

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



Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2016» атты
XI Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XI Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2016»

PROCEEDINGS
of the XI International Scientific Conference
for students and young scholars
«SCIENCE AND EDUCATION - 2016»

2016 жыл 14 сәуір
Астана

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

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2016»
атты XI Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XI Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2016»**

**PROCEEDINGS
of the XI International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2016»**

2016 жыл 14 сәуір

Астана

ӘӨЖ 001:37(063)

КБЖ 72:74

Ғ 96

Ғ96 «Ғылым және білім – 2016» атты студенттер мен жас ғалымдардың XI Халық. ғыл. конф. = XI Межд. науч. конф. студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2016» = The XI International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2016» . – Астана: [http://www.enu.kz/ru/nauka/ nauka-i-obrazovanie/](http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/), 2016. – б. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-764-4

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.

ӘӨЖ 001:37(063)

КБЖ 72:74

ISBN 978-9965-31-764-4

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2016

Квант-химиялық әдістермен алынған толық энергия мәндерін салыстыру, барлық есептелген модельдер үшін толық энергия мәндері сапалық құрамы мен құрылымына байланысты екендігін дәлелдейді. Бұл зерттеу әдісінің есептеу дұрыстығын көрсетеді.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Масакбаева С.Р. Координационные соединения галогенидов марганца и кобальта с протонированным ацетамидом: Автореф. дисс.кан хим. Наук: 02.00.01.-Караганда, 2010. – 16с.
2. Жидомиров Г.М., Багатурьяц А.А., Абропин И.А. Прикладная квантовая химия. –М.: Химия, 1979. –296с.
3. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений. –Л.: Химия, 1976. –352с.
4. Еркасов Р.Ш., Масакбаева С.Р., Рыскалиева Р.Г. Растворимость в системе $\text{CoBr}_2 - \text{CH}_3\text{CONH}_2 - \text{HBr} - \text{H}_2\text{O}$ при 25°C . //Вестник ЕНУ им.Л.Н.Гумилева. 2007. №6 (60). С.148-151.

УДК 544.182.7

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ОПТИМАЛЬНЫХ СТРУКТУР И СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ КЛАСТЕРОВ ЗОЛОТА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГИБРИДНОГО МЕТОДА

Мукатаев Искандер

mukataev_1996@mail.ru

Студент 3-го курса специальности «5В060600-химия» ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Научный руководитель: И.С. Иргibaева

Кластеры играют важную роль в изучении перехода свойств макроскопических тел к свойствам микроскопических структур. Область исследований кластеров, в особенности нанокластеров, развивается ускоренными темпами последние десятилетия. Это ускорение затрагивает как экспериментальную, так и теоретическую части. Несмотря на развитие техники, мы по-прежнему имеем некоторые проблемы в изучении отдельных микрокластеров. И точные методы квантовой химии и молекулярной динамики очень полезны для описания и объяснения многих экспериментальных деталей исследований наномира. Методы квантовой химии используют различные способы для изучения молекул, т.е. мы можем не только находить структуру с минимальной энергией, но и предсказывать спектры поглощения и т.п. Эти методы включают в себя различные способы приближения, в том числе теорию функционала плотности. Основная цель данной теории - при описании электронной подсистемы заменить многоэлектронную волновую функцию электронной плотностью. Это ведет к существенному упрощению задачи, поскольку многоэлектронная волновая функция зависит $3N$ от переменных — по 3 пространственных координаты на каждый из N электронов, в то время как плотность — функция лишь трёх пространственных координат.

В свою очередь наночастицы золота имеют широкое применение в современных исследованиях нанотехнологий. Они находят широкое применение в качестве катализаторов, оптических усилителей, препаратов и др. Для данных исследований рассматриваются оптические свойства, которые используются для современных солнечных концентраторов энергии, фоторезисторов и др.

Экспериментальная часть

Молекулярная геометрия. Для оптимизации и расчета поверхности потенциальной энергии была использована программа Gaussian 09. Расчет велся с использованием теории функционала плотности в приближении B3LYP. Для атомов золота был выбран базисный набор LanL2DZ (Los Alamos national laboratory), учитывающий релятивистские поправки. Для операции оптимизации были выбраны структуры из статьи “Molecular-dynamics simulations of gold clusters” Turgut Bastug, Masaru Hirata, в которой расчеты велись методом молекулярной динамики. Затем на программе G09 после операции оптимизация и найдены оптимальные структуры была построена поверхность потенциальной энергии. На оптимизированных структурах были рассчитаны спектры поглощения.

Для расчета спектров поглощения и вкладов молекулярных орбиталей был использован метод B3LYP и базисный набор LanL2DZ, учитывающий релятивистские поправки, для атомов золота.

В работе были использованы кластеры золота с количеством атомов от 3-13 атомов. Выбор объясняется тем, что в данном интервале возможно продемонстрировать изменение спектральных данных наиболее точно и задача вычислений упрощается.

Описание результатов.

Расстояние между атомами и их пространственное положение в кристалле играет первостепенную роль. С целью узнать оптимальное расстояние между атомами в первую очередь нами была рассчитана кривая потенциальной энергии системы Au₂.

Рассчитана была ППЭ для расстояния двух атомов золота (рис. 1.).

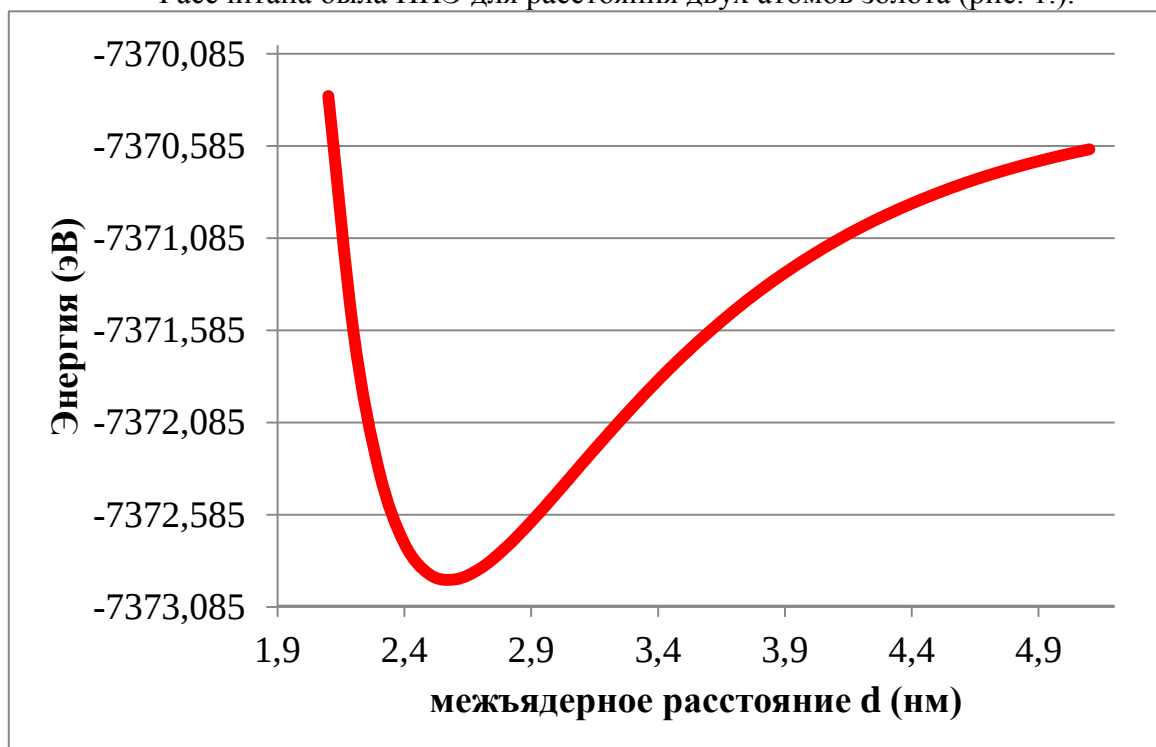


Рисунок 1. Кривая поверхности потенциальной энергии.

На кривой виден минимум энергии при 2,6 ангстрем. Так как ядра не находятся в точке минимума, а постоянная колеблется энергия будет выше, что хорошо демонстрируется в результатах оптимизации различных кластеров.

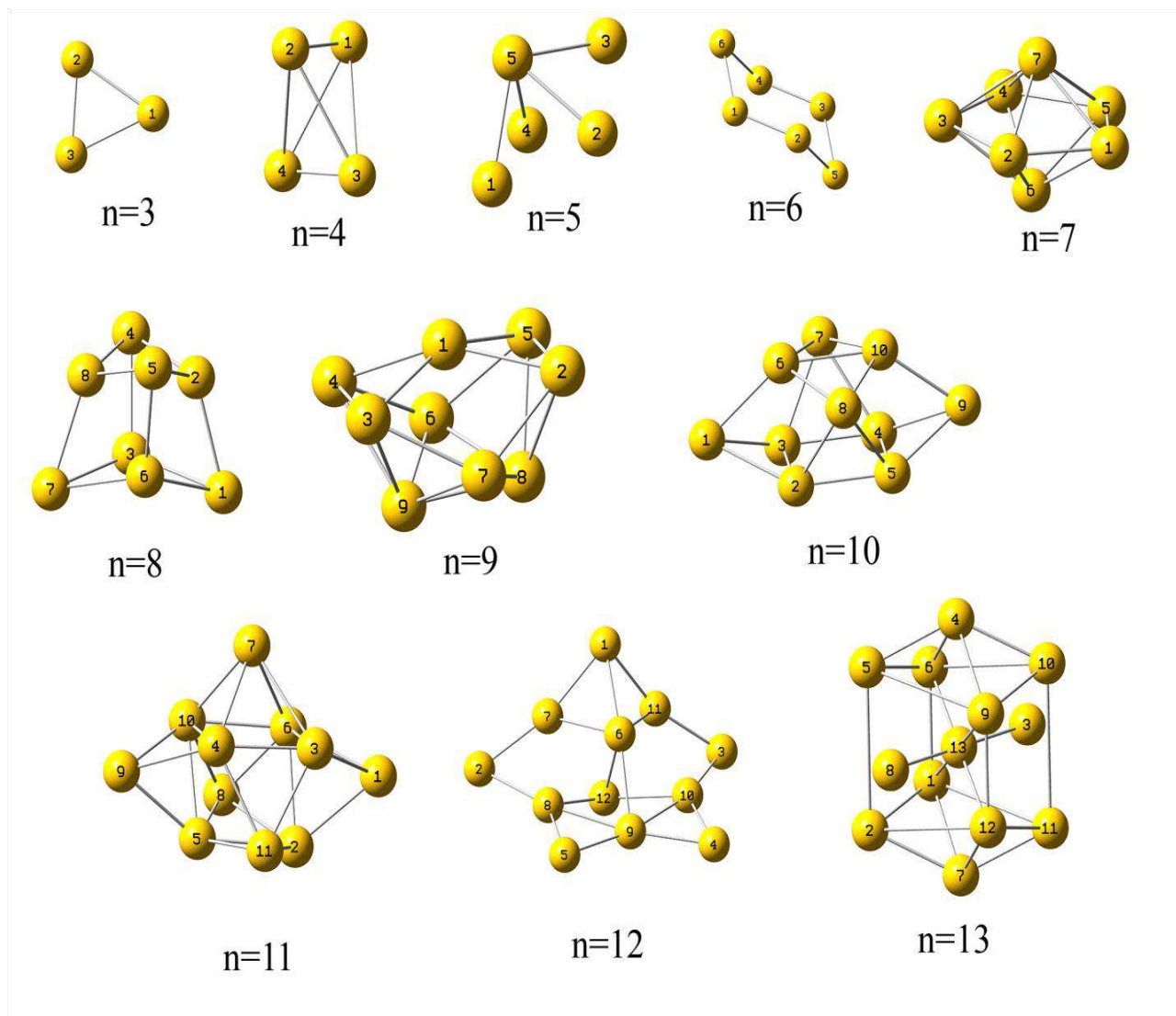


Рисунок 2. Кластеры золота.

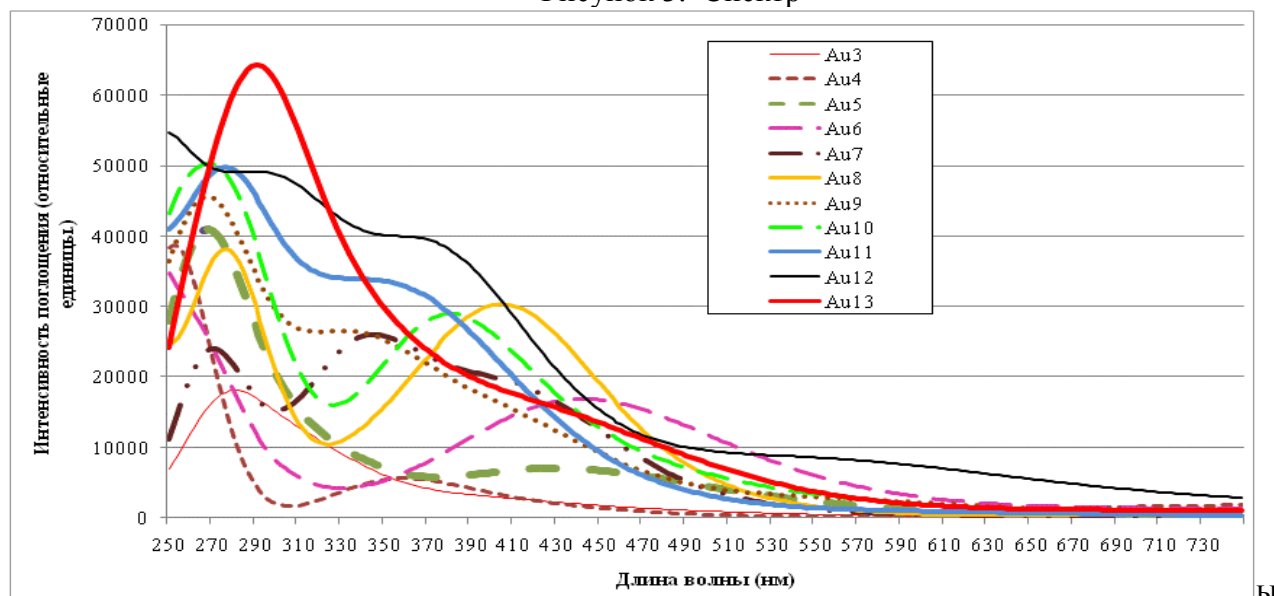
Оптимизация проводилась для кластеров с атомами золота с $n=3-13$ (где n – количество атомов золота). В результате оптимизации были получены структуры на рис. 2. Расстояние между двумя атомами золота стало 2,81 ангстрем, что хорошо согласуется с результатами построения ППЭ и экспериментальными данными. (В экспериментальных результатах для нанокластеров расстояние варьируется от 2,71 до 2,85 нм и данные результаты хорошо сходятся с результатами построения ППЭ).

Большинство оптимизированных структур относится к группе симметрии C_{2v} . Исключениями являются кластер с шестью атомами, для которого свойственна симметрия S_{2n} , кластер с семью атомами – D_{5h} , кластер с 12 атомами – C_s , для кластер с 13 атомами – C_{2h} .

Спектры поглощения.

С оптимизированными молекулами были рассчитаны спектры поглощения (рис.3). Из полученных спектров видно наличие пика совпадающего в области ближнего ультрафиолета, а также наличие пиков в видимой области.

Рисунок 3. Спектр



поглощения.

Интенсивность поглощения пика в УФ области изменяется в зависимости от количества атомов в кластере. В спектре поглощения возможно увидеть увеличение интенсивности в некоторых интервалах с увеличением атомов (от 7-13).

Данные результаты хорошо согласуются с результатами экспериментов опубликованных в различных работах (См. источники 8-9). Но с увеличением размера кластеров задача расчетов начинает усложняться. Сложности начинаются при увеличении кластеров золота до размера 50 нм так как с этих размеров в спектр поглощения вносится высокий вклад рассеяния который необходимо рассматривать с использованием дополнительных (теория Ми, теория плазмонного резонанса) и косвенных методов для получения точных результатов.

Выводы.

Из всего вышесказанного можно сделать заключение о том что современные компьютерно-химические методы хорошо описывают поведение микросистем. Данный факт показывается в спектрах поглощения. В спектрах возможно видеть тенденцию к увеличению интенсивности поглощения с увеличением размера наночастиц.

В табл.1 представлены спектральные линии и соответствующие им сила осциллятора и переходы молекулярных орбиталей. Были взяты линии сила осциллятора для которых выше 0,1 и переход МО вклады которых выше 0,3. (влияние остальных играет незначительную роль).

п	Энергия (нм)	Сила осциллятора	Переход
3	287.81	0.1019	α -HOMO $\rightarrow$ α -LUMO+4 β -HOMO-12 $\rightarrow$ β -LUMO+1
4	259.46	0.1069	HOMO $\rightarrow$ LUMO+4
	253.29	0.5871	HOMO $\rightarrow$ LUMO+2
5	279.22	0.1472	β -HOMO-23 $\rightarrow$ β -LUMO
	273.48	0.2090	α -HOMO-16 $\rightarrow$ α -LUMO+1
	265.60	0.1542	β -HOMO-24 $\rightarrow$ β -LUMO α -HOMO-16 $\rightarrow$ α -LUMO+1
	263.49	0.3101	α -HOMO-1 $\rightarrow$ α -LUMO+3 β -HOMO $\rightarrow$ β -LUMO+4
6	425.45	0.2085	HOMO-12 $\rightarrow$ LUMO

7	418.54	0.1822	α -HOMO-2 -> α -LUMO+2 B-HOMO-1 -> B-LUMO+3
	418.53	0.1822	α -HOMO-1 -> α -LUMO+2 β -HOMO -> β -LUMO+3
	267.18	0.1931	β -HOMO -> β -LUMO+6
	267.16	0.1926	β -HOMO-1 -> β -LUMO+6
8	410.48	0.2227	HOMO-> LUMO+3
	410.47	0.2227	HOMO-1-> LUMO+3
	410.05	0.2244	HOMO-2 -> LUMO+3
	277.29	0.2475	HOMO -> LUMO+4
	277.28	0.2475	HOMO-1 -> LUMO+4
9	266.59	0.1486	α -HOMO-2 -> α -LUMO+3 β -HOMO-25 -> β -LUMO+4
10	377.92	0.1877	HOMO-11 -> LUMO HOMO-7 -> LUMO
	275.24	0.1785	HOMO-1 ->LUMO+6
11	283.24	0.0742	α -HOMO-33 -> α - LUMO+2
12	474.56	0.1013	HOMO-2 ->LUMO+1
	394.77	0.1475	HOMO-5 -> LUMO+1
	383.18	0.1317	HOMO-7 -> LUMO+1
	299.83	0.1257	HOMO-30 -> LUMO+1
13	442.98	0.1001	β -HOMO-18 -> β -LUMO
	291.69	0.1224	α -HOMO-17 -> α - LUMO+5

Таблица 1.

На рис.4 представлен переход молекулярных орбиталей для модели с 3 атомами золота.

На рисунке демонстрируется основной переход для кластера золота.

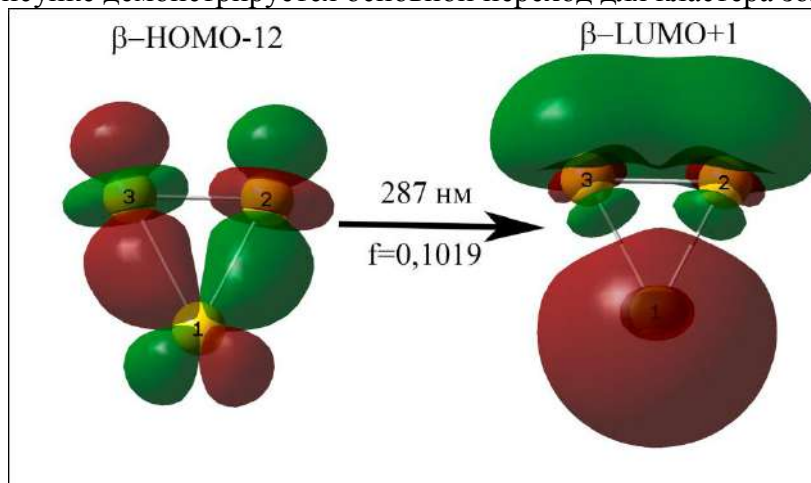


Рисунок 4.

Кроме того, нами было замечено влияние симметрии на спектры поглощения. Данное влияние проявляется в том, что тенденция наличия пика и увеличение его интенсивности свойственно только для кристаллов одной группы симметрии.

Данные результаты могут быть использованы для экспериментальных целей для получения материалов и нанокмполитов с необходимыми спектральными свойствами. Но возможно заметить наличие небольших отклонений от экспериментальных результатов в связи с тем, что большинство нанокластеров золота находятся в растворах, где влияние оказывает растворитель, поэтому для систем растворитель-наночастица расчеты будут иметь большую погрешность. Но наибольшее прикладное значение наночастицы имеют

находясь в составе твердых фаз (полимеры, кристаллы и др.) где их поведение хорошо описывается вышеперечисленными моделями.

Список использованных источников

1. P.W. Atkins, R.S. Friedman, Molecular quantum mechanics, third edition –UK: Oxford university press, 2005, 545p.
2. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев, Теория строения молекул – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997, 560 стр.
3. Bhargava S., Booth J., Agrawal S., Coloe P., Kar G. Gold Nanoparticle Formation during Bromoaurate Reduction by Amino Acids // Langmuir. 2005 № 21. P. 5949-5956.
4. Turgut Bastug, Masaru Hirata, Molecular-dynamics simulations of gold clusters.//Advances in quantum chemistry. 2000 №37. P. 353-364.
5. D. Michael, P.Mingos, Gold clusters, colloids and nanoparticles II – Switzerland: Springer international publishing, 2014, 213p.
6. Е.В. Бутырская, Компьютерная химия – Москва: Солон-Пресс, 2011, 224 стр.
7. P. Jeffrey Hay, Willard R. Wadt, Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for transition metal atoms Sc to Hg.// Journal of chemical physics. 1985 №82. P. 270-283.
8. Gareth L. Nealon, Bertrand Donnio, Romain Greget Jean-Paul Kappler Emmanuel Terazzi, Jean-Louis Gallani, Magnetism in gold nanoparticles// Nanoscale. 2012 №17. P.5244-5258.
9. Eunkeu Oh, Kimihiro Susumu, Ramasis Goswami, Hedi Mattoussi, One-phase synthesis of water soluble gold nanoparticles with control over size and surface functionalities// Langmuir. 2010 № 26. P. 7604-7613.

ӘОЖ 543.2(075)

ХИМИЯ САБАҒЫН ОҚЫТУДА ЭКОЛОГИЯЛЫҚ БІЛІМ БЕРУДІҢ МАҢЫЗДЫЛЫҒЫ

Нұрбол Гүлгина

g-nurbol@mail.ru

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ химия кафедрасының 2-ші курс магистранты
Ғылыми жетекші – Омарова Н.М.

Қазақстан Республикасында білім берудің инновациялық дамуы турасында мемлекетіміздің Президенті Н.Ә.Назарбаев өзінің әр жылдардағы халыққа жолдауларында атап көрсетіп, инновациялық даму ұлтымыздың бәсекелестік қабілетін көтеретінін, ол үшін білім деңгейіміздің жоғары болуы қажеттігін баса айтуда. «Әлемдік білім кеңістігіне толығымен кірігу білім беру жүйесін халықаралық деңгейге көтеруді талап ететіні сөзсіз,-дей келе, реформалаудың нәтижелерінің бірі – жаңа сатыдағы педагогтың өмірге келуі, уақыт талабына сәйкес болуы», - деп, оқытушылар мен мұғалімдер қауымына айқын міндеттер жүктеді [1].

Барлық дамыған елдердің сапалы бірегей білім беру жүйесі бар. Біздің елімізде де қоғам талабына, сұранысына сай қазіргі Қазақстанның білім беру ұйымдарының құрылымы мен ұйымдастырылуы, мониторингтік қызметі икемді әрі өзгермелі болуда. Яғни, біздің еліміздің ұлттық білім жүйесінің жаңа үлгісі оқушының қабілет – бейімділігін, қызығушылығын дамытуға бағытталып, оның өмірлік жоспарларын іске асыруға негізделген инновация оқу – тәрбие үрдісіне дендеп енуде. Дәстүрлі оқыту әдісінен жеке адамды тұлғалық дамытуға негізделген технологияларды зерттеу, тәжірибеге енгізу бағдарламаларымен жұмыстар жүргізіліп, мұғалімнің кәсіби, мәдени сапасына, әдістемелік шеберлік деңгейіне жоғары талаптар қойылуда.