

«8D07502 – Стандартизация және сертификация (салалар бойынша)» білім беру бағдарламасы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін диссертациялық жұмысқа

АҢДАТПА

АҚЫЛБАЕВА АЙГЕРИМ КАЙЫПЖАНОВНА

Молекулалық криоқристалдардың қасиеттеріне ИҚ-спектрометриялық зерттеу арқылы жүргізілетін нормативтік-техникалық құжаттамаларын дамыту

Жұмыстың жалпы сипаттамасы

Диссертациялық жұмыста молекулалық криоқристалдардың қасиеттеріне ИҚ-спектрометриялық зерттеулер жүргізу үшін нормативтік-техникалық құжаттаманы әзірлеу нәтижелері келтірілген.

Өзектілігі

Стандарттау және сертификаттау ғылымда, техникада, өнеркәсіпте, экономикада бірнеше рет қолданылатын міндеттерге техникалық талаптарды белгілеуге бағытталған. Түпкілікті нәтиже техникалық нормалау саласындағы нормативтік-техникалық құжат, яғни мемлекеттік стандарт болып табылады.

Стандарттау қызмет түрі ретінде белгілі бір салада оңтайлы ретке келтіруге бағытталған. Сонымен, қазіргі индустриалды әлем оңтайлы реттілік дәрежесіне ұмтылады және стандарттау мен метрологиямен тікелей байланысты ғылыми-технологиялық өндірістің дәлдігі мен сапасына ерекше назар аударылады. Себебі ғылыми компоненттер күрделене түседі және сапаны бақылау талаптары артады. Сондықтан жоғары нормативтік талаптарды орындау үшін жаңа технологиялар әзірленуде.

«Ғылыми және (немесе) ғылыми-техникалық қызмет нәтижелерін коммерцияландыру туралы» Қазақстан Республикасының заңына сәйкес ғылыми және білім беру қызметімен қатар ғылыми және (немесе) ғылыми-техникалық қызмет нәтижелерін коммерцияландыру ғылыми ұйымдар қызметінің басым бағыты болып табылады.

Осылайша, қазіргі заманғы конденсацияланған орта физикасы саласында сапалы зерттеулер жүргізу үшін бірқатар нормативтік-техникалық құжаттарды әзірлеу қажеттілігі туындайды. Бұл реттелмеген жүйелерді қалыптастырудың өзекті мәселесі аралық метастабильді күйлердің пайда болуымен бірге жүретін полиморфты түрлендірулерді зерттеу болып табылатындығына қатысты. Метастабильді күй көбінесе термодинамикалық жүйенің күйіне және физика-химиялық қасиеттеріне байланысты. Мұндай конденсацияланған заттардың мысалы ретінде тек төмен температурада болатын молекулалық криоқристалдарды қарастыруға болады.

Негізгі тұрғыдан алғанда, молекулалық криоқристалдар конденсацияланған күй физикасы, астрофизика, төмен температура физикасы

және материалтану сияқты көптеген салаларда қызықты. Сонымен, криоқристалдарға Ван-Дер-ваальс күштері азот, көміртегі тотығы, көмірқышқыл газы, метан сияқты атомдар мен молекулалық криоқристалдарды байланыстыратын қатайтылған инертті газдардың кристалдары жатады. Молекулалық криоқристалдар төмен температура физикасы мен конденсацияланған күй физикасының бірқатар негізгі мәселелерін зерттеуге арналған тамаша нысандар ретінде қызықты. Бөлшектердің қозғалыс энергиялары молекулааралық өзара әрекеттесу энергиясымен салыстырылатын криоқристалдар бар екенін атап өткен жөн. Мұндай криоқристалдар макроскопиялық жүйелерді құрайды, олардың мінез-құлқы кванттық физикамен анықталады және термостаттауда да, термоциклде де қызықты.

Осылайша, молекулалық криоқристалдардың полиморфтық күйінің жеке түрін одан әрі егжей-тегжейлі зерттеу үшін криоконденсацияның сыртқы параметрлерін бақылауды және зерттелетін затты іске қосуды жақсарту қажет. Нормативтік-техникалық құжаттарды (әдістемелерді) әзірлеу молекулалық криоқристалдардың қасиеттері мен олардың түзілу шарттары арасында бір мәнді корреляцияны белгілеу үшін эксперимент шарттарын дәл бақылауға және стандарттауға мүмкіндік береді.

Жоғарыда айтылғандардың негізінде диссертациялық жұмыс жүргізілетін зерттеулердің сапасын арттыруға және молекулалық криоқристалдардың қасиеттеріне ИҚ-спектрометриялық зерттеулер жүргізу үшін нормативтік-техникалық құжаттаманы әзірлеуге арналған.

Диссертация тақырыбының ғылыми жұмыстар жоспарымен байланысы

Диссертациялық жұмыс ҚР ҰӘМ «ғылыми зерттеулерді гранттық қаржыландыру» іргелі ғылыми-зерттеу жұмыстарының жоспарына сәйкес: «шыны түзуші органикалық молекулалардың криовакуумдық конденсаттарының жұқа қабықшаларындағы құрылымдық-фазалық түрленулер және релаксациялық процестер» (2020-2022 жж., АР08855738 шифры, мемлекеттік тіркеу № 0120РК00576); «зерттеу криоконденсацияланған сәулеленудің оптикалық сипаттамаларға әсері криогендік жабдықтың жұмыс беттері» (2020-2022, АР08052736 шифры); «Төмен температурада су пленкасындағы сызықтық молекулаларды криопрессиялау және десорбциялау процестерін зерттеу» (2020-2022 жж., АР08855681 шифры, мемлекеттік тіркеу № 0120РК00577); «көлемді наноқұрылымды термoeлектрлік материалдарды қалыптастыру процесінде агломерациялау механизмін зерттеу» (2022-2024 жж., шифр ар15473758); «физика-химиялық заттарды салқындату және ғылыми зерттеу үшін әмбебап Крио бетін әзірлеу және бөлме температурасынан 80 К-ге дейінгі заттардың оптикалық қасиеттері» (2023-2025 жж., АР19576644 шифры).

Диссертациялық жұмыстың мақсаты газ-фазалық тұндыру арқылы әмбебап криовакуумдық қондырғыда молекулалық криоқристалдардың қасиеттеріне ИҚ-спектрометриялық зерттеулер жүргізу үшін нормативтік-

техникалық құжаттаманы әзірлеу арқылы стандарттау тиімділігін қамтамасыз етудің ғылыми-техникалық мәселесін шешу болып табылады.

Мақсатқа жету үшін келесі міндеттерді шешу қажет болды:

1. Молекулярлық криокристалдардың қасиеттерін ИҚ-спектрометриялық зерттеудің жоғары сапалы және стандартталған нәтижелерін алу мәселелеріне кешенді талдау жүргізу;

2. Жүргізілетін эксперименттердің сапасын арттыру үшін әмбебап криовакуум қондырғысын жаңғырту;

3. Белгіленген қасиеттері бар материалдарды алу үшін әмбебап криовакуум қондырғысында ИҚ-Фурье спектрометрін калибрлеудің стандартталған әдісін әзірлеу;

4. Берілген белгісіздік интервалымен молекулалық криокристалдардың жұқа қабықшаларын алуға бағытталған ұйымдық стандартты әзірлеу.

Зерттеу объектісі 10-нан 200 К-ге дейінгі температура арасында және 1-ден 1000 μ Торр-ге дейінгі қысымда суық субстратқа тұндырылған жұқа қабықшалар, олардың өткізгіштігі қыздыру және салқындату кезінде өзгерістері болып табылады.

Зерттеу пәні молекулалық криокристалдардың термофизикалық және оптикалық қасиеттерін зерттеудің стандартталған әдістері болып табылады.

Зерттеу әдістері

Қойылған мақсаттарға жету үшін қажетті міндеттерді шешуде келесі әдістер қолданылды:

Су криоконденсаттарының, көмірқышқыл газының, фреон 134а және метан қоспасының конденсация жылдамдығын, қалыңдығын және сыну коэффициентін өлшеудің лазерлік-интерферометриялық әдісі;

Фреон 134а құрылымдық-фазалық түрлендіру процестерін және метан қоспасын ИҚ-Фурье спектрометрімен талдаудың ИҚ-спектроскопиялық әдісі;

Фреон 134а және метан қоспасының үлгілеріндегі термофизикалық және оптикалық параметрлерді анықтаудың термодесорбциялық әдісі.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы

1. Әмбебап криовакуум қондырғысы төмен температурада криоконденсацияланған жүйелердің іргелі сипаттамаларын сапалы зерттеуге мүмкіндік беретін жаңа жабдықпен және бағдарламалық қамтамасыз етумен жаңартылды.

2. Әмбебап криовакуумды қондырғының ИҚ-Фурье спектрометрін калибрлеу әдісі әзірленді және бекітілді, бұл көрсетілген қасиеттері бар материалдарды, мысалы, криокристалдардың жұқа қабықшаларын алуға мүмкіндік берді.

3. Әмбебап криовакуум қондырғысында стандартталған өлшеу әдістемесі әзірленді, ол тәжірибе сапасын жақсартады және молекулалық криокристалдардың қасиеттерін ИҚ-спектрометриялық зерттеулер үшін қолдануға болады.

Қорғауға шығарылатын негізгі тұжырымдар

1. Жаңартылған әмбебап криовакуум қондырғысы 1-ден 100 μ Торр аралығындағы қысымда зерттелетін заттың енгізуін бақылауды қамтамасыз етіп, ИҚ-спектрлердің диапазонын 1 $1/\text{см}$ -ден 0,5 $1/\text{см}$ -ге рұқсаттылығымен 420-4200 $1/\text{см}$ -ден 370-7800 $1/\text{см}$ -ге дейін арттырады және стандартты тәжірибені орындаудың орташа уақытын 4 есеге (8 сағаттан 2 сағатқа дейін) қысқартады.

2. Әмбебап криовакуум қондырғысының ИҚ-Фурье спектрометрі үшін әзірленген калибрлеу әдістемесі 95% сенімді ықтималдықпен және 2 қамту коэффициентімен 400-7800 $1/\text{см}$ толқындар диапазонында тәжірибелік деректер нәтижелерінің сенімділігін бағалауға мүмкіндік береді.

3. Әзірленген стандартты өлшеу әдістемесі 0,1-ден 100 μ Торр аралығындағы ультра төмен вакуум және 10-нан 50 К дейінгі төмен температура жағдайында молекулалық криокристалдардың жұқа қабықшаларын дайындауда және талдауда тиімді қолданылады.

Жұмыстың теориялық және практикалық маңыздылығы

Осы зерттеудің нәтижелері, молекулалық криокристалдардың қасиеттеріне ИҚ-спектрометриялық зерттеулер жүргізу үшін нормативтік-техникалық құжаттаманы әзірлеу және негіздеу конденсацияланған күйдің төмен температуралы физикасында іргелі нәтижелер алуға мүмкіндік береді.

Диссертациялық жұмысты орындау барысында криокристалдардың жұқа пленкасын алу әдістемесі, криокристалдардың жұқа пленкаларының оптикалық қасиеттерін өлшеу әдістемесі, сондай-ақ ИҚ-Фурье спектрометрін калибрлеу әдістемесі жасалды.

Өлшеулерді орындаудың жаңа әдістемесін жаңғырту және енгізу кезінде жүргізілетін эксперименттің сапасын жақсартуға ғана емес, алынған нормативтік-техникалық құжаттарды енгізуден айтарлықтай экономикалық тиімділікке қол жеткізілді, ол 30 жыл ішінде 25 млн теңгені құрайды.

Жұмыс нәтижелері «Алматы-Стандарт» Ғылым-зерттеу орталығы» ЖШС сынақ зертханасына енгізіліп, енгізу актісі алынды.

Алынған нәтижелердің практикалық маңыздылығы халықаралық рецензияланатын басылымдардағы жарияланымдармен және тұрақты халықаралық конференцияларға қатысумен, сондай-ақ ҚР № 7959 патентімен, ҚР № 33250 авторлық куәлігімен расталады.

Автордың жеке үлесі диссертациялық жұмыстың барлық көлемін, зерттеу әдісін таңдауды, мәселелерді шешуді және нормативтік-техникалық құжаттаманы әзірлеуді автордың өз бетінше орындауында. Тапсырма қою нәтижелерді талқылау ғылыми жетекшілермен бірлесіп жүргізілді.

Алынған нәтижелердің дұрыстығы мен негізділігі

Диссертациялық жұмыста алынған нәтижелердің дұрыстығы ҚР БЖҒМ Білім және ғылым саласында сапаны қамтамасыз ету комитеті (БҒССҚЕК) ұсынған басылымдарда, импакт-факторы нөлден жоғары алыс шетелдердің журналдарында және халықаралық конференциялардың еңбектерінде жарияланымдардың болуымен расталады.

Жарияланымдар

Диссертациялық жұмыстың тақырыбы бойынша 14 ғылыми баспа жұмысы жарияланды, оның ішінде 6 жұмыс халықаралық конференцияларда тезис түрінде, 4 мақала философия докторы (PhD) ғылыми дәрежесін алу үшін БҒССҚЕК-і ұсынған ғылыми басылымдарда, 2 мақала Web of Science (Clarivate Analytics, АҚШ) және Scopus (Elsevier, Нидерланды) халықаралық ақпараттық ресурстарына кіретін ғылыми басылымдарда жарияланды.

Диссертацияның құрылымы мен көлемі

Диссертация кіріспеден, бес бөлімнен, қорытындыдан, пайдаланылған дереккөздер тізімінен және он төрт қосымшадан тұрады. Жұмыс баспа мәтінінің 194 бетінде көрсетілген, 52 суреттермен суреттелген, 18 формула, 26 кесте келтірілген, пайдаланылған дереккөздердің тізімінде 143 атау бар және 14 қосымшадан тұрады.