Использование указанных материалов позволит не только сократить сроки и повысить качество экспертных исследований, но и будет способствовать совершенствованию судебно-экспертной деятельности, повышению эффективности осуществления правосудия и противодействию терроризму.

Также студенты третьего и четвёртого курсов имеют возможность применять полученные практические навыки в Испытательной лаборатории гражданского и служебного оружия и боеприпасов к нему.

Резюмируя изложенное, следует отметить, что работа, проводимая на кафедре технической физики, а также дальнейшее развитие указанных направлений обеспечивают подготовку востребованных специалистов для судебно-экспертной, правоохранительной и научной деятельности.

Список использованной литературы

1. Об установлении двухуровневой структуры высшего профессионального образования в Кыргызской Республике : постановление Правительства Кыргызской Республики от 23 августа 2011 г. № 496 // *Эркин Тоо*. - 2011. - 30 авг. - № 72. - URL: http://cbd.minjust.gov.kg/act/view/ru-ru/92802
2. Винокурова О. С. Подготовка экспертов с естественно-научным образованием // *Вестник КНУ*. - 2020. - № 3 (103). - С. 7–10.
3. Тугельбаева Б. Г., Чалков Г. И. Вопросы подготовки сведущих лиц в области криминалистических экспертиз // Право и правоприменение: история, проблемы, тенденции и перспективы : сб. науч. тр. - Липецк, 2007. - С. 138–142.
4. Винокурова О. С. Пиротехнические средства как объект криминалистического исследования // *Вестник КНУ*. - 2022. - № 3 (111).
5. Особенности криминалистического исследования пиротехнических изделий промышленного производства // *Актуальные вопросы теории и практики судебной экспертизы в Кыргызской Республике*. - 2023. - № 1.
6. Методы исследования следов выстрела // *Вестник КНУ. Труды молодых учёных*. - 2023.

Рецензент: кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Доржуева Г.Ж.

УДК 535.37
DOI 10.58649/1694-9099-2026-2-321-326

Ганыева А.С., Мамытбеков У.К., Шаршеев К.
Жусуп Баласагын атындагы КУУ,
Кыргыз Республикасынын Улуттук илимдер академиясы
Ганыева А.С.,[1] Мамытбеков У.К.,[2] Шаршеев К.[2]
КНУ имени Жусупа Баласагына,[1]
Национальная академия наук Кыргызской Республики[2]
Ganyeva A.S., Mamytbekov U.K., Sharsheev K.
KNU Jusup Balasagyn,
National Academy of Sciences of the Kyrgyz Republic

ORCID 0009-0007-0824-5300

ЩЕЛОЧТУК МЕТАЛЛДАРДЫН ТАТААЛ СУЛЬФАТТАРЫНЫН ЗОНАЛЫК ТҮЗҮЛҮШҮ
ЗОННАЯ СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ СЛОЖНЫХ СУЛЬФАТОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ
THE BAND STRUCTURE COMPLEX ALKALI METAL SULFATE CRYSTALS

Кыскача мүнөздөмө: Бул иште $M^I_{(1)}M^I_{(2)}SO_4$ (мында $M^I_i = Li, Na, K$) тибиндеги, өзгөчө $LiKSO_4$ и $LiNaSO_4$ курамындагы татаал сульфат кристаллдарынын зоналык түзүлүшү жана электрондук касиеттерине байланыштуу изилдөөлөр берилет. Энергетикалык зоналардын өзгөчөлүктөрү, химиялык байланыштын мүнөзү жана электрондук түзүлүштү калыптандырууда катиондордун курамынын ролу каралган.Тыюу салуу зонасынын кеңдигине жана электрондук тыгыздыктын бөлүштүрүлүшүнө ар түрдүү иондордун (Li^+, Na^+, K^+ ж.б.) таасири тыгыздык функционалынын теориясынын (DFT) алкагындагы кванттык-химиялык эсептөөлөрдүн негизинде анализделген. Жүргүзүлгөн иштерди талдоо көрсөткөндөй, зоналык түзүлүш менен люминесценциялык касиеттердин ортосунда тыгыз байланыш бар жана татаал сульфаттардын оптоэлектрондук түзүлүштөрдө жана нурлануунун дозиметрлеринде иштөөчү зат катары колдонулушу келечектүү багыт болуп саналат.

Аннотация: В работе представлены исследования зонной структуры и электронных свойств кристаллов сложных сульфатов типа $M^I_{(1)}M^I_{(2)}SO_4$ (где $M^I_i = Li, Na, K$), в частности $LiKSO_4$ и $LiNaSO_4$. Рассмотрены особенности энергетических зон, характер химической связи и роль катионного состава в формировании электронной структуры. На основе данных квантово-химических расчётов в рамках теории функционала плотности (DFT) проанализировано влияние различных ионов (Li^+, Na^+, K^+ и др.) на ширину запрещённой зоны и распределение электронной плотности. Анализ работ показывает взаимосвязь зонной структуры с люминесцентными характеристиками и перспективами применения сложных сульфатов в оптоэлектронных устройствах и в качестве рабочего вещества для дозиметров радиационного излучения.

Abstract: The paper presents studies of the band structure and electronic properties of complex sulfate crystals of the type $M^I_{(1)}M^I_{(2)}SO_4$ ($M^I_i = Li, Na, K$), in particular $LiKSO_4$ and LiNaSO. The features of the energy bands, the nature of the chemical bonding, and the role of the cationic composition in the formation of the electronic structure are discussed. Based on quantum-chemical calculations within the framework of density functional theory (DFT), the influence of various ions (Li^+, Na^+, K^+, and others) on the band gap width and the distribution of electron density is analyzed. The review highlights the relationship between the band structure, luminescent characteristics, and the potential applications of complex sulfates in optoelectronic devices and as active materials for radiation dosimeters.

Негизги сөздөр: зоналык түзүлүш; татаал сульфаттар; анион; катион; электрондук тыгыздык; тыюу салынган зона.

Ключевые слова: зонная структура; сложные сульфаты; анион; катион; электронная плотность; запрещённая зона.

Keywords: band structure; complex sulfates; anion; cation; electron density; band gap.

Актуальность исследования: В настоящее время ведутся работы по созданию новых эффективных оптических материалов многоцелевого назначения на базе кристаллов. Перспективной представляется разработки на базе кристаллов сложных сульфатов щелочных металлов типа $M^I_{(1)}M^I_{(2)}SO_4$ (где $M^I_i = Li, Na, K$), в частности $LiKSO_4$ и $LiNaSO_4$ представляют собой класс соединений для применения в качестве рабочих веществ в твердотельных дозиметрах рентгеновского, бета-, гамма- и электронного излучений, поскольку они обладают эффективным атомным номером близким к эффективному атомному номеру биологической костной ткани и достаточно высоким световыходом [1; 2].

Основные цели исследования – изучение электронной структуры кристаллов $LiNaSO_4$ и $LiKSO_4$ на основе квантово-химических расчётов в рамках теории функционала плотности (DFT) и анализ влияния различных ионов (Li^+, Na^+, K^+ и др.) на ширину запрещённой зоны и распределение электронной плотности.

Методы исследования: Кристалл – система с большим числом частиц. Элементарная ячейка кристалла может содержать десятки атомов, сотни электронов. Решение уравнения Шредингера для такой системы может быть получено только с использованием приближений. При решении уравнения Шредингера используются различные методы. Одним из подходов к решению многоэлектронной задачи реализован в рамках теории функционала плотности («Density Functional Theory» – DFT).

В основе DFT лежит положение о том, что все основные свойства многоэлектронной системы в основном состоянии однозначно определяются электронной плотностью ρ(r), а не многочастичной волновой функцией. Это существенно упрощает расчёты, поскольку электронная плотность зависит только от трёх пространственных координат, тогда как волновая функция - от координат всех электронов системы.

Объектами исследования в данной работе являются кристаллы смешанного сульфата $LiNaSO_4$ и $LiKSO_4$.

К исследованию физических свойств кристаллов сложных сульфатов щелочных металлов посвящено достаточно много работ. Для понимания свойств этих кристаллов необходимо рассмотреть их зонную структуру, которая определяет электронное поведение материала [1; 4].

Физические свойства кристалла $LiNaSO_4$ хорошо изучены: исследованы его электрические, люминесцентные, диэлектрические и оптические характеристики.

Ширина запрещённой зоны составляет около 4,7 эВ.

Кристаллическая структура базируется на тетраэдрических анионных группах SO_4^{2-}, типичных для сульфатов щелочных металлов, где катионы Li^+и Na^+ занимают позиции в тетраэдрических и октаэдрических пустотах соответственно, что представлено на рис. 1.

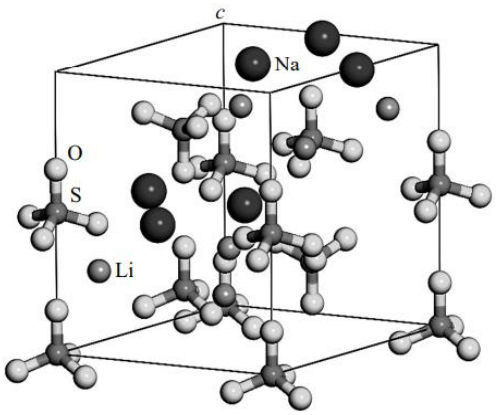


Рисунок 1. Кристаллическая структура $LiNaSO_4$ при комнатной температуре

Анионные комплексы SO_4^{2-} формируют в решётке тетраэдрические и октаэдрические полости, в которых располагаются катионы Li^+ и Na^+. Такая пространственная организация обеспечивает стабильность структуры и способствует высокой ионной подвижности.

В работе авторов [5] с использованием теории функционала плотности (DFT) была рассчитана зонно-энергетическая структура кристалла сульфата лития-натрия ($LiNaSO_4$), принадлежащего к пространственной группе P31c.

Рассчитанная зонно-энергетическая диаграмма $LiNaSO_4$ показывает, что уровни вершины валентной зоны обладают низкой дисперсией, характерной для кристаллов группы $ABSO_4$ (смешанных сульфатов щелочных металлов). Это свидетельствует о слабой ковалентной составляющей химической связи между атомами, формирующими группу SO_4^{2-}, и доминировании ионного взаимодействия в кристалле.

Вершина валентной зоны, принимаемая за уровень 0 эВ, совпадает с уровнем Ферми (EF). Запрещённая зона $LiNaSO_4$ является зоной прямого типа, что предполагает прямые оптические переходы между вершиной валентной зоны и дном зоны проводимости в Г-точке зоны Бриллюэна.

По результатам квантово-химических расчётов, выполненных в различных аппроксимациях обменно-корреляционного функционала, получены значения ширины запрещённой зоны: в приближении обобщённого градиента (GGA) - Eg = 5,89 эВ, в приближении локальной плотности (LDA) - Eg = 5,49 эВ.

Эти значения находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами и подтверждают, что кристалл $LiNaSO_4$ относится к широкозонным диэлектрикам прямого типа, обладающим перспективными оптическими и люминесцентными свойствами.

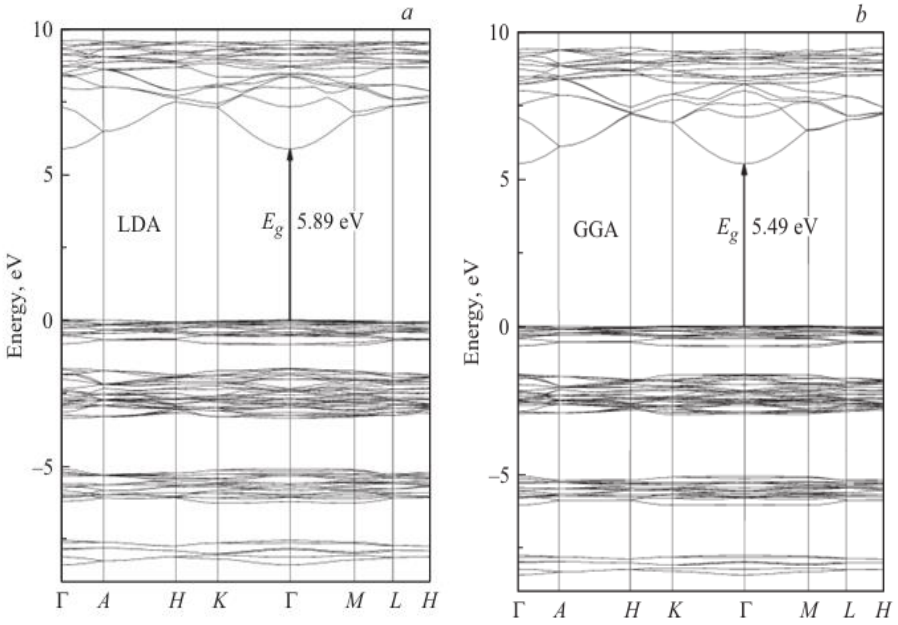


Рисунок 2. Рассчитанная зонно-энергетическая диаграмма для кристалла LiNaSO4 с использованием функционалов LDA (a) и GGA (b)

Кристаллы $LiKSO_4$ относятся к гексагональной сингонии; элементарная ячейка представляет собой призму с базовым ребром 5,13 Å и высотой 8,10 Å. Пространственная группа - $P6_3$. Структура $LiKSO_4$ представляет собой упорядоченную трёхмерную сеть, построенную из тетраэдрических фрагментов SO_4 и LiO_4, которые формируют шестичленные кольца, состоящие из трёх тетраэдров LiO_4 и трёх тетраэдров SO_4. Вершины этих тетраэдров связаны между собой, обеспечивая устойчивость кристаллической решётки.

Атомы калия располагаются вдоль гексагональной оси и координируются девятью атомами кислорода, образуя ионную подрешётку.

Обратите внимание: SO_2 и LiO_2, скорее всего, были ошибочными обозначениями. Для сульфатов корректнее SO_4, а для литий-кислородных тетраэдров - LiO_4.

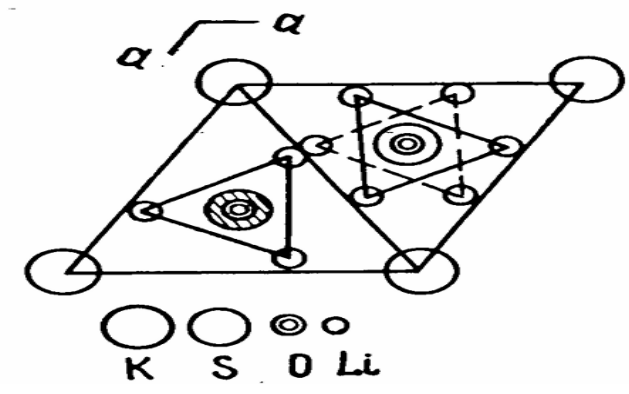


Рисунок 3. Проекция элементарной ячейки на плоскость "aa", пунктирный треугольник соответствует фазе P31c

При моделировании электронной структуры были ортогонализованы валентные состояния атомов кислорода O (2s, 2p), калия K (4s), лития Li (2s) и серы S (3s, 3p), а также учтены их возбуждённые состояния: O (3s, 3p), K (4p), Li (2p) и S (4s, 4p).

Согласно расчётам, проведённым в работе [6], ширина запрещённой зоны (Eg) составила 5,8 эВ, что хорошо согласуется с экспериментальным значением 6,2 эВ, полученным по спектрам отражения.

Анализ зонной диаграммы показал, что верхняя часть валентной зоны состоит из трёх подзон, формируемых в основном p-орбиталями кислорода, тогда как зона проводимости включает две-три подзоны, образованные s- и p-состояниями катионов Li^+ и K^+.

В работе на основе сочетания DFT-моделирования и экспериментальных спектроскопических методов проведён анализ кристаллов $LiNaSO_4$ и родственных сульфатов. Кристаллы Li_2SO_4, $LiKSO_4$ и $LiNaSO_4$ были выращены из насыщенных водных растворов методом медленного испарения при температуре 50 °C. Из кристаллов вырезались пластинки толщиной 3–5 мм. Образцы кристаллов Li_2SO_4, $LiKSO_4$ и $LiNaSO_4$ исследовались методами фотолюминесценции, рентгенолюминесценции и вакуумно-ультрафиолетовой спектроскопии [7].

В результате анализа проведённых теоретических расчётов [5; 6] и экспериментальных работ [2; 7] установлено, что значения ширины запрещённой зоны в литийсодержащих сульфатах смешанных щелочных металлов находятся в интервале 5,16–5,8 эВ. Было показано, что верхняя часть валентной зоны, участвующая в электронных переходах, образуется из 2p-орбиталей кислорода и состоит из четырёх подзон, отстоящих от потолка валентной зоны приблизительно на 10–20 эВ. Зона проводимости образуется в основном из s-состояний катионов основания.

Для выяснения электронной структуры кристаллов Li_2SO_4, $LiNaSO_4$ и $LiKSO_4$ были измерены спектр собственной люминесценции и спектры возбуждения основных полос излучения при возбуждении низкоэнергетическими фотонами (5,1 эВ), высокоэнергетическими фотонами (6,2–6,9 эВ), а также фотонами с энергией 12,4 эВ в широком температурном интервале 15–300 К. Электронные переходы интерпретировались на основе измеренных спектров возбуждения отдельных полос излучения.

Таким образом, оба соединения - $LiKSO_4$ и $LiNaSO_4$ - демонстрируют сходные черты в организации кристаллической решётки и формировании зонной структуры. В обоих случаях верхняя часть валентной зоны обусловлена p-состояниями кислорода, тогда как дно зоны проводимости формируется s-состояниями катионов лития и щелочного металла (Na или K). Полученные расчётные значения ширины запрещённой зоны в диапазоне 4,7–5,8 эВ хорошо согласуются с экспериментальными спектральными данными, что подтверждает достоверность теоретических моделей, основанных на методе функционала плотности.

Широкая запрещённая зона делает их типичными диэлектриками с высокой оптической прозрачностью. Моделирование зонной структуры методами квантовой химии позволяет прогнозировать поведение электронов, анализировать дефекты и создавать новые функциональные материалы на основе сульфатов.

Список использованной литературы

1. Alybakov A. A., Bujko V. M., Sharsheev K. Centers in X-irradiated $LiNaSO_4$ single crystals // Crystal Research and Technology. - 1981. - Vol. 16, № 5. - P. 611–616.
2. Шаршеев К. Радиационные и примесные центры с переменной валентностью в кристаллах сложных сульфатов щелочных металлов. - Екатеринбург ; Каракол, 1989. - 208 с.
3. Morosin B., Smith D. L. The crystal structure of $LiNaSO_4$ // Acta Crystallographica. - 1967. - Vol. 22. - P. 906.
4. Freiheit H. C., Kroll H., Putnis A. // Zeitschrift für Kristallographie. - 1998. - Vol. 213. - P. 575.

5. Щепанский П. А., Стадник В. И., Рудиш М. Я., Брезвин Р. С., Андриевский Б. В. Зонно-энергетическая структура и оптические спектры кристаллов $LiNaSO_4$ // Оптика и спектроскопия. - 2018. - Т. 125, вып. 3.
6. Kityk I. V., Kasperczyk J., Andrievskii B. V. Energy band structure of $KLiSO_4$ single crystals // Physics Letters A. - 1996. - Vol. 216, № 1–5. - P. 161–166.
7. Нурахметов Т. Н., Салиходжа Ж. М., Доломатов М. Ю., Жунусбеков А. М., Кайнарбай А. Ж., Дауренбеков Д. Х., Балтабеков А. С., Садыкова Б. М., Жанылысов К. Б., Юсупбекова Б. Н. Зонная структура и оптические спектры смешанных сульфатов щелочных металлов // Вестник Евразийского национального университета имени Л. Н. Гумилева. Серия: Физика. Астрономия. - 2019. - № 3 (128).

Рецензент: кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Доржуева Г.Ж.

УДК 519.6
DOI 10.58649/1694-9099-2026-2-326-338

Дуйшеев А.Б., Шамшыбекова Б.К.
Жусуп Баласагын атындагы КУУ
Дуйшеев А.Б, Шамшыбекова Б.К.
КНУ имени Жусупа Баласагына
Duisheev A.B., Shamshybekova B.K.
KNU Jusup Balasagyn

ORCID 0009-0007-9029-9606

МЕТАЛЛ МАТЕРИАЛДАРДЫ ЛАЗЕРДИК КАТУУЛАТУУДА ТЕМПЕРАТУРАЛЫК ТАЛААНЫН БӨЛҮШТҮРҮЛҮШҮН САНДЫК МОДЕЛДЕШТИРҮҮ
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ЗАКАЛКЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ
NUMERICAL SIMULATION OF TEMPERATURE FIELD DISTRIBUTION DURING LASER HARDENING OF METALLIC MATERIALS

Кыскача мүнөздөмө: Бул макалада жылуулук өткөрүмдүүлүктүн стационардык эмес теңдемесин чечүүнүн негизинде металл материалдарды лазердик катуулатуу процессине сандык анализ жүргүзүлөт. Лазердик жылуулук булагынын интенсивдүүлүгүнүн Гаусс боюнча бөлүштүрүлүшүн, фазалык өзгөрүүлөрдү жана реалдуу чек аралык шарттарды эске алуу менен жылуулук өткөрүүнүн математикалык модели сунушталат. Сандык алгоритм Python программалоо тили жана адистештирилген эсептөө китепканалары аркылуу чектүү айырмалар ыкмасы менен ишке ашырылган. Аналитикалык чечим менен салыштыруу аркылуу моделдин верификациясы жүргүзүлүп, анын жетиштүү тактыгы жана туруктуулугу тастыкталган. Лазердик нурлануунун параметрлеринин - кубаттуулуктун, тактын диаметринин, нурдун жылуу ылдамдыгынын жана импульстун узактыгынын - температуралык талаанын мүнөздөмөлөрүнө, жылынуу тереңдигине жана термикалык дефекттердин пайда болуу ыктымалдыгына тийгизген таасири каралат.

Аннотация: В статье рассматривается численный анализ процесса лазерной закалки металлических материалов на основе решения нестационарного уравнения теплопроводности. Предложена математическая модель теплопереноса с учётом гауссова распределения интенсивности лазерного источника тепла, фазовых превращений и реальных граничных условий. Численный алгоритм реализован методом конечных разностей с применением языка программирования Python и специализированных вычислительных библиотек. Проведена верификация модели путём сравнения с