардың XVIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XVIII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «GYLYM JÁNE BILIM – 2023» = The XVIII International Scientific Conference for students and young scholars «GYLYM JÁNE BILIM – 2023». – Астана: – 6865 б. - қазақша, орысша, ағылшынша.**

**ISBN 978-601-337-871-8**

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

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

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

**УДК 001+37**  
**ББК 72+74**

**ISBN 978-601-337-871-8**

**©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия  
ұлттық университеті, 2023**

**МАГНИЙ ФТОРИДИНІҢ КРИСТАЛДАРЫНДАҒЫ РАДИАЦИЯЛЫҚ АҚАУЛАРДЫ  
КВАНТТЫҚ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ**

Ахмедов Абзал Сабырович  
akhmedov00@gmail.com

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Ядролық физика жаңа материалдар және жаңа технологиялар  
кафедрасының 5 курс бакалавры, Астана, Қазақстан  
Ғылыми жетекшісі – Абуова Ф.У

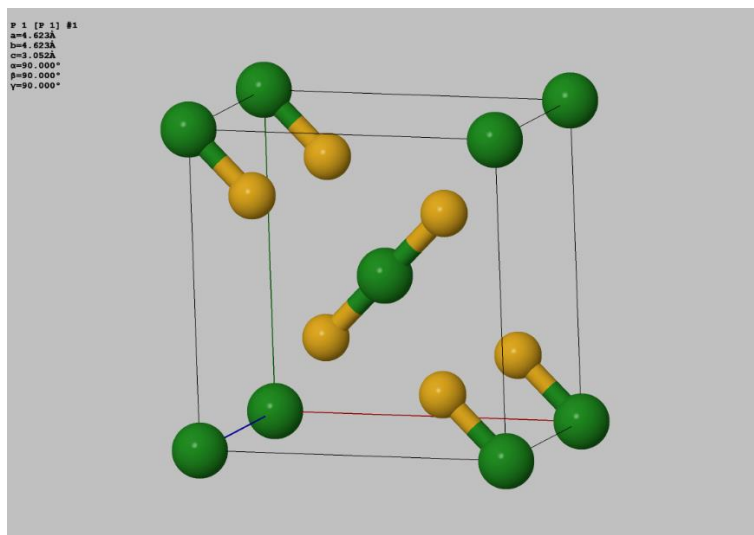
Магний фтор кристалындағы F-,H-центр ақауларының оптикалық материалдарда кең қолданылады. Магний фторидінің кристалы соңғы жылдары үлкен оптикалық перспективаларға ие болды. Жылдам электрондардың жұтылу, шағылысу және энергия шығыны спектрлерін өлшеу арқылы 150 эВ (электрон вольт) дейін жететін оптикалық тұрақты есептелді. Бұл Материалдар есептеу құрылғыларында, лазерлерде, дозиметрияда және ғарыш аппараттарында қолданылады. Магний фторид кристалы зерттеулер үшін үлкен қызығушылық тудырады. Өйткені магний фтор кристалы өте кең тыйым салынған зонасы бар және оның ультракүлгін сәулелердің өтімділік коэффициентінің шамасы 80%-тан үлкен [1]. Зерттеулердің көбісі кристалдың құрамында F-, H-центрлік дефектілерді немесе кристалдың құрамына басқа атомды енгізу процесстері жүргізілген [2]. Бұндай эксперименттер нәтижесінде кристалдағы дефект-центрлерінің құрылу энергияларының мөлшерлері анықталған [3]. Сонымен қатар, зерттеулер нәтижесінде магний фтор кристалының оптикалық қасиеттерінің жаңа мүмкіндіктері анықталған болған. Және де басқа жұмыстарда, магний фтор кристалының оптикалық қасиеттеріне сүйініп, өте ауыр атомдардың магний фтор кристалына енгізу нәтижесінде ядролық лазерлерді құрастыру жобалары орындалған [4].

Магний фториді – рутилдің құрылымы бар түссіз тұз болып табылады, яғни оның тетрагональды бірлік ұяшығы бар. Оның молярлық массасы  $M_{MgF_2} = 62.31$  г/моль. 10 эВ-ден 50 эВ-ге дейінгі аймақта электронды қозу спектрі экситондарға, плазмандарға және аймақаралық ауысуларға байланысты [5].

Жоғарыда айтылғандарға сәйкес зерттеудің мақсаты - Магний фтор кристалындағы бастапқы радиациялық ақауларды CRYSTAL программасы арқылы кванттық-химиялық әдісімен модельдеу. Сонымен қатар, дефектілердің нәтижесінде кристалдық торда пайда болатын өзгешіліктерді зерттеп сипаттау.

Тәжірбелік материалдары мен әдістері.

Осы экспериментте келесі сипаттамалары бар магний фтор кристаллы қолданылады: кристаллографиялық тобы –  $P4_2/mnm$ ; тор параметрлері  $a = b = 4.623$  Å,  $c = 3.052$  Å [6]. 1-суретте магний фтор кристалының қарапайым ұяшығы бейнеленген, жасыл атомдар – магний, қызғылт сары атомдар – фтор.



1-сурет - Магний фтор кристаллының геометриялық құрылымы

Санауларды жүргізу үшін бізге магний мен фтордың базистері қажет болады. Базис программалы кодтың маңызды бөлігі, өйткені CRYSTAL программасы осы базистер арқылы элементтердің қасиеттері туралы ақпаратты алады. Және дәл осы ақпарат арқылы санауларды жүргізеді. Бізде әр элементтің келесі базистері бар:

- Магний базистері:
  - Mg\_pob\_TZVP\_rev2
  - Mg\_pob\_TZVP\_2012
  - Mg\_pob\_DZVP\_rev2
  - Mg\_8-511G\_harrison\_1994
  - Mg\_8-511d1G\_valenzano\_2006
  - Mg\_8-61G\_causa\_1985
- Фтор базистері:
  - F\_pob\_TZVP\_rev2
  - F\_pob\_DZVP\_rev2
  - F\_pob\_TZVP\_2012
  - F\_7-311G\_nada\_1993

Базистан бөлек бізге санауларды арнайы әдістермен жүргізу керек болады. Есептеулерді санау үшін келесі әдістер қолданады:

- V3PW – PWGGA жергілікті емес корреляциямен біріктірілген үш параметрлі Бекке функционалдык (Perdew-Wang generalized gradient approximation – Жалпыланған Пердью-Ванг градиентінің жуықтауы);
- V3LYP – LYP (Lee-Yang-Parr) корреляциясымен біріктірілген үш параметрлі Бекке функционалы;
- PBE0 – PBEXC-тің (алмасу-корреляция Perdew-Becke-Ernzerhof) Адамо және Бароненің HF (Хартри-Фок) алмасуының 25%-мен жұмыс істейтін гибридті нұсқасы.

Осы ақпараттың барлығы .d12 файлға орнатылады. Бұл файлдың ішінде ақпаратты енгізу ережелерін сақтау қажет. Ең алдымен геометриялық ақпаратты **Ошибка! Источник ссылки не найден.**-кестедегідей енгіземіз:

1-Кесте - Геометриялық блок

Magnesium Fluoride – MgF	Жобаның аты
CRYSTAL	Жүйенің өлшемі, мұндағы жағдайда 3 өлшемді жүйе
0 0 0	Кристаллографиялық ақпарат
136	Кеңістік группа
4.654, 3.076	Тор параметрлері
2	Атомдар саны, мұнда 2 атом: Магний мен Фтор
12 0.5 0.5 0.5 9 0.69708 0.69708 0.0	Атомдық сан және олардың бөлшекті координаталары
END	Геометриялық блоктың соңы

Келесі қадамда атомдардың базистерін енгіземіз. Базистерді енгізгеннен соң END жазып базисті ақпарат блогын жабамыз. Соңғы блокта есептеу әдістері енгізілген Гамильтоннан және өздігінен үйлесімді өрістің есептеу параметрлері орнатылады.

Негізгі санаулар есептелгеннен кейін біз .out файлдан магний фтор кристалындағы атомдардың электр зарядын көре аламыз. Бұл ақпарат **Ошибка! Источник ссылки не найден.** және **Ошибка! Источник ссылки не найден.**-кестеде берілген.

2- Кесте - Магнийдің көрші атомдары

Атом элементі	Көрші атомдар	Ұяшық индекстері	Заряд
Mg	5 F	(0 0 0)	10.039
	3 F	(0 0 0)	9.98
	1 Mg	(0 0 -1)	9.99
	5 F	(0 0 -1)	9.99
	2 Mg	(0 0 0)	10
	5 F	(1 0 0)	10

3-Кесте - Фтордың көрші атомдары

Атом элементі	Көрші атомдар	Ұяшық индекстері	Заряд
F	2 Mg	(0 0 0)	10.039
	1 Mg	(0 0 0)	9.98
	4 F	(1 1 0)	10.023
	5 F	(0 0 0)	10.007
	3 F	(0 0 -1)	10.001
	2 Mg	(0 0 -1)	9.99

Есептеулерді жүргізу үшін .d12 файлдан басқа .d3 файл қажет болады. Осы файлдың ішіне кристалдың қасиеттеріне талдау операцияларын жүргізуге арналған арнайы кілт-сөздер жазылады, және олар арқылы санаулар жүргізіледі.

Эксперименттің дәлдігін арттыру үшін магний және фтордың базистерін жоғары аталған әдістер арқылы есептеулер жүргізілді. Осы санаулардың нәтижесі **Ошибка! Источник ссылки не найден.**-кестеде берілген.

Одан әрі есептеулер жүргізу үшін тор параметрлері, серпімділік модулі, жоғары жиілікті және статистикалық тұрақты параметрлерді түрлі әдістер арқылы есептеп, зерттеу нәтижелерімен салыстыруымыз қажет.

4-Кесте - Базистердің әртүрлі әдістермен комбинациялары

Basis	B3PW	B3LYP	PBE0
Mg_pob_TZVP_rev2/ F_pob_TZVP_rev2	7.97641241	7.943778	8.73293
Mg_pob_TZVP_rev2/ F_pob_DZVP_rev2	9.1480304	8.5493	9.3371223
Mg_pob_TZVP_rev2/ F_pob_TZVP_2012	8.058313	7.938852	8.6913694
Mg_pob_TZVP_2012/ F_pob_TZVP_rev2	11.395854	11.324832	11.759942
Mg_pob_TZVP_2012/ F_pob_DZVP_rev2	12.485125	12.438049	13.379835
Mg_pob_TZVP_2012/ F_pob_TZVP_2012	11.250545	10.61135	11.46878
Mg_pob_TZVP_2012/F_7-311G_nada_1993	8.5230943	8.4668208	9.294047
Mg_pob_DZVP_rev2/ F_pob_TZVP_rev2	8.6092176	8.5691633	8.7802412
Mg_pob_DZVP_rev2/ F_pob_DZVP_rev2	8.8290592	8.8023921	9.0119738
Mg_pob_DZVP_rev2/ F_pob_TZVP_2012	8.5873406	8.533189	8.7441812
Mg_pob_DZVP_rev2/ F_7-311G_nada_1993	7.9944587	7.9395457	8.7168394
Mg_8-511G_harrison_1994/ F_pob_TZVP_rev2	10.427945	10.377332	10.618425
Mg_8-511G_harrison_1994/ F_pob_DZVP_rev2	12.473153	12.420363	12.718871
Mg_8-511G_harrison_1994/ F_pob_TZVP_2012	10.150661	9.514024	10.340923
Mg_8-511G_harrison_1994/ F_7-311G_nada_1993	8.879291	8.839426	9.05494
Mg_8-511d1G_valenzano_2006/ F_pob_TZVP_rev2	10.587867	10.536654	11.380887
Mg_8-511d1G_valenzano_2006/ F_pob_DZVP_rev2	12.676966	12.641862	13.552356
Mg_8-511d1G_valenzano_2006/ F_pob_TZVP_2012	10.304079	9.666135	10.484273
Mg_8-511d1G_valenzano_2006/ F_7-311G_nada_1993	8.7146894	8.677056	8.8800531
Mg_8-61G_causa_1985/ F_pob_TZVP_rev2	13.621201	13.546097	13.875627
Mg_8-61G_causa_1985/ F_pob_DZVP_rev2	20.72664	20.639561	21.831966
Mg_8-61G_causa_1985/ F_pob_TZVP_2012	13.463646	12.758872	13.716984
Mg_8-61G_causa_1985/ F_7-311G_nada_1993	8.625273	8.57485	9.410702

**Ошибка! Источник ссылки не найден.**-кестеде осы шамалар көрсетілген. Бірақ жоғары аталған базистар есептеу барысында қателікке ұшырайды. Сондықтан BASISSET кілт-сөз қолданылады. Осы кілт-сөз арқылы CRYSTAL программасы өз базистар тізімінен ең тиімді базистерді қолданады. BASISSET қолдану үшін қосымша базистар тізімін таңдау қажет болады.

- STO-3G – Поплдың STO-3G минималды базалық жинағы (1-53)
- STO-6G - Поплдың STO-6G минималды базалық жинағы (1-36)
- POB-DZVP – POB қос-зета валенттілігі + қатты күй жүйелері үшін поляризация жинағы (1-35, 49, 74)
- POB-DZVPP – POB қос-зета валенттілігінің базалық жинағы + қатты күйдегі жүйелер үшін поляризациялық функциялардың қос жиынтығы (1-35, 49, 83)
- POB-TZVP – POB үштік-зета валенттілігі + қатты күй жүйелеріне арналған поляризация негізі (1-35, 49, 83)
- POB-DZVP-REV2 – POB қайта қаралған қос зета валенттілігі + қатты күй жүйелеріне арналған поляризация негізі (1-35)

- POB-TZVP-REV2 – POB үштік-зета валенттілігі + қатты күй жүйелері үшін поляризация негізі (1-35, 37-53, 55-56, 72-84)

5- Кесте POB-TZVP базис тізімімен саналған параметрлерің әдіске байланысты өзгерісі

Параметрлер		B3PW	B3LYP	HSE06	Эксперимент [7, 8, 9]
Тор параметрлері, Å	a	4.765	4.767	4.752	4.625
	c	3.126	3.128	3.118	3.052
Серпімдік модулі B, ГПа		103.57	106.15	107.59	101
Жоғары жиілікті диэлектрлік тұрақты $\epsilon$		1.7026	1.7084	1.6997	1.65
Поляризация тұрақтысы $\alpha$		24.6095	24.8139	24.5094	25.57

### Пайдаланылған әдебиеттер тізімі

1. Zhukova E. V. et al. Features of the photodecay kinetics of color centers in the surface layer of crystals //Journal of Optical Technology. – 2002. – Т. 69. – №. 3. – С. 154.
2. Lisitsyn V. M., Korepanov V. I., Yakovlev V. Y. Evolution of primary radiation defects in ionic crystals //Russian Physics Journal. – 1996. – Т. 39. – №. 11. – С. 1009-1028.
3. Abuova F. U. et al. Ab initio modeling of radiation damage in MgF2 crystals //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2014. – Т. 326. – С. 314-317.
4. Pimon M. et al. DFT calculation of 229thorium-doped magnesium fluoride for nuclear laser spectroscopy //Journal of Physics: Condensed Matter. – 2020. – Т. 32. – №. 25. – С. 255503.
5. Дотдаева Б. М., Голота А. Ф. Фторид магния для тонкослойной оптики //XXIII Российская молодежная научная конференция «Проблемы теоретической и экспериментальной химии».—Екатеринбург, 2013. – Издательство Уральского университета, 2013. – №. 23. – С. 325-327.
6. Cotter T. M., Thomas M. E., Tropf W. J. Magnesium fluoride (MgF2) //Handbook of Optical Constants of Solids. – Academic Press, 1998. – С. 899-918.
7. Haines J. et al. X-ray diffraction and theoretical studies of the high-pressure structures and phase transitions in magnesium fluoride //Physical Review B. – 2001. – Т. 64. – №. 13. – С. 134110.
8. Siqueiros J. M., Machorro R., Regalado L. E. Determination of the optical constants of MgF 2 and ZnS from spectrophotometric measurements and the classical oscillator method //Applied optics. – 1988. – Т. 27. – №. 12. – С. 2549-2553.
9. Domene C. et al. A transferable representation of the induced multipoles in ionic crystals //Molecular Physics. – 2002. – Т. 100. – №. 24. – С. 3847-3865.