

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(130)/2020

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, 2020**

**Nur-Sultan, 2020**

**Нур-Султан, 2020**

*Бас редакторы:*  
ф.-м.ғ.д., профессор  
**А.Т. Ақылбеков** (Қазақстан)

*Бас редактордың орынбасары*

**Гиниятова Ш.Г.**, ф.-м.ғ.к., доцент  
(Қазақстан)

*Редакция алқасы*

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

*Редакцияның мекенжайы:* 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Сәтбаев к-сі, 2, 402 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:* Г. Мендыбаева

**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.

Ашық қолданудағы электрондық нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz/>

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Қажымұқан к-сі, 12/1, 102 б.,  
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. Тел.: +7(7172)709-500 (ішкі 31-428)

*Editor-in-Chief*

Doctor of Phys.-Math. Sciences, Professor  
**A.T. Akilbekov** (Kazakhstan)

*Deputy Editor-in-Chief*

**Giniyatova Sh.G.**, Candidate of Phys.-Math. Sciences,  
Assoc. Prof. (Kazakhstan)

*Editorial Board*

<b>Aryngazin A.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences(Kazakhstan)
<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>Hoshi M.</b>	PhD, Prof. (Japan)
<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>Salikhodzha Z. M</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (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. 402,  
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008  
Tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Responsible secretary, computer layout:* G. Mendybayeva

**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.

Available at: <http://bulphysast.enu.kz/>

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.Т. Акилбеков**, доктор ф.-м.н., профессор (Казахстан)

*Зам. главного редактора*

**Ш.Г. Гиниятова** к.ф.-м.н., доцент  
(Казахстан)

*Редакционная коллегия*

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

*Адрес редакции:* 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2, каб. 402, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.  
Тел.: (7172) 709-500 (вн. 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Ответственный секретарь, компьютерная верстка:* Г. Мендыбаева

**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.

Электронная версия в открытом доступе: <http://bulphysast.enu.kz/>

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

№1(130)/2020

МАЗМҰНЫ

<i>Сарсенова С.М., Сүлейменов Т.Б., Жумадилов К.Ш.</i> Ақмола облысы аумағында дозиметриялық зерттеулер жүргізу үшін үлгілерді дайындау әдістемесі	8
<i>Кайнарбай А.Ж., Нуралиметов Т.Н., Салиходжа Ж.М., Балабеков К.Н., Ахметова А.С., Юсупбекова Б.Н., Жунусбеков А.М., Дауренбеков Д.Х., Какимшишов Е.А.</i> Полимер матрицасындағы CdSe және CdSe/CdS жоғарылюминесцентті нанокристалдар негізіндегі гибриді композиттердің оптикалық қасиеттері	16
<i>Нуралиметов Т.Н., Садықова Б.М., Жаңылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н., Әлібай Т., Таймуратова Л.У., Әділ Б., Досполов А., Төлеков Д.А.</i> CaSO <sub>4</sub> және K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> кристалдарындағы меншікті люминесценция табиғаты	26
<i>Ажылбекова А., Шаяманов Б., Усеинов А., Даулетбекова А., Баймуханов З., Козловский А., Гиниятова Ш., Попов А.И., Байжуманов М.</i> ZnSe <sub>2</sub> O <sub>5</sub> нанокристалдарының эксперименттік және теориялық зерттеулері	34
<i>Инербаев Т.М., Базарбек А.Б., Сағатов Н.Е., Ажылбеков А.Т.</i> Жер ядросының қысымындағы темір фосфидтерінің жай-күйі теңдеулерінің алғашқы ретті есептері	44
<i>Мендибаев К.О., Уразбеков Б.А., Лукьянов С.М., Кутербеков К.А., Джансейитов Д.М., Исатаев Т.Г., Жолдыбаев Т.К., Азнабаев Д., Валиолда Д.С., Кроха В., Мразек Д., Пеннионжеквич Ю.Э., Кабышев А.М., Мұхамбетжан А.М.</i> Дейтрондардың <sup>9</sup> Be ядросымен өзара әрекеттесуі кезінде түрлі теориялық модельдер шеңберінде бір нуклонды берілістерді зерттеу	50
<i>Опахай С., Кутербеков К.А., Соловьев А.А., Нуркенов С.А., Нығыманова А.С.</i> Жұқа пленкалы материалдар негізіндегі төмен температурадағы қатты оксидті отын элементтерінің дамуы	64
<i>Ракишев Ж.Б., Аппазова Ш.Т., Бейсембаева Б.С.</i> Ғарыш ашпараттының қозғалысын сипаттау нұсқалары туралы	74
<i>Амангелді Н., Солдатхан Д., Ергалиұлы Ғ.</i> <sup>16</sup> O+ <sup>12</sup> O ядролық жүйе үшін 20, 24 МэВ энергияларындағы серпінді шашыраудың оптикалық потенциалының параметрлерін анықтау	78
<i>Дәтей А.М., Амангалиева Р.Ж., Гиниятова Ш.Г.</i> Термоядролық реакторда қабырға маңындағы плазмалы-тозанды құрылымдардың қасиеттерін зерттеу	84
<i>Усеинов А.Б., Усеинов Б.М., Ажылбеков А.Т., Бекжанов Е.С.</i> Мырыш оксиді кристалдарының электр өткізгіштігі. «Алғашқы принциптер» зерттеу	90
<i>Балахаева Р., Кәрім Қ., Ажылбеков А., Баймуханов З., Гиниятова Ш., Байжуманов М., Даулетбекова А.</i> Температура мен тұндыру әдістерінің CdTe нанокристалдарының құрылымдық қасиеттеріне әсері	100

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

№1(130)/2020

CONTENTS

<i>Sarsenova S.M., Suleimenov T.B., Zhumadilov K.Sh.</i> Methodology of sample preparation for conducting dosimetric research on the territory of Akmola region	8
<i>Kainarbay A.Z., Nurakhmetov T.N., Ussipbekova B., Salikhodzha Z.M., Balabekov K.N., Akhmetova A.S., Yussupbekova B.N., Zhunusbekov A.M., Daurenbekov D.H., Kakimishov E.A.</i> Optical properties of hybrid composites based on highly luminescent CdSe and CdSe / CdS nanocrystals in the polymer matrix	16
<i>Nurakhmetov T.N., Sadykova B.M., Zhangylyssov K.B., Yussupbekova B.N., Alibay T.T., Taimuratova L.U., Adil B., Dospolov A., Tolekov D.A.</i> The nature of intrinsic luminescence in CaSO <sub>4</sub> and K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> crystals	26
<i>Akylbekova A., Shayamanov B., Usseinov A., Dauletbekova A., Baimukhanov Z., Kozlovskiy A., Giniyatova Sh., Popov A., Baizhumanov M.</i> Experimental and theoretical studies of ZnSe <sub>2</sub> O <sub>5</sub> nanocrystals	34
<i>Inerbaev T.M., Bazarbek A.B., Sagatov N.E., Akilbekov A.T.</i> First principle calculations of iron phosphide state equations at earth core pressures	44
<i>Mendibayev K.O., Urazbekov B.A., Lukyanov S.M., Kuterbekov K.A., Janseitov D.M., Isataev T., Zholdybayev T., Aznabayev D., Valiolda D.S., Kroha V., Mrazek D., Penionzhkevich Yu.E., Kabyshev A.M., Mukhambetzhana A.M.</i> Study of one-nucleon transfer reaction for the interaction of deuterons with the <sup>9</sup> Be nuclei within various theoretical models	50
<i>Opakhai S., Kuterbekov K.A., Solovyev A.A., Nurkenov S.A., Nygmanova A.S.</i> Development in low-temperature solid oxide fuel cells based on thin-film materials	64
<i>Rakishev Zh.B., Appazova Sh.T., Beisembayeva B.S.</i> About some options of the probability theory of description of motion of space vehicle	74
<i>Amangeldi N., Soldatkhan D., Yergaliuly G.</i> Determination of elastic scattering potential parameter at energies of 20, 24 MeV for the nuclear system <sup>16</sup> O+ <sup>12</sup> C	78
<i>Datey A.M., Amangaliyeva R.Zh., Giniyatova Sh.G.</i> Investigation of plasma-dust structures properties formed near the walls of a thermonuclear reactor	84
<i>Usseinov A.B., Useinov B.M., Akilbekov A.T., Bekzhanov E.S.</i> The electrical conductivity of zinc oxide crystals. First principles study	90
<i>Balakhayeva R., Karim K., Akilbekov A., Baymukhanov Z., Giniyatova Sh., Baizhumanov M., Dauletbekova A.</i> Influence of temperature and deposition methods on the structural properties of CdTe nanocrystals	100

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Сарсенова С.М., Сулейменов Т.Б., Жумадилов К.Ш.</i> Методика подготовки образцов для проведения дозиметрических исследований на территории Акмолинской области	8
<i>Кайнарбай А.Ж., Нурахметов Т.Н., Салиходжа Ж.М., Балабеков К.Н., Ахметова А.С., Юсупбекова Б.Н., Жунусбеков А.М., Дауренбеков Д.Х., Какимишов Е.А.</i> Оптические свойства гибридных композитов на основе высоколюминесцирующих нанокристаллов CdSe и CdSe/CdS в матрице полимеров	16
<i>Нурахметов Т.Н., Садыкова Б.М., Жанылысов К.Б., Юсупбекова Б.Н., Алибай Т.Т., Таймуратова Л.У., Адиль Б., Досполов А., Толеков Д.А.</i> Природа собственной люминесценции в кристаллах CaSO <sub>4</sub> и K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	26
<i>Акылбекова А., Шаяманов Б., Усеинов А., Даулетбекова А., Баймуханов З., Козловский А., Гиниятова Ш., Попов А.И., Байжуманов М.</i> Экспериментальные и теоретические исследования нанокристаллов ZnSe <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	34
<i>Инербаев Т.М., Базарбек А.Б., Сагатов Н.Е., Акилбеков А.Т.</i> Первопринципные расчеты уравнений состояния фосфидов железа при давлениях ядра Земли	44
<i>Мендибаев К.О., Уразбеков Б.А., Лукьянов С.М., Кутербек К.А., Джансейтов Д.М., Исатаев Т.Г., Жолдыбаев Т.К., Азнабаев Д., Валиолда Д.С., Кроха В., Мразек Д., Пеннионжскевич Ю.Э., Кабышев А.М., Мухамбетжан А.М.</i> Исследование однонуклонных передач при взаимодействии дейтронов с ядром <sup>9</sup> Be в рамках различных теоретических моделей	50
<i>Опахай С., Кутербек К.А., Соловьев А.А., Нуркенов С.А., Ныгыманова А.С.</i> Развитие низкотемпературных твердооксидных топливных элементов на основе тонкопленочных материалов	64
<i>Ракишев Ж.Б., Аптазова Ш.Т., Бейсембаева Б.С.</i> О некоторых вариантах описания движения космического аппарата	74
<i>Амангелди Н., Солдатхан Д., Ергалиұлы Ф.</i> Определение параметров потенциала упругого рассеяния при энергиях 20, 24 МэВ для ядерной системы <sup>16</sup> O+ <sup>12</sup> C	78
<i>Датей А.М., Амангалиева Р.Ж., Гиниятова Ш.Г.</i> Исследование свойств плазменно-пылевых структур, образующихся вблизи стенок термоядерного реактора	84
<i>Усеинов А.Б., Усеинов Б.М., Акилбеков А.Т., Бекжанов Е.С.</i> Электропроводность кристаллов оксида цинка. Исследования из первых принципов	90
<i>Балахаева Р.К., Карим К.Б., Акилбеков А.Т., Баймуханов З.К., Гиниятова Ш.Г., Байжуманов М.Ж., Даулетбекова А.К.</i> Влияние температуры и способов осаждения на структурные свойства нанокристаллов CdTe	100

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы, 2020, том 130, №1, 90-99 беттер  
<http://bulphysast.enu.kz>, E-mail: vest\_phys@enu.kz

МРНТИ: 29.19.24

А.Б. Усеинов<sup>1</sup>, Б.М. Усеинов<sup>2</sup>, А.Т. Акилбеков<sup>1</sup>, Е.С. Бекжанов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

<sup>2</sup> Северо-Казахстанский государственный университет им. М. Козыбаева, Петропавловск, Казахстан

(E-mail: usseinov\_ab@enu.kz)

### Электропроводность кристаллов оксида цинка. Исследования из первых принципов

**Аннотация:** В данной работе проведены расчеты уровней зарядового перехода примесного атома водорода в объеме оксида цинка методами теории функционала плотности. Для чистого оксида цинка полученная ширина запрещенной зоны хорошо согласуется в сравнении с экспериментальными данными (3.52 эВ против 3.44 эВ [1]). В результате расчетов показано, что адсорбция водорода энергетически выгодна во всех позициях в решетке, в случае если дефект заряжен положительно. Из анализа релаксации следует, что позиции водорода на связи между атомами цинка и кислорода (Zn-O связь) являются менее выгодными, так как они ведут к сильным релаксациям. Внедрение водорода ведет к появлению дефектных уровней в зонной структуре кристалла вблизи дна зоны проводимости и характеризует его как «мелкого донора» – донорной примеси с низким потенциалом ионизации. Для подтверждения мелкодонорного характера атома водорода, проведены вычисления оптических уровней перехода зарядового состояния с учетом коррекции «смещения» и дефект-дефектного взаимодействия. В результате показано, что примесные центры являются положительно заряженными почти при всех значениях энергии Ферми во всей запрещенной зоне, что указывает на малую энергию связи электронного заряда на примесном атоме и появление электрического тока уже при малых температурах.

**Ключевые слова:** оксид цинка, методы DFT, энергия образования, уровни зарядового перехода, электропроводность.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2020-130-1-90-99>

Поступила: 18.02.2020 / Доработана: 02.03.2020 / Допущена к опубликованию: 4.03.2020

**Введение.** Исследование электронной структуры оксида цинка (ZnO) (3.44 эВ при 2 К [1]) привлекло большое внимание благодаря перспективам его использования в качестве оптоэлектронного материала. За счет уникального электронного строения ZnO применяется в качестве полупроводникового материала для варисторов, тиристоров и оптических покрытий. К тому же это сравнительно недорогой материал, для которого развит широкий спектр способов получения, такие как химическое осаждение из паровой фазы, гидротермальный способ и другие [2]. Недавние успехи в получении монокристаллического ZnO открыли возможность его использования в LED дисплеях, лазерных и ультрафиолетовых диодах [3].

Еще в первых экспериментальных работах [4,5] было замечено, что в структуре ZnO образуется большое количество водорода, который связывается с кристаллической структурой в процессе роста кристаллов. Первые исследования влияния на электронные свойства ZnO примесного водорода показали, что его присутствие существенно увеличивает концентрацию носителей свободного заряда. Дальнейшие теоретические исследования показали, что примесный водород действительно вносит вклад в собственную проводимость и характеризуется как «мелкий» донор, эффективно создавая дефектные уровни вблизи дна зоны проводимости с энергией ионизации 30 – 60 мэВ [6-8]. Ранее считалось, что собственная электронная проводимость вызвана наличием собственных дефектов кристаллической решетки ZnO. Однако детальное изучение с привлечением квантово-химического моделирования



показало, что собственные дефекты не могут играть существенной роли в проводимости из-за высокой энергии образования дефектов [9]. К собственным дефектам, энергетические уровни изменения зарядового состояния которых лежат вблизи дна зоны проводимости, относится междоузельный атом цинка, однако в равновесных условиях, концентрация междоузельного цинка остается низкой за счет большой энергии его образования ( $\sim 4.98$  эВ). Таким образом, присутствие примеси водорода в составе ZnO дает хорошее объяснение наблюдающейся электропроводимости.

Несмотря на большое количество теоретических исследований, их подавляющая часть была сделана с использованием чистых методов теории функционала плотности – методов, построенных на приближении локальной плотности (LDA) и приближении обобщенных градиентов (GGA), которые обладают существенным недостатком при оценке значения запрещенной зоны. К примеру для ZnO приближение LDA дает 0.8 эВ, тогда как экспериментальный результат 3.44 эВ [1]. Другие приближения используют коррекции, основанные на эмпирических рассуждениях или на жестком сдвиге зоны проводимости [10], а также на несамосогласованных приближениях типа LDA+U [11] или гибридных функционалах [12]. Эти подходы привели различные группы к качественно разным выводам о роли отдельных точечных дефектов в ZnO, оставляя вопрос об источнике проводимости открытым к обсуждению. Таким образом, для надежного подтверждения влияния рассматриваемых дефектов на электронную структуру кристалла необходимо дальнейшее детальное исследование на высокоточном уровне.

Расчетная характеристика как донорных, так и акцепторных дефектов требует точного описания деталей зонной структуры и правильной оценки уровней зарядового состояния. Общепринятой практикой является обсуждение уровней энергии, вводимы в запрещенную зону дефектными центрами с применением одночастичных приближений Кона-Шэма. Этот подход, однако, не вполне оправдан, если рассматриваются электронные переходы, тогда как уровни перехода между различными зарядовыми состояниями достаточно хорошо вычисляются [13,14]. Что касается проблемы запрещенной зоны, то гибридные обменно-корреляционные функционалы представляют собой практическое, хотя и не идеальное решение, положительно влияющее как на надежность вычисления энергий образования дефектов, так и на локализацию спина за счет точного вычисленного значения запрещенной зоны. Для описания электронных свойств оксида цинка ранее использовались различные формы гибридных функционалов: от популярного функционала B3LYP [15,16] до PBE0 [17,18] и более новый функционал HSE06 [19,20]. С учетом специфического объекта этой работы исследование примесного водорода было выполнено на уровне гибридного функционала PBE0 с использованием программы CRYSTAL. Как будет показано ниже, данный функционал с хорошей точностью воспроизводит экспериментальное значение запрещенной зоны (3.52 эВ против 3.44 эВ), что является отличной стартовой точкой для определения положения уровней зарядового перехода различных донорных и акцепторных примесей.

**Формализм вычислений.** *Модель и детали расчета.* Для каждого зарядового состояния (которое определяется фиксированием числа электронов в суперячейке) мы провели широкомасштабные исследования с целью определения стабильных и метастабильных положений примеси водорода в решетке. Примесь атомарного водорода была помещена во множество разных мест в решетке, как показано на рис. 1, и в каждом случае была позволена полная релаксация ячейки кристалла. Модель кристалла представляет собой периодическую модель расширенной элементарной ячейки (суперячейки) с матрицей расширения  $3 \times 3 \times 2$  (72 атома) и с атомной концентрацией примеси водорода 2.78 ат. %. Концентрация высчитывалась как отношение количества атомов примеси к количеству атомов в кислородной подрешетке кристалла. Первоначально примесный атом водорода был расположен вблизи регулярного атома кислорода в решетке на расстоянии  $d_{O-H} = 1 \text{ \AA}$ .

Все вычисления были выполнены в программе CRYSTAL [21] с использованием приближения линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО). Эта программа позволяет вычислить электронную структуру кристаллических систем с использованием методов Хартри-Фока,

теории функционала плотности (DFT) и различных гибридных аппроксимаций в сочетании с базисом (набором) локальных гауссовских функций для периодических (3D, 2D, 1D) систем.

Для описания атомных орбиталей атомов кристалла ZnO были выбраны базисы Яффе (Jaffe)[22], а для адсорбируемого атома водорода базис Гати (Gatti) [23]. Известно, что для лучшего описания электронной структуры кристалла необходимо точно определить полную энергию кристаллической ячейки [6, 14]. С точки зрения известной теории расчет полной энергии в рамках периодической модели кристалла не является однозначным. По этой причине в программу CRYSTAL была введена сложная схема предварительного анализа и последующего вычисления кристаллических интегралов. В наших расчетах были выбраны высокие допуски сходимости для кулоновского и обменного интегралов: для кулоновского перекрытия ( $10^{-7}$ ), кулоновского проникновения ( $10^{-7}$ ), обменного перекрытия ( $10^{-7}$ ), первого обменного псевдоперекрытия ( $10^{-7}$ ) и второго обменного псевдоперекрытия ( $10^{-14}$ )[21 и ссылки в ней]. Эти допуски означают значение перекрытия атомных орбиталей, и если эти значения больше, чем указанные в расчете, то кулоновские и обменные интегралы вычисляются точно, в противном случае ими пренебрегают или вычисляют приблизительно. Эффективные заряды атомов были рассчитаны с помощью анализа заселенности Малликена [24].

В работе использован гибридный обменно-корреляционный функционал PBE0. Как было показано ранее, этот функционал обеспечивает надежное описание геометрической, электронной структуры и энергетики дефектов в широком спектре материалов [25,26]. В частности, гибридные функционалы, такие как PBE0, обеспечивают гораздо лучшее предсказание запрещенной зоны полупроводников, чем приближение локальной плотности (LDA) или приближение обобщенных градиентов (GGA).

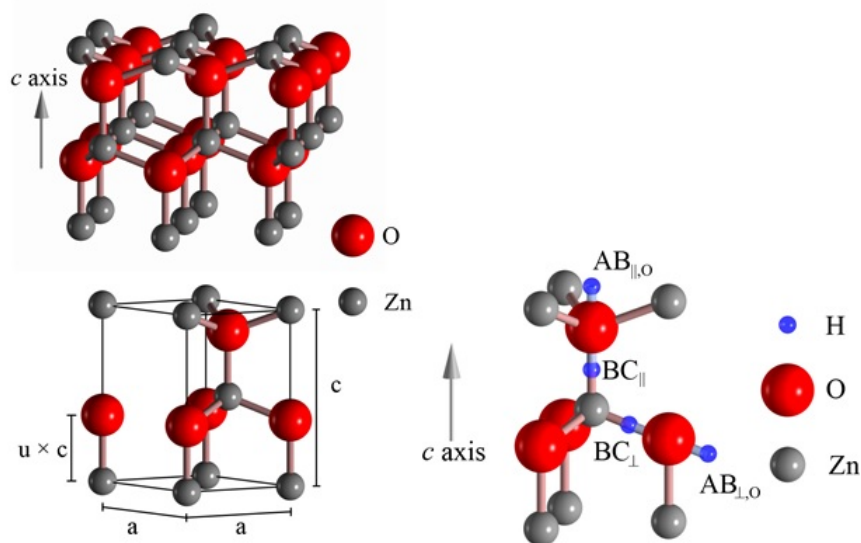


Рисунок 1 – Схематическое представление структуры вюрцита ZnO (слева), и позиции, на которых может адсорбироваться междуузельный водород (справа). BC указывает на положения в центре химических связей, а AB обозначают места вне связи, параллельно или перпендикулярно ей

Энергия образования дефектов и уровень зарядового перехода водорода в ZnO. Энергия образования дефекта D с зарядом q в системе X определяется как:

$$E_f = E_{tot}(D, q) - E_{tot}(X) + \sum_i n_i \mu_i + q(E_F - E_V) \quad (1)$$

где  $E_{tot}(D,q)$  и  $E_{tot}(X)$  - полные энергии системы с дефектом и без него.  $n_i$  представляет число атомов элемента  $i$ , которые удаляются из системы при образовании дефекта (отрицательное значение для  $n_i$  означает добавление атомов).  $\mu_i$  - химический потенциал элемента  $i$ , он представляет собой энергию атомов, которые удаляются (или добавляются) в систему, когда образуется дефект. Четвертый член  $q(E_F - E_V)$  представляет собой изменение электронной энергии за счет обменного взаимодействия.  $E_F - E_V$  - энергия Ферми относительно максимума валентной зоны бездефектной системы.

Для определения уровней перехода зарядового состояния для различных дефектов мы использовали приближение Лани и Зангера (Lany and Zunger) [27], основанно на предыдущих исследованиях Шерца и Шеффлера (Scherz and Scheffler) [28]. Уровень перехода зарядового состояния есть значение энергии Ферми, при котором энергия образования заряженного дефекта равна энергии образования нейтрального дефекта.

$$\begin{aligned} E_{tot}(D,q) - E_{tot}(X) + \sum_i n_i \mu + q(\varepsilon(q/q') - E_V) = \\ E_{tot}(D,q') - E_{tot}(X) + \sum_i n_i \mu + q'(\varepsilon(q/q') - E_V) \end{aligned} \quad (2)$$

Откуда:

$$\varepsilon(q/q') = \frac{E_{D,q'} - E_{D,q}}{q - q'} - E_V \quad (3)$$

За нулевую энергию устанавливается вершина валентной зоны,  $E_V = 0$ . Мы рассмотрели случаи, когда в систему добавляется электронный заряд, т.е. состояние  $q'$  отвечает состоянию на  $1e$  больше ( $q+1e$ ): это отвечает переходу из нейтрального состояния в отрицательно заряженное состояние,  $\varepsilon(0/-1)$ .

В такой постановке задачи имеется проблема расчета полной энергии заряженной системы, входящей в выражение 3 – полная энергия заряженной системы не имеет физического смысла, так как взаимодействие должно быть в балансе с фоновым зарядом, которое не учитывается или нивелируется при расчете. Рассчитать это взаимодействие крайне затруднительно и зачастую не удается из-за отсутствия сходимости процесса самосогласования, поэтому были сделаны попытки обойти данную проблему. Так, в предыдущих исследованиях дефектов в ZnO с использованием функционала V3LYP [12] для расчета разницы полных энергий использовалась разница в собственных одночастичных значениях энергии. Следующим шагом стало применение теоремы Янака (Janak), согласно которой разница полных энергий, связанная с вертикальными переходами, оценивается по сдвигу собственных значений Кона-Шэма после добавления электронного заряда [29]. В нашей работе мы не применяли подобных схем и попробовали рассчитать прямым способом разницу полных энергии в уравнении 3. Как будет показано ниже, обычный метод расчета дает неплохое согласие с результатами предыдущих работ.

*Коррекция энергии смещения.* Следствием использования периодических граничных условий в расчетах электронной структуры является то, что они приводят к условной сходимости кулоновского потенциала. В случае незаряженных систем, потенциал и полная энергия сходятся к хорошо определенным значениям в условиях, впервые описанных Эвальдом [30]. Однако, полная энергия заряженной системы может быть рассчитана только до некоторой постоянной смещения [9]. Величина этого смещения зависит от среднего потенциала кристалла. Смещение можно получить, вычислив изменение полной энергии нейтральной системы при удалении электрона из нее. С увеличением размера системы разница сходится к постоянному значению смещения. По мере того, как размер системы стремится к бесконечности, разница в энергии сходится приблизительно до значения 7.2 эВ. Значение  $E_{tot}(D)$  в уравнении 1 включает

в себя данное смещение и должно быть скорректировано при вычислении энергии образования дефекта.

*Дефект-дефектное взаимодействие.* Полная энергия периодической системы, которая содержит локализованный заряженный дефект, включает в себя дефект-дефектное кулоновское взаимодействие, взаимодействие «дефект–кристаллическая решетка» и взаимодействие «кристаллическая решетка–кристаллическая решетка». Чтобы вычислить энергию образования изолированного дефекта, энергию данных взаимодействий необходимо вычесть из  $E_{tot}(D)$ . Все три взаимодействия можно аппроксимировать многополосной коррекцией Макова-Пэйна (Makov-Payne) [31]:

$$\Delta E = \frac{q^2 \alpha_M}{2 \epsilon_r V^{1/3}} + \frac{2 \pi q Q}{3 \epsilon_r V} + O(V^{-5/3}) \quad (4)$$

где  $\alpha_M$  - зависящая от решетки постоянная Маделунга,  $\epsilon_r$  - относительная диэлектрическая постоянная,  $V$ - объем ячейки, а  $Q$  - квадрупольный момент дефекта.

Первый член в уравнении 2 представляет собой кулоновское дефект-дефектное взаимодействие. Его можно тривиально вычислить с использованием CRYSTAL, поскольку он эквивалентен взаимодействию периодической системы, состоящей из атомов водорода в положениях дефектов, умноженных на  $q^{2/\epsilon_r}$ . Полная энергия взаимодействия сообщается в стандартном выводе расчета CRYSTAL. Величина  $\epsilon_r$  в уравнении 2 может быть получена из экспериментальных результатов или рассчитана непосредственно с использованием CRYSTAL. Второй член в уравнении 2 связан с взаимодействием между дефектом и фоновым зарядом кристаллической решетки. Аналитический расчет второго слагаемого в уравнении 2 не является прямым, поэтому его чаще получают численно. Однако во многих случаях данный терм достаточно мал и им можно пренебречь. Третий член масштабируется как  $1/V^{5/3}$  и из-за малости им почти всегда можно пренебречь. В нашей работе исследовано влияние включения только первого члена в вычисление энергии дефектов.

**Результаты и их анализ.** Результаты вычисления энергии образования, относительного смещения атома водорода (H) и расстояния между примесью и атомами кристалла приведены в таблице 1. Как видно, для всех зарядовых состояний конфигурация  $BC_{\perp}$  является наиболее стабильной, хотя близость остальных значений энергий образования говорит о том, что эти позиции также могут сосуществовать в кристалле. Позиции вблизи атома Zn, как на связи, так и вне ее являются энергетически не выгодными в результате сильного электростатического отталкивания между атомом примеси и ионом цинка. Для позиции  $BC_{\perp}$  также наблюдается сильная релаксация (>40%) вблизи дефекта, что говорит в пользу реализации позиции атома H вне химической связи Zn-O: сильная релаксация локальной структуры дефекта приводит к достаточно сильному понижению полной энергии системы, что в свою очередь приводит к высокой энергии образования. Такое поведение не наблюдается в реальных физических процессах, однако реализуемо в принятой расчетной модели.

Таблица 1 – Рассчитанные энергии образования  $E_f$  и релаксации решетки для различных позиций и зарядовых состояний водорода.  $\Delta d$  – относительные смещения,  $d$  – расстояния между атомами

Дефект	Позиция	$E_f$ , eV	$\Delta d_{Zn}, \%$	$\Delta d_O, \%$	$\Delta d_{Zn-H}, \text{Å}$	$\Delta d_{O-H}, \text{Å}$
H <sup>+</sup>	$BC_{\perp}$	-1.84	40.6	11.2	2.00	0.99
H <sup>+</sup>	$BC_{\perp}$	-1.82	39.1	11.8	1.98	0.99
H <sup>+</sup>	$AB_{O,\perp}$	-1.78	18.6	20.6	-	1.01
H <sup>+</sup>	$AB_{O,\parallel}$	-1.59	20.1	17.8	-	1.01

Анализ перераспределения заряда показал, что нейтральный атом H<sup>0</sup> в позиции возле иона O отдает часть электронов ( $\approx 0.2e$ ) ближайшим атомам решетки, т.е. атом H теряет заряд. Заселенность O-H связи 0.132e, в то время как заселенность связи на близлежащих атомах Zn и O снижается и становится 0.062e. Абсорбция H также влияет на эффективные атомные заряды ближайших Zn и O, которые становятся меньше, чем для чистого ZnO ( $\pm 1e$ ).

Стоит отметить, что уменьшение концентрации примеси (приближение к экспериментальным условиям) приводит к усилению О-Н связи (заселенность 0.166e и длина О-Н связи  $\sim 0.979$  Å). В случае расположения вблизи атома Zn химическое взаимодействие не возникает, заряд атома Zn 29.02e, в то время как в идеальной структуре ZnO 29e. Внедрение водорода также приводит к перераспределению заряда на ближайших Zn-O связях. Особенно отчетливо это прослеживается для соседних атомов O, у которых снижается электронная заселенность связи с соседними атомами Zn. Полученные данные хорошо согласуются с результатами предыдущих исследований [32].

На рисунке 2 показаны уровни зарядового перехода примесного Н в междоузельной позиции и позиции вакансии в зависимости от энергии Ферми. Как видно, энергия Ферми, при котором происходит переход зарядового состояния дефекта из положительно заряженного в нейтральное состояние равна 0.12 эВ и 0.05 эВ для атома водорода в междоузлии и в вакансии кислорода, соответственно. Это говорит о том, что энергия связи электронного заряда с дефектным центром (О-Н) очень слабая и уже при низких температурах этот заряд становится свободным, приводя к повышению электропроводности кристалла. При этом наиболее выгодными позициями сорбции водорода являются позиции вблизи регулярного иона O либо в его вакансии. Полученные численные значения энергии перехода зарядового состояния хорошо согласуются с предыдущими исследованиями. Так в работе [6] расчеты с использованием гибридного функционала B3LYP для 400-атомной суперячейки показали, что оптический уровень зарядового перехода атома водорода лежит на 0.1 эВ ниже дна зоны проводимости, а рассчитанная длина О-Н связи составила 0.98 Å, что очень хорошо согласуется с нашими результатами. Такой вывод находится в хорошем согласии и с предыдущими теоретическими результатами, что водород характеризуется как мелкий донор.

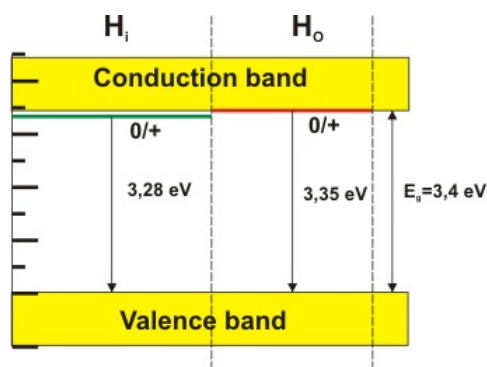


Рисунок 2 – Расположение уровней зарядового перехода атома водорода а) в междоузлии б) в вакансии кислорода

**Выводы.** В данной работе проведены расчеты из «первых принципов» примесного атома водорода, абсорбированного в кристалле ZnO. В результате расчетов получены энергетические и электронные свойства чистого и с примесью водорода кристалла ZnO. Для чистого ZnO полученная ширина запрещенной зоны хорошо согласуется в сравнении с экспериментальными данными (3.52 эВ против 3.44 эВ [1]), что позволило провести с высокой точностью расчеты энергии образования дефекта в различных положениях в решетке. Наиболее энергетически выгодной позицией для атома водорода оказалась позиция  $BC_{\perp}$ , однако другие конфигурации также являются энергетически выгодными и близкими по значению к наиболее выгодной конфигурации. Это говорит о том, что они также могут образовываться в кристалле. Однако из анализа релаксации можно сделать вывод, что выгодность позиции  $BC_{\perp}$  обусловлена высокой степенью релаксаций окружающих атомов (до 40%), т.е. энергия системы сильно понижается за счет значительной «перестройки» атомной структуры вблизи дефекта, что не характерно для реальных равновесных условий, а лишь является следствием неполноты расчетной модели. Таким образом, на наш взгляд, абсорбция вне кристаллических связей более вероятна. Поэтому, мы предполагаем, что наиболее выгодной позицией адсорбции

водорода является позиция  $AV_{\perp}$ , для которой наблюдается низкая релаксация и высокая энергия образования (таблица 1).

Внедрение водорода ведет к появлению дефектных уровней в зонной структуре кристалла вблизи дна зоны проводимости и характеризует его как мелкого донора. Наблюдаются два эффекта от внедрения водорода: 1) сужение запрещенной зоны; 2) появление резонанса на дне зоны проводимости между дефектными уровнями и уровнями кристалла. Для подтверждения мелкодонорного характера атома водорода проведены вычисления оптических уровней перехода зарядового состояния с учетом коррекции «смещения» и дефект-дефектного взаимодействия. В результате показано, что примесные центры являются положительно заряженными почти при всех значениях энергии Ферми во всей запрещенной зоне, что указывает на малую энергию связи электронного заряда на примесном центре и появление электрического тока уже при малых температурах. Оптические уровни перехода зарядового состояния посчитаны прямым способом без использования известных «обходных» схем подсчета разности полных энергий в (3), а полученные значения уровней хорошо согласуются со значениями из других работ.

### Список литературы

- 1 Litton C.W., Reynolds D.C., Collins T.C. Zinc Oxide Materials for Electronic and Optoelectronic Device Applications. – John Wiley and Sons, 2011. – 351 p.
- 2 Look D.C., Hemsley J.W., Sizelove J.R. Residual native shallow donor in ZnO // Phys. Rev. Lett. – 1999. – Vol. 82. – № 19. – P. 2552-2558.
- 3 Ozgur U., Alivov Y.I., Liu C., Teke A., Reshchikov M.A., Dogan S., Avrutin V., Cho S.-J., Morkoc H. A. Comprehensive review of ZnO materials and devices // J. Appl. Phys. – 2005. – Vol. 98. – № 4. – P. 041301-041404.
- 4 Mollwo E.Z. Transient Effects in the Ionic Conductance of Anodic Oxide Films // Phys. – 1954. – Vol. 138. – № 17. – P. 478-486.
- 5 Thomas D.G., Lander J.J. Efficient yellow luminescence from vapour-grown gallium phosphide with a high nitrogen content // Chem. Phys. – 1956. – Vol. 25. – № 26. – P. 1136-1139.
- 6 Gallino F., Pacchioni G and Valentin C. Transition levels of defect centers in ZnO by hybrid functionals and localized basis set approach // J. Chem. Phys. – 2010. – Vol. 133. – P. 144512(1-10)
- 7 Van de Walle C.G. Hydrogen as a cause of doping in Zinc Oxide // Phys. Rev. Lett. – 2000. – Vol. 85. - № 5. – P. 1012 – 1015.
- 8 Bastin D., Lavrov E.V., and Weber J. Metastable state of the  $V_{Zn}H_2$  defects in ZnO // Phys. Rev. B. – 2011. – Vol. 83. - №.19. – P 195210(1-5)
- 9 Janotti A. and Van de Walle C.G. Native point defect in ZnO // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 76. - № 16. – P.165202-165224.
- 10 Kohan A.F., Ceder G., Morgan D., Van de Walle Chris G. First-principles study of native point defects in ZnO // Phys. Rev. B. – 2000. - Vol. 61. - № 11. -P. 15019-15027.
- 11 Erhart P., Albe K. First-principles study of migration mechanisms and diffusion of oxygen in zinc oxide // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 73, – № 11. – P.115207-115216.
- 12 Patterson C. H., Role of defects in ferromagnetism in  $Zn_{1-x}Co_xO$ : A hybrid density-functional study // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 74. – P. 144432
- 13 Lany S. and Zunger A. Dopability, Intrinsic Conductivity and Nonstoichiometry of Transparent Conducting Oxides // Phys. Rev. Lett. – 2007. – Vol. 98. - № 4. – P. 045501-045506.
- 14 Van de Walle C. G. and Neugebauer J. First principles calculations for defects and impurities: Application to III-nitrides // J. Appl. Phys. - 2004. – Vol. 95. – № 8. – P. 3851-3879.
- 15 Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J. Chem. Phys. – 1993. – Vol. 98. – P. 5648.
- 16 Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Phys. Rev. B. – 1988. – Vol. 37. – P. 785.
- 17 Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865.
- 18 Alkauskas A., Broqvist P. and Pasquarello A. Defect energy levels in Density Functional Calculations Alignment and Band Gap Problem // Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 101. – № 4. – P 046405(1-4).
- 19 Heyd J., Scuseria G.E. and Ernzerhof M. Hybrid Functionals based on a screened Coulomb potential // J. Chem. Phys. – 2003. – Vol. 118.
- 20 Deak P., Aradi B., Frauenheim T., Janzen E., and Gali A. Accurate defect levels obtained from the HSE06 range-separated hybrid functional // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81. – № 15. – P. 153203 (1-4)

- 21 Dovesi R., Saunders V.R., Roetti C., Orlando R., Zicovich-Wilson C.M., Pascale F., Civalieri B., Doll K., Harrison N.M., Bush I.J., D'Arco P. and Llunell M. CRYSTAL 14 User's Manual University of Torino, Italy. [Electronic resource]– URL: <http://www.crystal.unito.it> (accessed: 20.01.2019).
- 22 Jaffe J. E. and Hess A. C. Hartree-Fock study of phase changes in ZnO at high pressure // Phys. Rev. B. – 1993. – Vol. 48. – № 11. – P. 7903 – 7909
- 23 Gatti C., Saunders V. R. and Roetti C. Crystal-field effects on the topological properties of the electron-density in molecular-crystals - the case of urea // J. Chem. Phys. – 1994. – Vol. 101. – P. 10686
- 24 Mulliken R. S. Electronic population analysis on LCAO-MO molecular wave functions // J. Chem. Phys. – 1955. – Vol. 23(10), – P. 1833.
- 25 Usseinov A.B., Kotomin E.A., Zhukovskii Yu., Purans J., Akilbekov A. Hydrogen adsorption on the ZnO (1-100) surface: ab initio hybrid density functional linear combination of atomic orbitals calculations // Physica Scripta. – 2014. – Vol. 89. – P. 045801-045809
- 26 Gryaznov D. et.al. A comparative Ab initio thermodynamic Study of Oxygen Vacancies in ZnO and SrTiO<sub>3</sub>: Emphasis on Phonon Contribution // J. Phys. Chem. C. – 2013. – Vol. 117 (27). – P. 13776–13784
- 27 Lany S. and Zunger A. Assessment of correction methods for the band-gap problem and for finite-size effects in supercell defects calculations: Case studies for ZnO and GaAs // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 78. – № 23. – P. 235104 (1-25)
- 28 Scherz U. and Scheffler M. Chapter I: Density Functional Theory of sp-bounded defects in III/IV Semiconductors // Semicond. Semimetals. – 1993. – Vol. 38. – P. 1-58.
- 29 Janak J.F. Proof that  $dE/dn = \epsilon$  in Density Functional Theory // Phys. Rev. B. – 1978. – Vol. 18. – № 12. – P. 7165-7168.
- 30 Ewald P. Die Berechnung optischer and electrostatischer Gitterpotentiale // Ann. Phys. – 1921. – Vol. 369. – № 3. – P. 253-287
- 31 Makov G. and Payne M. C. Periodic boundary conditions in ab-initio calculations // Phys. Rev. B. – 1995. – Vol. 51. – № 7. – P. 4014-4022
- 32 Акылбеков А.Т., Усеинов А.Б., Сокабаева А.Ш., Ерболатова Г.Ж., Абуова Ф.У. Квантовохимические расчеты проводимости оксида цинка // Вестник КарГУ им. Е.А. Букетова. Серия «Физика». – 2016. – Т.81. – № 1. – С. 8–18.

А.Б. Усеинов<sup>1</sup>, Б.М. Усеинов<sup>2</sup>, А.Т. Акилбеков<sup>1</sup>, Е.С. Бекжанов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

<sup>2</sup> М. Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Петропавл, Қазақстан

#### Мырыш оксиді кристалдарының электр өткізгіштігі. «Алғашқы принциптер» зерттеу

**Аңдатпа:** Бұл жұмыста мырыш оксидтің көлеміндегі сутегі атомының қоспасын «алғашқы принциптер» есептеу жүргізілді. Таза ZnO үшін алынған жолақтардың алшақтықтары эксперименттік мәліметтермен жақсы сәйкес келеді (3.44 эВ-қа қарсы 3.44 эВ [1]). Есептеулер нәтижесінде сутегі адсорбциясы, егер ақаулық оң зарядталған болса, тордың барлық позицияларында энергетикалық қолайлы екендігі көрсетілді. Релаксацияны талдаудан Zn-O байланысындағы сутектің позициясы аз қолайлы, өйткені олар күшті релаксацияға әкеледі. Сутектің енгізілуі кристалдың жолақ құрылымында ақаулар деңгейінің пайда болуына алып келеді және оны таяз донор ретінде сипаттайды. Сутегі атомының кіші донорлық сипатын растау үшін зарядталған күйдің ауысуының оптикалық деңгейі «жылжу» және ақау-ақаулық өзара әрекеттесуді ескере отырып есептелді. Нәтижесінде қоспалық орталықтар барлық тыйым салынған аймақтағы Ферми энергиясының барлық дерлік мәндері үшін оң зарядталатындығы көрсетілді, бұл қоспалық орталықтағы электронды зарядтың төмен байланыс энергиясын және тіпті төмен температурада да электр тогының пайда болуын көрсетеді.

**Түйін сөздер:** Мырыш оксиді, DFT әдістері, түзілу энергиясы, зарядтардың ауысу деңгейі, электр өткізгіштік.

A.B. Usseinov<sup>1</sup>, B.M. Useinov<sup>2</sup>, A.T. Akilbekov<sup>1</sup>, E.S. Bekzhanov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> L. N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

<sup>2</sup> M. Kozymbaev North Kazakhstan State University, Petropavlovsk, Kazakhstan

#### The electrical conductivity of zinc oxide crystals. First principles study

**Abstract:** In this work, we calculated the levels of the charge transition using the methods of the density functional theory of the impurity hydrogen atom in the volume of zinc oxide. For pure zinc oxide, the obtained band gap is in good agreement with the experimental data (3.52 eV versus 3.44 eV [1]). As a result of calculations, it was shown that hydrogen adsorption is energetically favorable at all positions in the lattice if the defect is positively charged. From the relaxation analysis it follows that the positions of hydrogen on the bond between zinc and oxygen atoms (Zn-O bond) are less advantageous, since they lead to strong relaxation. The incorporation of hydrogen leads to the appearance of defect levels in the band structure of the crystal near the bottom of the conduction band and characterizes it as a "shallow donor," a donor impurity with a low ionization potential. To confirm the small-donor nature of the hydrogen atom, the optical levels of the transition of the charge state were calculated taking into account the correction of "displacement" and defect-defect interaction. As a result, it was shown that impurity centers are positively charged for almost all values of the Fermi energy in the entire forbidden zone, which indicates a low binding energy of the electron charge on the impurity atom and the appearance of an electric current even at low temperatures.

**Keywords:** Zinc oxide, DFT methods, formation energy, charge transition levels, electrical conductivity

## References

- 1 Litton C.W., Reynolds D.C., Collins T.C. Zinc Oxide Materials for Electronic and Optoelectronic Device Applications. (John Wiley and Sons, 2011, 351 p.).
- 2 Look D.C., Hemsky J.W., Sizelove J.R. Residual native shallow donor in ZnO, Phys. Rev. Lett., 82(19), 2552-2558 (1999).
- 3 Ozgur U., Alivov YI., Liu C., Teke A., Reshchikov M.A., Dogan S., Avrutin V., Cho S-J., Morkoc H. A. Comprehensive review of ZnO materials and devices, J. Appl. Phys., 98(4), 041301-041404 (2005).
- 4 Mollwo E.Z. Transient Effects in the Ionic Conductance of Anodic Oxide Films, Phys. Rev., 138(17) 478-486 (1954).
- 5 Thomas D.G., Lander J.J. Efficient yellow luminescence from vapour-grown gallium phosphide with a high nitrogen content, Chem. Phys., 25(26) 1136-1139 (1956).
- 6 Gallino F., Pacchioni G. and Valentin C. Transition levels of defect centers in ZnO by hybrid functionals and localized basis set approach, J. Chem. Phys., 133, 144512(1-10) (2010).
- 7 Van de Walle C.G. Hydrogen as a cause of doping in Zinc Oxide, Phys. Rev. Lett., 85(5), 1012 – 1015 (2000).
- 8 Bastin D., Lavrov E.V. and Weber J. Metastable state of the  $V_{Zn}H_2$  defects in ZnO, Phys. Rev. B., 83(19), 195210(1-5) (2011).
- 9 Janotti A. and Van de Walle C.G. Native point defect in ZnO, Phys. Rev. B., 76(16), 165202-165224 (2007).
- 10 Kohan A.F., Ceder G., Morgan D., Van de Walle Chris G. First-principles study of native point defects in ZnO, Phys. Rev. B., 61(11), 15019-15027 (2000).
- 11 Erhart P., Albe K. First-principles study of migration mechanisms and diffusion of oxygen in zinc oxide, Phys. Rev. B., 73(11), 115207-115216 (2006).
- 12 Patterson C. H., Role of defects in ferromagnetism in  $Zn_{1-x}Co_xO$ : A hybrid density-functional study, Phys. Rev. B., 74, 144432 (2006).
- 13 Lany S. and Zunger A. Dopability, Intrinsic Conductivity and Nonstoichiometry of Transparent Conducting Oxides, Phys. Rev. Lett., 98(4), 045501-045506 (2007).
- 14 Van de Walle C. G. and Neugebauer J., First principles calculations for defects and impurities: Application to III-nitrides, J. Appl. Phys., 95(8), 3851-3879 (2004).
- 15 Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange, J. Chem. Phys., 98, 5648 (1993).
- 16 Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density, Phys. Rev. B., 37, 785 (1988).
- 17 Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple, Phys. Rev. Lett., 77, 3865 (1996).
- 18 Alkauskas A., Broqvist P., and Pasquarello A., Defect energy levels in Density Functional Calculations Alignment and Band Gap Problem, Phys. Rev. Lett., 101(4), 046405(1-4) (2008).
- 19 Heyd J., Scuseria G. E. and Ernzerhof M., Hybrid Functionals based on a screened Coulomb potential, J. Chem. Phys., 118, 8207 (2003).
- 20 Deak P., Aradi B., Frauenheim T., Janzen E. and Gali A., Accurate defect levels obtained from the HSE06 range-separated hybrid functional, Phys. Rev. B., 81(15), 153203 (1-4) (2010).
- 21 Dovesi R., Saunders V.R., Roetti C., Orlando R., Zicovich-Wilson C.M., Pascale F., Civalleri B., Doll K., Harrison N.M., Bush I.J., D'Arco P., and Llunell M. CRYSTAL14 User's Manual University of Torino, Italy. [Electronic resource]. Available at: <http://www.crystal.unito.it> (Accessed: 20.01.2019).
- 22 Jaffe J. E. and Hess A. C. Hartree-Fock study of phase changes in ZnO at high pressure, Phys. Rev. B., 48(11), 7903 – 7909 (1993).
- 23 Gatti C., Saunders V. R. and Roetti C. Crystal-field effects on the topological properties of the electron-density in molecular-crystals - the case of urea, J. Chem. Phys., 101, 10686 (1994).
- 24 Mulliken R. S., Electronic population analysis on LCAO-MO molecular wave functions, J. Chem. Phys., 23(10), 1833 (1955).
- 25 Usseinov A.B., Kotomin E.A., Zhukovskii Yu., Purans J., Akilbekov A., Hydrogen adsorption on the ZnO (1-100) surface: ab initio hybrid density functional linear combination of atomic orbitals calculations, Physica Scripta, 89, 045801-045809 (2014).
- 26 Gryaznov D. et. al. A comparative Ab initio thermodynamic Study of Oxygen Vacancies in ZnO and SrTiO<sub>3</sub>: Emphasis on Phonon Contribution, J. Phys. Chem. C., 117(27), 13776–13784 (2013).
- 27 Lany S. and Zunger A., Assessment of correction methods for the band-gap problem and for finite-size effects in supercell defects calculations: Case studies for ZnO and GaAs, Phys. Rev. B., 78(23), 235104 (1-25) (2008).
- 28 Scherz U. and Scheffler M., Chapter I: Density Functional Theory of sp-bounded defects in III/IV Semiconductors, Semicond. Semimetals, 38, 1-58 (1993).
- 29 Janak J. F. Proof that  $dE/dn = \epsilon$  in Density Functional Theory, Phys. Rev. B., 18(12), 7165-7168 (1978).
- 30 Ewald P. Die Berechnung optischer and electrostatischer Gitterpotentiale, Ann. Phys., 369, 253-287 (1921).
- 31 Makov G. and Payne M. C. Periodic boundary conditions in ab-initio calculations, Phys. Rev. B., 51(7), 4014-4022 (1995).



32 Akilbekov A.T., Usseinov A.B., Sokabaeva A.Sh., Erbolatova G.Zh., Abuova F.U., Quantum chemical calculations of the conductivity of zinc oxide, Bulletin of the Karaganda University. Physics Series, 1(81), 8 – 18 (2016).

**Сведения об авторах:**

*Усеинов А.Б.* - PhD, и.о. доцента кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий физико-технического факультета Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева 2, Нур-Султан, Казахстан.

*Усеинов Б.М.* - к.ф.-м.н., профессор кафедры физики факультета математики и естественных наук Северо-Казахстанского государственного университета им. М. Козыбаева, ул. Пушкина 86, Петропавловск, Казахстан.

*Акилбеков А.Т.* - д.ф.-м.н., профессор кафедры технической физики физико-технического факультета Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева 2, Нур-Султан, Казахстан

*Бекжанов Е.С.* - магистрант 2-го курса кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий физико-технического факультета Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева 2, Нур-Султан, Казахстан.

*Usseinov A.B.* - PhD, associate professor at the nuclear physics, new materials and technologies department, faculty of physics and technology of L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpaev street 2, Nur-Sultan, Kazakhstan.

*Useinov B.M.* - candidate of physical and mathematical sciences, professor at physics department, faculty of mathematics and natural sciences of M. Kozybaev North Kazakhstan State University, Pushkin street 86, Petropavlovsk, Kazakhstan.

*Akilbekov A.T.* - doctor of physical and mathematical sciences, professor of department of technical physics, physics and technology faculty of L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpaev street 2, Nur-Sultan, Kazakhstan.

*Bekzhanov E.S.* - 2nd-year master student of nuclear physics, new materials and technologies department, faculty of physics and technology of L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpaev street 2, Nur-Sultan, Kazakhstan.

«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 және шаблонды *bulphysast.eni.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://grmti.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 формулаларсызсыз, мақаланың атауын мейлінше қайталамауы қажет; әдебиеттерге сілтемелер болмауы қажет; мақаланың құрылысын (кіріспе мақаланың мақсаты/ міндеттері /қарастырылып отырған сұрақтың тарихы /зерттеу /әдістері нәтижелер/талқылау, қорытынды) сақтай отырып, мақаланың қысқаша мазмұны берілуі қажет).

Түйін сөздер (6-8 сөз не сөз тіркесі. Түйін сөздер мақала мазмұнын көрсетіп, мейлінше мақала атауы мен аннотациядағы сөздерді қайталамай, мақала мазмұнындағы сөздерді қолдану қажет. Сонымен қатар, ақпараттық-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 тыйым 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) он 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 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: КСЖВКЗКХ

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: КІНСКЗКА

ИИК: KZ498210439858161073

Кбе 16

Кпн 859 - за статью

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

БИК Банка: ІРТҮКЗКА

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"

**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 and template can be downloaded from the journal website *bulphysast.enu.kz*. And you also need to provide the **cover letter** of the author(s).  
Language of publications: Kazakh, Russian, English.

**3. Submission of articles to the scientific publication office means the authors' consent to the right of the Publisher, L.N. Gumilyov Eurasian National University, to publish articles in the journal and the re-publication of it in any foreign language. Submitting the text of the work for publication in the journal, the author guarantees the correctness of all information about himself, the lack of plagiarism and other forms of improper borrowing in the article, the proper formulation of all borrowings of text, tables, diagrams, illustrations.**

4. The volume of the article should not exceed 18 pages (from 6 pages).

**5. Structure of the article**

**GRNTI** <http://grnti.ru/>

**Initials and Surname of the author (s)**

**Full name of the organization, city, country** (if the authors work in different organizations, you need to put the same icon next to the name of the author and the corresponding organization)

**Author's e-mail (s)**

**Article title**

**Abstract** (100-200 words, it should not contain a big formulas, the article title should not repeat in the content, it should not contain bibliographic references, it should reflect the summary of the article, preserving the structure of the article - introduction/ problem statement/ goals/ history, research methods, results /discussion, conclusion).

**Key words** (6-8 words/word combination. Keywords should reflect the main content of the article, use terms from the article, as well as terms that define the subject area and include other important concepts that make it easier and more convenient to find the article using the information retrieval system).

**The main text of the article** should contain an introduction/ problem statement/ goals/ history, research methods, results / discussion, conclusion. Tables, figures should be placed after the mention. Each illustration should be followed by an inscription. Figures should be clear, clean, not scanned.

Tables are included directly in the text of the article; it must be numbered and accompanied by a reference to them in the text of the article. Figures, graphics should be presented in one of the standard formats: PS, PDF, TIFF, GIF, JPEG, BMP, PCX. Bitmaps should be presented with a resolution of 600 dpi. All details must be clearly shown in the figures.

In the article, only those **formulas** are numbered, to which the text has references.

All **abbreviations**, with the exception of those known to be generally known, must be deciphered when first used in the text.

Information on **the financial** support of the article is indicated on the first page in the form of a footnote.

**6.** The list of literature should contain only those sources (numbered in the order of quoting or in the order of the English alphabet), which are referenced in the text of the article. References to unpublished issues, the results of which are used in evidence, are not allowed. Authors are recommended to exclude the reference to pages when referring to the links and guided by the following template: chapter number, section number, paragraph number, theorem number (lemmas, statements, remarks to the theorem, etc.), number of the formula. For example, "... see [3, § 7, Lemma 6]"; "... see [2], a remark to Theorem 5". Otherwise, incorrect references may appear when preparing an English version of the article.

#### **Template**

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

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

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

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

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

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

**8. Work with electronic proofreading.** Articles received by the Department of Scientific Publications (editorial office) are sent to anonymous review. All reviews of the article are sent to the author. The authors must send the proof of the article within ten 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: HSBKKZKX

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. Стилиевой файл и шаблон 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 исключать 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 десяти 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"

### СОПРОВОДИТЕЛЬНОЕ ПИСЬМО

Настоящим письмом авторы гарантируют, что размещение научной статьи "НАЗВАНИЕ СТАТЬИ" (Произведение) авторов ФИО АВТОРА(ОВ) в журнале "Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н.Гумилева. Серия Физика. Астрономия" не нарушает ничьих авторских прав. Авторы предоставляют издателю журнала, Евразийскому национальному университету имени Л.Н. Гумилева исключительные права на неограниченный срок:

- право на воспроизведение Произведения (опубликование, обнародование, дублирование, тиражирование или иное размножение Произведения) без ограничения тиража экземпляров, право на распространение Произведения любым способом. При этом каждый экземпляр произведения должен содержать имя автора (ов) Произведения;

- право на включение в составное произведение;

- право на доведение до всеобщего сведения;

- право на использование метаданных (название, имя автора (правообладателя), аннотации, библиографические материалы, полный текст Произведения и пр.) Произведения путем распространения и доведения до всеобщего сведения, обработки и систематизации, а также включения в различные базы данных и информационные системы, в том числе полнотекстовых версий опубликованного Произведения.

Территория, на которой допускается использование прав на Произведения, не ограничена.

**Автор(ы)** также предоставляют издателю журнала право хранения и обработки своих персональных данных без ограничения по сроку (фамилия, имя, отчество, сведения об образовании, сведения о месте работы и занимаемой должности). Персональные данные предоставляются для их хранения и обработки в различных базах данных и информационных системах, включения их в аналитические и статистические отчетности, создания обоснованных взаимосвязей объектов произведений науки, литературы и искусства с персональными данными и т.п.

**Автор(ы)** в полном объеме несут ответственность за неправомерное использование в научной статье объектов интеллектуальной собственности, объектов авторского права в соответствии с действующим законодательством Республики Казахстан.

Настоящим письмом автор(ы) дают свое согласие на проверку Произведения на предмет плагиата издателем журнала.

**Автор(ы)** подтверждают, что направляемое Произведение нигде ранее не было опубликовано, не направлялось и не будет направляться для опубликования в другие научные издания.

*\*Сопроводительное письмо оформляется на официальном бланке организации и подписывается руководителем организации (для вузов - курирующим проректором по научно-исследовательской работе).*

*\*\* Сопроводительное письмо авторов, являющихся сотрудниками ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, заверяется деканом факультета.*

Исп.: ФИО автора(ов)



Редакторы: А.Т. Ақылбеков  
Шығарушы редактор, дизайн: Г. Мендыбаева

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің  
Хабаршысы. Физика. Астрономия сериясы.  
-2020 - 1(130) - Нұр-Сұлтан: ЕҰУ. 117-б.  
Шартты б.т. - 9,375 Таралымы - 25 дана.

Ашық қолданудағы электрондық нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz/>

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