



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ТҰҢҒЫШ ПРЕЗИДЕНТІ - ЕЛБАСЫНЫҢ ҚОРЫ

«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ – 2017»

студенттер мен жас ғалымдардың
XII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

XII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ – 2017»

PROCEEDINGS

of the XII International Scientific Conference
for students and young scholars
«SCIENCE AND EDUCATION - 2017»



14th April 2017, Astana



**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**«Ғылым және білім - 2017»
студенттер мен жас ғалымдардың
XII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2017»**

**PROCEEDINGS
of the XII International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2017»**

2017 жыл 14 сәуір

Астана

УДК 378

ББК 74.58

Ғ 96

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2017» студенттер мен жас ғалымдардың XII Халықаралық ғылыми конференциясы = The XII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2017» = XII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2017». – Астана: <http://www.eni.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2017. – 7466 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-827-6

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 378

ББК 74.58

ISBN 978-9965-31-827-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2017

3. Сверхчувствительная лазерная спектроскопия/Под ред. Д. Клайджера- М.: Мир, 1986.- 520 с.
4. Barros W.L., Melo, R.M. Faria. Photoacoustic procedure for measuring thermal parameters of transparent solids// Appl. Phys. Lett, 67 (26), 1995, p.3892-3894.
5. Mandelis A. Progress in Photothermal and Photoacoustic Science and Technology// New York: Elsevier, 1992.V. 1., 542 p.
6. Reiner Salzer, Heinz W. Siesler Infrared and Raman Spectroscopic Imaging// Wiley, New York, 2009.
7. Rosencwaig A. Photoacoustics and Photoacoustic Spectroscopy//Wiley, New York, 1980, 320 с.
8. Rosencwaig A., Gersho A. Theory of the photoacoustic effect with solids // J. Appl. Phys. 1976, V. 47. № 1. P. 64-69.

УДК 548.4:539.12.04:51.72

ТЕРМОДИНАМИКА И ДИНАМИКА РЕШЕТКИ ДВУХ МОДИФИКАЦИЙ TiO_2 РУТИЛА И АНАТАЗА

Сагатов Нурсултан Ерболулы

sagatinho23@gmail.com

Магистрант 2-го курса Физико-технического факультета

ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

Научный руководитель – Т.М. Инербаев

На сегодняшний день стали актуальны такие проблемы как очистка природных вод и атмосферы от загрязняющих веществ, искусственный фотосинтез, создание альтернативных источников энергии на основе преобразования солнечного света в электричество и фотохимическое разложение воды. Для решения этих проблем применяют гетерогенные фотокатализаторы на основе полупроводниковых материалов[1, 2]. Огромный научный и практический интерес к этому процессу обусловлен тем, что он направлен на решение глобальных проблем энергосбережения и экологии окружающей среды.

Среди наиболее часто используемых в качестве фотокатализаторов материалов является диоксид титана TiO_2 , который обладает не только высокой каталитической активностью, но и химической стабильностью, экологичностью и дешевизной.

Диоксид титана имеет несколько кристаллических модификаций. В природе диоксид титана встречается в трех модификациях – рутил(P42/mnm), анатаз(I41/amd) и брукит(Pbca), отличающиеся различным кристаллическим строением. Методы получения разработаны только для диоксида титана со структурой рутила и анатаза. И в данной работе мы будем рассматривать только данные две модификации диоксида титана.

Рассматривая модификации диоксида титана, рутил был хорошо изучен как теоретически так и экспериментально. Анатаз, по сравнению с рутилом, не так хорошо изучен, поскольку при атмосферном давлении является метастабильной фазой. Однако, в последнее время, исследователи сосредоточены на изучении диоксида титана структуры анатаза из-за его фотохимических и фотоэлектрохимических свойств [3, 4].

Повышенная фотокаталитическая активность анатаза по сравнению с рутилом объясняется меньшей прочностью связи Ti-O в анатазе (энергия связи Ti-O составляет для анатаза 73,7 и для рутила 75 ккал на связь), которая еще более уменьшается во время разрушения структуры анатаза и перестройки ее в структуру рутила.

Многие из технологически важных свойств рутила и анатаза тесно связаны с динамикой решетки кристалла. Информация о химической связи, теплоемкости, диэлектрическом поведении и оптических свойствах могут быть получены анализом дисперсионных кривых (дисперсии фононов).

Полное дисперсионное соотношение фононов рутила было изучено Трейлором и др., используя когерентное неупругое рассеяние нейтронов вдоль основных направлений в зоне Бриллюэна [5]. Так же были измерены фононные частоты в Γ - точке с помощью рамановской [6] и инфракрасной спектроскопий [7]. Тем не менее, существует очень мало работ, посвященных фононным спектрам анатаза [8-10], в связи с нехваткой для измерения монокристаллов хорошего качества. Хотя динамика решетки рутила и анатаза была изучена несколькими авторами, используя расчеты из первых принципов [10-17], очень мало работ, рассматривающих их полные дисперсионные фононные кривые.

В настоящее время уделено особое внимание на изучение фазового перехода анатаз – рутил, из-за того, что анатаз и рутил имеют большой диапазон применения. В работах [18, 19] показано, что превращение зависит от способа приготовления образца, наличия примесей и добавок для стабилизации определенной модификации, и настоящей атмосферой в процессе трансформации.

В данной работе проводится изучение динамики решетки и термодинамики кристаллов TiO_2 структуры рутила и анатаза с учетом дополнительной электрон-электронной корреляции на узле. Дополнительный параметр U , описывающий корреляцию, подбирался из условия совпадения рассчитанной разности термодинамических потенциалов Гиббса при комнатной температуре и атмосферном давлении с экспериментальными значениями. Также проведено сравнение рассчитанных фононных дисперсионных кривых с экспериментальными данными с учетом и без учета дополнительной электрон-электронной корреляции.

Расчеты из первых принципов на основе теории функционала плотности были выполнены с помощью пакета программ Vienna ab initio simulation package (VASP) [20, 21]. Мы использовали LDA-приближение, так как оно лучше описывает свойства TiO_2 рассматриваемые в данной работе, чем GGA-приближение. К-сетки, использованные при расчетах, приведены в таблице 1.

Во всех случаях полные энергии сводились к 10^{-7} эВ/ячейку с энергией отрыва 500 эВ. Фононные характеристики были исследованы методом суперячейки, который включен в код YPHON. Для подсчета постоянных сил, использовалась энергия отрыва 400 эВ и $3 \times 3 \times 3$ к-точек для суперячеек.

Таблица 1

Детали расчетов энергии и фононного спектра TiO_2 из первых принципов.

Фаза	Группа	К-точки электронных расчетов	Суперячейка	К-точки для фононных расчетов
Рутил	$P4_2/mnm$	18x18x27	2x2x2	3x3x3
Анатаз	$I4_1/amd$	19x19x7	3x3x3	3x3x3

В элементарной ячейке рутила 6 атомов, поэтому у нас должно быть 15 оптических и 3 акустических кривых. На рисунке 1, приведены посчитанные фононные кривые рутила.

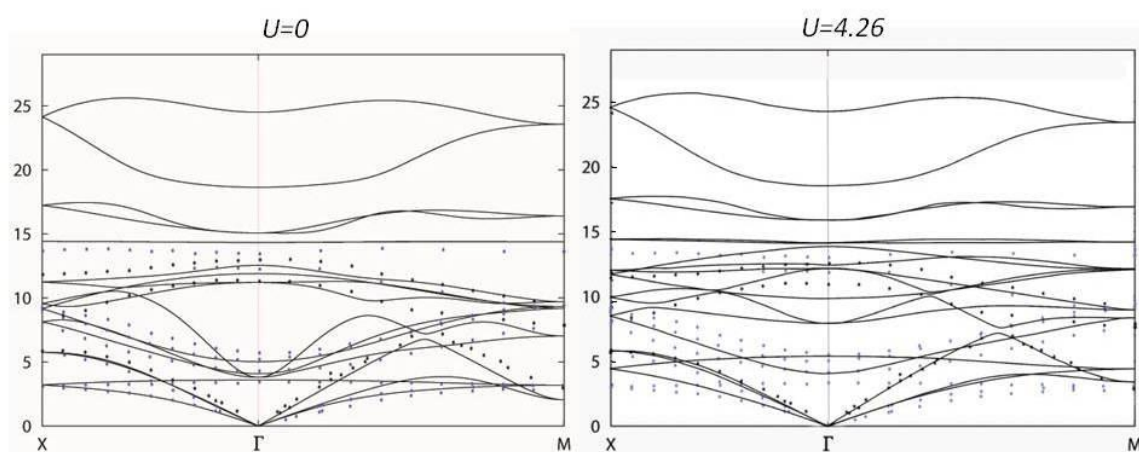


Рисунок 1 - Фононный спектр рутила рассчитанный при $U=0$ и $U=4.26$ эВ.

Оптические моды в Γ точке можно представить в виде

$$\Gamma_{\text{opt}}(\text{rutile}) = A_{1g} + A_{2g} + A_{2u} + B_{1g} + 2B_{1u} + B_{2g} + E_g + 3E_u$$

В таблице 2 сравниваются посчитанные фононные частоты рутила в Γ -точке с экспериментальными данными рамановской и ИК спектроскопии[6, 7], а также с другими теоретическими расчетами[22]. Оптические фононные частоты в Γ -точке посчитаны с хорошей точностью, и все LO-TO расщепления воспроизведены с допустимой погрешностью. Относительная погрешность для большинства фононных мод мала, и не превышает 6-7%, за исключением низкочастотных мод $A_{2u}(\text{TO})$ и $E_u^1(\text{TO})$.

Таблица 2

Данные по фононным модам рутила в Γ -точке

Мода	данная работа	теория	эксперимент
A_{1g}	18,32	18,72	18,36
A_{2g}	11,45	12,39	
B_{1g}	4,01	4,04	4,29
B_{2g}	24,50	25,05	24,78
E_g	13,90	14,21	13,41
$B_{1u}^{(1)}$	3,08	3,75	
$B_{1u}^{(2)}$	12,49	12,43	
$A_{2u}(\text{TO})$	4,09	5,97	5,01
$E_u^1(\text{TO})$	4,19	5,26	5,49
$E_u^2(\text{TO})$	11,72	11,87	11,64
$E_u^3(\text{TO})$	14,58	15,15	15,00
$A_{2u}(\text{LO})$	24,38	24,51	24,33
$E_u^1(\text{LO})$	11,45	10,52	11,19
$E_u^2(\text{LO})$	13,90	13,44	13,74
$E_u^3(\text{LO})$	24,01	23,81	24,18

Далее была исследована стабильность фаз. Для этого мы пролись по объему, сжимая и расширяя элементарную ячейку, чтобы найти нуль давлений. Энергия Гиббса считается по формуле

$$G = F + PV = F - V\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T \quad (1)$$

Но в нуле давлений энергия Гиббса становится равна энергии Гельмгольца.

Таблица 3

Разности энергий Гиббса полученных в разных работах

Год публикации	$\Delta G = G_{\text{rutile}} - G_{\text{anatase}} (\text{kJ/mol})$	Работа
1967	-5,32	[23]
1971	-11,84	[24]
2009	-1,87	[25]

В таблице 3 приведены данные работ, где считалась разность энергий Гиббса. Как бы эти данные не отличались, во всех работах мы видим что рутил стабильнее анатаза. Мы получили при помощи DFT, что анатаз при $P=0$ расположен ниже, т.е. стабильнее чем рутил, что противоречит приведенным данным. Поэтому для описания термодинамики DFT метод, хоть и с помощью него мы получили хорошие данные для фононов, не очень подходит. Для описания термодинамики мы использовали метод DFT+U (LDA). Теперь для правильного описания термодинамики нужно подобрать параметр U. Параметр U брали произвольно. Полученные данные с разными U показаны на рисунке 2.

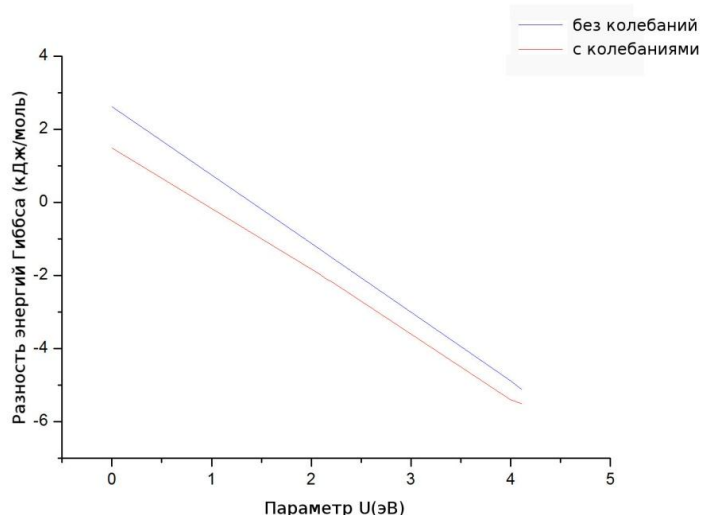


Рисунок 2 - Разность энергий Гиббса при разном параметре U.

Из данных, приведенных на рисунке 2, мы видим, что с увеличением параметра U, ΔG уменьшается, т.е. рутил становится стабильнее анатаза. Также мы можем подчеркнуть, что следует учитывать вклад колебаний, так как это вклад существенен при подсчете ΔG .

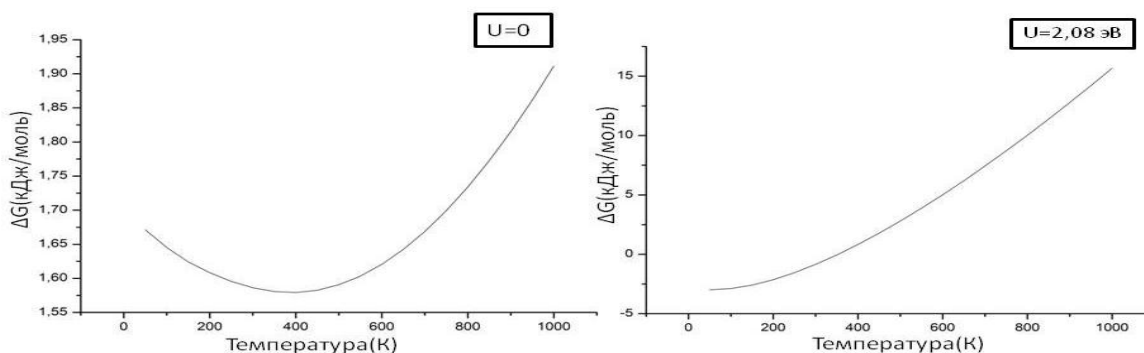


Рисунок 3 - Зависимость разности энергий Гиббса рутила и анатаза от температуры при $U=0$ и $U=2,08 \text{ эВ}$.

Также мы сравнили изменения ΔG от температуры при $U=0$ и $U=2,08\text{эВ}$. На рисунке 3, мы видим, что при $U=0$ фаза анатаза при любой температуре стабильнее рутила, а при $U=2,08\text{эВ}$ фаза рутила стабильнее, но при конечной температуре фаза анатаза становится стабильнее.

Список использованных источников

1. А.И., К., Энергетика электронных процессов в полупроводниковых фотокаталитических системах, in Теоритическая и экспериментальная химия. 2000. р. 69-89.
2. Н.М. Соболева, А.А.Н., В.В. Гончарук, Химия и технология воды. Гетерогенный фотокатализ в процессах обработки воды. 2007.
3. Fujishima, A.H., K. Nature 1972, 238, 37.
4. Hadjiivanov, K.I.K., D. G. Chem. Soc. Rev. 1996, 25, 61.
5. Traylor, J.G.S., H. G.; Nicklow, R. M.; Wilkinson, M. K. Phys. Rev. B 1971, 3, 3457.
6. Porto, S.P.S.F., P. A.; Damen, T. C. Phys. Rev. 1967, 154, 522.
7. Eagles, D.M.J.P.C.S., 25, 1243.
8. Ohsaka, T.I., F.; Fujiki, Y. J. Raman Spectrosc. 1978, 7, 321.
9. Gonzalez, R.J.Z., R.; Berger, H. Phys. Rev. B 1997, 55, 7014.
10. Giarola, M.S., A.; Monti, F.; Mariotto, G.; Bettinelli, M.,.
11. Lee, C.G., P.; Gonze, X. Phys. Rev. B 1994, 50, 13379.
12. Sikora, R.J.P.C.S., 66, 1069.
13. Kim, D.Y.d.A., J. S.; Koci, L.; Ahuja, R. Appl. Phys. Lett. 2007, 90, 171903.
14. Mikami, M.N., S.; Kitao, O.; Arakawa, H. Phys. Rev. B 2002, 66, 155213.
15. Shojaei, E.M., M. R. J. Phys.: Condens. Matter 2010, 22, 015401.
16. Mitev, P.D.H., K.; Montanari, B.; Refson, K. Phys.Rev. B 2010, 81, 134303. .
17. Montanari, B.H., N. M. Chem. Phys. Lett. 2002, 364, 528. .
18. Rao, K.V.K., Naidu, S. V. N., Iyengar, L. (1970) J. Amer. Ceram. Soc. 53: pp. 124.
19. Suzuki, A., Tukuda, R. (1969) Bull. Chem. Soc. Japan 42: pp. 1853.
20. Kresse, G.F.u., J. Phys. Rev. B 1996, 54, 11169.
21. Kresse, G.J., D. Phys. Rev. B 1999, 59, 1758.
22. Zhi-Gang Mei, Y.W., Shun-Li Shang, and Zi-Kui Liu, *First-Principles Study of*
23. Navrotsky A, K.O.J.A.C.S.
24. Stull DR, P.H.N.S.N., Washington DC, 1141 p.
25. Smith SJ, S.R., Liu S, Li G, Navrotsky A, Boerio-Goates J, Woodfield BF (2009) Am Miner 94:236.

ӘОЖ 538.958

ТАМАҚ ӨНІМДЕРІ ҚҰРАМЫНДАҒЫ БОЯҒЫШ МОЛЕКУЛАЛАРЫНЫҢ ИНФРАҚЫЗЫЛ СПЕКТРЛЕРІ

Тәжіғалиева Жанна Тұрақбайқызы

zhanok_t@mail.ru

Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ Физика-техникалық факультетінің 4 курс студенті,

Астана, Қазақстан

Ғылыми жетекші – А.М. Жүнісбеков

Дүкен сөрелерінде адамның назарын өзіне аударып, сол затты сатып алуға мәжбүр ететін ол, ең алдымен, сол заттың түсі болып табылады. Жеміс – жидектер, көкөністер мен еттің түсі бәрімізге түсінікті. Мәселе дайын тағамның түсінде. Дайын тамақты мейлінше нәрлі, құнарлы, көзге жағымды етіп көрсету үшін өндірушілер тамаққа арналған арнайы бояғыштарды қосады. Бірақ кейбір өндірушілер бояғыштарды басқа мақсаттарда да қолданады, атап айтатын болсақ, сапасы төмен өнімдерін мейлінше сапалы етіп көрсету үшін