



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
ҚАРАҒАНДЫ МЕМЛЕКЕТТІК ТЕХНИКАЛЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН
КАРАГАНДИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
KARAGANDA STATE TECHNICAL UNIVERSITY

**«Ғылым, білім және өндіріс интеграциясы –
Ұлт жоспарын іске асырудың негізі»**

(№ 10 Сағынов оқулары)

Халықаралық ғылыми-практикалық конференциясының

ЕҢБЕКТЕРІ

14-15 маусым 2018 ж.

I Бөлім

ТРУДЫ

**Международной научно-практической конференции
«Интеграция науки, образования и производства –
основа реализации Плана нации»**

(Сагиновские чтения № 10)

14-15 июня 2018 г.

Часть I

PROCEEDINGS

of the International scientific conference

**«Science integration, education and production –
basis of the implementation of the Plan of the nation»**

(Saginov's readings № 10)

June 14-15, 2018

Part I



Қарағанды 2018

Қазақстан Республикасы Білім және ғылым министрлігі
Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті
Министерство образования и науки Республики Казахстан
Карагандинский государственный технический университет
Ministry of education and science of the Republic of Kazakhstan
Karaganda State Technical University

«Ғылым, білім және өндіріс
интеграциясы - Ұлт жоспарын іске асырудың негізі»
(№10 Сағынов оқулары)
Халықаралық ғылыми-практикалық конференциясының

Е Н Б Е К Т Е Р І
14-15 маусым 2018 ж.
1 бөлім

Т Р У Д Ы
Международной научно-практической конференции
**«Интеграция науки, образования и производства – основа
реализации Плана нации» (Сагиновские чтения №10)**
14-15 июня 2018 г.
Часть 1

PROCEEDINGS
of the International scientific-practical conference
**“Science integration, education and production - basis of the
implementation of the Plan of the nation”**
(Saginov’s readings № 10)
June 14-15, 2018
Part 1

Қарағанды 2018

ӘӨЖ 001:378
КБЖ 74.58
F96

Бас редактор
Профессор Ибатов М.К.

Редакциялық алқа:

Исағұлов А.З., Жетесова Г.С., Ожигин С.Г., Дрижд Н.А.,
Борисенко А.В., Нарезнев А.Н., Кенжин Б.М., Моисеев В.С.,
Мұхаметқалиев Б.С., Бурковский А.Ю.,
Жакенов С.А., Ходжаев Р.Р.

«Ғылым, білім және өндіріс интеграциясы - Ұлт жоспарын іске асырудың негізі» (№10 Сағынов оқулары) Халықаралық ғылыми-практикалық конференциясының еңбектері, 14-15 маусым 2018 ж. 7 бөлімде. 1-бөлім/ ҚР Білім және ғылым министрлігі, Қарағанды мемлекеттік техникалық университеті. - Қарағанды: ҚарМТУ баспасы, 2018. – 327 б.

ISBN 978-601-315-504-3

Ғылыми еңбектерде «Ғылымды, білімді және өндірісті шоғырландыру – Ұлт Жоспарын жүзеге асыру негізі» Халықаралық ғылыми-практикалық конференция баяндамалары жарияланды. Баяндамаларда жоғары кәсіптік білім берудің, болашақ энергетикасының, ақпараттық технологиялардың, химия-биологиялық ғылымдарының, экономиканың, социология мен геосаясаттың, табиғатты тиімді пайдаланудың, тіршілік әрекеті қауіпсіздігінің, металлургия мен материалтанудың, көліктің және құрылыстың маңызды мәселелері қарастырылды.

Ғылыми еңбектердің материалдары ЖОО ғалымдарына, мамандарына, оқытушыларына, магистранттар мен студенттеріне арналған.

ӘӨЖ 001:378
КБЖ 74.58

ISBN 978-601-315-504-3

© Қарағанды мемлекеттік
техникалық университеті, 2018

УДК 001:378
ББК 74.58
Т96

Главный редактор
Профессор Ибатов М.К.

Редакционная коллегия:

Исагулов А.З., Жетесова Г.С., Ожигин С.Г., Дрижд Н.А.,
Борисенко А.В., Нарезнев А.Н., Кенжин Б.М., Моисеев В.С.,
Мухаметкалиев Б.С., Бурковский А.Ю.,
Жакенов С.А., Ходжаев Р.Р.

Труды Международной научно-практической конференции «Интеграция науки, образования и производства – основа реализации Плана нации» (Сагиновские чтения № 10), 14-15 июня 2018 г. В 7-и частях. Часть 1/ Министерство образования и науки РК, Карагандинский государственный технический университет. - Караганда: Изд-во КарГТУ, 2018. – 327 с.

ISBN 978-601-315-504-3

В Трудах опубликованы доклады участников Международной научно-практической конференции «Интеграция науки, образования и производства – основа реализации Плана нации». В докладах рассмотрены актуальные проблемы высшего профессионального образования, энергетики будущего, информационных технологий, химико-биологических наук, экономики, социологии и геополитики, технических наук, рационального природопользования, безопасности жизнедеятельности, металлургии и материаловедения, транспорта и строительства.

Материалы трудов предназначены для ученых, специалистов, преподавателей, магистрантов и студентов вузов.

УДК 001:378
ББК 74.58

ISBN 978-601-315-504-3

© Карагандинский государственный
технический университет, 2018

РОТАЦИОННЫЕ МОДЫ ЖЕСТКИХ ТЕТРАЭДРОВ И НЕСОРАЗМЕРНЫЕ ФАЗЫ В КРИСТОБАЛИТЕ

К каркасным кристаллическим структурам (ККС) относят решетки построенные из полиэдров AX_n , соединенных между собой общими X вершинами или ребрами X-X. Такие структуры привлекают внимание исследователей по нескольким причинам:

- к ним относятся множество минералов, составляющих основу земной коры
- многие из них они проявляют склонность к структурным фазовым переходам (СФП) как под давлением, так и при изменении температуры
- образуют семейства соединений с выдающимися сегнетоэлектрическими и сегнетоэластическими свойствами, многие из этих соединений имеют аномально большой или наоборот аномально низкий коэффициент теплового расширения.

Склонность ККС к фазовым превращениям связывают с наличием в их фононных спектрах специфических мягких мод – Rigid Unit Modes (RUM). Эти моды состоят из согласованных вращений и смещений полиэдров AX_n без их внутренних деформаций. В нашей работе для обозначения этих мод в качестве русского перевода этого термина мы используем название «ротационные моды жестких тетраэдров».

Описание механизма СФП в ККС и множества возможных взаимосвязанных структур обычно начинают с исследования спектра RUM в наиболее симметричной (как правило, наиболее высокотемпературной) фазе. Любая из найденных RUM, в принципе, может играть роль мягкой моды при том или ином СФП. Следовательно, зная весь спектр RUM высоко-симметричной фазы, мы можем описать всё многообразие гипотетических низко-симметричных фаз и исследовать микроскопический механизм их взаимных превращений.

Важная роль RUM была обнаружено при фазовых переходах в каркасных структурах SiO_2 – в кварце и тридимите. Многие из модификаций кремнезёма (кварц, тридимит, коэзит, кристобалит) представляют собой ККС и могут существовать в двух модификациях: в высоко-симметричной (β) и низко-симметричной (α). В данной работе мы исследуем кристобалит. Как и в кварце, решетка кристобалита построена из тетраэдров SiO_4 , сочлененных посредством общих вершин. Структуры кварца и кристобалита показаны на рис 1.

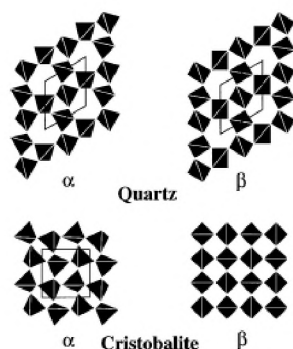
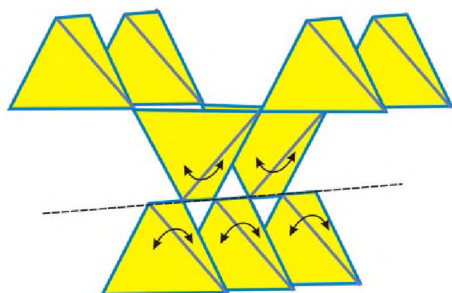


Рис. 1 Сравнение структур кварца и кристобалита.

Можно видеть, что в структуре кристобалита есть цепочки вытянутые вдоль кристаллографических осей. Каждая такая цепочка может совершать внутреннее RUM-колебание, при котором будут осциллировать только атомы внутри цепочки, а остальная часть решетки останется неподвижной. Такая RUM показана ниже:

Рис. 2 CRUM локализованная в одной из зигзагообразных цепочек.

Каждая такая RUM строго локализована в одной такой цепочке. RUM, локализованные в разных непересекающихся цепочках, независимы. Это открывает возможность существования бесконечного множества коллективных RUM. Чтобы описать все множество RUM в решетке



кристобалита, надо указать амплитуду и сдвиг фазы для осцилляций типа CRUM внутри каждой цепочки. Через каждую примитивную ячейку проходят 6 таких цепочек, вытянутых вдоль направлений $[110]$, $[-110]$, $[101]$, $[-101]$, $[011]$, $[0-11]$.

Рис.3 Линейные цепочки, проходящие через один из тетраэдров в структуре кристобалита.

Можно показать, что все известные из литературы кристаллические структуры искаженного кристобалита можно представить комбинациями CRUM.

В работе представлены результаты анализа спектра ротационных мод жестких тетраэдров в структуре β -кристобалита. Показано:

В решетке β -кристобалита есть CRUM, локализованные в отдельных цепочках, вытянутых вдоль определенных кристаллографических направлений.

Показано, что все известные из литературы искаженные структуры кристобалита могут быть представлены как результат конденсации комбинации CRUM.

Предсказано существование нескольких новых низко-симметричных структур кристобалита. Показано, что существование CRUM открывает возможность возникновения в кристобалите несоразмерных фаз; описано их пространственное строение и установлены возможные направления векторов модуляции.