

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ

«Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ» КЕАҚ

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»
XVIII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XVIII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»**

**PROCEEDINGS
of the XVIII International Scientific Conference
for students and young scholars
«GYLYM JÁNE BILIM - 2023»**

**2023
Астана**

УДК 001+37
ББК 72+74
G99

**«GYLYM JÁNE BILIM – 2023» студенттер мен жас ғалымдардың
XVIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XVIII
Международная научная конференция студентов и молодых
ученых «GYLYM JÁNE BILIM – 2023» = The XVIII International
Scientific Conference for students and young scholars «GYLYM JÁNE
BILIM – 2023». – Астана: – 6865 б. - қазақша, орысша, ағылшынша.**

ISBN 978-601-337-871-8

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

УДК 001+37
ББК 72+74

ISBN 978-601-337-871-8

**©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2023**

CdSe НК фотолюминесценциясын зерттеу CM 2203 спектрофлуориметрінің көмегімен жүргізілді. Люминесценция және жұтылу спектрлерінде кванттық өлшемді эффект анық байқалды. Қоспасыз CdSe кванттық нүктесінің фотолюминесценция спектрі максимумы 612 нм экситондық жолақтан және кең жайылған ұзынтолқындық жолақтан тұрады. Бұл ұзынтолқындық люминесценция жолағы селеннің вакансиясы сияқты нанокристалдың беттік ақауларымен байланысты.

Әдебиеттер тізімі

1. Parinda V., Praveen T., Pushan A., Singh B.P., Rajarshi B. // Journal Physics: Condens. Matter. 2002. V. 14. P. 281—286.
2. Киреев П. С. Физика полупроводников. М.: Высшая школа, 1969. 290 с.
3. Бьюб Р. Фотопроводимость твердых тел. М.:Издат-во иностран. лит-ры, 1962. 558 с.
4. Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. // Физика и техника полупроводников. 1982. Т. 16. № 7. С. 1209—1214.
5. Wang J., Herron N. // J. Phys. Chem. 1991. V. 95. № 2. P. 525—532.
6. Kirti Vishwakarma, O. P. Vishwakarma // Int. Journ. of Nanotechnology and Applications. 2010. V. 4. № 1. P. 13—19.
7. M. S. Smirnov, O. V. Ovchinnikov, E. A. Kosyakova [etc.] // Physica B. 2009. № 404. P. 5013.
8. Latyshev A. N. // J. Inf. Record. Material. 1996. V.22. P. 339.
9. Ключев В. Г. Дисс. докт. физ.мат. наук. Воронеж: ВГУ, 1998. 323 с.
10. Murray C.B., Norris D.J., Bawendi M.G. // J. Am. Chem. Soc., 1993, V. 115, P. 8706.
11. W. William Yu, Lianhua Qu, Wenzhuo Guo, Xiaogang Peng. Experimental Determination of the Extinction Coefficient of CdTe, CdSe, and CdS nanocrystals. Chem.Mater. 2003, vol.15(14), p.2854-2860.

УДК 538.9, 539.1, 542.8

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА КОМПЛЕКСОВ $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$ И $\text{Si}(\text{BZIMPY})(\text{CH}_3)_2$

Уварова И.В, Алдонгаров А.А.

E-mail : ira.uvarova.17@bk.ru, enu-2010@yandex.kz

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,
Астана, Казахстан

В статье показаны данные по исследованию расчетов переноса заряда, энергиям реорганизации, интегралов межмолекулярного переноса, скоростям переноса для оптимизированных структур пентакоординированных комплексов кремния $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$ и $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$. Продемонстрированы геометрические данные по оптимизированным структурам, показаны рисунки и таблицы по расчетным данным. Структура $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$ содержит один дифенилпиридин ($\text{DPP} = 2,6\text{-diphenylpyridine}$) лиганд. Структура $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$ содержит один бензимидазол ($\text{bzimpy} = 2,6\text{-bis}(\text{benzimidazol-2'-yl})\text{pyridine}$) лиганд. Вычислительные расчетные данные были выполнены с применением функционала B3LYP и базисного набора – 6-31G*. Было произведено сравнение полученных теоретических результатов мобильности зарядов структур $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$ и $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$. На основании сравнения теоретических данных были сделаны выводы о лучшей структуре для использования в качестве проводника в органической электронике. Данная работа показывает, что вычислительные методы могут помочь в дальнейшем изучении будущих структур, а также в прогнозировании будущих параметров еще неисследованных комплексов кремния.

Ключевые слова: метод функционала плотности DFT, пентакоординационные комплексы кремния, значения энергии НОМО и LUMO, мобильность заряда.

Пентакоординационные комплексы являются на сегодняшний день новым видом комплексов, которые привлекают ученых своими свойствами. Их также можно применять в органической электронике, что позволяет улучшать нам существующие устройства, что вызывает интерес к дальнейшим исследованиям. Желание улучшить физические свойства материалов привело к изучению свойств переноса зарядов. Измерение, оптимизация и установление структурно-функциональных взаимосвязей подвижности электронов и дырок имеет решающее значение для разработки эффективных устройств независимо от функции органического материала. В данной работе объектом исследования являются пентакоординационные кремниевые комплексы: $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$, содержащий один дифенилпиридин ($\text{DPP} = 2,6\text{-diphenylpyridine}$ ligand) лиганд и $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$, содержащий один бензимидазол ($\text{bzimpy} = 2,6\text{-bis}(\text{benzimidazol-2'-yl})\text{pyridine}$) лиганд. Целью данной работы является теоретическое исследование свойств переноса заряда, на основе метода функционала плотности.

Для квантово-химического исследования, были построены модели структур $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$ и $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$, для них использовался метод функционала плотности DFT (density functional theory method), реализуемый в программном пакете Gaussian09 [1]. Данный метод включает широкий набор различных функционалов. В данных расчетах свойств объектов был использован функционал B3LYP [2]. В дальнейшем была выполнена оптимизация структур с использованием базисных наборов: 6-31G* [3]. Был изучен анализ природы молекулярных орбиталей, высшей занятой молекулярной орбитали (НОМО) и низшей свободной молекулярной орбитали (LUMO). Расчеты частот продемонстрировали отсутствие отрицательных значений, что свидетельствует о том, что все полученные структуры соответствуют абсолютному минимуму.

Оптимизация структур была получена с помощью расчетной программы Gaussian 09W. В таблицах 1 и 2 продемонстрированы основные геометрические параметры оптимизированных соединений $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$ и $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$.

Таблица 1 Данные по оптимизированной структуре

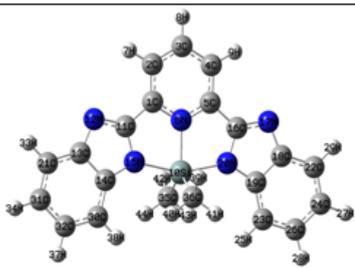
$\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$	Длина связи (Å)		Угол связи (°)	
		$^{10}\text{Si}-^6\text{N}$	1.94032	$^{10}\text{Si}-^6\text{N}-^1\text{C}$
	$^{10}\text{Si}-^{35}\text{C}$	1.88533	$^1\text{C}-^{11}\text{C}-^{15}\text{N}$	113.439
	$^{10}\text{Si}-^{15}\text{N}$	1.92868	$^{11}\text{C}-^{15}\text{N}-^{10}\text{Si}$	117.116
	$^6\text{N}-^1\text{C}$	1.35863	$^6\text{N}-^1\text{C}-^2\text{C}$	120.439
	$^{15}\text{N}-^{14}\text{C}$	1.37820	$^1\text{C}-^2\text{C}-^3\text{C}$	118.372
	$^1\text{C}-^2\text{C}$	1.39367	$^{11}\text{C}-^{15}\text{N}-^{14}\text{C}$	103.805
	$^2\text{C}-^7\text{H}$	1.08330	$^{15}\text{N}-^{11}\text{C}-^{12}\text{N}$	116.957
	$^{13}\text{C}-^{14}\text{C}$	1.43169	$^{14}\text{C}-^{13}\text{C}-^{21}\text{C}$	120.271
	$^{31}\text{C}-^{32}\text{C}$	1.41447	$^6\text{N}-^{10}\text{Si}-^{35}\text{C}$	119.432

Таблица 2 Данные по оптимизированной структуре

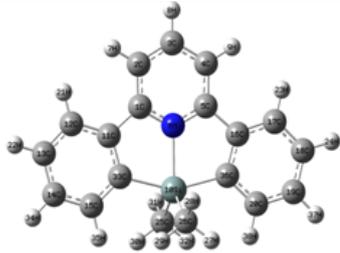
Si(DPP)(CH ₃) ₂	Длина связи (Å)		Угол связи (°)	
	¹⁰ Si- ⁶ N	2.12188	¹⁰ Si- ⁶ N- ¹ C	118.139
	¹⁰ Si- ³⁶ C	1.98610	¹ C- ¹¹ C- ³³ C	114.041
	¹⁰ Si- ²⁶ C	1.91774	⁶ N- ¹⁰ Si- ³³ C	76.733
	⁶ N- ¹ C	1.34211	¹¹ C- ³³ C- ¹⁰ Si	119.004
	¹⁵ N- ¹⁴ C	1.37820	¹ C- ² C- ³ C	118.336
	¹ C- ² C	1.39976	⁶ N- ¹ C- ² C	119.371
	² C- ⁷ H	1.08395	¹ C- ⁶ N- ⁵ C	123.721
	¹³ C- ¹⁴ C	1.39847	¹³ C- ¹⁴ C- ¹⁵ C	120.251
	¹¹ C- ³³ C	1.40953	³³ C- ¹⁰ Si- ²⁶ C	97.194

Таблица 3 Данные энергии реорганизации для дырки и электрона молекулы Si(bzimpy)(CH₃)₂

λ_{hole} (эВ)			
E(A)	E(A+)	E+(A+)	E+(A)
-37368,9106	-37361,9183	-37361,8213	-37368,8130
$\lambda_{electron}$ (эВ)			
E(A)	E(A-)	E-(A-)	E-(A)
-37368,9106	-37370,2840	-37370,0787	-37368,7221

Используя данные из таблицы 3, были получены следующие результаты для энергии реорганизации молекулы Si(bzimpy)(CH₃)₂:

$$\lambda_{hole} \text{ (энергия реорганизации дырки)} = 0.0006 \text{ эВ,}$$

$$\lambda_{electron} \text{ (энергия реорганизации электрона)} = 0.2785 \text{ эВ.}$$

Таблица 4 Данные энергии реорганизации для дырки и электрона молекулы Si(DPP)(CH₃)₂

λ_{hole} (эВ)			
E(A)	E(A+)	E+(A+)	E+(A)
-29336,2819	-29329,6028	-29338,9966	-29333,9283
$\lambda_{electron}$ (эВ)			
E(A)	E(A-)	E-(A-)	E-(A)
-29336,2819	-29336,7976	-29336,5080	-29336,0409

Используя данные из таблицы 4, были получены следующие результаты для энергии реорганизации молекулы Si(DPP)(CH₃)₂:

$$\lambda_{hole} = 1.5619 \text{ эВ, } \lambda_{electron} = 0.0486 \text{ эВ.}$$

Далее были рассчитаны значения НОМО и LUMO для вычисления интеграла межмолекулярного переноса заряда.



Рисунок 1 MO-96 (НОМО) и MO-97 (LUMO) комплекса Si(bzimpy)(CH₃)₂.



Рисунок 2 MO-76 (HOMO) и MO-77 (LUMO) комплекса Si(DPP)(CH₃)₂

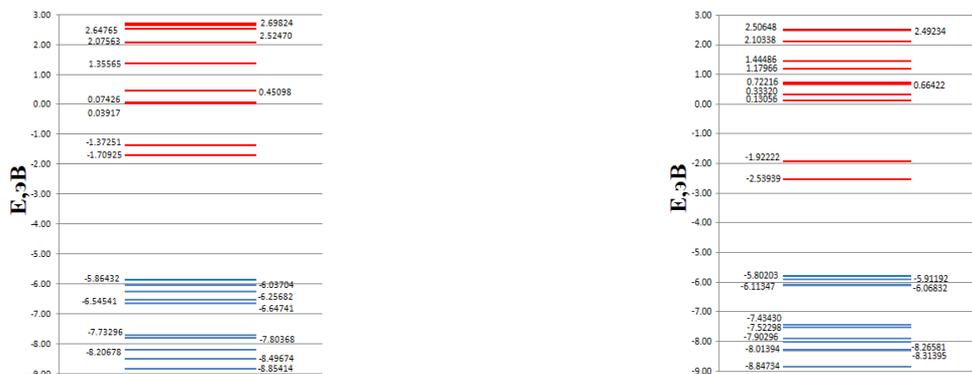


Рисунок 3 Энергетические уровни значений энергии молекулярных орбиталей комплексов Si(DPP)(CH₃)₂ и Si(bzimpy)(CH₃)₂

Интеграл межмолекулярного переноса рассчитывался по формуле :

$$V_{h/e} = \frac{\epsilon_{H[L+1]} - \epsilon_{H-1[L]}}{2},$$

где $\epsilon_{H[L+1]}$ – энергия HOMO (LUMO+1); $\epsilon_{H-1[L]}$ — энергия HOMO-1, (LUMO), были взяты из конфигурации состояния структуры.

Таблица 5 Данные интеграла межмолекулярного переноса для электрона и дырки молекул Si(bzimpy)(CH₃)₂ и Si(DPP)(CH₃)₂ :

V_{hole} (эВ) Si(bzimpy)(CH ₃) ₂		$V_{electron}$ (эВ) Si(bzimpy)(CH ₃) ₂	
E_{HOMO}	E_{HOMO-1}	E_{LUMO}	E_{LUMO+1}
-5.80203	-5.91192	-2.53939	-1.92222

V_{hole} (эВ) Si(DPP)(CH ₃) ₂		$V_{electron}$ (эВ) Si(DPP)(CH ₃) ₂	
E_{HOMO}	E_{HOMO-1}	E_{LUMO}	E_{LUMO+1}
-5.86432	-6.03704	-1.70925	-
			1.37251

Полученные результаты вычисления интеграла межмолекулярного переноса структуры Si(bzimpy)(CH₃)₂ :

$$V_{hole} = 1.494504(\text{эВ}), V_{electron} = 8.393512(\text{эВ})$$

Полученные результаты вычисления интеграла межмолекулярного переноса структуры Si(DPP)(CH₃)₂:

$$V_{hole} = 2.348992(\text{эВ}), V_{electron} = 4.579664(\text{эВ})$$

Далее было вычисление скачковой скорости переноса заряда, которая приблизительно описана уравнением Маркуса-Хаша [4]:

$$K_{et_{h/e}} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda_{h/e} K_B T}} \times \frac{V_{h/e}^2}{\hbar} \times \exp\left(-\frac{\lambda_{h/e}}{4K_B T}\right)$$

где k_B – постоянная Больцмана, T - температура, \hbar - постоянная Планка, $\lambda_{h/e}$ -энергия реорганизации электрона и дырки.

Используя ранее полученные результаты, а также известные физические константы находим скорость переноса электронов для $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$: $K_{\text{hole}} = 2.52e+17 \text{ (c}^{-1}\text{)}$, $K_{\text{electron}} = 1.20e-15 \text{ (c}^{-1}\text{)}$; для $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$: $K_{\text{hole}} = 3.66e-167 \text{ (c}^{-1}\text{)}$, $K_{\text{electron}} = 0.0e+00 \text{ (c}^{-1}\text{)}$

Для расчета коэффициента диффузии носителей заряда необходимо знать значения расстояния между молекулами в димере. На рисунках 3 и 4 представлены структуры оптимизированных димеров для соединений $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$ и $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$.

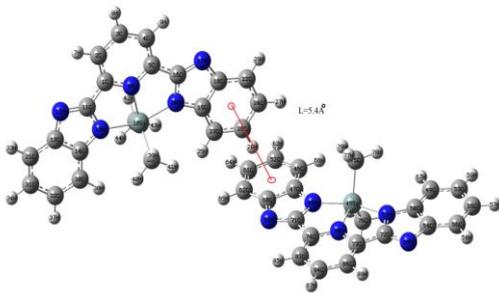


Рисунок 3 Структура димера соединения $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$

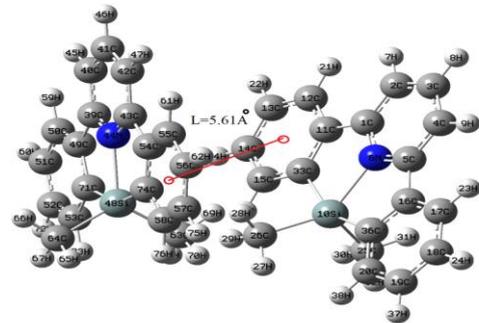


Рисунок 4 Структура димера соединения $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$

Коэффициент диффузии носителей заряда который можно рассчитать с помощью уравнения Эйнштейна-Смолуховского [5] :

$$D = \frac{L^2 K_{et}}{2}$$

где K_{et} -скорость переноса заряда , L -расстояние между молекулами в димере.

Для вычисления значения диффузии, по рассматриваемой структуре $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$, расстояние в димере (L) = 5.4 \AA : $D_{\text{hole}} = 3.80e+02 \text{ (cm}^2 \text{ c}^{-1}\text{)}$, $D_{\text{electron}} = 1.81e-30 \text{ (cm}^2 \text{ c}^{-1}\text{)}$, и структуре $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$, расстояние в димере (L) = 5.6 \AA : $D_{\text{hole}} = 3.71e-182 \text{ (cm}^2 \text{ c}^{-1}\text{)}$, $D_{\text{electron}} = 0.0e+0 \text{ (cm}^2 \text{ c}^{-1}\text{)}$

В пределе слабого поля подвижность носителей хорошо описывается соотношением Эйнштейна [6] :

$$\mu = \frac{eD}{K_B T}$$

где e – заряд электрона, D – коэффициент диффузии носителей заряда.

Полученные ранее результаты позволяют найти подвижность заряда дырки и электрона для структуры $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$: $\mu_{\text{hole}} = 2.41e-15 \text{ (cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ c}^{-1}\text{)}$, $\mu_{\text{electron}} = 1.15e-47 \text{ (cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ c}^{-1}\text{)}$, и структуры $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$: $\mu_{\text{hole}} = 2.35e-199 \text{ (cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ c}^{-1}\text{)}$, $\mu_{\text{electron}} = 0.0e+0 \text{ (cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ c}^{-1}\text{)}$.

Заключение

В данной работе исследовали свойства переноса заряда нейтральных пентакоординированных кремниевых комплексов $\text{Si}(\text{DPP})(\text{CH}_3)_2$ и $\text{Si}(\text{bzimpy})(\text{CH}_3)_2$. В

структуре Si(bzimpy)(CH₃)₂ сравнивалась мобильность дырок и электронов, что в результате теоретических расчетов показало, что мобильность дырок выше, чем мобильность электронов. При изучении теоретических расчетов для комплекса Si(DPP)(CH₃)₂ была выявлена обратная зависимость. В сравнении двух комплексов Si(DPP)(CH₃)₂ и Si(bzimpy)(CH₃)₂ было выявлено, что у комплекса Si(bzimpy)(CH₃)₂ мобильность дырок проявила себя лучше чем в комплексе Si(DPP)(CH₃)₂, и в то же время у комплекса Si(bzimpy)(CH₃)₂ мобильность электрона также была лучше. Расхождение в величинах подвижности зарядов можно объяснить приближениями использованных моделей и так же не учётом влияния окружения других молекул. Можно сделать вывод о том, что пентакоординированная структура Si(bzimpy)(CH₃)₂ является хорошей аналоговой структурой для использования в органической электронике.

Список использованной литературы

1. Frisch M.J., et al. Gaussian 09, Revision E.01 (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010)
2. Stephens P.J. et al. Ab Initio Calculation of Vibrational Absorption and Circular Dichroism Spectra Using Density Functional Force Fields // J. Phys. Chem. – 1994. – Vol. 98, - P. 11623.
3. Hariharan P.C., Pople J.A. Accuracy of AH equilibrium geometries by single determinant molecular-orbital theory // Mol. Phys. – 1974. – Vol. 27. – P. 209-214.
4. Kuo M.Y. et al. Cyanation: providing a three-in-one advantage for the design of n-type organic field-effect transistors // Chem.—Eur. J. – 2007. – Vol. 13. – P. 4750
5. Marcus R.A. Electron transfer reactions in chemistry. Theory and experiment // Rev. Mod. Phys. – 1993. – Vol. 65. – P. 599.
6. Wang L.J. et al. Computational methods for design of organic materials with high charge mobility // Chem. Soc Rev. – 2010. – Vol. 39. – P. 423.

УДК 532.528.5:537.56:661.96

СИНТЕЗ МАТЕРИАЛОВ СО СТРУКТУРОЙ РАДДЛСДЕНА-ПОППЕРА ДЛЯ ТВЕРДОКСИДНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Е.Шукалов

yerzhan.ceo@bk.ru

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева
Астана, Казахстан

Аннотация

В данной статье представлены результаты исследования характеристик материалов на основе никелата лантана La₂Ni_{1-x}Co_xO_{4+δ} (0 ≤ x ≤ 0.3) и Pr₂NiO_{4+δ}. Проанализирована их кристаллическая структура и взаимодействие с электролитными материалами YSZ и GDC при 900 °С. Определены коэффициенты термического расширения и исследованы температурные зависимости проводимостей. А также измерено поляризационное сопротивление данных материалов в контакте с электролитным материалом YSZ.

Ключевые слова: ТОТЭ, катодные материалы, проводимость, коэффициент температурного расширения, нанопорошки.

Введени

Твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ) – перспективные электрохимические устройства, напрямую преобразующие химическую энергию топлива в электрическую и тепловую. Основными преимуществами ТОТЭ являются высокий теоретический КПД преобразования энергии (до 60% при использовании только электроэнергии и до 90% при совместном использовании электрической и тепловой энергий) и экологичность. В связи с этим научные и технологические вопросы, связанные с созданием ТОТЭ, широко