

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ**

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

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

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

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

**2023  
Астана**

**УДК 001+37**  
**ББК 72+74**  
**G99**

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

**ISBN 978-601-337-871-8**

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

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

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

**УДК 001+37**  
**ББК 72+74**

**ISBN 978-601-337-871-8**

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

1. S.Venkatachalam, D.Mangalaraj, Sa.K. Narayandass, K.Kim, J.Yi, Electrical characterization of carrier trapping behavior of defects created by plasma exposures, J. Phys. D. Appl. Phys. 39 (2006) 4777.
2. T.F. Deutsch, Absorption coefficient of infrared laser window materials, J. Phys. Chem. Solids 34 (1973) 2091.
3. E. Masetti, M. Montecchi, M.P. da Silva, Analysis of the oxidation of polycrystalline zinc selenide by spectroscopic ellipsometry and photo thermal deflection spectroscopy, Thin Solid Films 234 (1993) 557.
4. M. Bedir, M. Oztas, O.F. Bakkalogu, R. Ormanci, Investigation on structural, optical and electrical parameters of spraydeposited ZnSe thin films with different substrate temperature, Eur. Phys. J. B 45 (2005) 465.
5. A.P. Samantilleke, I.M. Darmadasa, K.A. Prior, K.L. Choy, J. Mei, R. Bacewicz, A. Wolska, Development of opto-electronic devices using electrochemically grown thin ZnSe layers, J. Mater. Sci. Mater. Electron. 12 (2001) 661.
6. A. Nouhi, R.J. Stirn, A. Hermann, CuInSe<sub>2</sub>/ZnSe solar cells using reactively sputterdeposited ZnSe, Proc. 19th IEEE Photovoltaic Specialists Conf. IEEE, New York, 1987, p. 1461.
7. Paolo Ugo, Ligia Maria Moretto. Template deposition of metals // in Handbook of Electrochemistry, 2007
8. Даулетбекова А.К., Альжанова А.Е., Комаров Ф.Ф., Власукова Л.А., Акилбеков А.Т., Машенцева А.А., Здоровец М.В. Темплэйтний синтез оксида цинка в нанопористый SiO<sub>2</sub> на Si подложке // Вестник ЕНУ. – Астана, 2016. №4 (113). – С. 148-156.
9. Akilbekov A., Akylbekova A., Usseinov A., Kozlovskiy A., Baymukhanov Z. Giniyatova Sh., Popov A.I., Dauletbekova A. Ion track template technique for fabrication of ZnSe<sub>2</sub>O<sub>5</sub> nanocrystals. // [Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms](#). 2020 V. 476. P.10-13.
10. Экспериментальные и теоретические исследования нанокристаллов ZnSe<sub>2</sub>O<sub>5</sub> Акылбекова А., Шаяманов Б., Усеинов А., Баймуханов З., Козловский А., Гиниятова Ш., Попов А.И., Байжуманов М., Даулетбекова А. // Вестник ЕНУ им. Л.Н.Гумилева. Серия Физика. Астрономия – 2020, №1(130). С.34-43.

УДК 535.016

## ЗОЛЬ – ГЕЛЬ ӘДІСІМЕН АЛЫНҒАН КАДМИЙ СЕЛЕНИДІНІҢ НАНОКРИСТАЛДАРЫНЫҢ ОПТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ

Сарсенова Зарина

zarinasarsenova315@gmail.com

3 курс студенті, техникалық физика кафедрасы, физика техникалық факультеті,

Л.Н. Гумилева атындағы Еуразия ұлттық университеті

Ғылыми жетекші Асет Қайнарбай

**Аннотация.** Золь-гель әдісіне негізделген технологияның көмегімен 4-6 нм кадмий сульфидінің нанокристалдары синтезделді. Жұтылу және люминесценция спектрлерінде кванттық өлшемді әсер айқын көрінеді. Нанокристалдардың мөлшері азайған сайын люминесценция спектрлері, жұту спектрлері қысқа толқынды аймаққа ауысады. Люминесценция спектрлері 450 нм-ден 800 нм-ге дейінгі спектр аймағында кең жолақтар болып табылады.

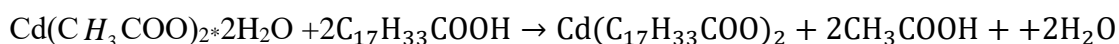
**Түйін сөздер:** нанокристалдар, кадмий селениді, оптикалық жұтылу спектрі, фотолюминесценция спектрі, кванттық өлшем әсері.

**Кіріспе.** Қарқынды люминесценциясы бар наноөлшемді кристалдық жүйелердің оптикасы физиканың қарқынды дамып келе жатқан саласы болып табылады. Бұл, бір жағынан, нанокристалдардың электрондық құрылымы мен қасиеттерін зерттеу үшін оптикалық және люминесценттік әдістерді қолдану мүмкіндігіне, ал екінші жағынан, оларды әртүрлі сәулелену құрылғыларында, сәулелену энергиясын антистоксикалық түрлендіру жүйелерінде және т.б. қолдану перспективасына байланысты. Бұл жұмыста мөлшері 4-6 нм қарқынды люминесценциясы бар кадмий сульфидінің нанокристалдарын синтездеуге арналған золь-гель технологиясын қолдану нәтижелері келтірілген [1-9].

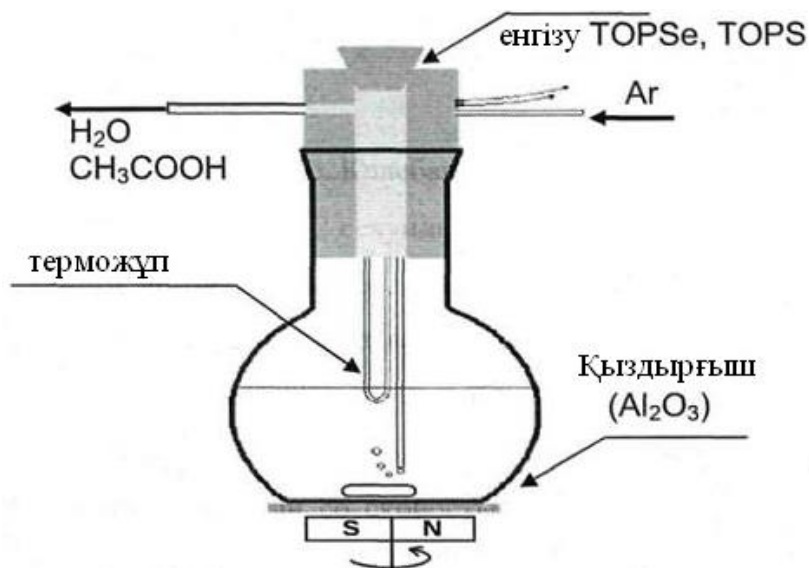
**Эксперименттік бөлім. CdS нанокристалдарының синтезі.** Біздің жұмыста Мюррей жұмысында ұсынылған молекулалық прекурсорлар әдісі бойынша КН синтезі жүргізілді [10]. Коллоидты кванттық нүктелерді синтездеуде стандартты олеатты синтез әдісі – жоғары температурада прекурсорлар ерітіндісіне негізделген импульстық нуклеация әдісі қолданылады. Алдын ала кадмий және халькоген прекурсорларының ерітінділері дайындалды. Кадмий прекурсоры ретінде кадмий олеаты, ал халькоген прекурсоры ретінде триоктилфосфиндегі (TOP) триоктилфосфинхалькогениді (мысалы TOPSe) алынады. Кадмий олеаты полярлы емес органикалық еріткіште – гексадеканда “C16”, дифенил эфирде  $Ph_2O$  немесе октадеценде “C18” алынады.

Халькоген прекурсорын дайындауды селен мысалында қарастырайық. TOPSe прекурсоры келесі жолмен дайындалады: өте ұсақ ұнтақталған селенді TOP бар пробиркаға салады, Se тұнбасы ерігенше пробирканы  $\sim 60^\circ C$  дейін қыздырады.  $TOP + Se \rightarrow TOPSe$  реакциясы экзотермалық және триоктилфосфиндегі баяу диффузиямен шектеледі. TOP пен еріген оттегі арасындағы қосымша реакцияны  $TOP + 1/2 O_2 \rightarrow TOPO$  болдырмау үшін реакциялық массаға май насосында дегазация жүргізді. Дайын прекурсорды берік тығыны бар ыдыста ұзақ уақыт сақтауға болады.

Кадмий прекурсоры - C16,  $Ph_2O$  немесе C18 октадецендегі кадмий олеатының ерітіндісі. Кадмий олеатын дайындау үшін 0,638 гр кадмий ацетаты, 2,5 мл олеин қышқылы, 10 мл дифенил эфирін кварцты колбада араластырады. Қоспаны үздіксіз араластыра отырып инертті атмосферада  $150-200^\circ C$  дейін қыздырады. Қыздыру сірке қышқылының иісі толықтай жойылғанға дейін жүреді (1 сағ):



Кванттық нүктелердің синтез схемасы 1-суретте көрсетілген қондырғыда жүргізіледі. Температураны хромель-алюмель және платина-платинородилі термопаралармен қадағалайды. Температура көрсеткішінің тербелуі  $\pm 1^\circ C$ , әр 2 секунд сайын жаңарып отырды. Реакциялық қоспаны фторопластпен қапталған магниттік якорьлар көмегімен үзіліссіз араластырып отырады. Айналу жылдамдығы минутына 100 айналымнан кем болмауы керек. Инертті газ фторопластты түтікше арқылы беріледі. Қыздыру керамикалық қыздырғыш элементпен (30 Вт) жүзеге асады.  $250^\circ C$  жоғары температурада қыздыру кезінде колбадан бөлінетін жылудың шығынын азайту қажет болады. Ол үшін колбаны каолинді мақтамен қоршайды.



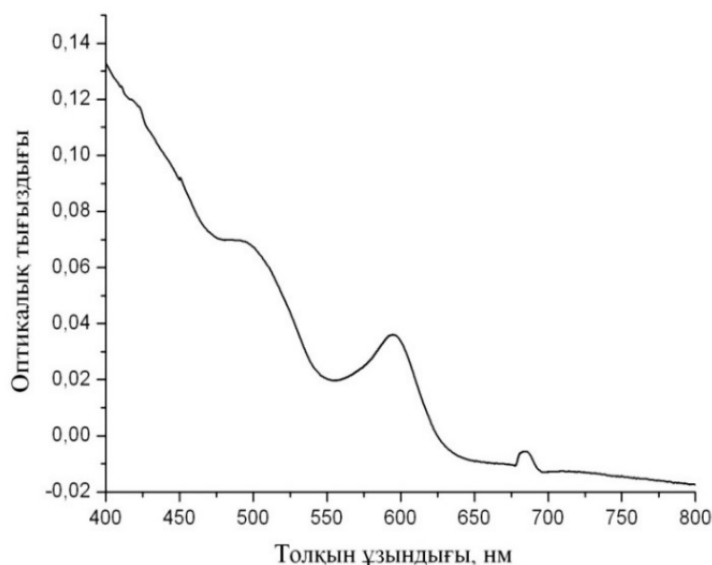
Сурет 1 - Кванттық нүктелерді синтездеуге арналған колба

Кадмий олеаты дайын болған соң оны синтез температурасына дейін қыздырады. Шприц көмегімен халькоген прекурсорын (TOPSe) кадмий олеатына қажетті температурада инъекциялайды. Стандарт синтез уақыты – 5 минут. Осы уақытта температураны тұрақты етіп ұстау қажет. Бөлшектердің өлшемі өсу уақыты және температурамен басқарылады. Синтездеу температурасына сәйкес еріткішті тандап алады:  $\text{Ph}_2\text{O}$  және C16 температура 250 °C-ден төмен синтездер үшін, C18 жоғары температуралы синтездер үшін.

Бөлшектердің өсуі барысында ерітінді өзінің түсін солғын сарыдан қанық сары түске (150 °C температурадағы синтездер үшін), күлгін және қызыл түске (150 -200 °C температурадағы синтездер үшін), күңгірт-қызыл және тіптен қара түске дейін (өте жоғары температуралар үшін) өзгертеді. Түстің өзгеру жылдамдығы температура өскен сайын арта береді. TOPSe-ді енгізген кезде 200 °C және одан да жоғары температураларда ерітінді бірнеше секундта-ақ түсін өзгертіп үлгереді.

Өсу уақыты аяқталған соң ерітіндіні қыздырғыштан алып бөлме температурасына дейін салқындатады. Ерітіндідегі кванттық нүктелерді центрифуга көмегімен тұнбаға түсіріп алады және әр қарай оптикалық қасиеттерін зерттеу үшін полярлы емес еріткіштерде ерітеді.

**Эксперименттік нәтижелерді талдау. Жұтылу спектрлері.** Синтезделген нанокристалдардың оптикалық қасиеттерін зерттеу үшін КН-ң гександағы ерітіндісін дайындадық. Jasco V-770 спектрофотометрімен бөлме температурасында CdSe кванттық нүктелерінің 400-800 нм аймағында оптикалық жұтылу спектрін өлшедік. Өлшенген CdSe КН жұтылу спектрі 58-суретте көрсетілген. CdSe КН жұтылу спектрінде жартылай ені 30 нм максимумы шамамен 594 нм бірінші экситондық жұтылу шыңы байқалды. Ал екінші экситондық жұтылу шыңы шамамен 493 нм-де жатыр.



Сурет 2- CdSe кванттық нүктелерінің оптикалық жұту спектрі

Оптикалық жұтылу спектрінен бірінші экситондық жұтылу жолағының орнын білу арқылы кванттық нүктенің орташа диаметрін есептей аламыз, мысалы CdSe КН үшін[11]:

$$D = 1,6122 \cdot 10^{-9}\lambda^4 - 2,6575 \cdot 10^{-6}\lambda^3 + 1,6242 \cdot 10^{-3}\lambda^2 - 0,4277\lambda + +41,57 \quad (1)$$

Мұндағы  $\lambda$  – бірінші экситондық жұтылу жолағының максимумы (нм), Ал нанокристалдың мольдік экстинкция коэффициентін келесі тәжірибелік өрнекпен анықтаймыз:

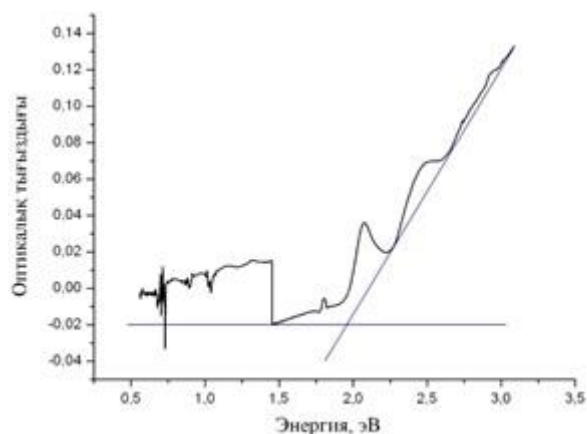
$$\varepsilon = 5857 (D)^{2,65} (M^{-1} * cm^{-1}) \quad (2)$$

Дайындалған ерітіндідегі КН концентрациясын Бугер-Ламберт-Бер заңын қолданып есептеуге болады:

$$C_M = \frac{A_{max}}{\varepsilon \cdot l} \quad (3)$$

Мұндағы  $A_{max}$  – бірінші экситондық жұтылу жолағының максимумындағы оптикалық тығыздық;  $l$  - кюветаның ені;  $E_g$ - тыйым салынған аймақтың ені.

Жұтылу спектрі арқылы нанокристалдардың  $E_g$  тыйым салынған зонасының енін бағалауға болады. Мұндай бағалаулар оптикалық тығыздық квадратының жұтылған кванттардың энергиясына  $D^2(E)$  тәуелділігі негізінде бағалаулар өткізілген.



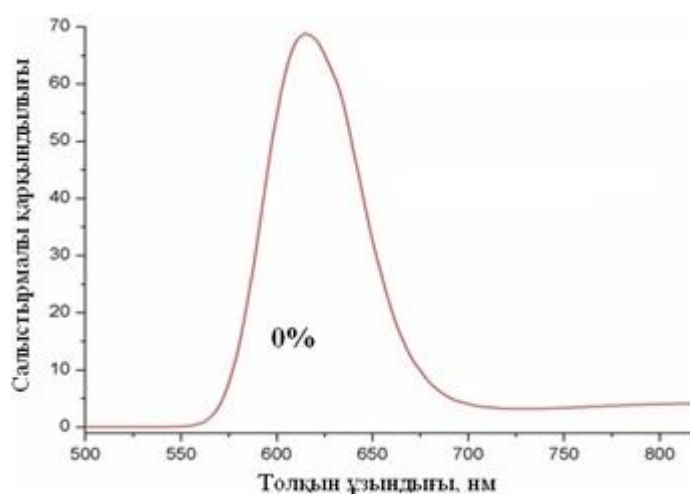
Сурет 3 – Гександа ерітілген CdSe КН нормаланған жұтылу спектрі  $E_g = 1,95$  эВ

Осы теңдіктер арқылы есептелген КН сипаттамалары 1-кестеде көрсетілген.

Кесте 1- Кванттық нүктелердің оптикалық жұтылу спектрі бойынша анықталған сипаттамалары

№	Кванттық нүкте	$T_{\text{син}}$ °C	$\lambda_{\text{max}}$ (нм)	$A_{\text{max}}$	D (нм)	$\epsilon(M^{-1} \cdot \text{cm}^{-1})$	$C_{\text{м}}$ штук/ $\text{cm}^3$	$E_g$ эВ
1	CdSe	260	594	0,0364	4,3	279490,230	$7,84 \cdot 10^{13}$	1,95

CdSe НК фотолюминесценциясын зерттеу CM 2203 құрылғысының көмегімен жүргізілді. Үлгілерді дайындау мақсатында нанокристалдар гександа ерітілді. Үлгілер бөлме температурасында 370 нм толқын ұзындығындағы жарықпен сәулелендірілді. CdSe КН 370 нм толқын ұзындығындағы люминесценция спектрі 75 - суретте көрсетілген.



Сурет 4 – Бөлме температурасындағы CdSe кванттық нүктелерінің люминесценция спектрі

CdSe үлгілерінің люминесценттік сипаттамалары 2-ші кестеде берілген.

Кесте 2- CdSe үлгілерінің люминесценттік сипаттамалары

№	Үлгілер	Максимум, нм		
		I экситондық жұтылу шыңы	Люминесценция-ның экситондық шыңы	Люминесценцияның ұзынтолқындық шыңы
1	CdSe	594	612	700

CdSe КН фотолюминесценция спектрі максимумы 612 нм экситондық жолақтан және кең жайылған ұзынтолқындық жолақтан тұрады. Ұзынтолқындық люминесценция жолағы селеннің вакансиясы сияқты нанокристалдың беттік ақауларымен байланысты. Осы вакансияларда заряд тасымалдаушылар қармалып және одан кейінгі рекомбинациясы кезінде жарық бөліп шығарады.

**Қорытынды** Эксперименттік зерттеулер нәтижесінде CdSe нанокристалдарының физикалық сипаттамалары анықталып, тұжырымдар жасалынды. CdSe кванттық нүктелері стандартты олеатты синтез әдісімен жасалытынымен таныстым. CdSe НК оптикалық жұтылу спектрлері Jasco 770 V спектрофотометрімен өлшенді. Жұтылу спектрлерінде экситондық жұтылу шыңдары байқалды. Бірінші экситондық жұтылу шыңының орны бойынша кванттық нүктенің диаметрі, экстинкция коэффициенті және дайындалған ерітіндідегі концентрациясы анықталды, яғни кванттық нүктелердің сипаттамалық әдістерімен таныстым, оларды меңгердім. Нормаланған жұтылу спектрі бойынша нанокристалдардың тыйым салынған зонасының ені анықталды.

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

#### Әдебиеттер тізімі

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

УДК 538.9, 539.1, 542.8

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

Уварова И.В, Алдонгаров А.А.

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

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

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