



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, 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 978-9965-31-997-6

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

Гидрохимияда газдық хроматография әдісі пестицидтарды, органикалық қышқылдарды, аминдерді және т.б. анықтауда үлкен қолданысқа ие болды [5].

Қорытындылай келе біз күрделі приборлардың жұмыс істеу принципімен, су үлгілерін қандай әдістермен зерттеуге болатынымен және физико-химиялық талдау әдістерімен қысқаша әрі нақты таныстық. Тағы бір айта кететін жәйт үлкен ғылыми және практикалық маңызы өте зор ол, суға аналитикалық бақылау жасаудың маңыздылығы, сапалы түрде қоршаған ортаның экологиялық мониторингін физико-химиялық әдістерді дәл пайдалана отырып нақты жасауға және уақытылы қадағалауға мүмкіндік бар.

Болашақта осы әдістердің көмегімен табиғи сулардың физико-химиялық қасиеттерін анықтауды жалғастыру және жаңа технологияларды пайдаланып дамыту керек. Судағы мыстың иондарын, хлоридтерді, мұнай өнімдерін анықтау және рұқсат етілген концентрацияға дейін төмендету жұмыстары маңызды мәселелердің бірі болмақ.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Алекин О. А. Основы гидрохимии/ Учебное пособие— JL: Гидрометеоздат, 1970. 442 с.
2. Резников А. А., М уликовская Е. П., Соколова И. Ю. Методы анализа природных вод. — М.: Недра, 1970. — 488 с.
3. Угай Я. А. Общая химия / Учебник. — М.: Высшая школа, 1984. — 440 с.
4. Киреев В. А. Краткий курс физической химии— М.: Химия, 1970. — 638 с.
5. А. М. Никаноров. Гидрохимия: Учебник. — 2-е изд., перераб. и доп. — СПб: Гидрометеоздат, 2001. — 444 с.
6. Романова С.М., Ниязбаева А.И. Табиғи сулар химиясы: оқу құралы- Алматы: Қазақ университеті, 2015. -187б.

УДК 544.18

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРОЙНЫХ СИСТЕМ ОРГАНИЧЕСКОГО КРАСИТЕЛЯ, НАНОЧАСТИЦЫ МЕТАЛЛА И КВАНТОВОЙ ТОЧКИ

Мукатаев Искандер Рамазанович

mukataev_1996@mail.ru

Магистрант 1-го курса специальности «Химия-6М060600», Евразийского Национального университета Л.Н. Гумилева.

Научный руководитель – Иргибаетова И.С.

Введение

Влияние наночастиц металлов (MNP) на флуоресцентные материалы находится в центре современных исследований. Обычно это явление относится к усиленной флуоресценции металла (MEF) [1]. В этом случае присутствие MNP может обеспечить значительное увеличение интенсивности флуоресценции без изменения формы спектра флуорофора [1-3]. Усиление флуоресценции связано с комбинацией двух эффектов. Во-первых, увеличение электромагнитного поля вблизи металлических наночастиц при фотовозбуждении, что обеспечивает увеличение скорости поглощения во флуорофоре. Во-вторых, индуцированное флуорофором излучение плазмонов в MNP. В то же время может наблюдаться заметное гашение излучения [4]. Благодаря этим уникальным свойствам MNP, в основном Au и Ag, могут найти применение в различных приложениях, таких как [5].

Несмотря на большое количество экспериментов, проведенных в этой области, не все аспекты взаимодействия между наночастицами металлов и флуорофорами все еще ясны. Например, некоторые родственные красители могут проявлять усиление или тушение излучения в той же среде с металлическими наночастицами. Трудно предсказать и объяснить разницу в их поведении. Хотя теория функционала плотности (DFT) [6] может помочь

проанализировать абсорбционные свойства флуорофоров в присутствии металлических наночастиц. Явление переноса энергии между флуорофорами может быть затронуто металлическими наночастицами. Например, наночастицы металлов могут повысить эффективность Форесторовского энергетического переноса (FRET) [7-8].

В этой работе мы рассматриваем влияние MNP на FRET в системе, где органические красители представляют собой доноры, а квантовые точки (КТ) представляют собой акцепторы. В частности, мы использовали комбинации донорно-акцепторных пар: Coumarin 7 (C-7) (Рис.1)-квантовая точка сульфида кадмия (QD525) с наночастицами золота.

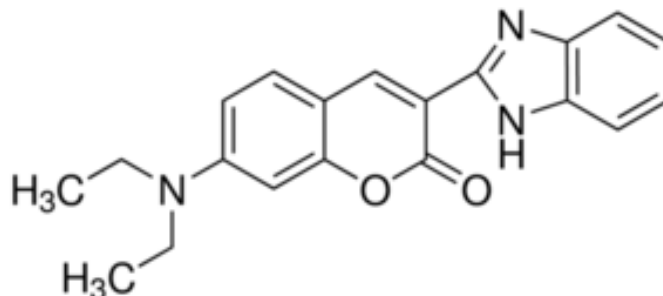


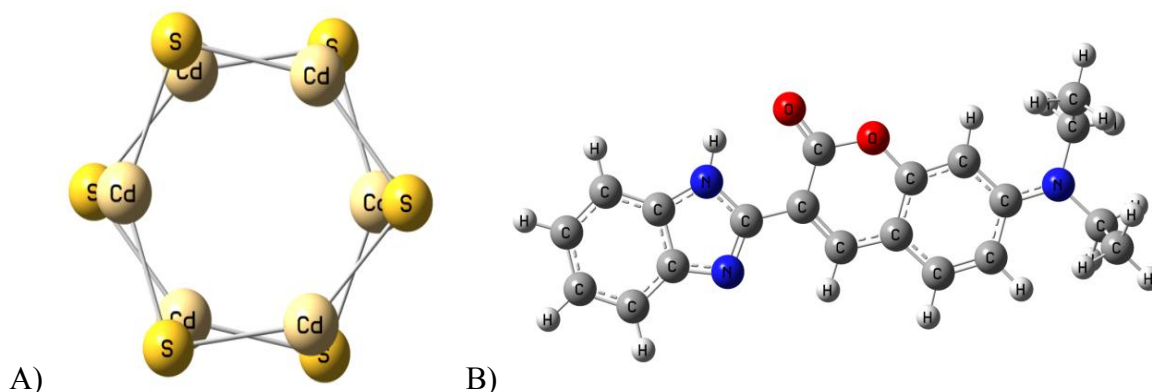
Рисунок 1. Структура красителя Coumarin-7

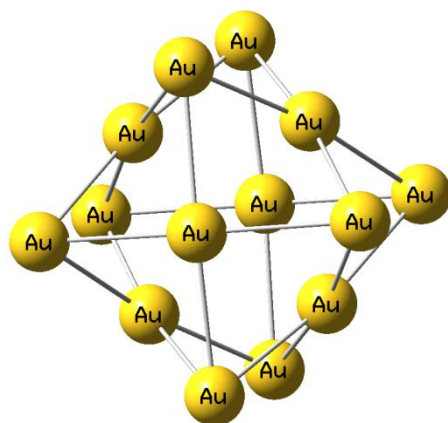
Вычислительные методы.

Мы рассмотрели модель трехкомпонентной системы, состоящей из молекулы C-7, Cd6S6-QD и двух кластеров Au14. Для этой теоретической модели использовались теория функционала плотности в виде B3LYP-функционала [9-10] со следующими базисными наборами 6-31G (d) [11] для C, N, H, O; 6-311G (d) [12] для S; DZ для Au и Cd с эффективным потенциалом ядра Lanl2 [13-14]. Мы использовали программный пакет Gaussian09 Rev. E.01 для всех вычислений. Для выполнения расчетов использовались вычислительные ресурсы КазНТУ.

Результаты и обсуждение

Первоначально мы получили оптимизированные одиночные структуры C-7, Cd6S6 и Au14 (рис. 71 а, b, с). Оптимизированная структура кластера Cd6S6 не соответствует ни структурам вюрцита, ни цинковой обманки. Группа Au14 создает кубическую гранецентрированную решетку.





С)

Рисунок 2. Оптимизированные структуры квантовой точки Cd_6S_6 (А), органического красителя С-7 (В), и наночастицы золота (С).

Электронные спектры были оценены для С-7 и Cd_6S_6 с использованием TD DFT-приближения [Ref-TD]. Для красителя С-7 интенсивный пик поглощения расположен на 308 нм (табл. 71), хотя экспериментальные результаты для С-7 в РММА показывают интенсивный пик при 406 нм. А для Cd_6S_6 теория кластеров предсказывает самый низкий интенсивный переход при 439 нм (2,82 эВ). Это значение энергии больше, чем разрыв зазора на объемном CdSZnSe (2,42 эВ или 520 нм), что указывает на отсутствие глубоких ловушек в области запрещенной зоны.

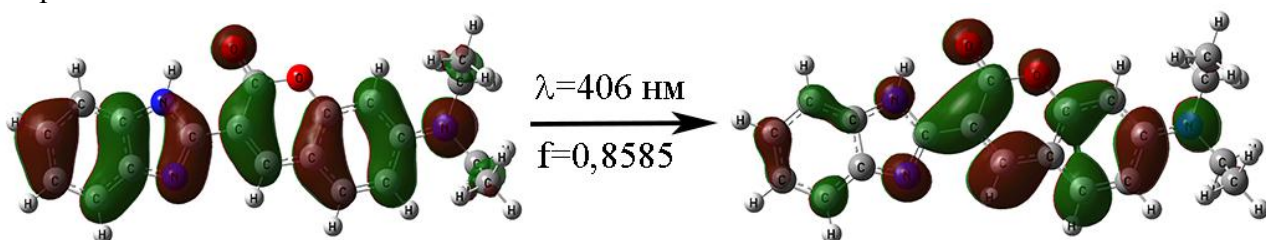


Рисунок 3. Электронный переход в молекуле красителя отвечающий за поглощение в области 406 нм.

Далее были рассмотрено влияние кластера Au_{14} на электронные переходы С-7 и Cd_6S_6 Zn_6Se_6 . В модели кластер Au_{14} был между молекулой красителя и кластером квантовой точки (рис. 4). В этой модельной структуре 4 атома каждого кластера Au_{14} находились в плоскости ядра С-7, а расстояние между атомом водорода С-7 и ближайшим атомом Au составляло 5 Å.

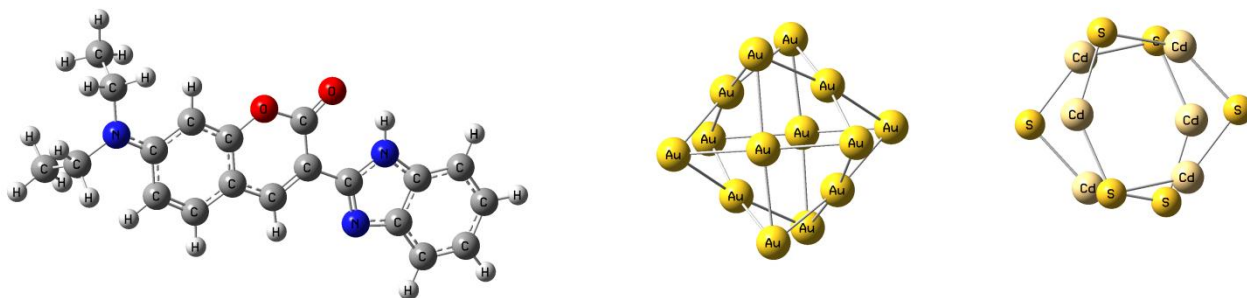


Рисунок 4. Модель для описания взаимодействия между молекулой красителя, квантовой точкой и наночастицей металла.

Теоретически рассчитанный спектр показан на рисунке 4.

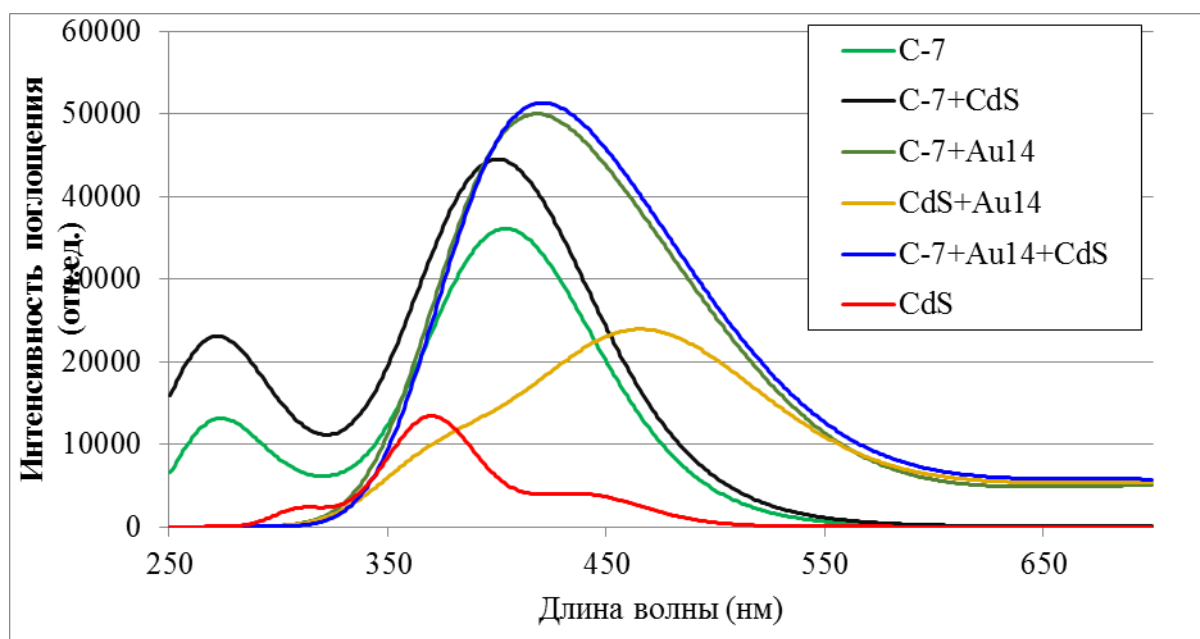


Рисунок 4. Спектры поглощения всех моделей органического красителя, наночастицы и квантовой точки

Заключение

В работе мы рассмотрели тройные системы органического красителя, квантовой точки и наночастицы золота. Все системы были упрощены для уменьшения времени расчетов.

Мы использовали уровень приближения теорию функционала плотности для рассмотрения модели трехкомпонентной системы. Эта модель включает одну молекулу C-7, два кластера Au_{14} и Cd_6S_6 . Для расчетов электронных переходов использовалась временно-зависимая теория функционала плотности. Основная полоса поглощения для чистой молекулы красителя составила 406 нм, что оказалось близко к экспериментальному значению. Для кластера квантовой точки величина запрещенной зоны 2,82 эВ, что также схоже со значениями экспериментов. Теоретические результаты показывают, что добавление металлической наночастицы может обеспечить увеличение скорости поглощения C-7 в двухкомпонентной системе (C-7 + Au_{14}) и в трехкомпонентной системе (C-7 + Cd_6S_6 + ВНП). Хотя для Cd_6S_6 ВНП обеспечивают снижение поглощающей способности. Показано, что поглощающие свойства Cd_6S_6 и C-440 не зависят от их относительных положений.

Список использованных источников

1. Lakowicz JR, Ray K, Chowdhury M, Szmazinski H, Fu Y, Zhang J, Nowaczyk K (2008) Plasmon-controlled fluorescence: a new paradigm in fluorescence spectroscopy. *Analyst* 133:1308–1346
2. Lee K.-T., Park J.-H., Kwon S. J., Kwon H.-K., Kyhm J., Kwak K.-W., Jang H. S., Kim S. Y., Han J. S., Lee S.-H., Shin D.-H., Ko H., Han I.-K., Ju B.-K., Kwon S.-H., Ko D.-H. (2015) Simultaneous enhancement of upconversion and downshifting luminescence via plasmonic structure. *Nano Lett.* 15 (4): 2491–2497
3. Mantel A., Shautenbaeva N., Irgibaeva I., Aldongarov A., Lang A., Barashkov N., Mukatayev I. (2016) Perylene derivative dyes luminescence in polysiloxane matrix in presence of gold nanoparticles. *J Fluoresc* 26:2213–2223
4. Focsan M., Gabudean A. M., Vulpoi A., Astilean S. (2014) Controlling the luminescence of carboxyl-functionalized CdSe/ZnS core-shell quantum dots in solution by binding with gold nanorods. *J. Phys. Chem. C* 118 (43): 25190–25199
5. [R3-1] Jain P. K., Huang X., El-Sayed I. H., El-Sayed M. A. (2008) Noble metals on the nanoscale: optical and photothermal properties and some applications in imaging, sensing, biology, and medicine. *Accounts of Chem. Res.* 41: 1578-1586
6. Hohenberg P., Kohn W. (1964) Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 136: B864-B71.

7. Kim K., Kim J., Kim H., Laquai F., Arifin E., Lee J., Yoo S., Sohn B. (2012) Switching off FRET in the hybrid assemblies of diblock copolymer micelles, quantum dots, and dyes by plasmonic nanoparticles. ACS Nano. 6:5051-5059
8. Kochuveedu S.T., Kim D.H. (2014) Surface plasmon resonance mediated photoluminescence properties of nanostructured multicomponent fluorophore systems. Nanoscale. 6: 4966-4984
9. Becke A (1994) Density functional theory III The role of exact exchange. J Chem Phys 98:5648
10. Lee C, Yang W, Parr R G (1988) Development of the Colle-Salvetti correlation energy formula into a functional of the electron density. Phys Rec B 37
11. Ditchfield R, Hehre W J, Pople J A (1971) Self-consistent molecular orbital methods. 9. Extended Gaussian-type basis for molecular-orbital studies of organic molecules. J Chem Phys 54:724
12. McLean A D, Chandler G S (1980) Contracted gaussian-basis sets for molecular calculations. 1. 2nd-row atoms, Z=11-18. J Chem Phys. 72:5639-48
13. Raghavachari K, Binkley J S, Seeger R, Pople J A (1980) Self-consistent molecular orbital methods. 20. Basis set correlated wave-functions. J Chem Phys. 72:650-654
14. Hay P, Wadt W (1985) Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for the transition metal atoms Sc to Hg. J Chem Phys. 82:270-283

ӘОЖ 54(075.8)

БЕЙОРГАНИКАЛЫҚ ХИМИЯ САЛАСЫНДА БІЛІМ БЕРУДІ МОДЕРНИЗАЦИЯЛАУ

Мұқатай Мұхит

mukhit-07@mail.ru

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ химия кафедрасының 2курс магистранты, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекші-Дүйсембиев М.Ж.

В.В.Карпов пен М.И.Катханов профессионалды білім беруге қатысты «модуль – ғылыми білім құрылымымен, логикалық тұрғыдан, болашақ инженердің танымдық қызметінің ақпараттық құрылымымен сәйкес келетін семантикалық түсініктердің туындауын қарастыратын оқу материалының ұйымдастырушылық-әдістемелік пәндераралық құрылымы» деп есептейді. Осы тұста авторлардың «модульге оның әдістемелік қалыпы бойынша төменгі модульдерден тұрады» деген нұсқасы қызығырақ. Пәнаралық тәсілдерде оқу пәндері, тіпті, бөлек бөлімдер мен тақырыптар профессионалды дайындық иерархиясының белгілі бір сатысы ретінде қарастырылады. Иерархияның әрбір сатысы мамандық бойынша оқу-ғылымдық тұрғыдан жеке сипатқа ие және үшдәрежелі психологиялық-профессионалды иерархияға сәйкес құрастырылған дайындық нәтижесі деңгейінің жаппай талаптарына біріктірілген пәнаралық модульдер қатарынан тұра алады:

-Жалпы ғылыми дайындық модульдері аналитикалық-синтетикалық деңгейдің басым қалыптасу сипаты – профессионалды дайындық бойынша біріктіріледі;

-Соңғы нәтижесі жалпы инженерлік білім мен біліктіліктің қалыптасуы болып келетін модульдер - алгоритмдік деңгейдегі модульдер;

-Соңы арнайы пәндермен аяқталатын модульдер – шығармашылық-танымды деңгейдегі модульдер;

Модуль түсінігі анықтамасының жалпы анализі келесі: оқу жүйесінде «модульді» белгілі бір мақсаттармен біріктірілген, осы модульді меңгерудің әдістемелік жетекшілігімен біріктірілген білімнің өзіндік оқу бірлігі деп түсінеміз.

Әртүрлі әдебиеттер талдауы бойынша, тәжірибеде модуль ретінде көбірек қолданылатындар келесі тізімде қарастырады:

-Бір тұжырымдамалық бірлікті қарастыратын оқу материалының пакетін;