РУХАНИ ЖАҢҒЫРУ

20 АСТАНА

ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2018»
XIII Халықаралық ғылыми конференциясы

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

XIII Международная научная конференция
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2018»

The XIII International Scientific Conference
for Students and Young Scientists
«SCIENCE AND EDUCATION - 2018»

12th April 2018, Astana

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

Студенттер мен жас ғалымдардың «Ғылым және білім - 2018» атты XIII Халықаралық ғылыми конференциясының БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ XIII Международной научной конференции студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2018»

PROCEEDINGS of the XIII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2018»

2018 жыл 12 сәуір

Астана

УДК 378

ББК 74.58
Ғ 96

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2018» атты студенттер мен жас ғалымдардың XIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XIII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2018» = The XIII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2018». – Астана: http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/, 2018. – 7513 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-997-6

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докоранттардың 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 978-9965-31-997-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 2018

изучены оптико-люминесцентные особенности. Далее нами, запланировано детальное изучение при более высоких температурах и длительном времени.

Список использованных источников

1. Васильев Р. Б., Дирин Д. Н. МГУ, Москва, 2007, С. 2–34.
2. Федоров А.В.. Оптика наноструктур. СПб «Недра» (2005).
3. Исследовательская группа V. Klimov https://quantumdot.lanl.gov 3. https://pechatnick.com/articles/kvantovie-tochki-poligrafiya-i-drygie-oblasti-primeneniya
4. Murray C.B., Sun S., Gaschler W., Doyle H., Betley T.A., Kagan C.R. IBM J. Res. and Dev., 45, 2001, C.47-56
5. Квантовые точки: синтез, свойства, применение. Васильев Р.Б., Дирин Д.Н.

УДК 539.19; 539.194

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ DFTB МЕТОДА ДЛЯ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДОВ НА СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ КЛАСТЕРОВ CDS

Зейнел Динара Ермуханбетқызы
Студентка кафедры «Техническая физика» ЕНУ им. Л.Н.Гумилева
Научный руководитель – А.А. Алдонгаров

Введение

Используя метод DFTB, были рассчитаны спектры поглощения кластеров CdS до 394 атомов в общем было проанализировано 14 структур с различным количеством атомов. Из-за эффекта квантового ограничения можно изменять оптические свойства кластеров сульфида кадмия, изменив их размер.[6-11] На основе полученных данных предполагается, что спектры поглощения показывают зависимость самых низких незанятых молекулярных орбиталей от структурных свойств кластеров, особенно от числа односвязных поверхностных атомов. При увеличении размера кластера CdS ширина запрещенной зоны между наивысшими занятыми и низкими незанятыми молекулярными орбиталями (HOMO / LUMO) уменьшается в сторону объемной запрещенной зоны сульфида кадмия для кластеров без односвязных поверхностных атомов.[12-15]

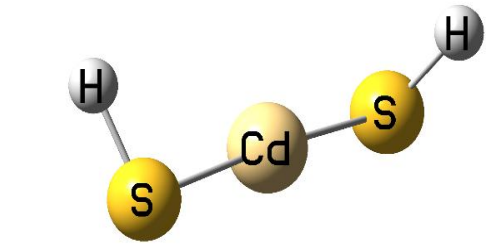
Актуальность

Квантово-механические методы дают нам способ описания многоэлектронных систем. Но как мы знаем из стандартных курсов квантовой механики: если расчёт простейших систем удалось провести путём точного решения уравнения Шредингера, то описание многоэлектронных систем вызвало серьезные трудности. Суть проблемы состоит в том, что многоэлектронные системы обладают большим числом степеней свободы, поэтому в общем случае для них оказалось невозможным проинтегрировать уравнение Шредингера.[2] DFTB метод, основанный на теории функционала плотности, сформулированной Хоэнбергом, Коном и Шамом позволил преодолеть данные трудности, где вместо волновой функции для расчета основных характеристик системы можно использовать электронную плотность. [4, 5]Полупроводниковые флуоресцентные нанокристаллы или квантовые точки - КТ находят широкое применение в самых различных областях физики. Благодаря уникальным оптическим свойствам - зависимость цвета эмиссии от состава и размера КТ, высокая фотостабильность, широкие спектры поглощения .[1, 3]

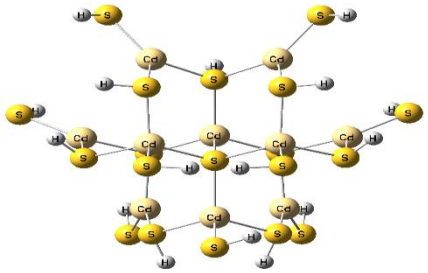
Оптимизация

В данной работе были взяты кластеры CdS с различным количеством атомов, начиная от 5 до 394 атомов (Рис. 1). CdS гексагональные кристаллы с структурой вюрцита были построены изначально в программе в GaussView после этого производилась оптимизация в программе deMon. Данная программа основана на методе функционала плотности.

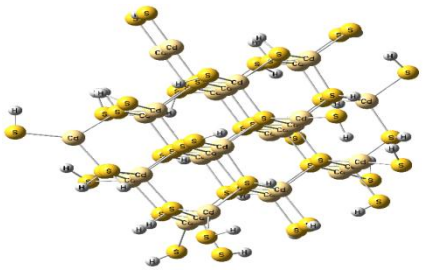
Оптимизация была необходима, чтобы данные структуры были приближены к более реальным моделям, так как оптимизированная структура принимает значения минимальной энергии в пространстве, тем самым становясь более стабильной.



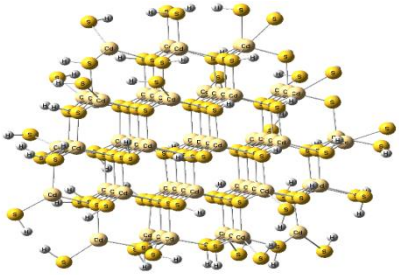
5 атомов



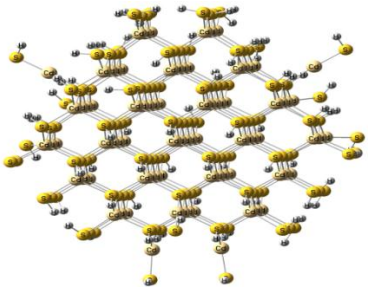
47 атомов



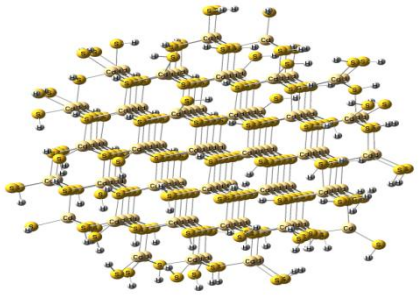
110 атомов



206 атомов



295 атомов



394 атомов

Рисунок 1. Оптимизированные структуры кластеров сульфида кадмия

Электронные спектры поглощения

Данные об электронных переходах были в получены в программе demon методом DFTB (англ. Density Functional based Tight Binding), то есть метод функционала плотности.[3, 7] Произведя вычисления, были получены данные о силах осциллятора, длине волн, энергии и орбиталях переходов (Таблицы 1-6). Полученные данные электронных спектров показывают уменьшение энергии первого перехода с увеличением размера кластера. Таким образом, расчеты в приближении DFTB показывают квантово-размерный эффект для кластеров. Для самого большого кластера наименьшая энергия перехода (3,359 эВ) больше ширины запрещенной зоны объемного кристалла сульфида кадмия (2,42 эВ).

Таблица 1.

Данные о электронных переходов для 5 атомов

№ перехода	E (эВ)	λ (эВ)	Сила осциллятора	Орбитали
1	5,665	5,652	0,0005851	13-14
2	5,807	5,790	0,0292797	12-14
3	6,182	6,143	0,0885008	13-15
4	6,321	6,281	0,0012805	12-15
5	6,514	6,502	0,2997638	13-16

6	6,594	6,639	0,0002384	12-16
7	6,716	6,639	0,0312823	12-16
8	6,916	6,931	0,0003213	11-15
9	6,961	6,748	0,0004181	10-14
10	7,060	7,041	0,0326822	13-17

Таблица 2.

Данные о электронных переходов для 47 атомов

№ перехода	E (эВ)	λ (эВ)	Сила осциллятора	Орбитали
1	4,355	4,345	0,0056562	126-127
2	4,387	4,381	0,0057188	125-127
3	4,401	4,389	0,0040095	124-127
4	4,475	4,470	0,0000494	123-127
5	4,548	4,539	0,0057118	122-127
6	4,583	4,574	0,0103634	121-127
7	4,697	4,692	0,0008039	120-127
8	4,719	4,712	0,0020904	119-127
9	4,815	4,806	0,0001508	118-127
10	4,831	4,825	0,0024432	117-127

Таблица 3.

Данные о электронных переходов для 110 атомов

№ перехода	E (эВ)	λ (эВ)	Сила осциллятора	Орбитали
1	3.884	3.863	0.1280460	324-325
2	3.958	3.937	0.1571278	323-325
3	3.964	3.940	0.1597507	322-325
4	4.054	4.049	0.0009863	321-325
5	4.059	4.055	0.0004420	320-325
6	4.081	4.072	0.0465815	324-326
7	4.092	4.083	0.0009471	319-325
8	4.137	4.125	0.0001865	318-325
9	4.148	4.134	0.0008731	317-325
10	4.159	4.149	0.0476800	322-326

Таблица 4.

Данные о электронных переходов для 206 атомов

№ перехода	E (эВ)	λ (эВ)	Сила осциллятора	Орбитали
1	3.497	3.484	0.1105967	642-643
2	3.502	3.490	0.1095274	641-643
3	3.523	3.506	0.1575995	640-643
4	3.609	3.603	0.0093453	639-643
5	3.615	3.610	0.0085825	638-643
6	3.643	3.642	0.0009477	637-643
7	3.672	3.660	0.0042188	636-643
8	3.675	3.663	0.0046599	635-643
9	3.721	3.720	0.0000107	634-643
10	3.826	3.785	0.4031977	642-644

Таблица 5.

Данные о электронных переходов для 295 атомов

№ перехода	E (эВ)	λ (эВ)	Сила осциллятора	Орбитали
1	3.627	3.578	0.5876081	919-920
2	3.659	3.612	0.5834130	918-920
3	3.660	3.613	0.5842814	917-920
4	3.672	3.667	0.0078200	916-920
5	3.676	3.672	0.0086832	915-920
6	3.688	3.686	0.0000641	914-920
7	3.785	3.760	0.0002753	913-920
8	3.786	3.760	0.0001354	912-920
9	3.853	3.849	0.0008805	911-920
10	3.855	3.851	0.0011343	910-920

Таблица 6.

Данные о электронных переходов для 394 атомов

№ перехода	E (эВ)	λ (эВ)	Сила осциллятора	Орбитали
1	3.394	3.359	0.5409202	1279-1280
2	3.395	3.360	0.5395158	1278-1280
3	3.406	3.371	0.4940266	1277-1280
4	3.466	3.464	0.0002181	1276-1280
5	3.467	3.465	0.0000681	1275-1280
6	3.479	3.478	0.0000066	1274-1280
7	3.522	3.500	0.0015648	1273-1280
8	3.523	3.501	0.0017288	1272-1280
9	3.579	3.578	0.0000160	1279-1281
10	3.583	3.578	0.0002043	1279-1282

Population Mulliken

Данные о зарядах и массах были получены при помощи команды POP в программе deMon, что позволило просчитать дипольный момент для каждой оптимизированной структуры. Для определения дипольного момента нужно сначала было посчитать радиус-вектор для каждого элемента данной структуры. Затем нужно найти сумму произведения радиус-вектора и массы элементов. После этого нужно посчитать сумму масс элементов. После того, как мы посчитали значения радиус-вектора и центр масс, то можно было найти дипольный момент. Формула (1) это формула определения дипольного момента, формула (2) показывает как найти радиус вектор, зная координаты x, y, z, формула (3) дает представление о нахождение значения центр масс.

Основные формулы:

$$P=\sum q_{i*}(r_i-r_c) \quad (1)$$

$$r_i = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (2)$$

$$r_c=\sum r_i * m_i / \sum m_i \quad (3)$$

Дипольный момент для 5 атомов составил значения P = -0,640626284,
для 47 атомов P = -2,974678393, для 110 атомов P = -5,501151631,
для 206 атомов P = -36,02463851, для 295 атомов P = -46,90553798,
для 394 атомов P = -67,39832935.

Дипольный момент зависит только от таких параметров как симметрия структуры, пассивация и от количества атомов структуры. С ростом размера кластера его дипольный момент растет.

Список использованных источников

1. Козлова М.В.. Особенности Нелинейного Поглощения При Резонансном Одно- и Двухфотонном Возбуждении Экситонов в Коллоидных Квантовых Точках CdSe/ZnS. 2015
2. Сатанин А.М.. “Многоэлектронные Эффекты в Наноструктурах: Метод Функционала Плотности.” , 2007
3. Сперанская Е.С. “Квантовые Точки На Основе Селенида Кадмия: Получение, Модификация и Применение в Иммунохимическом Анализе.” : , 2013
4. Oliveira, et al. “Density-Functional Based Tight-Binding: an Approximate DFT Method.”*Journal of the Brazilian Chemical Society*, Brazilian Chemical Society, 2009
5. Seabra, Gustavo de M. “Implementation of the SCC-DFTB Method for Hybrid QM/MM Simulations within the Amber Molecular Dynamics Package.” The Journal of Physical Chemistry. A, U.S. National Library of Medicine, 5 July 2007
6. Vandervell, Andy. “Quantum Dots Explained: What They Are and Why They're Awesome.” Trusted Reviews, 7 Jan. 2016
7. Tamer M Samir; Mai MH Mansour; Steven C Kazmierczak; Hassan ME Azzazy. “Quantum Dots: Heralding a Brighter Future for Clinical Diagnostics.” Medscape , 2012
8. Moynihan, Tim. “What Are Quantum Dots, and Why Do I Want Them in My TV?” Wired, Conde Nast, 29 June 2017
9. Jasim, Khalil Ebrahim. “Quantum Dots Solar Cells.” Quantum Dots Solar Cells | IntechOpen, InTech, 22 Oct. 2015
10. Zhou, M, and I Ghosh. “Quantum Dots and Peptides: a Bright Future Together.” Biopolymers., U.S. National Library of Medicine
11. Woodford, Chris. “Quantum Dots: Introduction to Their Science and Applications.” What Are Quantum Dots?, 23 Feb. 2018
12. “Cadmium Sulfide – Properties, Applications and the Future for CdS.” AZoM.com, AHP Materials, 1 Aug. 2017
13. Brian Clegg13 March. “Cadmium Sulfide.” *Chemistry World*, 13 Mar. 2013
14. Harrison, M. A.; Ng, A.; Hmelo, A. B.; Rosenthal, S. J., CdSSe Nanocrystals with Induced Chemical Composition Gradients. Isr. J. Chem. (11-12), 2012, P.1063-1072
15. Brian Clegg13 March. “Cadmium Sulfide.” Chemistry World, 13 Mar. 2013

ӘОЖ 538.91

КЕУЕКТІ КРЕМНИЙДІҢ ДИОКСИДІ ҚАБЫРШАҚТАРЫН ЗЕРТТЕУ

Искакова Гульдана Мергалиевна, Кушанова Софья Сералиевна
Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің «Техникалық физика» мамандығының 1-курс магистранттары, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекші – ф-м.ғ.к. Бажиков К.Т.

Кеуекті диэлектрикалық қабыршақтар микро-, нано- және оптоэлектрониканың болашағы бар материал болып саналады. Бұл материалдар светодиодтарда, фотодетекторларда, ваккумды микроэлектроника катодтарында, биологиялық имплантаттарда, газ тетіктерінде, мембраналрда қолданылады. Оның ылғалдылық тетіктерін, газдық, химиялық және биологиялық сенсорларды, сонымен қатар басқа да қолданысқа үлкен болашағы бар.

Осы жұмыстың мақсаты кремний диоксиді кеуекті қабыршақтарының құрамын зерттеу болып табылады. 30-120^{O}C температура аралығында n-Si-де құрылған кеуекті кремнийдің ВАС құрылымы. Жоғары температурада сызықты емес қасиеттер жойылады, қисық ВАС екі бағытта практика жүзінде симметриялы болып қалады.

Тәжірибелік бөлімі