ШИНБАЕВА АЙНУРА КАДЫРЖАНОВНА

ОРГАНИКАЛЫҚ МОЛЕКУЛАЛАРДЫҢ КРИОВАКУУМДЫҚ КОНДЕНСАТТАРЫНЫҢ ОПТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІНЕ ПОЛИМОРФТЫ ТҮРЛЕНУЛЕРДІҢ ӘСЕРІ

«6D072300 – Техникалық физика» мамандығы бойынша философия докторы (Ph.D.) ғылыми дәрежесін алу үшін дайындалған диссертациясына

АҢДАТПА

Зерттеу өзектілігі. Конденсирленген орта физикасының өзекті мәселелерінің бірі метастабильді күйлердің түзілуімен бірге жүретін полиморфты түрленулерді зерттеу болып келеді. Осы күйлердің тұрақтылығы фаза түзілудің термодинамикалық параметрлерімен және қарастырылып отырған заттардың молекулаларының физика-химиялық қасиеттерімен анықталады. Осының бір мысалы ретінде тек қана төмен және аса төмен температураларда орын алатын криокристалдарды қарастыруға болады. Бұл күйлер молекулаларының өлшемдері аз және молекула аралық әрекеттесулері әлсіз заттарға тән.

Криокристалдар көптеген себептер бойынша қызығушылық тудырады. Соның бірі теориялық модельге ұқсас кристалл торда молекулалардың орналасуының қарапайымдылығы. Криокристалдарға ван-дер-ваальс күштері өзара молекулаларды емес, атомдарды, сондай-ақ молекулалық криокристалдарды (N_2, CO, CD_4 және т.б.) байланыстыратын инертті газдар жатқызылады. Криокристалдарға қызығушылықтың басқа бір себебі бөлшектердің нольдік қозғалыстары молекула аралық өзара әрекеттесу энергиясымен сәйкес келетін заттардың болуы. Осындай заттар кванттық физика қағидаларымен анықталатын макроскопиялық жүйелерді құрайды. Мұндай жүйелерге негізінен He^3, He^4, H_2, CH_4 жатады.

Сонымен бірге конденсаттары термодинамикалық параметрлердің өзгеруіне байланысты ары қарай трансформацияланатын шыны тәрізді күйлердің түзілуіне бейім болатын заттар бар [1-5]. Олар аморфты жүйелерде жүретін процестерді зерттеу үшін өте тиімді объектілер болып табылады. Бұл жағынан қарастырғанда қарапайым өкілдері органикалық заттардың: метан, метанол, этанол және фреондардың криокристалдары болады. Сонымен қатар осы заттардың молекула ішілік және аралық ерекшеліктерінің болуы олардың кристалдарының әр түрлі күйлерінің қалыптасуын анықтайды. Мысалы, метан ядролық спиндері 2, 1 және 0 тең болатын A, T және E үш спиндік модификацияларының тепе-тең қоспасы болып келеді. Термодинамикалық параметрлері өзгерген кезде аталған спиндік модификациялардың концентрациялық қатынастарының өзгерісіне алып келетін конверсия жүреді. Қалыпты температура кезінде спиндік жүйе релаксациясы жылдам жүреді, ал температура төмендеген кезде конверсия жылдамдығы баяулайды. Метан аса жылдам суыған жағдайда спин-ядролық жүйесі тепе-тең емес қатты фазаның түзілуі жүреді. Спирттерге келетін болсақ, олар әр түрлі конформациялық күйде бола алады. Атап айтқанда, этанол молекуласы келесі екі

конформацияның біреуін қабылдай алады: молекулаға C_S симметрия тән болған кезде транс- және симметрия элементтері болмайтын гош-. Сонымен қатар, спирттер молекула аралық сутекті байланыстар есебінен әртүрлі кластерлік құрылымдар түзе алады.

Осылайша, зерттелініп отырған заттардың молекула ішілік ерекшеліктерін есепке алу газды ортада жалғыз молекулалардан конденсирленген ортаға өтуді, сонымен бірге осы жолда оптикалық сипаттамалардың өзгерісін егжей-тегжейлі бақылауға мүмкіндік береді. Сонымен бірге криотұндырудың сыртқы параметрлері мен газ фазасының тазалығын нақты бақылау осы заттардың полиморфты түрлерінің ерекше түрлерін зерттеуге мүмкіндік береді.

Конденсация температурасы және криокристалдардың түзілу жылдамдығы сияқты криотұндыру шарттарын нақты бақылауға болатындығы туралы мәлімет криоконденсаттар мен олардың көрсетілген түзілу шарттарының арасындағы қасиеттердің корреляциясын орнатуға мүмкіндік береді. Осылайша, ұсынылып отырған жұмыс терең вакуум жағдайында оптикалық әдістердің көмегімен төмен және аса төмен температура кезінде түзілетін полиморфты конденсирленген орталарды зерттеу сұрақтарын қарастырған кезде салмақты толықтауыш қызметін атқарады.

Диссертациялық зерттеудің мақсаты

Зерттеудің негізгі мақсаты полиморфты түрленулердің метанның, метанолдың және 134a фреонның криовакуумды кондсенсаттарының оптикалық сипаттамаларына, сонымен бірге олардың құрылымдық-фазалық күйлерінің болуының температуралық шекараларын анықтауға әсерін анықтау болып табылады.

Алдыға қойылған мақсат келесі **міндетерді** орындауды қарастырды:

1. тұндыру температурасының 134a фреон мен метанолдың тербелмелі спектрлеріне әсерін зерттеу;
2. 134a фреон мен метанолдың криовакуумды конденсаттарының әр түрлі құрылымдық күйлерінің температуралық шекараларын анықтау;
3. үлгілердің температураларының өзгерісінің 134a фреон мен метанол молекулаларыцның тербелмелі спектрлеріне әсерін зерттеу;
4. әртүрлі құрылымдық күйдегі конденсаттардың тығыздығы мен сыну коэффициенттерінің криотұндыру температурасына тәуелділігін зерттеу;
5. инертті газ қоспаларының метанның криовакуумды конденсаттарының оптикалық қасиеттеріне әсерін анықтау.

Зерттеу нысаны 16 К мен 130 К температура мен 10^{-5} Торр бастап 10^{-2} Торр интервалында түзілген, ИҚ – спектр диапазонындағы төсеменің шағылдыру қабілеті мен толқын ұзындығы λ=403 нм лазерлік сәулеленудің өзгеруіне алып келетін органикалық молекулалардың криовакуумды конденсаттарының жұқа үлдірлері болып табылады.

Зерттеу пәні органикалық заттардың криоконденсирленген фазаларының жылуфизикалық және оптикалық қасиеттері болып табылады.

Зерттеудің әдістемелік базасы

Зерттеу мақсатына қол жеткізу үшін келесі эксперименталды әдістер пайдаланылған: метан, 134а фреон, метанол және этанолдың криоконденсирленген жұқа үлдірлерінің конденсация жылдамдығы, қалыңдығы мен сыну коэффициентін лазерлік-интерферометр өлшеу әдісі; метана, 134а фреон, метанол криоконденсаттарындағы полиморфты түрлену процестерін ИҚ-спектрометрлік талдау әдісі; зерттелінетін үлгілердегі құрылымды-фазалық түрленулердің параметрлерін анықтаудың термодесорбциялық әдісі.

Қорғауға ұсынылатын негізгі тұжырымдар:

1. конденсация және 16-40 К температурарда метанолдың тығыздығы жоғары аморфты криоконденсатының болу ареалына сәйкес келетін үлгілерді қыздыру барысында туындайтын әр түрлі аморфты күйлердегі метанол криоүлдірлері. Т=40 К температура кезінде үлгі тығыздығы төмен аморфты күйге өтеді, 60 К бастап 80 К дейінгі температурада сұйық фазаны жылдам суыту барысында алынатын шыны тәрізді күйге келеді.
2. фреон 134а криоконденсаттары аморфтану дәрежесі әр түрлі аморфты күйде 16-60 К температура интервалында 72 К шынылану температурасы кезінде аморфты шыны тәрізді күйден қатты суытылған сұйық фазаға айналады, ары қарай пластикалық кристалл күйіне дейін кристалданады, одан кейін 78-80 К температура диапазонында моноклинді торлы кристалл күйге ауысу басталады;
3. оптикалық сипаттамалардың өзгеру негізінде метанол мен 134а фреонның криоконденсаттарының шынылану температуралары, сәйкесінше T_g=102,6 К және T_g=72 К анықталды;
4. бағдарлы ретсізделген α-фазадан жартылай реттелген β-фазаға фазалық ауысу метан криоконденсаттарында метан молекулаларымен сәулеленудің өзара әрекеттесу сипатын өзгертеді, бұл үлгілердің сыну коэффициенті мен тығыздықтарының өзгеруіне алып келеді, ал олардың температураға тәуелділігі фазалық ауысу температурасының маңайында үзіліске ұшырайды;
5. метан криоконденсаттарында аргон немесе азоттың 5% қоспасының болуы құраушыларның концентрациясы мен деформациялық тербелістің жұтылу жолақтарының орнының арасындағы байланысты көрсете отырып, α-β ауысуының қайтымдылығының бұзылуына алып келеді.

Диссертациялық жұмыстың **ғылыми жаңалығы** төмен температуралық оптикалық зерттеу әдістерімен метана, 134а фреонның және метанолдың криовакуумды конденсаттарының полиморфты түрленулері мен оптикалық сипаттамаларының арасындағы өзара байланысының анықталғандығына негізделеді. Бұл кезде келесідей жаңа нәтижелер алынған:

– бірінші рет оптикалық сипаттамалардың өзгерістерін тіркеу негізінде метанол мен 134а фреонның криоконденсаттарының шынылану температуралары анықталған;

– A'' симметрия типіне жатқызылатын ν_{15} мода тербелістеріне сәйкес келетін 134а фреон молекулаларының жұтылу жолағының бөлінуі эксперимент жүзінде анықталған;

– оптикалық әдістердің негізінде метанның криовакуумды конденсаттарының тығыздығы мен сыну көрсеткіштерінің тұндыру температурасына тәуелділігі анықталған, бұл әр түрлі полиморфты күйлердің түзілуімен байланысты;

– метанның инертті газдармен қоспаларының криовакуумды конденсаттарының оптикалық сипаттамалары өлшенген және α-β ауысудың болуының қоспалардың концентрациясына тәуелді болатындығы анықталған.

Зерттеудің ғылыми-тәжірибелік маңыздылығы

Осы зерттеу нәтижелері, экспериментті орындау әдістемелерін әзірлеу және негіздеу қатты дененің төмен температуралы физикасында іргелі нәтижелерді, атап айтқанда қатты фазаның конденсация шарттары мен қатты денелердегі құрылымдық түрленулердің механизмдерін зерттеудің бірегей нысандары болып табылатын үлдірлердің қасиеттерінің арасындағы өзара байланыс анықталған.

Осы диссертациялық жұмыстың алынған нәтижелері жақын және алыс ғарыштағы астрофизикалық және астрометриялық өлшеулерді зерттеу үшін құрамында көміртек болатын заттардың оптикалық қасиеттерінің верификациялық базасын құру бойынша көлемді жұмысқа негіз бола алады. Жұмыстың барысында бекітілген жиіліктегі молекулалардың сипаттық тербелістерінің жиілік диапазондарындағы жұқа үлдірлердің тербелмелі спектрлерінің термоынталандырылған өзгерістерін талдау негізінде ИҚ-спектроскопия әдісі әзірленген.

Жұмыс нәтижелері "Regtormed" ЖШҚ дәрілік құраушыларды бөлу жүйесін құру бойынша техникалық шешімді әзірлеу үшін пайдаланылған.

Алынған зерттеу нәтижелері эксплуатация барысында криоконденсирленген қабаттардың түзілу процесі жүзеге асырылатын криогенді-вакуумды технологиялық жабдықтың жұмыс беттерінің жылуфизикалық және оптикалық сипаттамаларын білуді талап ете отырып, заманауи криогенді технологиялардың дамуында тәжірибелік маңызға ие. Криогенді жабдық күйінің өзгерісін ескеру оның жұмысының сенімділігі мен пайдалану тиімділігін айтарлықтай жоғарылатуға мүмкіндік береді.

Автордың жеке үлесі. Авторластармен орындалған жұмыстардағы автордың жеке үлесі барлық жұмыс сатылары үшін негізгі болып табылады және іргелі ғылыми мәселені таңдау мен оны шешу жолдарына, эксперименталды зерттеулердің негізгі бөлігін орындауға және мақалалар мен баяндама тезистерін редакциялауға негізделеді.

Жүргізілген зерттеулердің апробациясы. Диссертациялық жұмыс негізінде 17 жұмыс жарияланған, олардың ішінде:

Thomson Reuters халықаралық база журналдарында жеті мақала:

1. A. Shinbayeva et. al.// Applied Surface Science. – 2018. – Vol. 446. – P. 196–200. (IF-5.155)
2. А. Шинбаева и др. // Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur. – 2018. – Vol. 44 (8). P. 1062–1072. (IF-0.825)

3. А. Шинбаева и др. // Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur. – 2019. – Vol. 45 (4). P. 511-522. (IF-0. 825)
4. A. Shinbayeva et. al. // J Low Temp Phys. – 2017. – Vol.187 (5). – P. 742–748. (IF-1.491)
5. A. Shinbayeva et. al. // J Low Temp Phys. – 2017. – Vol.187(5). – P. 749–756. (IF-1.300)
6. A. Shinbayeva et. al. // Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur. – 2017. – Vol. 43 (6). P. 909–913. (IF-0. 825)
7. A. Shinbayeva et. al. // Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur. – 2017. – Vol. 43 (10). – P. 1521–1524 (IF-0. 825)

Білім және ғылым саласындағы бақылау бойынша Комитетпен ұсынылған журналдарда төрт мақала:

1. Шинбаева А. К. ж. б // Вестник КазНУ им Аль – Фараби. Серия физическая. – 2018. – №1(64). – С. 39 – 47.
2. Шинбаева А. К. ж. б // Вестник КазНУ им Аль – Фараби. Серия физическая. – 2018. – №1(64). – С. 48 – 53.
3. Шинбаева А. К. ж. б // Вестник КазНУ им Аль – Фараби. Серия физическая. – 2017. – №1(60). – С. 28 – 37.
4. Шинбаева А. К. // Вестник КазНУ им Аль – Фараби. Серия физическая. – 2017. – №3(62). – С. 10 – 16.

Диссертациялық жұмыс материалдары келесі халықаралық конференцияларда баяндалған:

1. A. Shinbayeva et. al. //15th International Conference on the Physics of Non-Crystalline Solids & 14th European Society of Glass Conference, Saint-Malo, France. – 2018. – P.545.
2. A. Shinbayeva et. al. // 12th International Conference on Surfaces, Coatings and Nanostructured Materials (NANOSMAT), France. – 2017. – P. 133-134
3. A. Shinbayeva et. al. // 8th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Wisla, Poland. – 2017. – P.447
4. A. Shinbayeva et. al. // International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES), Prague, Czech Republic. – 2017. – P. 122
5. Шинбаева А. К. ж. б // V международная научная конференция «Современные проблемы физики конденсированного состояния, нанотехнологии и наноматериалов (Сарсембиновские чтения), Алматы, Казахстан. – 2018. – С. 11
6. Шинбаева А. К. ж. б // 9th International Scientific Conference «Modern Achievements of Physics and Fundamental Physical Education», Almaty, Kazakhstan. – 2016. – P. 147

Диссертацияның көлемі мен құрылымы

Диссертациялық жұмыс белгіленулер тізімі мен қысқартулардан, кіріспеден, бес тараудан, қорытынды, пайдаланылған әдебиеттер тізімі мен төрт қосымшадан тұрады. Диссертация көлемі машиналық мәтіннің 123 бетін, соның ішінде 52 сурет және 143 пайдаланылған әдебиеттер тізімін құрайды.