

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**

№1(126)/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

Астана, 2019  
Astana, 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*

<b>Алдонгаров А.А.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Балапанов М.Х.</b>	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
<b>Бахтизин Р.З.</b>	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
<b>Гиниятова Ш.Г.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Даулетбекова А.Қ.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Ержанов Қ.К.</b>	ф.-м.ғ.к., PhD (Қазақстан)
<b>Жұмаділов Қ.Ш.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Здоровец М.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Қадыржанов Қ.К.</b>	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Кутербеков Қ.А.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Лушик А.Ч.</b>	доктор ф.-м.ғ.д., проф. (Эстония)
<b>Морзабаев А.К.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Мырзақұлов Р.Қ.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Нұрахметов Т.Н.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Сауытбеков С.С.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Тлеукенов С.К.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Усеинов А.Б.</b>	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: 25 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*

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

*Editorial address:* L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2, Satpayev str., of. 349, Astana,  
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., 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*

<b>Алдонгаров А.А.</b>	PhD (Казахстан)
<b>Балапанов М.Х.</b>	ф.-м.н., проф. (Россия)
<b>Бахтизин Р.З.</b>	ф.-м.н., проф. (Россия)
<b>Гиниятова Ш.Г.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Даулетбекова А.К.</b>	кандидат ф.-м.н., PhD (Казахстан)
<b>Ержанов К.К.</b>	кандидат ф.-м.н., PhD (Казахстан)
<b>Жумадилов К.Ш.</b>	доктор PhD (Казахстан)
<b>Здоровец М.</b>	к.ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Кадыржанов К.К.</b>	ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Кутербеков К.А.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Лущик А.Ч.</b>	ф.-м.н., проф. (Эстония)
<b>Морзабаев А.К.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Мырзакулов Р.К.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Нурахметов Т.Н.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Сауытбеков С.С.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Тлеукенов С.К.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Усеинов А.Б.</b>	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: 25 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

№1(126)/2019

МАЗМҰНЫ

<i>Балахаева Р., Акылбеков А., Даулетбекова А., Козловский А., Баймуханов З., Гиниятова Ш., Усеинов А., Садуова Б., Карим К.</i> SiO <sub>2</sub> /Si тректі темплэйтте екі типті электролит негізінде CdTe нанокластерлерін қалыптастыру	8
<i>Дукенов А.Б., Усеинов А.Б., Акылбеков А.Т., Даулетбекова А.К., Здоровец М.В., Ыбыраев Н.С., Оралбеков Н.Б.</i> Таза және кобальтпен легирленген MgF <sub>2</sub> -нің электрондық қасиеттерін Ab-initio есептеулері	15
<i>Доломатов М.Ю., Шуткова С.А., Шарипов Т.И., Бахтизин Р.З., Ишниязов З.З., Нураxметов Т.Н., Салиходжа Ж.М.</i> Мұнай асфальтені нанобөлшектерінің молекулалық және супрамолекулалық құрылымының ерекшеліктері	23
<i>Кайнарбай А. Ж., Нураxметов Т.Н., Юсупбекова Б., Кайнарбаева А., Турмаханбетова А., Базарбаева.Г.Е., Абдраман Б.</i> Биологиядан бастан күн энергетикасына шейін кең қолданыс табатын CdSe/CdS гетероқұрылымдардың алу әдістемесін жасау	32
<i>Мадиярова А.Е., Разина О.В., Цыба П.Ю.</i> f-эссенциялы Эйнштейн-Картан гравитация моделі	38
<i>Ногай А.С., Кутербеков К.А., Бекмырза К.Ж., Нураxметов Т.Н., Кабышев А.М., Кумисбек А., Жеткенбай А., Айдарбеков Н., Сулейменов А.</i> Жанармай жасушалары үшін кобальт халькогенидінің негізінде катализаторларды синтездеу және зерттеу	48
<i>Нураxметов Т.Н., Бахтизин Р.З., Салиходжа Ж.М., Жунусбеков А.М., Кайнарбай А.Ж., Дауренбеков Д.Х., Садыкова Б.М., Жанылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н.</i> Сілтілі металл сульфаттарының зоналық құрылымы	56
<i>Санг Мей Ли, Босунг Шин, А.Сейтжан, А.Мырзагалиева, Б.Медеубаева</i> Брэгг торларына негізделген оптофлюидтық сенсорлар	67
<i>Саттинова З.К.</i> Құю қондырғысының сақиналы каналында бериллий тотығы термопласт шликерінің изотермиялық емес қату процесін модельдеу	81
<i>Тлеукенов С.К., Балабеков К.Н., Жалғасбекова З.К.</i> Ромбылық кристалдардағы топтық жылдамдық пен электромагниттік энергия ағыны	90

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

№1(126)/2019

CONTENTS

---

<i>Balakhayeva R., Akilbekov A., Dauletbekova A., Kozlovskii A., Baimukhanov Z., Giniyatova Sh., Usseinov A., Saduova B., Karim K.</i> Creation of CdTe nanoclusters in SiO <sub>2</sub> /Si track templates using two types of electrolyter	8
<i>Dukenov A.B., Usseinov A.B., Akilbekov A.T., Dauletbekova A.K., Zdorovets M.V., Ybyraev N.S., Oralbekov N.B.</i> Ab-initio calculations of the electronic properties of pure and cobalt doped MgF <sub>2</sub>	15
<i>Dolomatov M.Yu., Shutkova S.A., Sharipov T.I., Bakhtizin R.Z., Ishniyazov Z.Z., Nurakhmetov T.N., Salikhodzha Z.M.</i> Band structure of alkali metal sulfates	23
<i>Kainarbai A.Zh., Nurakhmetov T.H., Usupbekova B., Kainarbaeva A., Turmakhanbetova A., Bazarbayeva.G., Abdraman B.</i> Wide application areas from biology until solar cell heterojunction CdSe/CdS synthesis method	32
<i>Madiyarova A.E., Razina O.V., Tsyba P.Yu.</i> Einstein-Cartan gravity model with f-essence	38
<i>Nogai A.S., Kuterbekov K.A., Bekmyrza K.Zh., Nurakhmetov T.N., Kabyshev A.M., Kumisbek A., Zhetkenbay A., Aidarbekov N., Suleimenov A.</i> Synthesis and Investigation of Catalysts Based on Cobalt Chalcogenide for Fuel Cells	48
<i>Nurakhmetov T.N., Bakhtizin R.Z., Salikhodja Z.M., Zhunusbekov A.M., Kainarbay A.Z., Daurenbekov D.H., Sadykova B.M., Zhangylysov K.B., Yussupbekova B.N.</i> Band structure of alkali metal sulfates	56
<i>Sang Mae Lee, Bosung Shin, A.Seitkan, A.Myrzagaliyeva, B.Medeubayeva</i> Optofluidic sensors based on bragg gratings	67
<i>Sattinova Z.K.</i> Simulation of the process of non-isothermal crystallization process of thermoplastic slurry BeO in the annular cavity of the casting plant	81
<i>Tleukenov S.K., Balabekov K.N., Zhalgasbekova Z.K.</i> Group velocity and flow of electromagnetic energy in rhombic crystals	90

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

№1(126)/2019

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Балахаева Р., Акылбеков А., Даулетбекова А., Козловский А., Баймуханов З., Гиниятова Ш., Усеинов А., Садуова Б., Карим К.</i> Создание нанокластеров CdTe в трековых темплэйтах SiO <sub>2</sub> /Si с использованием двух типов электролита	8
<i>Дукенов А.Б., Усеинов А.Б., Акылбеков А.Т., Даулетбекова А.К., Здоровец М.В., Ыбыраев Н.С., Оралбеков Н.Б.</i> Ab-initio расчеты электронных свойств чистого и легированного кобальтом MgF <sub>2</sub>	15
<i>Доломатов М.Ю., Шуткова С.А., Шарипов Т.И., Бахтизин Р.З., Ишниязов З.З., Нурахметов Т.Н., Салиходжа Ж.М.</i> Особенности молекулярной и надмолекулярной структуры наночастиц нефтяных асфальтенов	23
<i>Кайнарбай А. Ж., Нурахметов Т.Н., Юсупбекова Б., Кайнарбаева А., Турмаханбетова А., Базарбаева.Г.Е., Абдраман Б.</i> Разработка методик получения гетероструктур CdSe/CdS широкого круга применения: от биологии до солнечной энергетики	32
<i>Мадиярова А.Е., Разина О.В., Цыба П.Ю.</i> Модель гравитации Эйнштейна-Картана с f-эссенцией	38
<i>Ногай А.С., Кутербекоев К.А., Бекмырза К.Ж., Нурахметов Т.Н., Кабышев А.М., Кумисбек А., Жеткенбай А., Айдарбеков Н., Сулейменов А.</i> Синтез и исследование катализаторов на основе халькогенида кобальта для топливных элементов	48
<i>Нурахметов Т.Н., Бахтизин Р.З., Салиходжа Ж.М., Жунусбеков А.М., Кайнарбай А.Ж., Дауренбеков Д.Х., Садыкова Б.М., Жанылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н.</i> Зонная структура сульфатов щелочных металлов	57
<i>Санг Мей Ли, Босунг Шин, А.Сейтжан, А.Мырзагалиева, Б.Медеубаева</i> Оптофлюидные датчики на основе Брэгговских решеток	67
<i>Саттинова З.К.</i> Моделирование процесса неизотермического отверждения термопластичного шликера BeO в кольцевом канале установки литья	81
<i>Тлеуженов С.К., Балабеков К.Н., Жалгасбекова З.К.</i> Групповая скорость и поток электромагнитной энергии в ромбических кристаллах	90

Т.Н. Нурахметов<sup>1</sup>, Р.З. Бахтизин<sup>2</sup>, Ж.М. Салиходжа<sup>1</sup>, А.М. Жунусбеков<sup>1</sup>,  
А.Ж. Кайнарбай<sup>1</sup>, Д.Х. Дауренбеков<sup>1</sup>, Б.М. Садыкова<sup>1</sup>, К.Б. Жанылысов<sup>1</sup>,  
Б.Н. Юсупбекова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

<sup>2</sup> *Башкирский государственный университет, Уфа, Башкортостан, Россия*

(E-mail: nurakhmetov\_tn@enu.kz, batsaiy\_s@mail.ru)

### Зонная структура сульфатов щелочных металлов

**Аннотация:** Измерены спектры создания основных полос излучения при  $3,65 \div 4,0$  эВ и длинноволновых полос излучения при  $3,0 \div 3,1$  эВ,  $2,6 \div 2,7$  эВ и  $2,3 \div 2,4$  эВ в кристаллах  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$  при температурах 15–300 К. Показано, что эти излучения возбуждаются низкоэнергетическими фотонами с энергией  $4,6 \div 6,2$  эВ, а также высокоэнергетическими фотонами  $6,4 \div 10,5$  эВ. Во время возбуждения электроны из  $1t_1, 3t_2, e, 2t_2$  орбиталей валентной зоны переходят на s состояние катиона в зоне проводимости. Дырки, возникающие на указанных орбиталях, всплывают на уровень над валентной зоной и локализуются. Основное излучение  $3,65 \div 4,0$  эВ возникает при рекомбинации электронов с этими локализованными дырками, находящимися над валентной зоной.

**Ключевые слова:** фотоны, электроны, дырки, люминесценция, рекомбинация, запрещенная зона.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-68-36-2019-126-1-57-67>

**Введение.** Сульфаты щелочных металлов относятся к ионным кристаллам, в которых анионы имеют тетраэдрическую структуру. Теоретические исследования электронной структуры сульфатов щелочных металлов ограничивались проведением расчетов изолированного иона  $SO_4^{2-}$  методом молекулярных орбиталей МО [1-3]. Экспериментальные работы представлены в основном по фотоэлектронным и рентгеновским эмиссионным спектрам [3-6]. Оптические спектры сульфатных солей высокоэнергетической области, полученные в работах [6-7] не сопровождаются идентификацией отдельных полос. Результаты экспериментальных работ слабо согласуются между собой, имеются противоречия в интерпретации отдельных полос поглощения и отражения. Наиболее хорошо изученным представителем сульфатов щелочных металлов является кристалл  $K_2SO_4$ . Кристаллы  $K_2SO_4$  кристаллизуются в виде орторомбической структуры с пространственной группой симметрии  $D_{2h}^{16}$ . В работе авторов [7] с целью выяснения природы электронных возбуждений сульфата калия, были исследованы спектры отражения и люминесценции  $K_2SO_4$ . Спектры отражения и возбуждения стационарной люминесценции измерены на вакуумном монохроматоре ВМ-1. Спектр отражения полированного кристалла сульфата калия условно можно разделить на две части: длинноволновую, состоящую из структурной широкой полосы и коротковолновую, имеющую ряд пиков. Элементарная ячейка  $K_2SO_4$  содержит четыре формульные единицы, при этом они попарно имеют разное пространственное расположение, что приводит к давидовскому расщеплению в спектрах фундаментального поглощения. Сравнение электронных переходов в молекуле  $SO_4^{2-}$  с максимумами в спектре отражения позволяет заключить, что природу длинноволнового пика нужно связывать с возбуждением анионного комплекса  $SO_4^{2-}$ , т.е. с молекулярным экситоном Френкеля. Из расчета энергетических термов молекулы  $SO_4^{2-}$  [8, 9] известно, что самым высоколежащим заполненным состоянием является состояние  $2a_1$ , а нижним пустым  $4t_2^*$ . По предположению авторов [8, 9] энергия перехода между ними составляет  $9 \div 10$  эВ, что очень близко к спектральному положению длинноволнового максимума 8,6 эВ в спектре отражения [7]. Характерную ступеньку в области 9,4 эВ, связывали с переходами с переносом заряда из валентной зоны в зону проводимости. Авторы работы [10] на основе измерения спектра отражения для различных направлений электрического вектора возбуждающего света показали, что спектр характеризуется богатой структурой и значительной анизотропией.

Результаты получили удовлетворительное согласие со спектрами, полученными авторами [7] при возбуждении неполяризованным светом, где наблюдаются две полосы максимума при 8,6 и 10,2 эВ. Максимум отражения в области 9,5 ÷ 10,5 эВ характеризуется сложной структурой с несколькими компонентами. Наиболее длинноволновая компонента при 9,6 эВ также характеризуется отчетливой анизотропией, подобной той, которая наблюдается для экситонного максимума 8,6 эВ. Следующий максимум отражения в области 12 ÷ 13 эВ, видимо, также не является элементарным, хотя здесь не наблюдается четкой структуры. По этим спектрам отражения рассчитаны оптические постоянные монокристаллов  $K_2SO_4$  для трех кристаллографических направлений в области энергий фотонов 4 ÷ 22 эВ. Расчеты оптических постоянных выполнены с помощью метода Крамерса-Кронига с учетом степени поляризации спектрографа. Проявление анизотропии связано с тем, что в анионе  $SO_4^{2-}$  имеются качественно разные группы электронов (кратных связей S=O, одинарных связей S-O и не связывающих атомов кислорода), отличающиеся по энергиям связи. Естественно ожидать этого в спектрах оптических постоянных R, n, k и др. В работе авторов [11] проведены расчеты полной и парциальной плотностей состояний для атомов кристалла  $K_2SO_4$  в орторомбической фазе при комнатной температуре в трех кристаллографических направлениях. На рисунке 1 представлена расчетная плотность состояний электронов в атомах кристалла  $K_2SO_4$ : в интервале энергии -24 ÷ 20 эВ. С потолка валентной зоны расположено 2s состояние кислорода (O) с полушириной состояния 1,1 эВ. 2p состояние кислорода (O) состоит из трех подполос в интервале энергии с потолка валентной зоны от 0,5 до 3,2 эВ, от 7 до 8 эВ и от 14 до 16 эВ с полушириной 1,2 эВ, 2,0 эВ и 2,4 эВ соответственно. В этих же интервалах энергии расположены три полосы 3p состояния серы (S). Зона проводимости  $K_2SO_4$  образована из 4s состояния катиона ( $K^+$ ) и из разрыхляющих  $4t_2^*$  и  $3t_1^*$  орбиталей 2p состояния кислорода (O). Расчетная ширина запрещенной зоны авторов [11] составляет 8,1 эВ и 7,95 эВ.

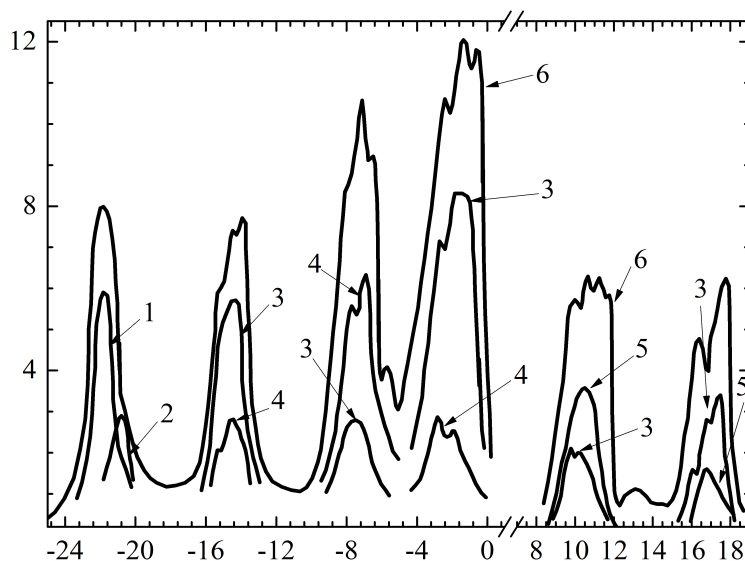


Рисунок 1 – Плотность электронных состояний в монокристалле. Цифрами на графике обозначены суммарная плотность электронных состояний, а также плотность состояния отдельных атомов, формирующих структуру зон: 1) плотность 2s состояния O- кислорода; 2) плотность 3p состояния S- серы; 3) плотность 2p состояния O- кислорода; 4) плотность 3p состояния S- серы; 5) плотность 5s состояния K- калия; 6) суммарная плотность состояний

В работе [12] авторов предпринята попытка экспериментального исследования природы электронных состояний сульфатных солей ряда металлов, существенно отличающихся по своему электронному строению. С этой целью зарегистрированы спектры диффузного отражения порошков сульфатов Na, K, Ca, Cu в области 1 ÷ 12 эВ. Полученные им [12] спектры диффузного отражения приведены на рисунке 2. Для установления соответствия между спектрами диффузного отражения и спектрами поглощения авторами [12] были

зарегистрированы дополнительно спектры зеркального отражения в области  $4 \div 12$  эВ для  $K_2SO_4$  и  $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ .

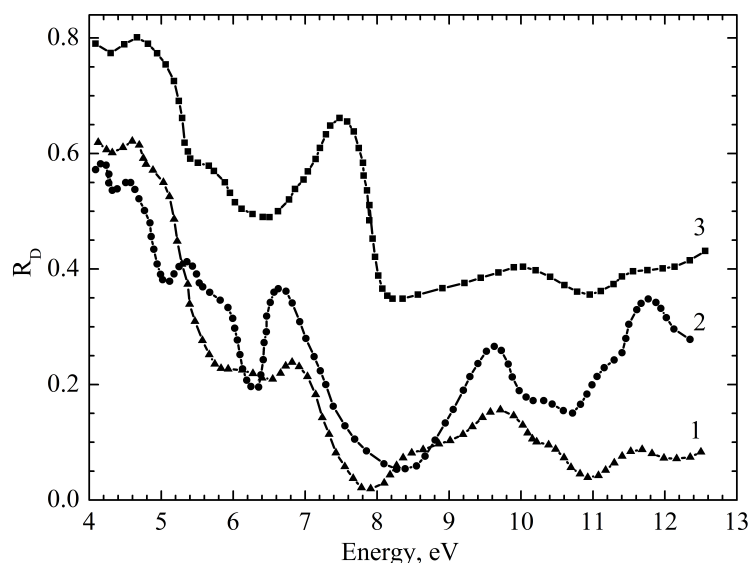


Рисунок 2 – Спектры диффузного отражения для  $Na_2SO_4$  (кривая 1),  $K_2SO_4$  (кривая 2),  $CuSO_4 \cdot 5H_2O$  (кривая 3)

Показали [12], что в области  $4 \div 12$  эВ положения соответствующих полос диффузного и зеркального отражения совпадают, только наблюдается различие их формы и относительных интенсивностей. Следовательно, значения энергии, соответствующие максимумам диффузного отражения сульфатов в диапазоне  $4 \div 12$  эВ, определяют положения полос поглощения в указанной области (см. таблицу 1).

Таблица 1 – Потенциалы ионизации  $V_i$  металлов натрия, калия, кальция, меди и положение полос поглощения их сульфатов (эВ)

Соединение	$V_i$	A	B	C	D	E	F
$Na_2SO_4$	5,1	4,4	5,1	6,0	6,8	9,8	10,5
$K_2SO_4$	4,3	4,4	5,1	6,2	6,9	9,8	10,5
$CaSO_4 \cdot 2H_2O$	6,1	4,5	5,6	6,5	7,5	10,3	11,5
$CuSO_4 \cdot 5H_2O$	7,7	4,4	5,6	6,7	7,8	10,2	11,3

Электронная конфигурация основного состояния аниона, с которого осуществляется электронный переход, имеет вид  $(2a_1)^2(2t_2)^6(1e)^4(3t_2)^6(1t_1)^6$ . Анализ данных таблицы совместно с результатами теоретических расчетов электронной структуры  $SO_4^{2-}$  [1-4], а также экспериментальных работ [5-7], позволил авторам [12], интерпретировать наблюдающиеся электронные переходы. Полосы В, D, F согласуются с данными работы [1], где максимумы рентгеновского фотоионизационного спектра сульфата в области 5,8 эВ; 7,7 эВ; 10 эВ отнесены к ионизации молекулярных орбиталей  $1t_1$ ;  $3t_2$ ;  $1e$ ;  $2t_2$  изолированного иона  $SO_4^{2-}$  соответственно. Наблюдаемые полосы в фотоионизационном спектре могут быть описаны в модели молекулярных орбиталей (МО) сульфатных солей как полосы переноса заряда с аниона на катион, авторы [12] наблюдающиеся полосы поглощения в соответствии с результатами [1] отнесли к следующим переходам. Максимум поглощения В относится к электронным переходам  $1t_1 \rightarrow (M^+)$ , полоса D обусловлена переходами  $3t_2, 1e \rightarrow (M^+)$ , полоса поглощения F относится к переходу  $2t_2 \rightarrow (M^+)$ , где  $s(M^+)$  незаполненное s-состояние катиона  $M^+$ , расположенное в зоне проводимости. Полосы А, С, Е не имеющие аналогов в фотоионизационном спектре [1] относятся, по предположению авторов [12], к внутримолекулярным переходам в анионном комплексе  $SO_4^{2-}$ . А-полоса поглощения –  $1t_1 \rightarrow 4t_2^*$  и  $3a_1^*$ , С-полоса –  $3t_2, e \rightarrow 4t_2^*$  и  $3_1^*$  и Е-полоса –  $2t_2 \rightarrow 4t_2^*$  и  $3_1^*$ , где  $4t_2^*$  и  $3_1^*$  – незаполненные орбитали анионного комплекса  $SO_4^{2-}$ , расположенные в зоне проводимости.

Энергетическая схема электронных переходов сульфатов щелочных металлов показана на рисунке 3.

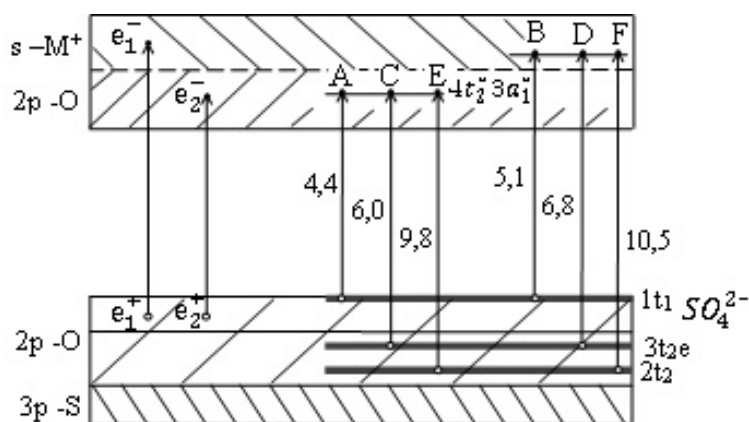


Рисунок 3 – Энергетическая схема сульфатов щелочных металлов

Таким образом, анализ литературных данных о зонной структуре сульфатов щелочных металлов показывает, что сульфаты щелочных металлов являются широкозонным ионным кристаллом с шириной запрещенной зоны около 8-10 эВ. Помимо этого имеются экспериментальные данные авторов [12] о том, что в сульфатах щелочных металлов существуют электронные переходы, охватывающие спектральный интервал 4,4 эВ ÷ 10,5 эВ [12]. В настоящей работе на основе измерения спектров создания собственных излучений при 3,65 ÷ 4,0 эВ в кристаллах  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$  будут оценены их ширина запрещенной зоны.

**Объекты и методы исследования.** Кристаллы  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$  выращены из насыщенного водного раствора методом медленного испарения при температуре 50 °С. Из кристалла вырезались пластинки толщиной 3-5 мм. Нами исследованы образцы кристаллов  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$ . Кристаллы  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$  исследовались методами фотолюминесценции, рентгенолюминесценции и вакуумно-ультрафиолетовой спектроскопии. Для возбуждения в ультрафиолетовой области спектра использовалась дейтериевая лампа D200VUV (Heraeus Noblelight, Germany) с энергией фотонов 6,2 ÷ 11,5 эВ и ксеноновая лампа XBO 150W (OSRAM, Germany) с энергией фотона 1,5 ÷ 6,2 эВ. Для измерения спектров излучения и возбуждения в спектральной области 1,5 ÷ 6,2 эВ использовался спектрофлуориметр Solar CM2203. Измерения спектров возбуждения и излучения в области спектра 4 ÷ 11,5 эВ проводились на вакуумном монохроматоре, собранном по схеме Seya-Namioka, в широкой области температур 15 ÷ 400 К. Регистрация излучения кристаллов проводилась через монохроматор МДР-41 с помощью ФЭУ (Photomultiplier tube) 1P28 (Hamamatsu, Japan). Спектр возбуждения исправлен на спектральное распределение интенсивности возбуждающего излучения.

#### Результаты эксперимента и их обсуждение.

**Кристалл  $K_2SO_4$ .** Для выяснения некоторых особенностей ширины запрещенной зоны сульфатов щелочных металлов мы проводили исследования о природе собственного излучения сульфатов щелочных металлов при избирательном возбуждении фотонами в фундаментальной спектральной области 4 ÷ 12 эВ при температурах 15 ÷ 300 К. На рисунке 4 представлен спектр излучения кристалла  $K_2SO_4$  при возбуждении низкоэнергетическими фотонами с энергией 5,16 ÷ 6,2 эВ. Из рисунка видно, что появляются основная полоса излучения при 3,65 ÷ 4,0 эВ и длинноволновые полосы излучения 3,0 ÷ 3,1 эВ, 2,6 ÷ 2,7 эВ и 2,3 ÷ 2,4 эВ. Нами экспериментально показано [4, 14], что собственная полоса излучения при 3,65 ÷ 4,0 эВ появляется при рекомбинации неэквивалентно расположенными локализованными дырками  $SO_4^-$  (с двойными и одинарными S-O связями). С уменьшением энергии фотонов 6,2 ÷ 5,16 эВ интенсивность полосы постепенно уменьшается до минимума, и появляются новые длинноволновые полосы излучения, связанные с собственными центрами захвата.

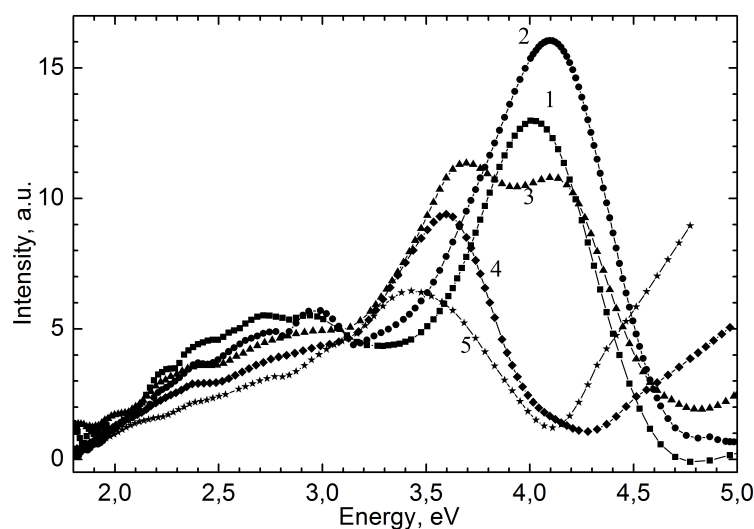


Рисунок 4 - Спектр излучения кристалла  $K_2SO_4$  при 300 К: при возбуждении фотонами с энергией: 1 - 6,2 эВ; 2 - 5,9 эВ; 3 - 5,64 эВ; 4 - 5,4 эВ; 5 - 5,16 эВ

На рисунке 5 представлен спектр собственного излучения кристалла  $K_2SO_4$  при возбуждении фотонами с энергиями 6,2 эВ (кривая 1), 7,75 эВ (кривая 2) и рентгеновскими лучами при 300 К (кривая 3).

Из рисунка 5 (кривая 1) видно, что появляется основная полоса излучения при  $3,65 \div 4,0$  эВ, которая возникает при возбуждении фотонами с энергией при 6,2 эВ. При возбуждении высокоэнергетическими фотонами с энергией 7,75 эВ появляется широкая полоса излучения (кривая 1) с максимумами  $3,65 \div 4,0$  эВ,  $3,0 \div 3,1$  эВ,  $2,6 \div 2,7$  эВ и  $2,3 \div 2,4$  эВ. Необходимо отметить, что появляются все те же полосы излучения, которые появлялись при возбуждении фотонами с энергией 6,2 эВ. На этом же рисунке 5 (кривая 3) представлена полоса излучения при возбуждении рентгеновскими лучами. Из рисунка видно, что при возбуждении рентгеновскими лучами появляются все те же излучения при  $3,65 \div 4,0$  эВ,  $3,0 \div 3,1$  эВ и  $2,6 \div 2,7$  эВ как и при возбуждении фотонами с энергией 6,2 эВ и 7,75 эВ.

На рисунке 6 представлен спектр возбуждения полосы собственного излучения. Из рисунка 6 (кривая 1) видно, что излучение с максимумом  $3,65 \div 4,0$  эВ возбуждается при энергии фотонов  $5 \div 6,2$  эВ. Уменьшение энергии возбуждающих фотонов приводит к уменьшению интенсивности излучения  $3,65 \div 4,0$  эВ до минимального значения. Спектр возбуждения основной полосы излучения при 4,0 эВ представлен на рисунке 6 (кривая 2) широком спектральном диапазоне  $5 \div 11$  эВ. Из рисунка 6 (кривая 2) видно, что излучение при 4,0 эВ возбуждается при энергии фотонов  $5 \div 6,2$  эВ, а также  $8,5 \div 10,5$  эВ.

#### Кристалл $Na_2SO_4$ .

Исследование природы собственного излучения при возбуждении фотонами в широкой спектральной области  $4 \div 12$  эВ проводилось также в кристалле  $Na_2SO_4$ . На рисунке 7 представлены собственные излучения при возбуждении фотонами с энергией  $4,9 \div 6,2$  эВ при 300 К. Из рисунка 7 (кривые 1-4) видно, что появляются основная полоса излучения при  $3,7 \div 3,8$  эВ и длинноволновые полосы при  $3,0 \div 3,1$  эВ,  $2,6 \div 2,7$  эВ и  $2,3 \div 2,4$  эВ, связанные с собственными дефектами матрицы. С уменьшением энергии возбуждающих фотонов с 6,2 эВ до 5 эВ основная полоса излучения при  $3,7 \div 3,8$  эВ и все длинноволновые полосы излучения уменьшаются до минимума.

На рисунке 8 (кривая 1) представлена собственная полоса излучения при возбуждении фотонами с энергией 5,9 эВ при 300 К кристалла  $Na_2SO_4$ . Из рисунка 8 (кривая 1) видно, что появляются основная полоса излучения при  $3,7 \div 3,8$  эВ и длинноволновые полосы излучения. На этом же рисунке 8 (кривая 2) представлен спектр собственного излучения  $Na_2SO_4$  при возбуждении высокоэнергетическими фотонами с энергией 7,75 эВ при 15 К. Из рисунка видно, что появляются основная полоса излучения при  $3,7 \div 3,8$  эВ и все длинноволновые три полосы излучения. Также рисунок 8 (кривая 3) представляет спектр собственного излучения при



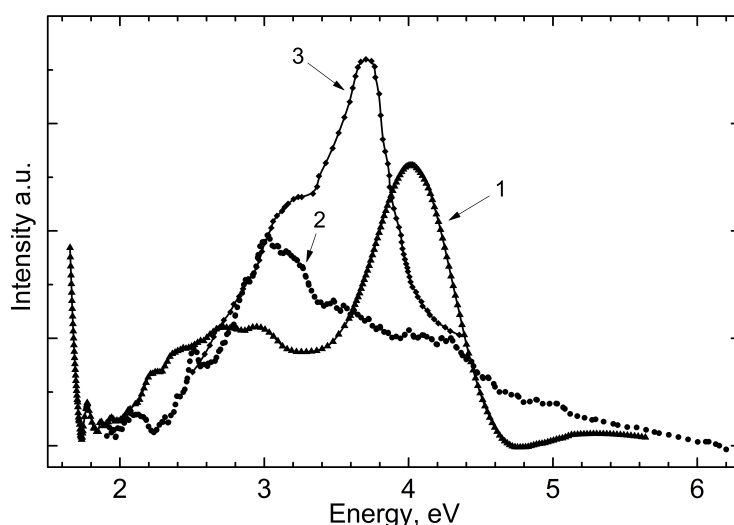


Рисунок 5 - Спектр собственного излучения кристалла  $K_2SO_4$  при возбуждении фотонами с энергией 6,2 эВ (кривая 1), 7,75 эВ (кривая 2) и рентгеновскими лучами при 300 К (кривая 3)

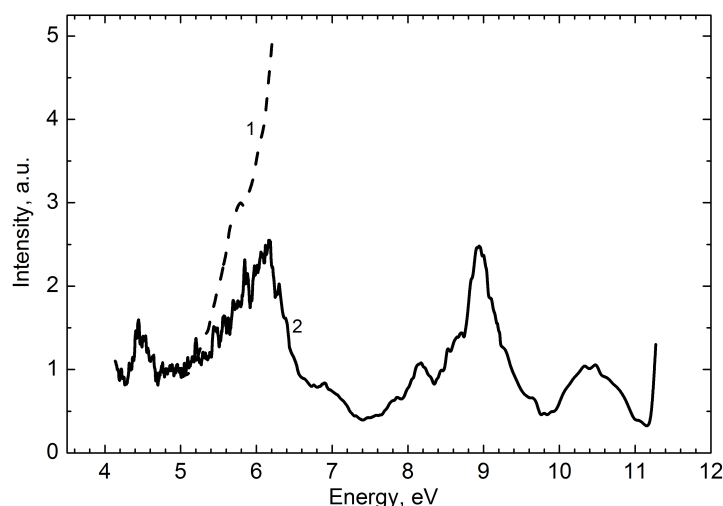


Рисунок 6 - Спектр возбуждения кристалла  $K_2SO_4$ : 1- для полосы излучения 3,7 ÷ 3,8 эВ при 300 К; 2 - для полосы излучения 4,0 эВ

возбуждении рентгеновскими лучами при 300 К кристалла  $Na_2SO_4$ . Из рисунка видно, что появляется основная широкая полоса излучения при 3,65 ÷ 3,8 эВ с максимумом 3,5 эВ.

На рисунке 9 представлен спектр возбуждения основных полос излучения кристалла  $Na_2SO_4$ . Из рисунка 9 (кривая 1) видно, что собственная люминесценция при 3,8 эВ возбуждается при энергиях фотонов 6,2 ÷ 5 эВ. С уменьшением энергии возбуждающих фотонов интенсивность излучения 3,8 эВ уменьшается до минимального значения.

На этом же рисунке 9 (кривая 2) представлен спектр возбуждения кристалла  $Na_2SO_4$  для излучения 3,8 эВ, измеренного при 15 К. Из рисунка 9 (кривая 2) видно, что излучение при 3,8 эВ возбуждается при энергиях фотонов 9,5 ÷ 10,5 эВ, 7,0 ÷ 7,75 эВ и 4,4 ÷ 6,2 эВ. Собственное излучение 3,8 эВ в кристалле  $Na_2SO_4$  при 15 К эффективно возбуждается высокоэнергетическими фотонами 7,0 ÷ 10,5 эВ, а также одинаковой эффективностью возбуждается низкоэнергетическими фотонами 4,9 ÷ 6,2 эВ при 15 К. Длинноволновое излучение при 3,0 ÷ 3,1 эВ (рисунок 9, кривая 3), связанное с собственными центрами захвата возбуждается в  $Na_2SO_4$  при 15 К низкоэнергетическими фотонами (5,0 ÷ 6,2 эВ), а также высокоэнергетическими фотонами (8,0 ÷ 10,5 эВ).

**Обсуждение.** Таким образом, экспериментальные результаты показали, что в кристаллах  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$  при возбуждении рентгеновскими лучами и высокоэнергетическими

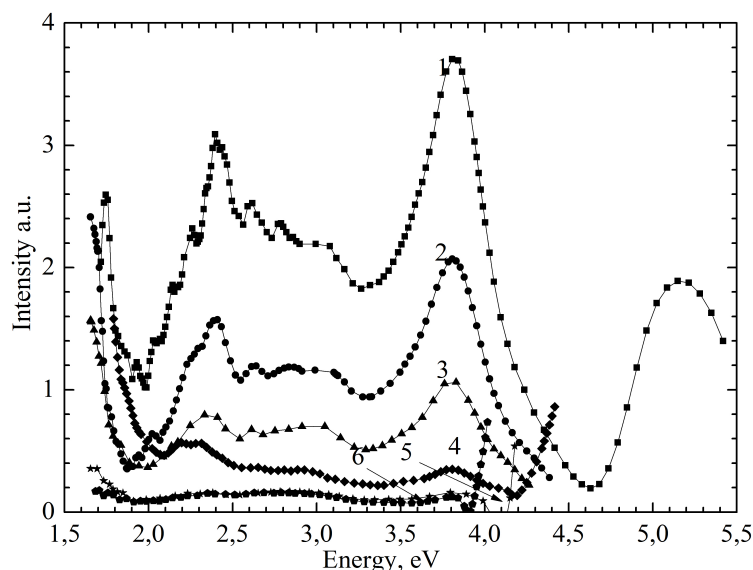


Рисунок 7 - Спектр излучения кристалла  $Na_2SO_4$  при 300 К: при возбуждении фотонами с энергией: 1 - 6,2 эВ; 2 - 5,9 эВ; 3 - 5,64 эВ; 4 - 5,4 эВ; 5 - 5,16 эВ

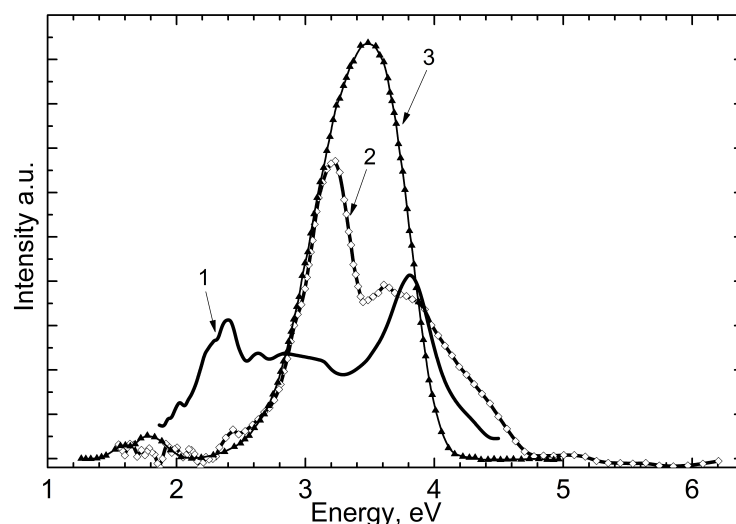


Рисунок 8 - Спектр излучения кристалла  $Na_2SO_4$  при возбуждении фотонами с энергией: 1 - 5,9 эВ при 300 К; 2 - 7,75 эВ при 15 К; 3 - рентгеновскими лучами при 300 К

фотонами с энергией 7,75 эВ появляются основные полосы излучения при  $3,7 \div 3,8$  эВ, а в некоторых случаях  $3,65 \div 3,9$  эВ. Сдвиг полосы связывается наличием разных локальных энергетических уровней для локализованных дырок  $SO_4^-$  над валентной зоной в зависимости от кристаллографического направления (в разных кристаллографических направлениях могут существовать двойные или одинарные S-O связи).

Соответственно, при переходе электронов с возбужденного локального состояния на такие дырочные уровни могут возникать излучения, различающиеся по энергии. Кроме основного излучения  $3,65 \div 3,9$  эВ появляются длинноволновые излучения  $3,0 \div 3,1$  эВ,  $2,6 \div 2,7$  эВ и  $2,3 \div 2,4$  эВ. Появление основного излучения  $3,65 \div 3,9$  эВ в  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$  считается закономерным, так как ширина запрещенной зоны этих кристаллов по предположению многих авторов составляет 8 эВ и выше. Появляется основное излучение  $3,65 \div 3,9$  эВ с большим Стоксовым сдвигом, характерным для триплетного излучения.

Новизной нашего исследования является появление излучения при  $3,65 \div 3,9$  эВ и длинноволновых излучений при возбуждении низкоэнергетическими фотонами с энергией  $4,9 \div 6,2$  эВ. Экспериментальные факты подтверждают предположение авторов [12] о существовании низкоэнергетических  $1t_1 \rightarrow s$  (5,1 эВ), и высокоэнергетических  $3t_1, e \rightarrow$

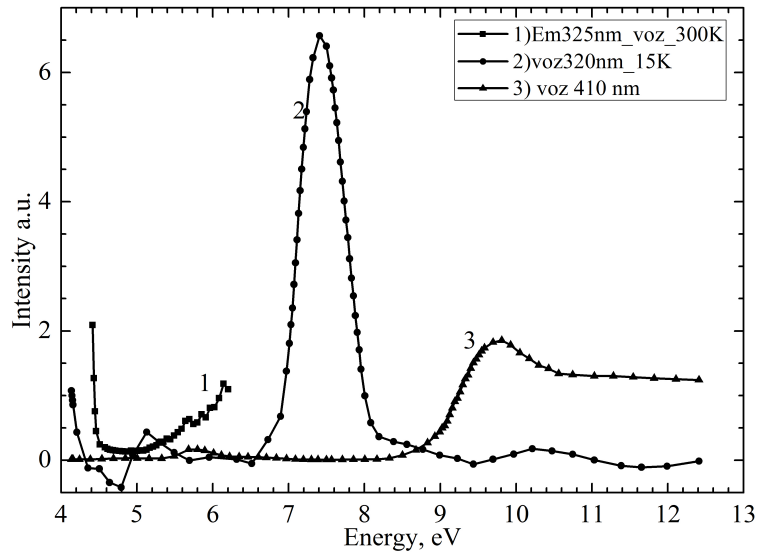


Рисунок 9 - Спектр возбуждения кристалла  $Na_2SO_4$ : 1 - для полосы излучения 3,8 эВ при 300 К; 2 - для полосы излучения 3,8 эВ при 15 К; 3 - для полосы излучения 3,0 эВ при 15 К

$s$  (6,8 эВ) и  $2t_2 \rightarrow s$  (10,5 эВ) электронных переходов в  $s$  состоянии катиона ( $K^+Na^+$ ) в зоне проводимости. С этого возбужденного состояния электрон переходит на основное локальное дырочное состояние. В результате таких переходов возникает основное излучение при  $3,65 \div 3,9$  эВ в сульфатах щелочных металлов. Длинноволновые излучения возникают при переходах  $e$  электронов в центрах захвата.

Предполагается, что одинаковое значение основного излучения  $3,65 \div 3,9$  эВ в широких пределах возбуждения может быть связано всплыванием всех локализованных дырок  $SO_4^-$  из термов  $1t_1$ ,  $3t_2$ ,  $e$  и  $2t_2$  на уровень над валентной зоной. Всплывание дырок из орбиталей может осуществляться за счет межзонных излучательных или безызлучательных переходов. Межзонные электронные переходы (кросслоуминесценция) в  $K_2SO_4$  обнаружены в наших предыдущих работах [14] при возбуждении синхротронным излучением в наносекундном интервале времени.

При возбуждении в стационарных условиях это излучение не обнаруживается. На основе экспериментальных фактов возбуждения собственного излучения при  $3,65 \div 3,9$  эВ, а также длинноволновых излучений низкоэнергетическими фотонами, с энергией  $4,9 \div 6,2$  эВ приводит к предположению, что ширины запрещенных зон кристаллов  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$  составляют  $\approx 5,0$  эВ.

Настоящее предположение никак не противоречит литературным данным [6, 7, 14] о том, что основное излучение  $3,65 \div 3,9$  эВ возбуждается высокоэнергетическими фотонами с энергией  $7,75 \div 10,0$  эВ. При возбуждении в широкой области энергии фотонов ( $4,9 \div 10,5$  эВ) электроны могут переходить из низколежащих  $3t_2$ ,  $e$  и  $2t_2$  термов валентной зоны в зону проводимости с энергией  $7,75 \div 10,5$  эВ.

**Закключение.** На основе анализа существующих экспериментальных данных и теоретических расчетов зонно-энергетической структуры кристаллов  $K_2SO_4$  и  $Na_2SO_4$ , а также измерения спектра создания основных фундаментальных полос излучения оценены ширины зоны запрещенных энергий. Показано, что основные полосы излучения  $3,65 \div 4,0$  эВ с максимумами при  $3,7 \div 3,8$  эВ и длинноволновые полосы излучения при  $3,0 \div 3,1$  эВ,  $2,6 \div 2,7$  эВ и  $2,3 \div 2,4$  эВ возбуждаются с одинаковой эффективностью как низкоэнергетическими фотонами ( $4,9 \div 6,2$  эВ) так и высокоэнергетическими фотонами с энергией ( $6,9 \div 10,5$  эВ). Предполагается, что основные излучения при  $3,7 \div 3,8$  эВ возникают при рекомбинации электронов из зоны проводимости с локализованными дырками над валентной зоной, которые всплывают с  $1t_1$ ;  $3t_2$ ;  $e$ ;  $2t_2$  -орбиталей  $2p$  состояния кислорода валентной зоны

Работа выполнена в рамках научных проектов AP05132165 «Разработка технологии производства асфальтенов из нефтяного сырья как органических полупроводников для нанoeлектроники» и AP05131725 «Люминесцентные преобразователи солнечного излучения на основе квантовых точек полупроводников для увеличения КПД действующих кремниевых солнечных элементов» Комитета науки МОН РК.

### Список литературы

- 1 Hojer G., Meza-Hojer S., Hernandez de Pedrero G. A CNDO study of the electronic structure of oxyanions  $XO_4^{(n-)}$  with X=Si, P, S, Cl, Ge, As, Se and Br // Chem. Phys. Lett.-1976.- V. 37.№2.- P. 301-306. doi: 10.1016/0009-2614(76)80220-5.
- 2 Tossell J.A., Gibbs G.V. Molecular-orbital studies of geometries and spectra of minerals and inorganic-compounds // Phys. and Chem. of Miner.-1977.-V.2. P.21-57. doi: 10.1007/bf00307524.
- 3 Barber M., El-Issa B.D., Alan Hinchliffe SCF-Xa Investigation of the Ionization Energies of  $ClO_4^-$ ,  $SO_4^{(-)}$  and  $PO_4^{(3-)}$  // Chem. Soc. Faraday Trans. – 1980.- V. 2 (76).- P.441-445. doi: 10.1039/F29807600441.
- 4 Taniguchi K., Henke B.L. Sulfur LII,III emission-spectra and molecular-orbital studies of sulfur-compounds // Chem. Phys.- 1976.- V.64. №7.-P.3021-3035. doi: 10.1063/1.432563.
- 5 Connor J.A., Considine M. Low-energy photoelectron-spectroscopy of solids-photoelectron – spectra of carbonate, phosphate, sulfate, triborate and ethanoate ions // Chem. Soc.-Faraday Trans. – 1978.-V.74. №7.- P. 1285-1291. doi: 10.1039/f29787401285.
- 6 Romanyuk N.A., Andrievsky B.V. Optical-constants of triglycinesulfate and triglycinefluoroberyllate crystals in range 4 divided-by 22 eV // Optica Spectrosc.- 1978.- V.44 (2).- P. 276-280.
- 7 Плеханов В.Г., Осминин В.С. Спектры отражения сульфатов щелочных металлов при 78 К // Оптика и спектроскопия -1975.-Т.39 (3). С. 604-605.
- 8 Bishop D.M., Randic M. Electronic Structure of Sulfate, Thiosulfate, and Related Ions. I. Calculation of Molecular Orbital Energy Levels // Chem.Phys.- 1966.- V.45. №6.- P.1880-1884.
- 9 Manne R. Molecular Orbitals and Inner-Electron-Shell Chemical Shifts for Sulfur and Chlorine Oxy-anions // Chem.Phys.- 1967.- V.46. №.12- P.4645 – 4651.
- 10 Андриевский Б.В., Курляк В.Ю., Романок И.А. Поляризационно-оптические свойства кристаллов  $K_2SO_4$  в области собственного поглощения // Изв. АН. СССР, серия физическая.– 1989.- Т.53. №4. - С. 1335 -1338.
- 11 Kityk V., Yuvshenko V.O., Band energy calculation and optical constants of  $K_2SO_4$  single crystals // Physica Status Solidi – 1994. -(b) 182. - P. 79-83. doi: org/10.1002/pssb.2221820236.
- 12 Sholokh V.G., Aleshkevich N.I. Electronic spectra of sulfates with the langbeinite structure // Zhurnal Prikladnoi Spektroskopii – 1985.- V. 42. – P. 718-722.
- 13 Нурахметов Т.Н., Салиходжаев Д.М., Большакова Н.А. Радиационные дефекты в сульфатах щелочных и щелочно-земельных металлов // Изв. МОН РК НАН РК серия физ.мат.- 2002.- №6.- P.7- 17.
- 14 Tokbergenov I., Feldbach E., Kerikmae M., Lushchik A., Nagirnyi V., Nurakhmetov T., Savikhin F., Vasil'chenko E. Molecular excitons and electron-hole processes in  $K_2SO_4$  and  $CaSO_4$  // Radiat. Effects Defects in Solids – 1999. – V.150. P. 103-107

Т.Н. Нурахметов<sup>1</sup>, Р.З. Бахтизин<sup>2</sup>, Ж.М. Салиходжа<sup>1</sup>, А.М. Жүнісбеков<sup>1</sup>,  
А.Ж. Қайнарбай<sup>1</sup>, Д.Х. Дауренбеков<sup>1</sup>, Б.М. Садыкова<sup>1</sup>, К.Б. Жаңылысов<sup>1</sup>,  
Б.Н. Юсупбекова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

<sup>2</sup> Башқұртстан мемлекеттік университеті, Уфа, Башқұртстан, РФ

#### Сілтілі металл сульфаттарының зоналық құрылымы

**Аңдатпа.**  $K_2SO_4$  және  $Na_2SO_4$  кристалдарында 15–300 К температурасында  $3,65 \div 4,0$  эВ негізгі сәулелену жолақтары мен ұзын толқынды сәулелену жолақтарының  $3,0 \div 3,1$  эВ,  $2,6 \div 2,7$  эВ және  $2,3 \div 2,4$  эВ спектрлері өлшенді. Эксперимент нәтижесі көрсеткендей, энергиясы  $4,6 \div 6,2$  эВ құрайтын төменгі энергиялы фотондардың, сонымен қатар жоғарғы энергиялы фотондардың  $6,4 \div 10,5$  эВ сәулелерінің қозуы орын алады. Қоздыру кезінде электрондар валенттік зонаның  $1t_1$ ,  $3t_2$ , e,  $2t_2$  орбиталінен өткізгіштік зонадағы s катиондық деңгей күйіне өтеді. Бұл орбиталдарда пайда болған кемтіктер валенттік зонаның диапазонынан жоғары деңгейге өтеді және қармалады.

Көрсетілген орбиталдағы пайда болған кемтіктер валенттік зонаның жоғарғы деңгейіне өтіп қармалады. Негізгі сәулелену  $3.65 \div 4.0$  эВ валенттік зонаның жоғарғы жағында орналасқан рекомбинация кезіндегі қармалған кемтіктермен пайда болады.

**Түйін сөздер:** фотондар, электрондар, кемтіктер, люминесценция, рекомбинация, тыйым салынған зона.

T.N.Nurakhmetov<sup>1</sup>, R.Z. Bakhtizin<sup>2</sup>, Z.M.Salikhodja<sup>1</sup>, A.M.Zhunosbekov<sup>1</sup>, A.Z.Kainarbay<sup>1</sup>,  
D.H.Daurenbekov<sup>1</sup>, B.M.Sadykova<sup>1</sup>, K.B.Zhanglysov<sup>1</sup>, B.N.Yussupbekova<sup>1</sup>

<sup>1</sup> L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

<sup>2</sup> Bashkir State University, Ufa, Russia

### Band structure of alkali metal sulfates

**Abstract:** The spectra of the creation of the main emission bands at  $3.65 \div 4.0$  eV and the long-wavelength emission bands at  $3.0 \div 3.1$  eV,  $2.6 \div 2.7$  eV, and  $2.3 \div 2.4$  eV in  $K_2SO_4$  crystals and  $Na_2SO_4$  at temperatures of 15-300 K was investigated. It is shown that these emissions are excited by low-energy photons with an energy of  $4.6 \div 6.2$  eV, as well as high-energy photons of  $6.4 \div 10.5$  eV. During excitation, electrons from  $1t_1$ ,  $3t_2$ ,  $e$ ,  $2t_2$  orbitals of the valence band transfer to the state of the cation in the conduction band. Holes arising in these orbitals, float to a level above the valence band and are localized. The main emission of  $3.65 \div 4.0$  eV arises when electrons recombine with these localized holes located above the valence band.

**Keywords:** photons, electrons, holes, luminescence, recombination, bandgap.

## References

- 1 Hojer G., Meza-Hojer S., Hernandez de Pedrero G. A CNDO study of the electronic structure of oxyanions  $XO_4^{(n-)}$  with X=Si, P, S, Cl, Ge, As, Se and Br, Chem. Phys. Let.,(2). 301-306.(1976) doi: 10.1016/0009-2614(76)80220-5.
- 2 Tossell J.A., Gibbs G.V. Molecular-orbital studies of geometries and spectra of minerals and inorganic-compounds, Phys. and Chem. of Miner.)(2),21-57.(1977) doi: 10.1007/bf00307524.
- 3 Kosyachenko L.A., Maslyanchuk O.L., Sklyarchuk V.M. et al.// J. Appl. Phys., 101, 013704 (2007).
- 4 Barber M., El-Issa B.D., Alan Hinchliffe SCF-Xa Investigation of the Ionization Energies of  $ClO_4^-$ ,  $SO_4^{(2-)}$  and  $PO_4^{(3-)}$ , Chem. Soc. Faraday Trans, (2) (76), 441-445(1980) doi: 10.1039/F29807600441.
- 5 Taniguchi K., Henke B.L. Sulfur LII,III emission-spectra and molecular-orbital studies of sulfur-compounds, Chem. Phys, 64. (7), 3021-3035(1976). doi: 10.1063/1.432563.
- 6 Connor J.A., Considine M. Low-energy photoelectron-spectroscopy of solids-photoelectron – spectra of carbonate, phosphate, sulfate, triborate and ethanoate ions, Chem. Soc.-Faraday Trans, 74(7), 1285-1291. (1971) doi: 10.1039/f29787401285.
- 7 Romanyuk N.A., Andrievsky B.V. Optical-constants of triglycinesulfate and triglycinefluoroberyllate crystals in range 4 divided-by 22 eV, Optica Spectrosc, 44 (2),276-2809 (1978).
- 8 Plekhanov V.G., Osminin V.S. Spektry otrazheniya sul'fatov shchelochnykh metallov pri 78 K, Optika i spektroskopiya, 39 (3), 604-605(1975).
- 9 Bishop D.M., Randic M. Electronic Structure of Sulfate, Thiosulfate, and Related Ions. I. Calculation of Molecular Orbital Energy Levels, Chem.Phys,45. (6).1880-1884.(1966).
- 10 Manne R. Molecular Orbitals and Inner-Electron-Shell Chemical Shifts for Sulfur and Chlorine Oxy-anions, Chem.Phys.46. (12),4645 – 4651.(1976).
- 11 Andriyevskiy B.V., Kurylyak V.YU., Romanyuk I.A. Polarizatsionno-opticheskiye svoystva kristallov  $K_2SO_4$  v oblasti sobstvennogo pogloshcheniya, Izv. AN. SSSR, seriya fizicheskaya, 53.(4), - 1335 -1338.(1989).
- 12 Kityk V., Yuvshenko V.O., Band energy calculation and optical constants of  $K_2SO_4$  single crystals, Physica Status Solidi, 182,79-83.(1994). doi: org/10.1002/pssb.2221820236.

### Сведения об авторах:

Нурахметов Т.Н. - профессор кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Бахтизин Р.З. - д.ф.м.н., профессор, заведующий кафедрой «Физическая электроника и нанофизика», Башкирский государственный университет, Уфа, РФ.

Салиходжа Ж.М. - доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Жунусбеков А.М. - доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Кайнарбай А.Ж. - доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Дауренбеков Д.Х. - ст.преподаватель кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Садькова Б.М. - докторант второго курса кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

Жангильсов К.Б. - докторант первого курса кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

*Юсупбекова Б.Н.* - докторант первого курса кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Астана, Казахстан.

*Nurakhmetov T.N.* - Professor, Technical Physics Department, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Bakhtizin R.Z.* - Doctor of Phys.-Math. Sci., Professor, Head of Physical Electronics and Nanophysics Chair, Bashkir State University, Ufa, Russia.

*Salikhodzha Zh.M.* - Associate Professor of the Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Zhunusbekov A.M.* - Assoc.professor, Technical Physics Department, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Kainarbay A.Zh.* - Assoc.professor, Technical Physics Department, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Daurenbekov D. H.* - Senior Lecturer, Technical Physics Department, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Sadykova B.M.* - PhD student, Technical Physics Department, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Zhanylysov K.B.* - PhD student, Technical Physics Department, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Yussupbekova B.N.* - PhD student, Technical Physics Department, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

*Поступила в редакцию 14.12.2018*

«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.enru.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

**Аннотация** (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 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 теорамдағы ескерту]». Бұл талап орындалмаған жағдайда мақаланы ағылшын тіліне аударғанда сілтемелерде қателіктер туындауы мүмкін.

**Қолданылған 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.

**Реквизиттер:**

"Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева" МОН РК

Столичный филиал АО "Цеснабанк"

КБЕ 16

БИН 010140003594

БИК TSES KZ KA

Счет в кодировке IBAN-

KZ91998BTV0000003104-

"За публикацию ФИО авторов"



**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](http://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 Баиллов 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, посвященная 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):

**Requisites:**

L.N. Gumilyov Eurasian  
National University"  
JSC "Tsesnabank:"  
Tsesnabank КБЕ  
КБЕ 16  
БИН 010140003594  
БИК TSES KZ KA  
Счет в кодировке IBAN-  
KZ91998ВТВ0000003104-  
-За публикацию фио

**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 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://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):

## Мақаланы рәсімдеу үлгісі

МРНТИ 27.25.19

А.Ж. Жубанышева<sup>1</sup>, Н. Темиргалиев<sup>2</sup>, А.Б. Утесов<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup> *Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, Актюбе, Казахстан*

(Email: <sup>1</sup> *axaulezh@mail.ru*, <sup>2</sup> *ntmath10@mail.ru*, <sup>3</sup> *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

$$\delta_N(\varepsilon_N; D_N)_Y \equiv \delta_N(\varepsilon_N; T; F; D_N)_Y \equiv \inf_{(l^{(N)}, \varphi_N) \in D_N} \delta_N \left( \varepsilon_N; \left( l^{(N)}, \varphi_N \right) \right)_Y, \quad (51)$$

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

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

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

### 3. Ссылки и библиография

Для ссылок на утверждения, формулы и т. п. можно использовать метки. Например, теорема 2, Формула (51)

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

Для руководства по  $\LaTeX$  и в качестве примера оформления ссылок, см., например, *Львовский С.М.* Набор и верстка в пакете  $\LaTeX$ . 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., 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. - **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. Жубанышева**<sup>1</sup>, **Н. Темиргалиев**<sup>1</sup>, **А.Б. Утесов**<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> Қ.Жубанов атындағы. Ақтөбе өңірлік мемлекеттік университеті, Ақтобе, 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.Zhubanysheva**<sup>1</sup>, **N. Temirgaliyev**<sup>1</sup>, **A.B. Utesov**<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> 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'yuternyj (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 funkcionov s nulevymi znachenijami zadannogo nabora linejnyh funkcionov 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 teorija priblizhenija funkcionov" [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 gipolipidemicheskaia aktivnost' leukomycina [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], Sibirskie 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:

*Жубаньшева 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, Актыбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, пр. А.Молдагуловой, 34, Актобе, 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 - 1(126) - Астана: ЕҰУ. 107-б.  
Шартты б.т. - 9,375 Таралымы - 25 дана.

Мазмұнына типография жауап бермейді.

Редакция мекен-жайы: 010008, Астана 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