

ISSN (Print) 2616-6836
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

ХАБАРШЫСЫ

BULLETIN

of L.N. Gumilyov Eurasian
National University

ВЕСТНИК

Евразийского национального
университета имени Л.Н. Гумилева

ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Серия **ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

№4(129)/2019

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Нұр-Сұлтан, 2019

Nur-Sultan, 2019

Нур-Султан, 2019

Бас редакторы:
ф.-м.ғ.д., профессор
А.Т. Ақылбеков (Қазақстан)

Бас редактордың орынбасары

Гиниятова Ш.Г., ф.-м.ғ.к., доцент
(Қазақстан)

Редакция алқасы

Арынгазин А.Қ.	ф.-м.ғ. докторы(Қазақстан)
Алдонгаров А.А.	PhD (Қазақстан)
Балапанов М.Х.	ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
Бахтизин Р.З.	ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
Даулетбекова А.Қ.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Ержанов Қ.К.	ф.-м.ғ.к., PhD (Қазақстан)
Жұмаділов Қ.Ш.	PhD (Қазақстан)
Здоровец М.	ф.-м.ғ.к.(Қазақстан)
Қадыржанов Қ.К.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Кайнарбай А.Ж.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Кутербеков Қ.А.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Лущик А.Ч.	ф.-м.ғ.д., проф.(Эстония)
Морзабаев А.К.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Мырзақұлов Р.Қ.	ф.-м.ғ.д., проф.(Қазақстан)
Нұрахметов Т.Н.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Сауытбеков С.С.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Салиходжа Ж.М.	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
Тлеукенов С.К.	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
Усеинов А.Б.	PhD (Қазақстан)
Хоши М.	PhD, проф.(Жапония)

Редакцияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Сәтбаев к-сі, 2, 402 б.,
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті.
Тел.: +7(7172) 709-500 (ішкі 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Жауапты хатшы, компьютерде беттеген: А. Нұрболат

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.
ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

Меншіктенуші: ҚР БЖҒМ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" ШЖҚ РМК
Мерзімділігі: жылына 4 рет.

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігінде 27.03.2018ж.
№16999-ж тіркеу куәлігімен тіркелген.

Ашық қолданудағы электрондық нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz/>

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Қажымұқан к-сі, 12/1, 349 б.,
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. Тел.: +7(7172)709-500 (ішкі 31-428)

Editor-in-Chief

Doctor of Phys.-Math. Sciences, Professor
A.T. Akilbekov (Kazakhstan)

Deputy Editor-in-Chief

Giniyatova Sh.G., Candidate of Phys.-Math. Sciences,
Assoc. Prof. (Kazakhstan)

Editorial Board

Aryngazin A.K.	Doctor of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Aldongarov A.A.	PhD (Kazakhstan)
Balapanov M.Kh.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Russia)
Bakhtizin R.Z.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Russia)
Dauletbekova A.K.	Candidate of Phys.-Math. Sciences, PhD (Kazakhstan)
Hoshi M.	PhD, Prof. (Japan)
Kadyrzhanov K.K.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Kainarbay A.Zh.	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Kuterbekov K.A.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Lushchik A.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Estonia)
Morzabayev A.K.	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Myrzakulov R.K.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Nurakhmetov T.N.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Sautbekov S.S.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Salikhodzha Z. M	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Tleukenov S.K.	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Prof. (Kazakhstan)
Useinov A.B.	PhD (Kazakhstan)
Yerzhanov K.K.	Candidate of Phys.-Math. Sciences, PhD (Kazakhstan)
Zdorovets M.	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
Zhumadilov K.Sh.	PhD (Kazakhstan)

Editorial address: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2, Satpayev str., of. 402,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008
Tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Responsible secretary, computer layout: A.Nurbolat

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University.

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Owner: Republican State Enterprise in the capacity of economic conduct "L.N. Gumilyov Eurasian National University" Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan.

Registration certificate №16999-ж from 27.03.2018.

Available at: <http://bulphysast.enu.kz/>

Address of printing house: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 12/1 Kazhimukan str.,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008;

tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)

Главный редактор:
доктор ф.-м.н.
А.Т. Акилбеков, доктор ф.-м.н., профессор (Казахстан)

Зам. главного редактора

Ш.Г. Гиниятова к.ф.-м.н., доцент
(Казахстан)

Редакционная коллегия

Арынгазин А.К.	доктор ф.-м.н.(Казахстан)
Алдонгаров А.А.	PhD (Казахстан)
Балапанов М.Х.	д.ф.-м.н., проф. (Россия)
Бахтизин Р.З.	д.ф.-м.н., проф. (Россия)
Даулетбекова А.К.	д.ф.-м.н., PhD (Казахстан)
Ержанов К.К.	к.ф.-м.н., PhD (Казахстан)
Жумадилов К.Ш.	PhD (Казахстан)
Здоровец М.	к.ф.-м.н.(Казахстан)
Кадыржанов К.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Кайнарбай А.Ж.	к.ф.-м.н. (Казахстан)
Кутербеков К.А.	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Лущик А.Ч.	д.ф.-м.н., проф. (Эстония)
Морзабаев А.К.	д.ф.-м.н. (Казахстан)
Мырзакулов Р.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Нурахметов Т.Н.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Сауытбеков С.С.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Салиходжа Ж.М.	к.ф.-м.н. (Казахстан)
Тлеукунов С.К.	д.ф.-м.н., проф. (Казахстан)
Усеинов А.Б.	PhD (Казахстан)
Хоши М.	PhD, проф. (Япония)

Адрес редакции: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2, каб. 402, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.
Тел.: (7172) 709-500 (вн. 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Ответственный секретарь, компьютерная верстка: А. Нурболат

Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева.
Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

Собственник РГП на ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева" МОН РК
Периодичность: 4 раза в год

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16999-ж от 27.03.2018г.

Электронная версия в открытом доступе: <http://bulphysast.enu.kz/>

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Кажимукана, 12/1, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева. тел.: +7(7172)709-500 (вн. 31-428)

Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ХАБАРШЫСЫ. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

№4(129)/2019

МАЗМҰНЫ

<i>Ибраева А.Д., Янсе А. Вуурен Ван, Скуратов В.А., Здоровец М.В.</i> Кристалды Si ₃ N ₄ -те латентті тректердің пайда болу энергиясының ионизациялық жоғалтуының шекті деңгейін анықтау	8
<i>Алдонгаров А.А., Асылбекова А.М., Иргубаева И.С.</i> Кумарин бояғышымен байланысты CdS кластерлерінде электрондық ауысуларды есептеу	15
<i>Ермекова Ж.К., Алдонгаров А.А., Сағындықова Ғ.Е., Есманова С.С.</i> Педагогикалық мамандық студенттерінің сыни ойлауын дамыту	27
<i>Карипбаев Ж.Т., Абуова А.У., Алтысова Г.К., Сәрсенғалиева К.М., Байжолов К.А., Кукенова А.Б., Здоровец М.В.</i> Оттегі енгізілген ZnWO ₄ кристалдарының люминесценциясы	33
<i>Кабышев А.М., Кутербеков К.А., Мұхамбетжан А.М., Нуржанов А.Б., Уәлшерев Д.Т., Бекмырза К.Ж., Рахимғалиева И.Т., Сарсенов Р.М., Махамбаева И.У.</i> 8-217 МэВ энергиясы кезінде ²⁸ Si ядросында ³ He серпімді шашырауын зерттеу	42
<i>Мусаханов Д.А., Лисицын В.М., Карипбаев Ж.Т., Алтысова Г.К., Голковский М.Г., Даулетбекова А.К., Козловский А., Здоровец М.В.</i> Қуатты электронды ағынында синтезделген MgF ₂ -WO ₂ керамикасының құрылымы	51
<i>Каргин Д., Козловский А., Алтынов Е., Касымханов, А.Бисекен, Мухамбетов Д.</i> Болат илемдеу өндірісінің қосалқы өнімдер бөлшектерінің морфологиясы	59
<i>Мусатаева А.Б., Мырзакулов Н.А.</i> Камасс-Холм теңдеуі үшін беттің бірінші және екінші фундаменталды формасы	65
<i>Серикбаев Н.С., Нугманова Г.Н., Мырзакулов Р.</i> (2+1)-өлшемді Дэви-Стюартсон I теңдеуінің екікомпонентті жалпылануы I	73
<i>Ногай А.С., Кутербеков К.А., Ускенбаев Д.Е., Бекмырза К.Ж., Ногай А.А., Кабышев А.М.</i> Платинасыз катализаторлары бар нафион типті мембраналардағы жылу релаксациялық поляризациясының ерекшеліктері	80
<i>Нурсултанова Н.С., Жумадилов К.Ш.</i> Төмен доза әсер ету ықпалын бағалау мәселесі	86
<i>Шанина З.К.</i> Конно-Оно теңдеуінің дисперсиясыз шегі	93
<i>Шаханова Г.А.</i> Ақыл-ой карталарын оқу үдерісінде идеяларды қалыптастыру және құрылымдау әдісі ретінде қолдану	99
<i>Русақова А.В., Акилбеков А.Т., Жунусова М.К.</i> Нейтрондармен сәулеленген GaAs диэлектрлік қасиеттерін күйдіру	107

BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS.
ASTRONOMY SERIES

№4(129)/2019

CONTENTS

<i>Ibrayeva A.D., Janse A. Vuuren Van, Skuratov V.A., Zdorovets M.V.</i> About determination of the threshold ionization energy losses for the latent tracks formation in crystalline Si_3N_4	8
<i>Aldongarov A.A., Assilbekova A.M., Irgibaeva I.S.</i> Calculation of electronic transitions in CdS clusters associated with coumarin dye	15
<i>Ermekova Zh.K., Aldongarov A.A., Sagyndykova G.E., Esmanova S.S.</i> Development of critical thinking of students of pedagogical specialties	27
<i>Karipbaev Zh.T., Abuova A.U. Alpyssova G.K., Sarsengalieva K.M., Baozholov K.A., Kukenova A.B., Zdorovets M.V.</i> Luminescence of ZnWO_4 crystals with oxygen introduced	33
<i>Kabyshv A.M., Kuterbekov K.A., Mukhambetzhana A.M., Nurzhanov A.B., Ualsherov D.T., Bekmyrza K.Zh., Rakhimgaliyeva I.T., Sarsenov R.M., Makhambayeva .U.</i> Study of the elastic scattering of ^3He on the ^{28}Si nucleus at the energy of 8 -217 MeV	42
<i>Musahanov D., Lisitsyn V., Karipbaev Zh., Alpyssova G., Golkovskii M., Dauletbekova A., Kozlovskii A., Zdorovec M.</i> The structure of $\text{MgF}_2\text{-WO}_2$ ceramic synthesized in a powerful electron flow	51
<i>Kargin D., Kozlovskij A., Altynov E., Kasymhanov Zh., Biseken A., Muhambetov D.</i> Morphology of the particles of by-products of steel rolling production	59
<i>Mussatayeva A.B., Myrzakulov N.A.</i> The first and second fundamental forms for the Camassa-Holm equation	65
<i>Serikbayev N.S., Nugmanova G.N., Myrzakulov R.</i> On the Integrable Two-Component (2+1)-dimensional Davey-Stewartson Equation	73
<i>Nogay A.S., Kuterbekov K.A., Uskenbayev D.E., Bekmyrza K.Zh., Nogay A.A., Kabyshv A.M.</i> Features of thermal relaxation of polarization in the Nafion membranes with no platinum catalysts	80
<i>Nursultanova N., Zhumadilov K.</i> The problem of assessing the effects of low-dose exposure	86
<i>Shanina Z.K.</i> Dispersionless limit of the Konno-Oono equation	93
<i>Shakhanova G.A.</i> Mind maps as a method of generating and structuring ideas in the learning process	99
<i>Russakova A.V., Akilbekov A.T., Zhunusova M.K.</i> Annealing of dielectric properties of GaAs Crystals Irradiated by Neutrons	107

ВЕСТНИК ЕВРАЗИЙСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА
ИМЕНИ Л.Н.ГУМИЛЕВА. Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

№4(129)/2019

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Ибраева А.Д., Янсе А. Вуурен Ван., Скуратов В.А., Здоровец М.В.</i> К вопросу об определении порогового уровня ионизационных потерь энергии образования латентных треков в кристаллическом Si_3N_4	8
<i>Алдонгаров А.А., Асылбекова А.М., Иргибаетова И.С.</i> Расчет электронных переходов в кластерах CdS, связанных с кумариновым красителем	15
<i>Ермекова Ж.К., Алдонгаров А.А., Сагындыкова Г.Е., Есманова С.С.</i> Развитие критического мышления студентов педагогических специальностей	27
<i>Карипбаев Ж.Т., Абуова А.У., Алтысова Г.К., Сарсенгалиева К.М., Байжолов К.А., Кукенова А.Б., Здоровец М.В.</i> Люминесценция кристаллов ZnWO_4 с введенным кислородом	33
<i>Кабышев А.М., Кутербекоев К.А., Мухамбетжан А.М., Нуржанов А.Б., Уалшерев Д.Т., Бекмырза К.Ж., Рахимгалиева И.Т., Сарсенов Р.М., Махамбаева И.У.</i> Изучение упругого рассеяния ^3He на ядре ^{28}Si при энергии 8-217 МэВ	42
<i>Мусаханов Д.А., Лисицын В.М., Карипбаев Ж.Т., Алтысова Г.К., Голковский М.Г., Даулетбекова А.К., Козловский А., Здоровец М.В.</i> Структура керамики $\text{MgF}_2\text{-WO}_2$, синтезированной в мощном потоке электронов	51
<i>Каргин Д., Козловский А., Алтынов Е., Касымханов, А.Бисекен, Д.Мухамбетов</i> Морфология частиц побочных продуктов сталепрокатного производства	59
<i>Мусатаева А.Б., Мырзакулов Н.А.</i> Первая и вторая фундаментальные формы поверхности для уравнения Камасса-Холма	65
<i>Серикбаев Н.С., Нугманова Г.Н., Мырзакулов Р.</i> О двухкомпонентном обобщении (2+1)-мерного уравнения Дэви-Стюартсона I	73
<i>Ногай А.С., Кутербекоев К.А., Ускенбаев Д.Е., Бекмырза К.Ж., Ногай А.А., Кабышев А.М.</i> Особенности тепловой релаксационной поляризации в мембранах типа нафион с без платиновыми катализаторами	80
<i>Нурсултанова Н.С., Жумадилов К.Ш.</i> Проблема оценки последствий воздействия низкой дозы облучения	86
<i>Шанина З.К.</i> Бездисперсионный предел уравнения Конно-Оно	93
<i>Шаханова Г.А.</i> Интеллект-карты как метод генерации и структурирования идей в учебном процессе	99
<i>Русакова А.В., Акилбеков А.Т., Жунусова М.К.</i> Отжиг диэлектрических свойств GaAs, компенсированного облучением нейтронами	107

А.А. Алдонгаров¹, А.М. Асильбекова¹, И.С. Иргибаетова²

¹ Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

² ТОО "Центр исследования люминесцентных материалов", Нур-Султан, Казахстан

(E-mail: asylaliya@yandex.kz)

Расчет электронных переходов в кластерах CdS, связанных с кумариновым красителем

Аннотация: Комплексы нанокристаллических полупроводников с органическими молекулами красителей являются критическими компонентами двух основных типов солнечных элементов третьего поколения: сенсibilизированные красителем солнечные элементы и тонкопленочные ячейки нанокристалла. Эти устройства основываются на эффективном фотоиндуцированном переносе заряда через наноструктурированную органическую-неорганическую границу раздела. Для оценки энергии переноса заряда при фотовозбуждении были рассмотрены молекула кумарина 153 (C153) и его комплексы с кластерами квантовых точек $[C153-Cd_4S_4]^{6+}$ и $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$. Проведены расчет электронного спектра поглощения комплексов "квантовая точка - кумарин 153" методом время-зависимого функционала плотности TD DFT и анализ молекулярных орбиталей, участвующих в интенсивных переходах. Полученные данные показывают отсутствие интенсивных полос переноса заряда и появления длинноволновых полос, которые указывают на увеличение дипольного момента комплекса.

Ключевые слова: квантовые точки CdS, метод функционала плотности DFT, пассивирование, органические красители, молекулярные орбитали.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-68-36-2019-129-4-15-26>

Введение. Полупроводниковые нанокристаллы играют важную роль в разработке функциональных наноразмерных материалов и устройств. Синтез и исследование свойств таких нанокристаллов является важной темой в области материаловедения. Когда размер частиц полупроводника меньше 10 нм, диаметр экситона Бора и фотофизические свойства полупроводниковых частиц изменяются в зависимости от размера. Уменьшение размера частиц полупроводника приводит к увеличению на уровне энергии возбужденного состояния, так что спектр поглощения частиц смещается в синюю область электромагнитного спектра [1,2]. Эта особенность полупроводников открывает большое количество областей исследований. В качестве одного из важных полупроводниковых материалов группы II-VI нанокристаллы CdS получили значительный интерес исследователей из-за потенциальных применений в оптоэлектронных устройствах [3], солнечных батареях [4], биологической маркировке [5] и др.

В последние годы значительное улучшение квантового выхода было достигнуто путем оптимизации методов неорганической поверхностной пассивации [6]. В последние годы полупроводниковые КТ (квантовые точки) находятся в центре научных исследований [7,8] благодаря большим перспективам их применения в качестве новых неорганических люминесцентных зондов. Основными преимуществами использования квантовых точек в этом направлении являются их оптические и химические свойства, такие как высокая фотохимическая стабильность, перестраиваемая (зависящая от размера) фотолюминесценция, охватывающая весь видимый спектр, а также хороший квантовый выход флуоресценции [9-11]. В общем, полупроводниковые наночастицы с превосходными спектральными свойствами и фотохимической стабильностью могут потенциально использоваться в качестве флуоресцентных зондов для преодоления недостатков органических красителей. Однако квантовые точки могут быть цитотоксичными, поскольку они содержат Cd^{2+} , S^{2-} , или другие токсичные металлические ионы.

Квантовые точки CdS должны быть стабилизированы поверхностными лигандами, чтобы предотвратить их агрегацию в более крупные нерастворимые агломераты. За последние годы были исследованы несколько примеров с использованием органических красителей,

таких как родамин и кумарин, которые имеют широкий круг областей применения: от медицины до химии полимеров. Однако в большинстве случаев основное внимание уделялось взаимодействию органического поверхностного лиганда с внешней средой, а не с самим нанокристаллом. Кроме того, в комплексах подобных полупроводниковых наночастиц с органическими молекулами может наблюдаться перенос заряда между ними при фотовозбуждении. Такие системы, проявляющие перенос заряда при фотовозбуждении, могут использоваться при создании фотоэлектрических преобразователей, таких, например, как солнечные элементы [12-16]. Однако почти не проводились обширные теоретические исследования этого процесса. Таким образом, нам интересно исследовать влияние кумарина на оптические свойства наноразмерных кластеров CdS.

Теоретические и вычислительные данные. В предыдущем исследовании [17] мы рассмотрели перенос энергии возбуждения в комплексах родаминового красителя и кластерах CdS. Было показано, что в комплексах красителя $[RhB]^+$ с кластерами сульфида кадмия возможно наблюдение интенсивных полос переноса заряда.

В этой статье мы будем исследовать квантовые точки CdS с другим типом красителей. Широко распространенный вид красителей помимо родаминовых - кумариновые красители. Следует заметить, что эти красители также могут иметь атомы кислорода с двойной связью в своем составе, что может способствовать их связыванию на поверхности CdS КТ. Поэтому для рассмотрения была взята молекула кумарина 153.

Во всех расчетах использовался программный пакет Gaussian09W [18], установленный на высокопроизводительном кластере Национальной научной лаборатории коллективного пользования информационных и космических технологий КазНИТУ им. К.И. Сатпаева. Для исследования комплексов квантовых точек CdS с красителем кумарина использовался *ab initio* метод. Расчеты из первых принципов проводились в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием функционала B3LYP и стандартным базисным набором 6-31G(d) для оптимизации структуры молекулы C153, а расчет электронного спектра и дипольного момента для построенных структур проводился время-зависимым методом функционала плотности TD DFT [19-21] с использованием функционала с дальнедействующей поправкой LC-wPBE [22-25], так как нами ранее было показано, что его использование позволяет более или менее точно определять энергии электронных переходов [26]. Для описания атомных орбиталей кадмия использовался эффективный остоновый потенциал LanL2 с базисным набором DZ [27], для серы и кислорода базисный набор 6-31G(d), а для водорода 3-21G. Расчет заряда кластеров проводился по формуле $q = 2 * (g - j) - k$ для кластера $[Cd_g S_j (X)_k]^q$, где X = SH согласно методике, предложенной Френзелем и соавторами [28]. Визуализация спектров поглощения проводилась с помощью программного пакета GaussView 5.0 при заданной полуширине на половине высоты 0,33 эВ с использованием гауссовой кривой.

1 Расчет структуры и электронного спектра молекулы кумарин 153

Оптимизированная структура молекулы С153 представлена на рисунке 1.

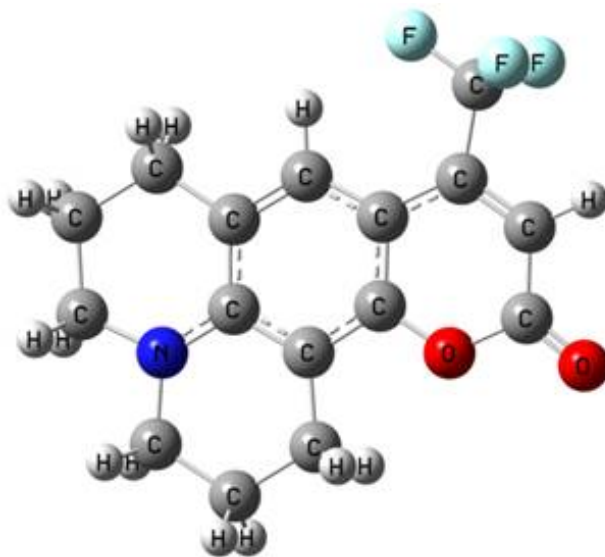


Рисунок 1 – Оптимизированная структура молекулы С153

Для полученной оптимизированной структуры проводился расчет электронного спектра методом время-зависимого функционала плотности TD DFT в приближении LC-wPBE (рисунок 2). Данные по рассчитанным интенсивным переходам С153 представлены в таблице 1. Видно, что первый интенсивный переход расположен на длине волны 421 нм, при этом переходы в длинноволновой области, включая полосы малой интенсивности, для молекулы С153 отсутствуют. Положение этого пика хорошо согласуется с экспериментальными данными [29].

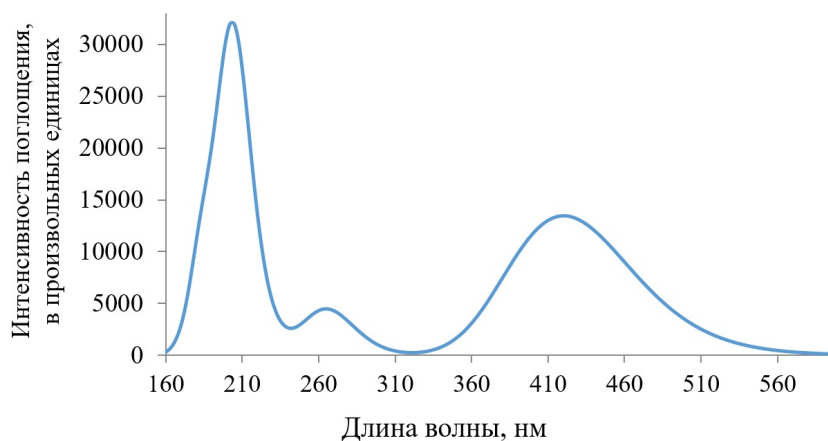


Рисунок 2 – Рассчитанный спектр поглощения молекулы С153

Таблица 1 – Рассчитанные интенсивные переходы молекулы C153

Номер возбужденного состояния	МО	Длина волны, нм	Сила осциллятора, f
1	80 -> 81	421	0,3304
9	76 -> 81	213	0,1446
10	79 -> 82	205	0,2985
12	79 -> 83	202	0,3618

На рисунке 3 показаны визуализированные МО (молекулярная орбиталь) образующие интенсивные переходы молекулы C153. Данные МО имеют высокую степень делокализации и образованы за счет π орбиталей молекулы (НОМО - наивысшая занятая молекулярная орбиталь, LUMO - нижайшая свободная молекулярная орбиталь).

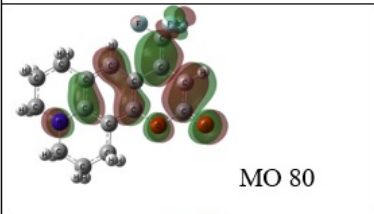
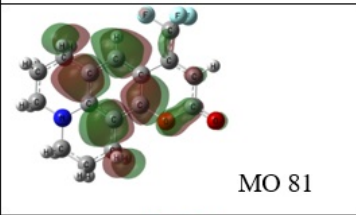
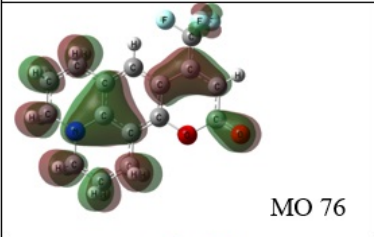
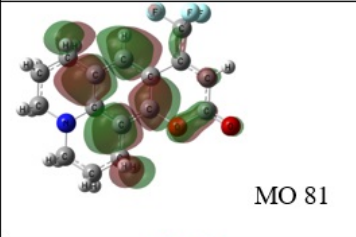
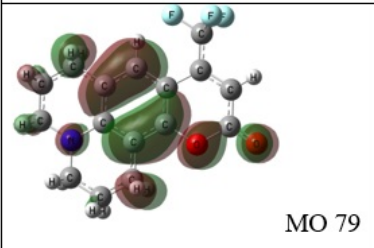
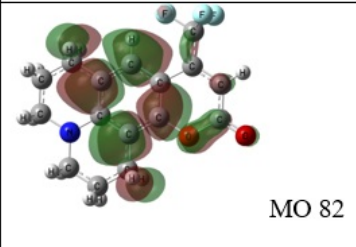
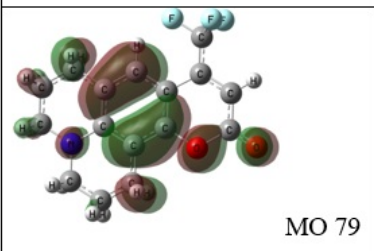
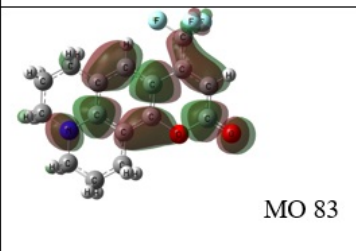
Занятая МО	λ (f)	Свободная МО
 МО 80	421 нм (0,3304)	 МО 81
 МО 76	213 нм (0,1446)	 МО 81
 МО 79	205 нм (0,2985)	 МО 82
 МО 79	202 нм (0,3618)	 МО 83

Рисунок 3 – МО, участвующие в интенсивных переходах молекулы C153 (НОМО и LUMO имеют номера 80 и 81)

2 Расчет структуры и электронного спектра кластеров $[Cd_4S_1]^{6+}$ и $[Cd_{13}S_4]^{18+}$.

Были рассмотрены гексагональные кластеры $[Cd_4S_1]^{6+}$ и $[Cd_{13}S_4]^{18+}$, представленные на рисунке 4 и построенные по известным экспериментальным данным о структуре [30,31]. Следует заметить, что объемные кристаллы и нано-кристаллы сульфида кадмия обладают очень близкими структурными параметрами кристаллической ячейки согласно известным экспериментальным данным [29,30]. Оптимизация кластеров не проводилась, так как для сохранения гексагональной структуры требуется искусственное наложение условия периодичности, либо использование кластеров чрезвычайно больших для расчетов размеров.

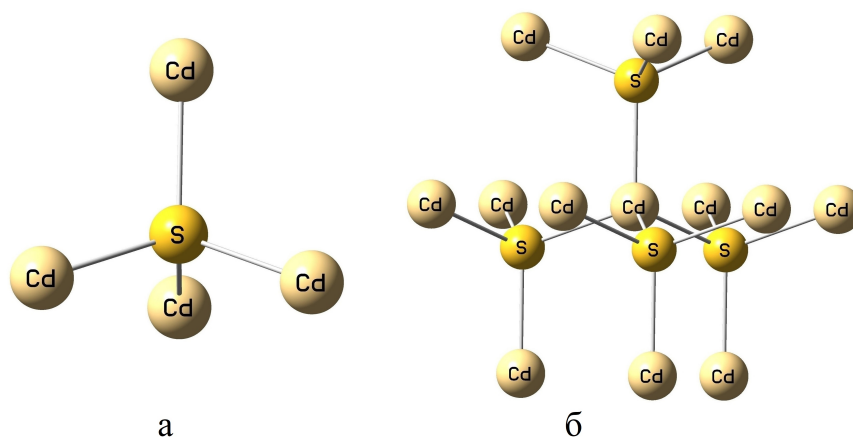


Рисунок 4 – Структуры кластеров $[Cd_4 S_1]^{6+}$ (а) и $[Cd_{13} S_4]^{18+}$ (б)

Для этих структур проводился расчет электронного спектра методом TD DFT в приближении LC-wPBE (рисунок 5). Данные по рассчитанным интенсивным переходам кластеров $[Cd_4 S_1]^{6+}$ и $[Cd_{13} S_4]^{18+}$ представлены в таблицах 2 и 3, соответственно. Формы спектров, представленных на этих рисунках, в целом воспроизводят формы спектров поглощения, характерные для КТ CdS. Следует заметить, что для кластеров $[Cd_4 S_1]^{6+}$ и $[Cd_{13} S_4]^{18+}$ вследствие наличия симметрии интенсивные переходы трехкратно вырождены, что согласуется с данными [28,32] для гексагональной структуры.

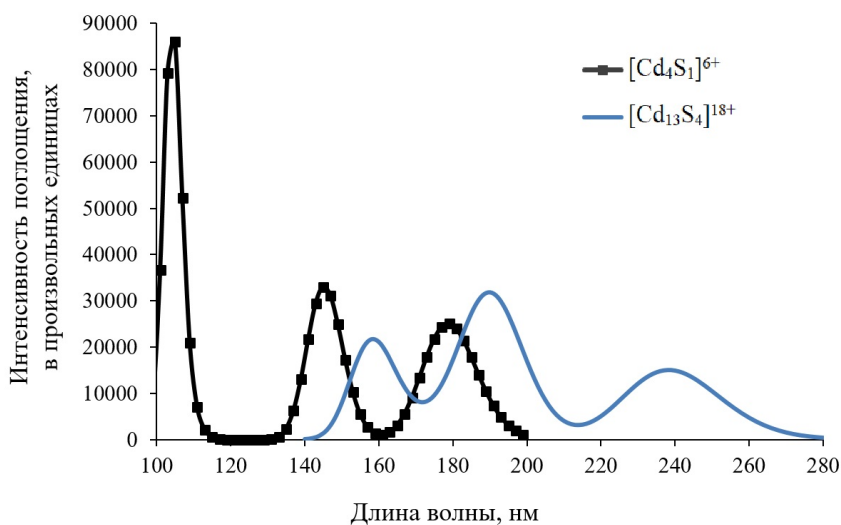


Рисунок 5 – Рассчитанный спектр поглощения кластеров $[Cd_4 S_1]^{6+}$ и $[Cd_{13} S_4]^{18+}$

Таблица 2 – Рассчитанные интенсивные переходы кластера $[\text{Cd}_4\text{S}_1]^{6+}$

Номер возбужденного состояния	МО	Длина волны, нм	Сила осциллятора, f
1	29 -> 30	179	0,2064*3
2	28 -> 30		
3	27 -> 30		
9	28 -> 31	145	0,2722*3
10	27 -> 31		
11	28 -> 33		
24	27 -> 34	104	0,7322*3
25	29 -> 35		
26	28 -> 35		

Таблица 3 – Рассчитанные интенсивные переходы кластера $[\text{Cd}_{13}\text{S}_4]^{18+}$

Номер возбужденного состояния	МО	Длина волны, нм	Сила осциллятора, f
1	100 -> 102	239	0,1196*2
2	99 -> 102		
3	101 -> 102	236	0,1345
10	93 -> 102	191	0,2194*2
11	92 -> 102		
14	91 -> 102	188	0,2591
33	100 -> 106	157	0,1121*3
34	99 -> 106		
35	91 -> 102		

По результатам расчетов для структур $[\text{Cd}_4\text{S}_1]^{6+}$ и $[\text{Cd}_{13}\text{S}_4]^{18+}$ длинноволновые переходы не наблюдаются, также значения дипольного момента для структур $[\text{Cd}_4\text{S}_1]^{6+}$ и $[\text{Cd}_{13}\text{S}_4]^{18+}$ близки к нулю (0,0002 Дб и 0,5098 Дб соответственно), что указывает на отсутствие глубоко лежащих локализованных состояний. Анализ расположения граничных молекулярных орбиталей указывает на равномерное распределение электронной плотности по всей структуре кластера, что также указывает на отсутствие локализованных состояний.

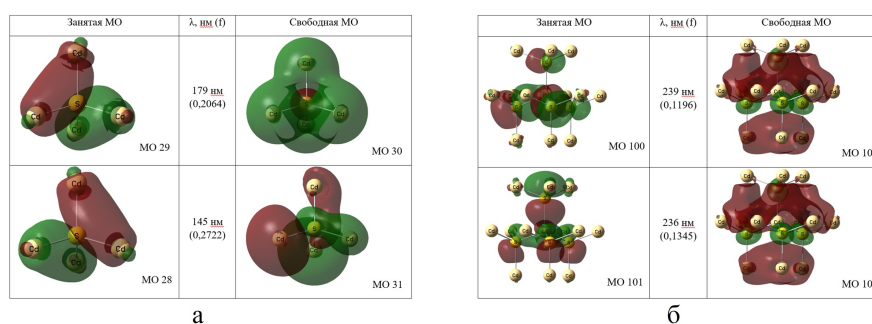


Рисунок 6 – МО, участвующие в интенсивных переходах кластеров: а) $[\text{Cd}_4\text{S}_1]^{6+}$ (НОМО и LUMO имеют номера 29 и 30); б) $[\text{Cd}_{13}\text{S}_4]^{18+}$ (НОМО и LUMO имеют номера 101 и 102).

3 Расчет электронных переходов в комплексах $[C153-Cd_4S_1]^{6+}$ и $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$

В соответствии с экспериментальными данными краситель связывается с поверхностью сульфида кадмия через образование связи между атомом кислорода красителя и ионом Cd поверхности сульфида кадмия, и расстояние этой связи составляет 2,3 Å [33]. На основании этих данных нами были построены комплексы $[C153-Cd_4S_1]^{6+}$ и $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$, где атом кадмия координировал с кислородом карбонильной группы на расстоянии 2,3 Å (рисунок 7), при этом использовалась оптимизированная структура молекулы C153.

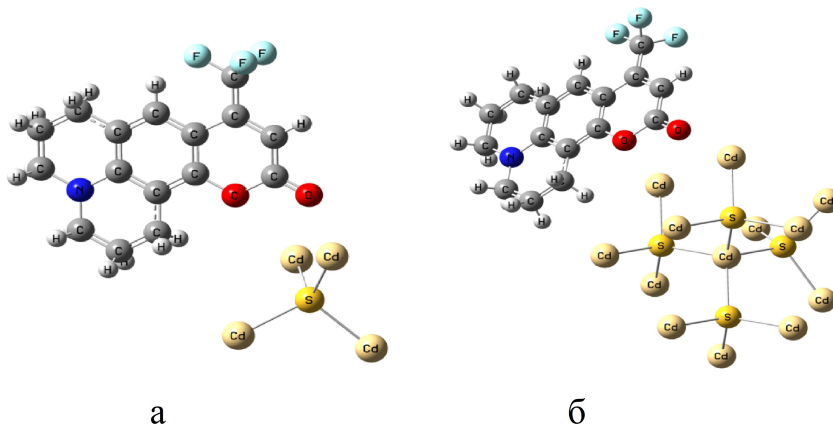


Рисунок 7 – Структура комплексов $[C153-Cd_4S_1]^{6+}$ и $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$

Для данных структур методом TD DFT производился расчет электронного спектра, данные которого представлены в таблицах 4, 5 и на рисунке 8.

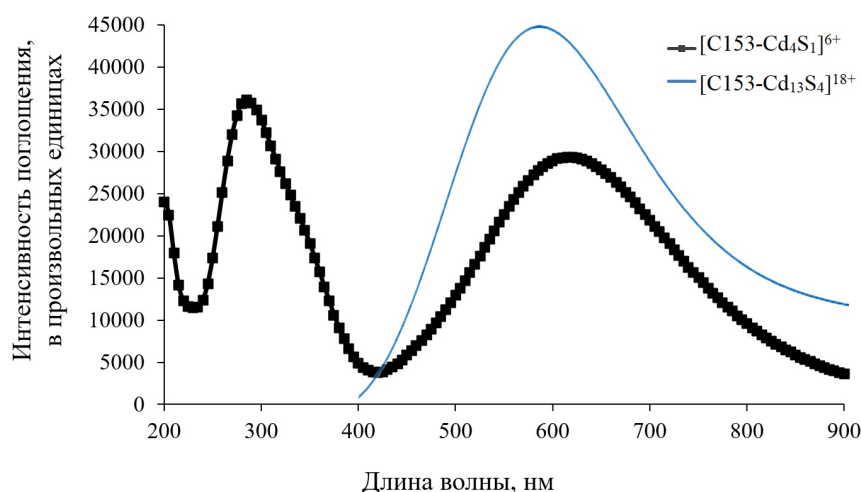
Таблица 4 – Рассчитанные интенсивные переходы комплекса $[C153-Cd_4S_1]^{6+}$

Номер возбужденного состояния	МО	Длина волны, нм	Сила осциллятора, f
2	109 -> 111	662	0,2131
4	109 -> 112	625	0,2433
5	109 -> 113	593	0,2698
7	107 -> 110	485	0,1418
9	102 -> 110	349	0,3263
13	109 -> 115	311	0,2272

Таблица 5 – Рассчитанные интенсивные переходы комплекса $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$

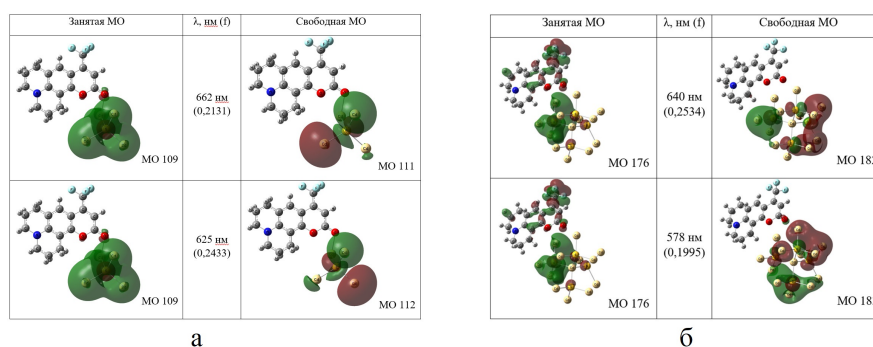
Номер возбужденного состояния	МО	Длина волны, нм	Сила осциллятора, f
21	176 -> 182	640	0,2534
25	176 -> 183	578	0,1995
28	179 -> 188	564	0,1740

По данным расчетов для комплекса $[C153-Cd_4S_1]^{6+}$ в длинноволновой области спектра поглощения присутствуют интенсивные переходы на длинах волн 662, 625 и 593 нм (таблица 4), формирующие широкую полосу с максимумом около 600 нм (рисунок 7), причем данные переходы не наблюдаются в рассчитанных спектрах как самого красителя, так и кластера $[Cd_4S_1]^{6+}$. Наличие этих длинноволновых переходов в кластере $[Cd_4S_1]^{6+}$ по видимому обусловлено значительным увеличением дипольного момента системы от 1 Дб до 17 Дб при добавлении красителя. Анализ МО этих переходов указывает на то, что они связаны с кластером сульфида кадмия. Интенсивная полоса поглощения самого красителя кумарин

Рисунок 8 – Рассчитанный электронный спектр комплексов $[C153-Cd_4S_1]^{6+}$ и $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$

153 испытывает батохромный сдвиг с 421 нм для самого красителя на 485 нм в комплексе с кластером $[Cd_4S_1]^{6+}$. Следующий интенсивный переход на длине волны 349 нм также связан с возбуждением электронов красителя. При этом интенсивных переходов, связанных с переносом электрона между молекулой красителя и кластером сульфида кадмия, не обнаружено в рассчитанном спектре.

Согласно результатам расчета в длинноволновой области комплекса $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$ наблюдается множество малоинтенсивных переходов, которые не характерны для изолированной молекулы C153 или кластера $[Cd_{13}S_4]^{18+}$. Значительное число переходов малой интенсивности в спектре поглощения комплекса $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$ можно объяснить значительным увеличением дипольного момента системы - 45 Дб, тогда как для кластера $[Cd_{13}S_4]^{18+}$ эта величина составляет около 1 Дб и для C153 8,65 Дб. Среди интенсивных переходов можно выделить переходы на длинах волн 640 и 578 нм, которые связаны с частичным переносом электронной плотности с красителя на кластер сульфида кадмия $[Cd_{13}S_4]^{18+}$, а точнее, вакантные МО локализованы на атомах серы согласно анализу МО (рисунок 10). Стоит заметить, что подобные переходы были предсказаны и для комплекса $[RhB-Cd_{13}S_4]^{19+}$ [17], что возможно подтверждает предположение о том, что этот факт связан с избыточным положительным зарядом на кластере сульфида кадмия. Другой интенсивный переход связан с возбуждением исключительно электронов кластера $[Cd_{13}S_4]^{18+}$.

Рисунок 9 – МО связанные с интенсивными переходами с переносом электрона с C153 на кластеры $[Cd_4S_1]^{6+}$ и $[Cd_{13}S_4]^{18+}$ в комплексах: а) $[C153-Cd_4S_1]^{6+}$ (НОМО и LUMO имеют номера 109 и 110); б) $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$ (НОМО и LUMO имеют номера 181 и 182).

Заключение. Согласно полученным результатам можно сделать следующие выводы.

Для комплексов кумарина 153 с кластерами CdS интенсивных полос переноса заряда с сульфида кадмия на молекулу красителя не наблюдается. Только в случае комплекса $[C153-Cd_{13}S_4]^{18+}$ возможно осуществление смещения электронной плотности с красителя на CdS кластер.

Для всех рассмотренных комплексов красителей с кластерами CdS наблюдается появление новых полос в длинноволновой области спектра, причем значительная часть из них имеет низкую интенсивность. Данное обстоятельство можно объяснить значительным увеличением дипольного момента системы при образовании комплексов.

Список литературы

- 1 Yoffe A.D. Semiconductor quantum dots and related systems: Electronic, optical, luminescence and related properties of low dimensional systems // *Adv. Phys.* - 2001. - Vol. 50. - P. 1-208.
- 2 Schmid G. Ed. Nanoparticles. From Theory to Application. - Weinheim: Wiley-VCH, 2004. - 434 p.
- 3 Orlova A.O., Martynenko I.V., Maslov V.G., Fedorov A.V., Gun'ko Yu. K., Baranov A.V. Investigation of Complexes of CdTe Quantum Dots with the AlOH-Sulphophthalocyanine Molecules in Aqueous Media // *J. Phys. Chem. C.* - 2013. - Vol. 117 (44). - P. 23425-23431.
- 4 Liu L., Xu X., Luo T. Liu Y., Yang Zh., Lei J. Metal enhanced photoluminescence of near-infrared CdTeSe_{1-x} quantum dots // *Solid State Communications.* - 2012. - Vol. 152. - P. 1103-1107.
- 5 Wu W., Qu W., Ye H-A., Zheng Zh., Yang Y. Photoluminescent spectroscopic and kinetic studies on green-emitting CdSeS quantum dot/polymethyl methacrylate composite // *Journal of Non-Crystalline Solids.* - 2010. - Vol. 356. - P. 1016-1020.
- 6 Sarkar S., Makhil A., Lakshman K., Bora T., Dutta J., Pal S.K. Dual-Sensitization via Electron and Energy Harvesting in CdTe Quantum Dots Decorated ZnO Nanorod-Based Dye-Sensitized Solar Cells // *J. Phys. Chem. C.* - 2012. - Vol. 116 (27). - P. 14248-14256.
- 7 Gur I., Fromer N. A., Geier M. L., Alivisatos A. P. Air-Stable All-Inorganic Nanocrystal Solar Cells Processed from Solution // *Science.* - 2005. - Vol. 310. - P. 462-465.
- 8 Alivisatos A. Perspectives on the Physical Chemistry of Semiconductor Nanocrystals // *J. Phys. Chem.* - 1996. - Vol. 100. - P. 13226-13239.
- 9 Eychmuller A. Structure and Photophysics of Semiconductor Nanocrystals // *J. Phys. Chem. B.* - 2000. - Vol. 104. - P. 6514-6528.
- 10 Halivni Sh., Sitt A., Hadar I., Banin U. Effect of Nanoparticle Dimensionality on Fluorescence Resonance Energy Transfer in Nanoparticle Dye Conjugated Systems // *ACS Nano.* - 2012. - Vol. 6 (3). - P. 2758-2765.
- 11 Xiong Sh., Xi B., Qian Y. CdS Hierarchical Nanostructures with Tunable Morphologies: Preparation and Photocatalytic Properties // *J. Phys. Chem. C.* - 2010. - Vol. 114. - P. 14029-14035.
- 12 Baride A., Engebretson D., Berry T.M., May P.S. Quenching of coumarin emission by CdSe and CdSe/ZnS quantum dots: Implications for fluorescence reporting // *Journal of Luminescence.* - 2013. - Vol. 141. - P. 99-105.
- 13 Elangovan R., Venkatachalam P. Co-sensitization Promoted Light Harvesting for Dye-Sensitized Solar Cells // *J. Inorg. Organomet. Polym.* - 2015. - Vol. 25(4). - P. 823-831.
- 14 El-Kemary M., Gaber M., El-Sayed Y.S., Gheat Y. Photoinduced interaction of CdSe quantum dot with coumarins // *Journal of Luminescence.* - 2015. - Vol. 159. - P. 26-31.
- 15 Jain K., Kaniyankandy S., Kishor S., Josefsson I., Ghosh H.N., Singh K.S., Mookerjee S., Odelius M., Ramaniah L.M. Density functional investigation and some optical experiments on dye-sensitized quantum dots // *Phys. Chem. Chem. Phys.* - 2015. - Vol. 17. - P. 28683-28696.
- 16 Wijnmans M., Rosenthal J.S., Zwanenburg B., Porter A.N. Visible Light Excitation of CdSe Nanocrystals Triggers the Release of Coumarin from Cinnamate Surface Ligands // *J. Am. Chem. Soc.* - 2006. - Vol. 128 (35). - P. 11720-11726.
- 17 Алдонгаров А.А., Асильбекова А.М., Иргибаява И.С., Ермакова Ж.К. Определение природы электронных переходов в комплексах родаминового красителя и кластерах CdS // *Вестник ЕНУ им. Л.Н.Гумилева. Серия Физика. Астрономия.* - 2018. - №1 (122) - С. 19-27.
- 18 Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., et al Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010. <http://gaussian.com/>
- 19 Bauernschmitt R., Ahlrichs R. Treatment of electronic excitations within the adiabatic approximation of time dependent density functional theory // *Chem. Phys. Lett.* - 1996. - Vol. 256. - P. 454-464.
- 20 Stratmann R.E., Scuseria G.E., Frisch M.J. Theoretical Study on Reactions of Triplet Excited State Thioxanthone with Indole // *J. Chem. Phys.* - 1998. - Vol. 109. - P. 8218-8224
- 21 Furche F., Ahlrichs R. An improved method for density functional calculations of the frequency-dependent optical rotation // *J. Chem. Phys.* - 2002. - Vol. 117. - P.7433-7447.
- 22 Tawada Y., Tsuneda T., Yanagisawa S., Yanai T., Hirao K. A long-range-corrected time-dependent density functional theory // *J. Chem. Phys.* - 2004. - Vol. 120. - P. 8425-8433.
- 23 Vydrov O.A., Scuseria G.E. Assessment of a long-range corrected hybrid functional // *J. Chem. Phys.* - 2006. - Vol. 125. - P. 234109(8).

- 24 Vydrov O.A., Heyd J., Krukau A., Scuseria G.E. Importance of short-range versus long-range Hartree-Fock exchange for the performance of hybrid density functionals // *J. Chem. Phys.* - 2006. - Vol. 125. - P. 074106(6).
- 25 Vydrov O.A., Scuseria G.E., Perdew J.P. Tests of functionals for systems with fractional electron number // *J. Chem. Phys.* - 2007. - Vol. 126. - P. 154109(7).
- 26 Aldongarov A., Irgibaeva I., Hermansson H., Agren H. Theoretical study on passivation of small CdS clusters // *Molecular Physics.* - 2014. - Vol. 112(5,6). - P. 674-682.
- 27 Hay P.J., Wadt W.R. Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for the transition metal atoms Sc to Hg // *J. Chem. Phys.* - 1985. - Vol. 82. - P. 270-283.
- 28 Frenzel J., Joswig J.-O., Seifert G. Optical Excitations in Cadmium Sulfide Nanoparticles // *J. Phys. Chem. C.* - 2007. - Vol. 111. - P. 10761-10770.
- 29 Kim D., Sambasivan S., Nam H., Kim K.H., Kim J.Y., Joo T., Lee K.H., Kim K.T., Ahn K.H. Reaction-based two-photon probes for in vitro analysis and cellular imaging of monoamine oxidase activity // *Chem. Commun.* - 2012. - Vol. 48. - P. 6834-6840.
- 30 Rockenberger J., Troger L., Kornowski, A., Vossmeier T., Eychmuller A., Feldhaus J., Weller H. EXAFS Studies on the Size Dependence of Structural and Dynamic Properties of CdS Nanoparticles // *J. Phys. Chem. B* - 1997. - Vol. 101. - P. 2691-2701.
- 31 Banerjee R., Jayakrishnan R., Ayyub P. Effect of the Size-Induced Structural Transformation on the Band Gap in CdS Nanoparticles // *J. Phys.: Condens. Matter* - 2000. - Vol. 12. - P. 10647-10654.
- 32 Joswig J.-O., Seifert G., Niehaus T., Springborg, M. Optical Properties of Cadmium Sulfide Clusters // *J. Phys. Chem. B* - 2003. - Vol. 107. - P. 2897-2902.
- 33 Jang E., Jun Sh., Chung Y., Pu L. Surface Treatment to Enhance the Quantum Efficiency of Semiconductor Nanocrystals // *J. Phys. Chem. B.* - 2004. - Vol. 108. - P. 4597-4600.

А.А. Алдонгаров¹, А.М. Асильбекова¹, И.С. Иргibaева²

¹ Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

² "Люминесцентті материалдарды зерттеу орталығы" ЖШС, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Кумарин бояғышымен байланысты CdS кластерлерінде электрондық ауысуларды есептеу

Аңдатпа: Органикалық бояғыш молекулалары бар нанокристалдық жартылай өткізгіштер кешендері үшінші буын күн элементтерінің екі негізгі түрінің маңызды компоненттері болып табылады: бояғышпен сенсублизацияланған күн элементтері және нанокристалдың жұқа пленкалы ұяшықтары. Бұл құрылғылар наноқұрылымды органикалық-бейорганикалық интерфейс шекарасы арқылы тиімді фотоиндуцирленген заряд тасымалдауға негізделген. Фотоқозу кезінде заряд тасымалын бағалау үшін кумарин 153 (C153) молекуласы және оның кванттық нүкте кластерлерімен комплекстері $[C153-Cd_4 S_1]^{6+}$ және $[C153-Cd_{13} S_4]^{18+}$ қарастырылды. Кванттық нүкте - кумарин 153 кешендерінің электрондық жұту спектрін есептеу және қарқынды ауысуларға қатысқан молекулалық орбитальдарды талдау TD DFT уақытқа тәуелді тығыздық функционал әдісімен жүргізілді. Алынған деректер заряд тасымалының қарқынды жолақтарының жоқтығын және ұзын толқынды жолақтарының пайда болуын көрсетеді, бұл өз кезегінде кешеннің дипольдық моментінің жоғарылауына алып келеді.

Түйін сөздер: CdS кванттық нүктелері, DFT тығыздық функционал әдісі, пассивтеу, органикалық бояғыштар, молекулалық орбитальдар.

А.А. Aldongarov¹, А.М. Assilbekova¹, I.S. Irgibaeva²

¹ L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

² LLP "Center for research of luminescent materials", Nur-Sultan, Kazakhstan

Calculation of electronic transitions in CdS clusters associated with coumarin dye

Abstract: Complexes of nanocrystalline semiconductors with organic dye molecules are critical components of two main types of third-generation solar cells: dye-sensitized solar cells and thin-film cells of a nanocrystal. These devices rely on efficient photo-induced charge transfer across the nanostructured organic-inorganic interface. To estimate the charge transfer during photoexcitations, the coumarin 153 (C153) molecule and its complexes with the $[C153-Cd_4 S_1]^{6+}$ and $[C153-Cd_{13} S_4]^{18+}$ quantum dot clusters were considered. The electronic absorption spectrum of the quantum dot - coumarin 153 complexes was calculated by the time-dependent density functional TD DFT and the analysis of molecular orbitals involved in intense transitions was performed. The data obtained show the absence of intense charge transfer bands and the appearance of long wavelength bands, which indicate an increase in the dipole moment of the complex.

Keywords: Quantum dots, CdS, DFT density functional method, passivation, organic dyes, molecular orbitals.

References

- 1 Yoffe A.D. Semiconductor quantum dots and related systems: Electronic, optical, luminescence and related properties of low dimensional systems, *Adv. Phys.* **50**, 1-208 (2001).
- 2 Schmid G. Ed. Nanoparticles. From Theory to Application, Weinheim: Wiley-VCH, 434 (2004).

- 3 Orlova A.O., Martynenko I.V., Maslov V.G., Fedorov A.V., Gun'ko Yu. K., Baranov A.V. Investigation of Complexes of CdTe Quantum Dots with the AlOH-Sulphophthalocyanine Molecules in Aqueous Media, *J. Phys. Chem. C.*, **117** (44), 23425-23431 (2013).
- 4 Liu L., Xu X., Luo T. Liu Y., Yang Zh., Lei J. Metal enhanced photoluminescence of near-infrared CdTexSe1-x quantum dots, *Solid State Communications*, **152**, 1103-1107 (2012).
- 5 Wu W., Qu W., Ye H-A., Zheng Zh., Yang Y. Photoluminescent spectroscopic and kinetic studies on green-emitting CdSeS quantum dot/polymethyl methacrylate composite // *Journal of Non-Crystalline Solids*, **356**, 1016-1020 (2010).
- 6 Sarkar S., Makhil A., Lakshman K., Bora T., Dutta J., Pal S.K. Dual-Sensitization via Electron and Energy Harvesting in CdTe Quantum Dots Decorated ZnO Nanorod-Based Dye-Sensitized Solar Cells, *J. Phys. Chem. C.*, **116** (27), 14248-14256 (2012).
- 7 Gur I., Fromer N. A., Geier M. L., Alivisatos A. P. Air-Stable All-Inorganic Nanocrystal Solar Cells Processed from Solution, *Science*. **310**, 462-465 (2005).
- 8 Alivisatos A. Perspectives on the Physical Chemistry of Semiconductor Nanocrystals, *J. Phys. Chem.*, **100**, 13226-13239 (1996).
- 9 Eychmuller A. Structure and Photophysics of Semiconductor Nanocrystals, *J. Phys. Chem. B.*, **104**, 6514-6528 (2000).
- 10 Halivni Sh., Sitt A., Hadar I., Banin U. Effect of Nanoparticle Dimensionality on Fluorescence Resonance Energy Transfer in Nanoparticle Dye Conjugated Systems, *ACS Nano.*, **6** (3), 2758-2765 (2012).
- 11 Xiong Sh., Xi B., Qian Y. CdS Hierarchical Nanostructures with Tunable Morphologies: Preparation and Photocatalytic Properties, *J. Phys. Chem. C.*, **114**, 14029-14035 (2010).
- 12 Baride A., Engebretson D., Berry T.M., May P.S. Quenching of coumarin emission by CdSe and CdSe/ZnS quantum dots: Implications for fluorescence reporting, *Journal of Luminescence*, **141**, 99-105 (2013).
- 13 Elangovan R., Venkatachalam P. Co-sensitization Promoted Light Harvesting for Dye-Sensitized Solar Cells, *J. Inorg. Organomet. Polym.*, **25** (4), 823-831 (2015).
- 14 El-Kemary M., Gaber M., El-Sayed Y.S., Gheat Y. Photoinduced interaction of CdSe quantum dot with coumarins, *Journal of Luminescence*, **159**, 26-31 (2015).
- 15 Jain K., Kaniyankandy S., Kishor S., Joseffson I., Ghosh H.N., Singh K.S., Mookerjee S., Odelius M., Ramaniah L.M. Density functional investigation and some optical experiments on dye-sensitized quantum dots, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **17**, 28683-28696 (2015).
- 16 Wijnmans M., Rosenthal J.S., Zwanenburg B., Porter A.N. Visible Light Excitation of CdSe Nanocrystals Triggers the Release of Coumarin from Cinnamate Surface Ligands, *J. Am. Chem. Soc.*, **128** (35), 11720-11726 (2006).
- 17 Aldongarov A.A., Assilbekova A.M., Irgibaeva I.S., Ermekova Zh.K. Opredeleniye prirody elektronnykh perekhodov v kompleksakh rodaminovogo krasitelya i klasterakh CdS [Determination of the nature of electronic transitions in the complexes of rhodamine dye and CdS clusters], *Vestnik ENU im. L.N. Gumileva. Seriya Fizika. Astronomiya.* [Bulletin of L.N. Gumilyov ENU. Physics. Astronomy series], **1** (122), 19-27 (2018). [in Russian].
- 18 Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G.A., et al Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010. <http://gaussian.com/>
- 19 Bauernschmitt R., Ahlrichs R. Treatment of electronic excitations within the adiabatic approximation of time dependent density functional theory, *Chem. Phys. Lett.*, **256**, 454-464 (1996).
- 20 Stratmann R.E., Scuseria G.E., Frisch M.J. Theoretical Study on Reactions of Triplet Excited State Thioxanthone with Indole, *J. Chem. Phys.*, **109**, 8218-8224 (1998).
- 21 Furche F., Ahlrichs R. An improved method for density functional calculations of the frequency-dependent optical rotation, *J. Chem. Phys.*, **117**, 7433-7447 (2002).
- 22 Tawada Y., Tsuneda T., Yanagisawa S., Yanai T., Hirao K. A long-range-corrected time-dependent density functional theory, *J. Chem. Phys.*, **120**, 8425-8433 (2004).
- 23 Vydrov O.A., Scuseria G.E. Assessment of a long-range corrected hybrid functional, *J. Chem. Phys.*, **125**, 234109(8) (2006).
- 24 Vydrov O.A., Heyd J., Krukau A., Scuseria G.E. Importance of short-range versus long-range Hartree-Fock exchange for the performance of hybrid density functionals, *J. Chem. Phys.* **125**, 074106(6) (2006).
- 25 Vydrov O.A., Scuseria G.E., Perdew J.P. Tests of functionals for systems with fractional electron number, *J. Chem. Phys.*, **126**, 154109(7) (2007).
- 26 Aldongarov A., Irgibaeva I., Hermansson H., Agren H. Theoretical study on passivation of small CdS clusters, *Molecular Physics*, **112** (5,6), 674-682 (2014).
- 27 Hay P.J., Wadt W.R. Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for the transition metal atoms Sc to Hg, *J. Chem. Phys.*, **82**, 270-283 (1985).
- 28 Frenzel J., Joswig J.-O., Seifert G. Optical Excitations in Cadmium Sulfide Nanoparticles, *J. Phys. Chem. C.*, **111**, 10761-10770 (2007).
- 29 Kim D., Sambasivan S., Nam H., Kim K.H., Kim J.Y., Joo T., Lee K.H., Kim K.T., Ahn K.H. Reaction-based two-photon probes for in vitro analysis and cellular imaging of monoamine oxidase activity, *Chem. Commun.*, **48**, 6834-6840 (2012).

- 30 Rockenberger J., Troger L., Kornowski, A., Vossmeier T., Eychmuller A., Feldhaus J., Weller H. EXAFS Studies on the Size Dependence of Structural and Dynamic Properties of CdS Nanoparticles, *J. Phys. Chem. B.*, **101**, 2691-2701 (1997).
- 31 Banerjee R., Jayakrishnan R., Ayyub P. Effect of the Size-Induced Structural Transformation on the Band Gap in CdS Nanoparticles, *J. Phys.: Condens. Matter*, **12**, 10647-10654 (2000).
- 32 Joswig J.-O., Seifert G., Niehaus T., Springborg, M. Optical Properties of Cadmium Sulfide Clusters, *J. Phys. Chem. B.*, **107**, 2897-2902 (2003).
- 33 Jang E., Jun Sh., Chung Y., Pu L. Surface Treatment to Enhance the Quantum Efficiency of Semiconductor Nanocrystals, *J. Phys. Chem. B.*, **108**, 4597-4600 (2004).
- 34 Halloun I., Hestenes D. The initial knowledge state of college physics students, *American Journal of Physics*, **53**, 1043-1055 (1985).

Сведения об авторах:

Алдонгаров А.А. - PhD, доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, ул. Мунайтпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Асылбекова А.М. - докторант 2-го курса специальности "6D072300-Техническая физика", Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, ул. Мунайтпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Иргібаева И.С. - директор ТОО "Центр исследования люминесцентных материалов", профессор кафедры химии, Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, ул. Мунайтпасова, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Aldongarov A.A. - PhD, associate professor at the department of technical physics, L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

Assilbekova A.M. - 2nd year PhD student of the specialty 6D072300-Technical physics, L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

Irgibaeva I.S. - Head of LLP "Center for research of luminescent materials", professor at the department of chemistry, L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov str., Nur-Sultan, Kazakhstan.

Поступила в редакцию 17.10.2019