



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.enu.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

Список использованных источников

1. Саубенова М.Г. Достижения Института микробиологии и вирусологии КН МОН РК // Вестник КазНУ. Серия: биологическая. – 2012. - №4. – С.6-8
2. Медицинская микробиология, вирусология и иммунология. / Под ред. акад. РАМН А.А. Воробьева. – М.: МИА, 2004. – 234с.
3. Ветлугина Л.А., Никитина Е.Т. Противогрибковые полиеновые антибиотики. – Алматы: Наука. – 1980. – 49 с.
4. Suleimenov E.M. // Chemistry of Natural Compounds. – 2009. – 45, N 5. – P. 710.
5. Sawant O., Kadam V.J., Ghosh R. // Journal of Herbal Medicine and Toxicology. – 2009. – 3, N 2. – P. 39.

УДК 54.01

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРИЛЕНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ С НАНОЧАСТИЦАМИ МЕТАЛЛОВ

Мукатаев Искандер Рамазанович

mukataev_1996@mail.ru

Студент 4-го курса специальности «Химия-5В060600», Евразийского Национального университета Л.Н. Гумилева.

Научный руководитель – Иргитаева И.С.

Введение

Органические флуоресцентные красители и наночастицы золота находят все большее применение в медицине [1], электронике [2], катализе [3] и спектроскопии [4].

Наночастицы металлов демонстрируют уникальные оптические свойства вследствие поверхностного плазмонного резонанса, который возникает по причине коллективного колебания электронов в резонансе с электромагнитной волной. Поверхностный плазмонный резонанс приводит к усиленному поглощению и рассеянию света наночастицами на резонансной частоте. Коллективные колебания создают локальное электрическое поле.

В случае присутствия люминесцентных веществ в локальном электрическом поле, скорость поглощения и испускания существенно изменяются что приводит к изменению поглощения и квантового выхода. Если длина волны плазмона перекрывается со спектром поглощения люминесцентного вещества степень поглощения увеличивается [5]. Множество теоретических [6] и экспериментальных [7-10] работ рассматривало эти феномены.

Для качественного и количественного описания поведения плазмона используется ряд уравнений Максвелла. Однако при рассмотрении композитов наночастиц металлов органическими молекулами стоит проблема, состоящая в том, что свойства молекулы подчиняются законам квантовой механики и стоит задача разработать методы, которые могут описать взаимодействие наночастиц и молекул. Данные методы включают в себя различные способы расчетов: эмпирические (ММ), полуэмпирические (ZINDO, CNDO) и неэмпирические (DFT, HF). Все расчеты состоят из огромного количества математических операций проводимых на компьютерных программах. Так как наночастицы металлов являются наноразмерными объектами и, из-за относительно большого размера расчеты занимают длительное время, и для сокращения времени и для удобства наиболее приемлемо использование полуэмпирических и эмпирических методов, которые обеспечивают лишь ограниченный уровень точности. Тем не менее, появление теории функционала плотности и возможности уменьшить размер наночастиц с использованием наиболее подходящих моделей, меньших размеров и более практических, делают эти соединения гораздо более доступными для вычислений, сохраняя при этом удовлетворительный уровень точности.

В данной работе рассматривается описание и прогнозирование влияния наночастиц

золота и серебра на поглощение в видимой области, что может быть полезно для практики в медицине и материаловедении.

Цель данной работы: разработать модель с привлечением современных методов квантовой химии, для описания влияния поверхностного плазмонного резонанса, возникающего на поверхностях наночастиц металлов, и его влияния на свойства оптические свойства периленовых красителей. Данное достижение позволит объяснить и описать процесс взаимодействия молекул красителя с поверхностью наночастиц металлов, и подтвердить адекватность методов квантовой химии для наносистем.

Для достижения цели поставлены задачи:

1. Разработать простейшие модели наночастиц металлов и наночастиц с красителем, с которыми рассчитать электронные спектры поглощения.
2. Соотнести полосы электронных переходов с соответствующим орбиталям.
3. Сравнить теоретические данные с экспериментом. Провести прогнозирование.

Вычислительные методы

Все операции велись на программе Gaussian 09. Для всех атомов был выбран базисный набор 6-31G(d) кроме атомов золота и серебра для которых использовался базис LanL2dz с эффективным потенциалом (ECP)[11]. Для всех расчетов использовался метод DFT с указанием функционала B3LYP[12-13].

Экспериментальная часть

Для исследования был взят один из производных органических периленовых красителей DyeIII. Для данного красителя была оптимизирована структура с гибридным функционалом B3LYP. После чего был рассчитан колебательный спектр на наличие мнимых частот. После подтверждения того, что структура была удачно оптимизирована, был рассчитан электронный спектр поглощения и соответствующие полосам перехода орбитали. В качестве самого интенсивного был взят $\pi \rightarrow \pi^*$ переход, за изменением интенсивностью которого мы будем наблюдать в ходе работы.

В качестве наночастиц металлов будут рассматриваться кластеры золота и серебра с пятью и семью атомами. Которые также пройдут операцию оптимизации.

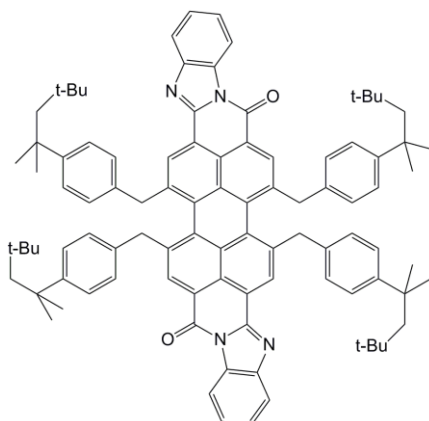


Рисунок 1. Структура молекулы DyeIII.

После оптимизации структур красителя и кластера металла, был проведен расчет электронного спектра поглощения системы. Система состояла из кластера металла и органического красителя, и было произведено наблюдение за изменением интенсивности переходов по мере изменения расстояния между красителем и наночастицей.

Для создания моделирования поверхностного плазмона наночастицы металла, был взят кластеров для золота и серебра, состоящих из пяти и из семи атомов. Данные структуры были подвергнуты операции оптимизации после чего «заморожены»

Для создания оптимальной модели были взяты результаты экспериментов ряда периленовых красителей с наночастицами золота [14-15], к которым были адаптированы модели с золотом. Разработанные модели были использованы для осуществления

прогнозирования влияния наночастиц серебра на такие же красители. Полученные модели были использованы для описания влияния поверхностного плазмона на красители.

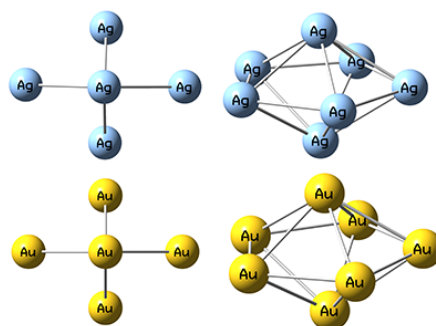


Рисунок 2. Структуры нанокластеров металлов использованных для моделирования

Результаты и обсуждение

Операция нахождения оптимальной структуры органического красителя была проведена удачно, о чем говорит сохранившаяся плоскость периленового основания и отсутствие мнимых частот в рассчитанном колебательном спектре. Оптимизированная структура показана на рисунке 3.

Дипольный момент данной молекулы по результатам расчетов составил 2.4820 Дебай и общая энергия -4234.01129859 Хартри.

Из формулы молекулы видно наличие сопряженной системы, которая согласно экспериментальным данным поглощает в области 630-650 нм. Для подтверждения результатов был рассчитан электронный спектр поглощения и соответствующие линиям переходов молекулярные орбитали (Табл 1).

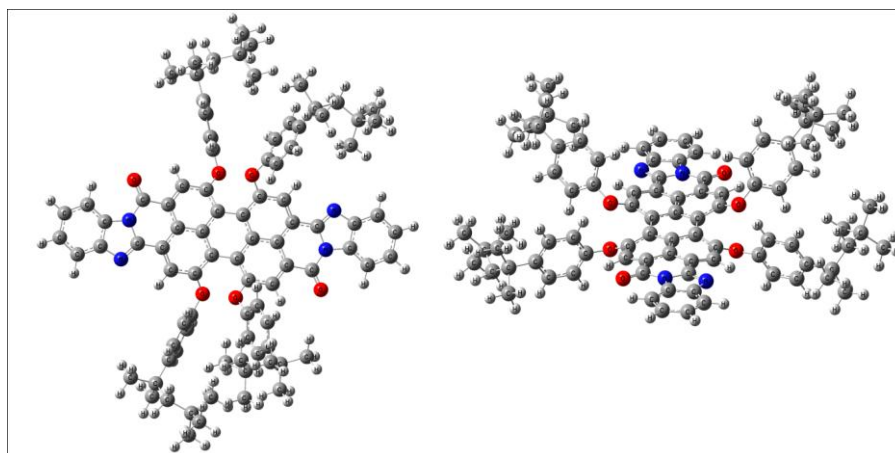


Рисунок 3. Оптимизированная структура красителя Dye III

Таблица 1 – Основные переходы с спектре поглощения красителя Dye III.

Номер перехода	Длина Волны перехода (нм)	Сила осциллятора	МО
1	637	0.8456	HOMO → LUMO
3	467	0.0825	HOMO -2 → LUMO
4	449	0.1103	HOMO -3 → LUMO

Рассчитанный спектр поглощения (Рис. 3) хорошо соответствует экспериментальному приведенному в работе [14]. Из данного спектра в ходе работы интерес будет проявлен к переходу HOMO → LUMO или $\pi \rightarrow \pi^*$ (Рис. 5).

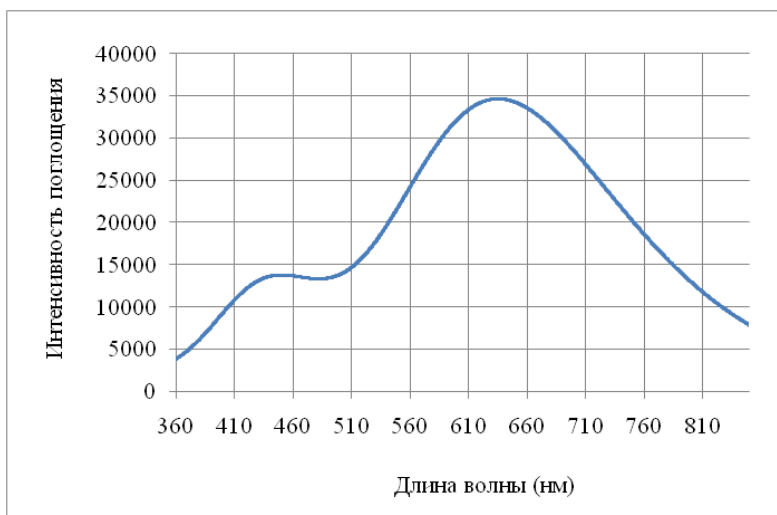


Рисунок 4. Рассчитанный спектр поглощения Dye III.

Из данного спектра в ходе работы интерес будет проявлен к переходу НОМО \rightarrow LUMO или $\pi \rightarrow \pi^*$ (Рис. 4)

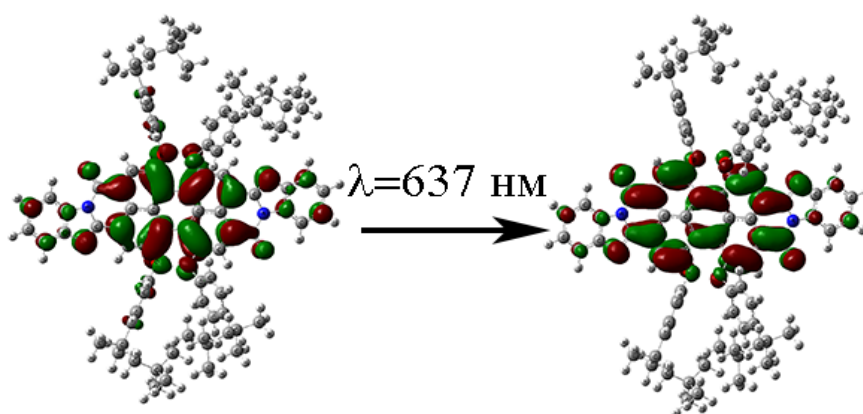


Рисунок 5. $\pi \rightarrow \pi^*$ переход в молекуле красителя

Для создания комбинации красителя и наночастицы металла, была рассчитана оптимальная и упрощенная структура наночастицы (Рис 2). Это было необходимо, для того, чтобы уменьшить время расчета

Данные структуры были «заморожены» и использованы для моделей с красителем. Кластеры металлов были помещены в плоскости периленового основания положение показанное на рисунке 6. И в ходе работы изменению подвергалась расстояние L между наночастицей и молекулой.

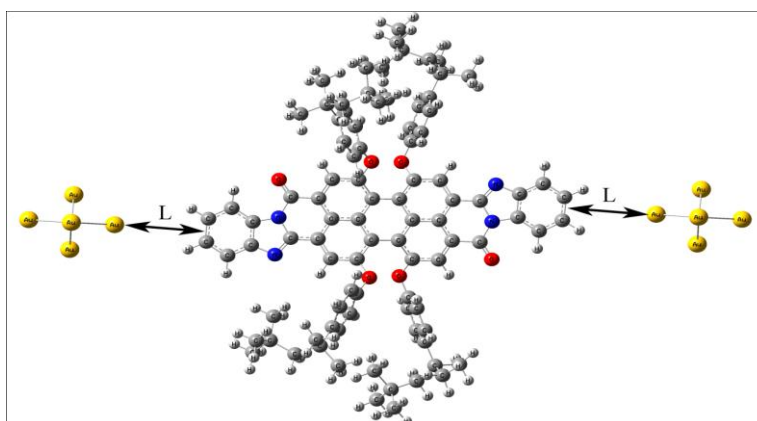


Рисунок 6. Модель красителя с кластером из пяти атомов

Расчеты электронных спектров поглощения показали результаты, показанные на рисунке 7 и в таблице 2.

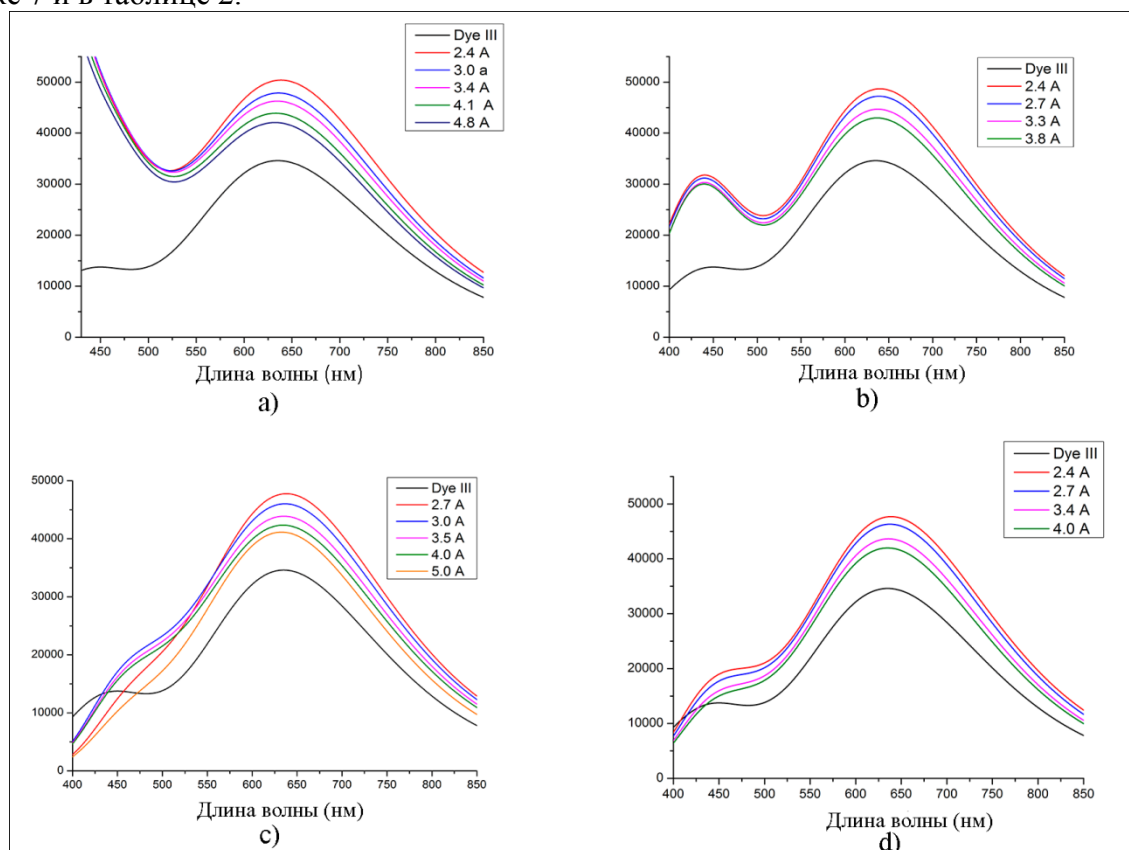


Рисунок 7. Рассчитанные спектры поглощения систем красителя с кластером а) серебра с пятью атомами б) серебра с семью атомами с) золота с пятью атомами д) золота с семью атомами. Разными цветами указаны расстояния между молекулой и металлом, отмеченные на легенде в ангстремах (Å).

Таблица 2 – Электронные переходы в модели красителя с кластером золота с пятью атомами

Расстояние L в Å	Энергия перехода (нм)	Сила осциллятора	МО
∞	637	0.8456	НОМО \rightarrow LUMO
2.7	650	1.1980	НОМО-1 \rightarrow LUMO + 3
3.0	646	1.0426	НОМО-1 \rightarrow LUMO + 3
3.5	645	0.9483	НОМО-1 \rightarrow LUMO + 3
4.0	644	0.8201	НОМО-1 \rightarrow LUMO + 3
5.0	644 (0.8200	НОМО-1 \rightarrow LUMO + 5

В таблице 2 видно, что изменения интенсивности достигается, не только за счет наложения полос спектров поглощения наночастиц золота, но и за счет увеличения интенсивности $\pi \rightarrow \pi^*$ перехода, что говорит о влиянии локального поля поверхностного плазмона. Такая же тенденция наблюдается в оставшихся четырех случаях с другими кластерами из рисунка.

Из данных по расчетам поверхности потенциальной энергии равновесное расстояние между молекулой и наночастицей находится в интервале от 2,9 до 3,2 ангстрем, что говорит об электростатическом взаимодействии между составляющими. Из этого следует, что в реальности расположение молекул будет в виде отростков, отходящих от поверхности наночастицы (Рис. 8).



Рисунок 8

Заключение

В ходе работы были изучены спектры поглощения квантовых точек периленового производного отдельно и в присутствии нанокластеров золота и серебра, а также проведена оценка методов DFT для расчетов с базисным набором LanL2DZ ECP. И из проделанной работы можно сделать выводы.

1. Структуры были удачно оптимизированы с использованием DFT методов, (об этом говорит сохранившаяся структура периленового основания, также отсутствие нереальных частот в колебательном спектре) из чего следует, что данные методы могут быть приемлемы для операций оптимизаций.

2. Для описания электронных спектров поглощения B3LYP оказался удачным методом, как отдельной квантовой точки, так и моделей с наночастицами.

3. Качественное описание влияния поверхностного плазмона наночастиц металлов удачно описывается методом B3LYP.

4. Строение системы состоящей из молекулы красителя и наночастицы металла будет выглядеть в виде, показанном на рисунке 8. Возникновение данной структуры происходит вследствие электростатического взаимодействия между молекулой и наночастицей и влияния стерического эффекта заместителей.

5. Результаты работы могут быть полезны для методов биохимического анализа и анализа полимеров, так как результаты расчетов показывают тенденцию к уменьшению поглощения при удалении наночастицы от молекулы, что может быть использовано для измерения длины полимерных цепей и белковых молекул.

Список использованных источников

1. Bhargava S, Booth J, Agrawal S, Coloe P, Kar G, Gold nanoparticles formation during bromoaurate reduction by amino acids//. *Langmuir*, 2005, №21, p5949–5956
2. Pan A, Yang H, Liu R, Yu R, Zou B, Wang Z Color-tunable photoluminescence of alloyed CdS_xSe_{1-x} nanobelts//. *J Am Chem Soc*, 2005, №127, p15692–15693
3. Hirai H, Wakabayashi H, Komiyama M, Polymer-protected copper colloids as catalysts for selective hydration of acrylonitrile// *Chem Lett*, 1983, №12, p1047–1050
4. Haes A, Haynes C, McFarland A, Schatz G, Van Duyne R, Zhou S, Plasmonic materials for surface-enhanced sensing and spectroscopy. // *MRS Bull*, 2005, №30, p368–375
5. Wokaum A, Lutz H-P, King A, Wild U, Ernst R, Energy transfer in surface enhanced luminescence. // *J Chem Phys*, 2005, №79, p509–514
6. Chance R, Prock A, Silbey R, Molecular fluorescence and energy transfer near interfaces.//

- Adv Chem Phys, 1978, №37, p 1–65
7. . Lakowicz JR, Shen Y, Auria SD, Malicka J, Fang J, Gryczynski Z, Gryczynski I, Radiative decay engineering: effects of silver island films on fluorescence intensity, lifetimes, and resonance energy transfer.// Anal Biochem, 2002,№301, p. 261–277
 8. Chen Y, Munechika K, Plante I, Munro AM, Skrabalak S, Xia Y, Ginger DS, Excitation enhancement of CdSe quantum dots by single metal nanoparticles.// App. Phys Lett,2008, № 93, p.053106.
 9. Tam F, Goodrich G, Johnson B, Halas N, Plasmonic enhancement of molecular fluorescence. // Nano Lett, 2007, №76 p. 496–501
 10. . Musken O, Giannini V, Sánchez-Gil J, Rivas J, Strong enhancement of the radiative decay rate of emitters by single plasmonic Nanoantennas.// Nano Lett,2007, № 7,p.2871–2875
 11. P. Jeffrey Hay, Willard R. Wadt, Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for transitions metal atoms Sc to Hg.// Journal of chemical physics. 1985 №82. P. 270-283.
 12. B. Miehlich, A. Savin, H. Stoll, H. Preuss, Results obtained with the correlation energy density fucntionals of Becke and Lee, Yang, and Parr// J. Chem. Phys., 1989, 157. 3, 200
 13. Axel D. Becke, A new mixing of Hartree-Fock and local density functional theories// J. Chem. Phys., 1993, 98, 1372
 14. Artur Mantel, Nazerke Shautenbaeva, Irina Irgibaeva, Anuar Aldongarov, Albina Lang, Nikolay Barashkov, Iskander Mukatayev, Perylene Derivative Dyes Luminescence in Polysiloxane Matrixin Presence of Gold Nanoparticles// Journal of Flour., 2016,
 15. Buffa M, Carturan S, Debije MG, Quaranta A, Maggioni G, Dye-doped polysiloxane rubbers for luminescent solar concentrator systems. //Sol Energy Mater Sol Cells,2012, №103,p114–118.

ӘОЖ 541.128.094

БЕЙОРГАНИКАЛЫҚ ХИМИЯ ПӘНІ БОЙЫНША ДӘСТІРЛІ БІЛІМ БЕРУДІ МОДЕРНИЗАЦИЯЛАУДЫҢ ТИІМДІ ӘДІСТЕРІН ІЗДЕСТІРУ

Мұқатай Мұхит

Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық Университеті 1 курс магистранты, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекші - Дуйсембиев М.Ж., х.ғ.к., доцент

Оқыту әдістері – студенттердің танымдық әрекетін белсендіру әдістері мен құралдары, олардың шығармашылық әлеуетін дамыту теориясы. Оқыту үдерісіне қатысушылардың –оқытушы мен білім алушылардың әрекетіне, оқыту әдістерінің типтеріне, оқу материалының сипатына, студенттерді дамыту міндеттеріне негізделген оқыту әдістерінің типтері анықталды және т.б. Сондай-ақ, сабақты ұйымдастыру теориясы жасалды [1].

Қазіргі уақытта осы жетістіктер негізіінде дидактика жиырма бірінші ғасырдың оқыту жүйесінің мақсаттары мен міндеттерін нақты зерделеуде Осы тұрғыда жаңа технологияның тиімді әдіс – тәсілдерін, яғни Ф.Я.Вассерманның «Биоақпараттандыру және синергетика» (БиС) білім беру технологиясын, Ж.Караевтың “саралап, деңгейлеп оқыту технологиясы”, М.Жанпейсованың “Модульдік оқыту технологиясы”, СТО стратегияларының элементтерін пайдаланып, оқушының ізденушілік, зерттеушілік әрекетін жас ұрпақтың бойына сіңіре отырып, оқушылардың танымдық белсенділіктерін дамыту ұстаздардың басты міндеті болмақ Танымдық белсенділік дегеніміз – оқушының оқуға, білімге деген ынта – ықыласының, құштарлығының ерекше көрінісі. Мысалы: мұғалімнің баяндап тұрған материалын түсіну үшін, студенттердің оны зейін қойып тыңдауы, алған білімін кеңейтіп толықтыру үшін, өздігінен кітап оқуы, бақылау, тәжірибе жасау, жазу, сызу сияқты жұмыстар істеуі керек. Өйткені өтілген материалды саналы қайталауда, жаңадан білім алуда,