



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN



Л. Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ
ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ
ЕВРАЗИЙСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Л. Н. ГУМИЛЕВА
GUMILYOV EURASIAN
NATIONAL UNIVERSITY



Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2015»
атты X Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
X Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2015»

PROCEEDINGS
of the X International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2015»

УДК 001:37.0
ББК72+74.04
Ғ 96

Ғ96

«Ғылым және білім – 2015» атты студенттер мен жас ғалымдардың X Халық. ғыл. конф. = X Межд. науч. конф. студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2015» = The X International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2015». – Астана: <http://www.eni.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie-2015/>, 2015. – 7419 стр. қазақша, орысша, ағылшынша.

ISBN 978-9965-31-695-1

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 001:37.0
ББК 72+74.04

ISBN 978-9965-31-695-1

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2015

Как видно из приведенных выше рисунков 1-3 с повышением времени травления увеличивается диаметр пор. На рисунке 4 показана морфология поверхности структуры SiO₂/Si, облученная ионами Ar (38 МэВ, 1×10⁹), как показывает эксперимент, в данном образце поры вытравливаются плохо, эта тенденция видна и на рисунках 5-6, где на образцах с более высоким флюэнсом также четких пор не наблюдается.

Таким образом нами была изучена морфология вытравленных треков в слоях аморфного SiO₂ на Si. Показано, что использование доз $\leq 10^9$ см⁻² позволяет создавать систему каналов практически одинакового размера и правильной формы.

Список использованных источников

1. Dallanora A., Marcondes D.A., Bermudez T.L., Fichtner G.G., Trautmann C., Toulemonde M., Papaleo R.M. // J. Appl. Phys. – 2008. – 104. – P. 024307.
2. Bergamini, Bianconi M., Cristiani S., Gallerani L., Nubile A., Petrini S., Sugliani S. // Nucl. Instr. Meth. B. – 2008. – 266. – P. 2475 - 2480.
3. Vlasukova L.A., Komarov F.F., Yuvchenko V.N., Mil'chanin O.V., Didyk A.Yu., Skuratov V.A., Kislitsyn S.B. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2012. 76. – P. 582–587.
4. Nuclear Tracks in Solids/Ed.R.L.Fleischer. Berkeley: Univ. California Press, 1975 – P.23-27.
5. Sigrist A., Balzer R. // Helv. Phys. Acta. 1977 V. 50. P. 75.
6. Jensen ., Skupinski M., Razpet A., Possnert G. // Nucl. Instr. and Meth. B. 2000 V.166/167 p.903.
7. Hoppe K., Fahrner W.R., Fink D. et.al // Nucl. Instr. Methods. B. 2008. V. 266. P. 1642.
8. Fujimaki M., Rockstuhl C., Wang X. et al. // Opt. Exp. 2008. v V.16 P.64068.
9. Ferting N., Blick R.H., Berhends J.C. // Biophys. J. 2002. V 18. P. 3056.
10. Stolterfoht N., Hellhammer R., Juhasz Z. et al. // Phys. Rev. A. 2010. V 82 P. 245.

УДК 538.958

СdS ЖАРТЫЛАЙ ӨТКІЗГІШ КВАНТТЫҚ НҮКТЕЛЕРІНДЕГІ ЭЛЕКТРОНДЫҚ АУЫСУЛАРҒА ДИПОЛЬДЫҚ МОМЕНТТІҢ ЖӘНЕ СЫРТҚЫ ЭЛЕКТР ӨРІСІНІҢ ӘСЕРІ

Асильбекова Алия Молдабековна

aliya_2.5.4.2@mail.ru

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Физика-техникалық факультеті, «Техникалық физика»
мамандығының 2-ші курс магистранты, Астана, Қазақстан

Ғылыми жетекшісі – А. А. Алдонгаров

Наноөлшемді масштабтағы материалдардың оптикалық қасиеттері физикалық химияда маңызды пән ретінде терең зерттелуде [1-3]. Олардың негізгі ерекшелігі бұл материалдардың өлшемі электрондық және оптикалық қасиеттерін анықтайтындығында [4,5]. Сондықтан, бұл бөлшектер атомдық (немесе молекулалық) күй мен көлемді кристалл арасында орналасқан заттың аралық күйін сипаттайтын жаңа физикалық қасиеттерге ие болады. Олардың айрықша электрондық табиғаты кең практикалық қолданысқа ие, мысалы биологиялық маркерлер [6], дисплейлер [7], күн элементтерін [8], лазерлер [9] және фотокатализаторлар [10] жасау.

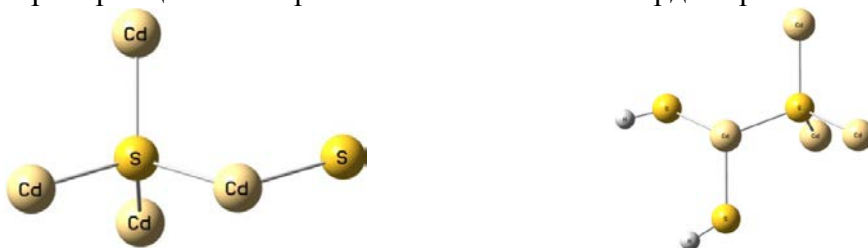
Практикалық қолдану үшін келешегі мол қосылыс кадмий сульфиді CdS болып табылады. Қазіргі таңда CdS наноөлшемді бөлшектердің электрондық қасиеттерін зерттеулер

бойынша тәжірибелік және кванттық-химиялық модельдеуді қолданумен орындалған зерттеулердің көптігіне қарамастан, бұл салада шешілмеген мәселелер көп.

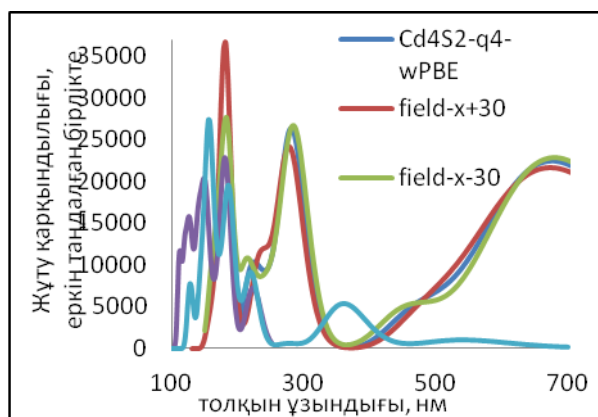
Бұл зерттеу жұмысында кіші өлшемді CdS жартылай өткізгіш кванттық нүктелеріндегі электрондық ауысуларға дипольдық моменттің және сыртқы электр өрісінің әсері зерттелді. Gaussian09 [11] бағдарламалық пакетінде орындалатын DFT тығыздық функционал әдісімен сыртқы электростатикалық өріс пен нүктелік [background] зарядтар қатысымен кластерлердің электрондық спектрлері есептелді. Электростатикалық өріс кернеулігі векторының бағыты және нүктелік зарядтардың орналасуы дипольдық момент векторының шамасын максимал кемітетіндей немесе арттыратындай етіп тандап алынды.

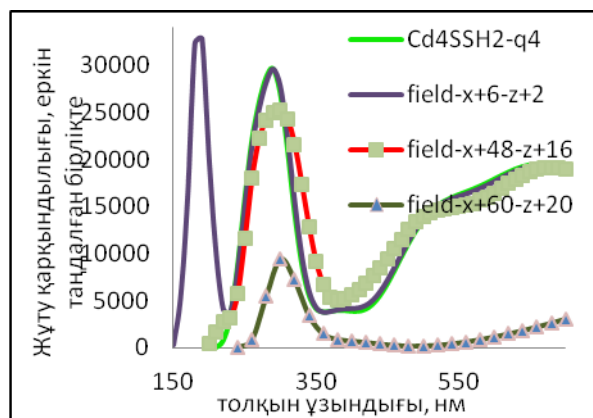
Электростатикалық өріс әсерін зерттеу кезінде S^- және SH^- беттік иондары бар $[Cd_4S_2]^{4+}$, $[Cd_4S(SH)_2]^{4+}$ кластерлері қарастырылды. Бұл үлгілі кластерлердің құрылымы CdS наноөлшемді кластерлері туралы белгілі эксперимент нәтижелері [12,13] бойынша құрастырылып, 1-ші суретте көрсетілген. Сонымен қатар, аталған кластерлер үшін электрондық жұту спектрлері есептелді және ол 2-ші суретте беріліп отыр.

Сыртқы электростатикалық өріс қатысуымен $[Cd_4S_2]^{4+}$ және $[Cd_4S(SH)_2]^{4+}$ кластерлері үшін визуализацияланған шекаралық молекулалық орбитальдар HOMO және LUMO, диполь моментінің D , ең төмен энергетикалық ауысулардың толқын ұзындықтарының λ_1 , интенсивті ауысулардың толқын ұзындықтарының λ_{int} және оның сәйкес осциллятор күштерінің f шамалары 1-ші және 2-ші кестелерде берілген.



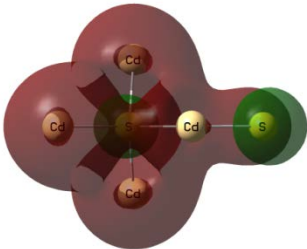
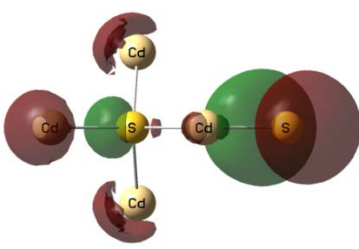
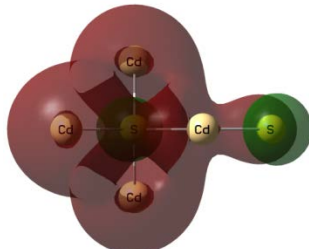
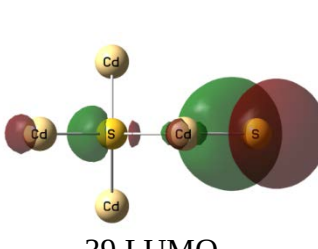
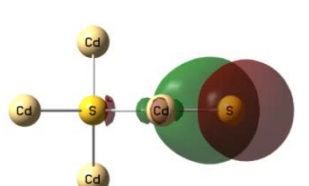
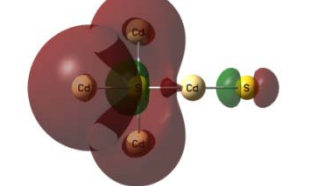
Сурет 1 – $[Cd_4S_2]^{4+}$ және $[Cd_4S(SH)_2]^{4+}$ кластерлерінің құрылымдары.





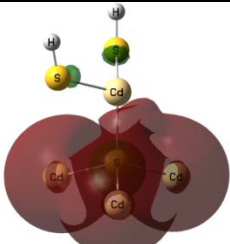
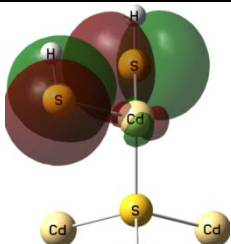
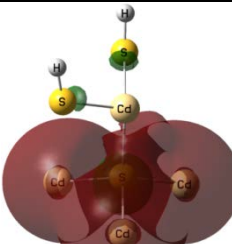
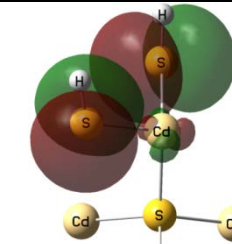
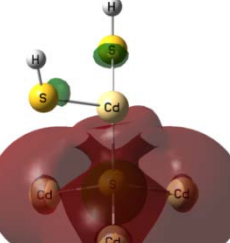
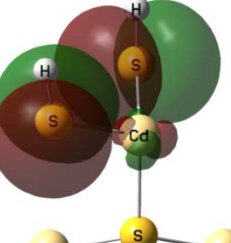
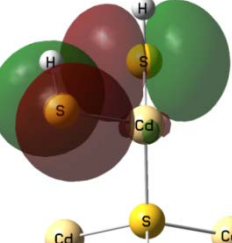
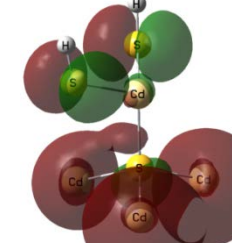
Сурет 2 – а) $[\text{Cd}_4\text{S}_2]^{4+}$; б) $[\text{Cd}_4\text{S}(\text{SH})_2]^{4+}$ кластерлерінің электрондық спектрлері.

Кесте 1. $[\text{Cd}_4\text{S}_2]^{4+}$ кластері үшін HOMO және LUMO молекулалық орбитальдары, диполь моментінің D (Дб), λ_1 және λ_{int} (нм) және оның сәйкес осциллятор күштерінің f шамалары.

$[\text{Cd}_4\text{S}_2]^{4+}$			
			
38 HOMO		39 LUMO	
D = 3,5946; λ_1 = 4265,76; λ_{int} = 867,74; f = 0,1275			
$[\text{Cd}_4\text{S}_2]^{4+}$ + field x-30		$[\text{Cd}_4\text{S}_2]^{4+}$ + field x+30	
			
38 HOMO		39 LUMO	
D = 0,1628; λ_1 = 4959,79; λ_{int} = 673,01; f = 0,2352		D = 7,1702; λ_1 = 3883,04; λ_{int} = 835,76; f = 0,1476	
$[\text{Cd}_4\text{S}_2]^{4+}$ + field x-100		$[\text{Cd}_4\text{S}_2]^{4+}$ + field x+100	
			
37 HOMO		38 LUMO	
D = 2,2443; λ_1 = 3686,99; λ_{int} = 366,29; f = 0,1067		D = 4,9742; λ_1 = -4260,91; λ_{int} = 222,39; f = 0,1771	

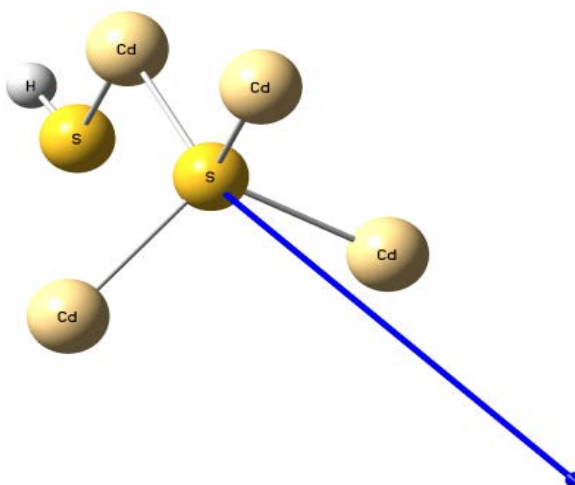
1-ші кестеде берілген мәліметтерге сәйкес сыртқы электростатикалық өріс әсер еткенде $[\text{Cd}_4\text{S}_2]^{4+}$ кластерінің электрондық спектрлерінде λ_1 шамасы 1000 нм-ден де көп қарқынды емес, төмен энергетикалық ауысулар кездеседі. Сыртқы электростатикалық өрістің аз шамасында дипольдық моменттің максимал артуын және кемуін бақылауға болады, алайда мұндай өрістер электрондық жұту спектрлеріне әсер етпейді. Күшті электростатикалық өрістерде λ_1 шамасының қысқа толқынды аймаққа ығысқанын көреміз (сурет 2, а), бұл өз кезегінде тыйым салынған зонада окшауланған күйлердің орналасуын азайтады. Сыртқы электростатикалық өрістің аз шамасында жоғарғы бос емес молекулалық орбитальдар барлық кластер бойынша локализацияланған, ал төменгі бос молекулалық орбитальдардың толқындық функциялары S^{2-} күкірт иондарында орналасады.

Кесте 2. $[\text{Cd}_4\text{S}(\text{SH})_2]^{4+}$ кластері үшін HOMO және LUMO молекулалық орбитальдары, диполь моментінің D (Дб), λ_1 және λ_{int} (нм) және оның сәйкес осциллятор күштерінің f шамалары.

$[\text{Cd}_4\text{S}(\text{SH})_2]^{4+}$		$[\text{Cd}_4\text{S}(\text{SH})_2]^{4+} + \text{Field}=\text{x}+6$ $\text{Field}=\text{z}+2$	
			
47 HOMO		47 HOMO	
48 LUMO		48 LUMO	
D = 3,2553; $\lambda_1 = -912,48$; $\lambda_{\text{int}} = 693,89$; f = 0,1823		D = 3,1582; $\lambda_1 = -844,98$; $\lambda_{\text{int}} = 695,97$; f = 0,1846	
$[\text{Cd}_4\text{S}(\text{SH})_2]^{4+} + \text{field}=\text{x}+48$ $\text{field}=\text{z}+16$		$[\text{Cd}_4\text{S}(\text{SH})_2]^{4+} + \text{field}=\text{x}+60$ $\text{field}=\text{z}+20$	
			
47 HOMO		47 HOMO	
48 LUMO		48 LUMO	
D = 2,7921; $\lambda_1 = -559,02$; $\lambda_{\text{int}} = 709,19$; f = 0.1988		D = 19,2268; $\lambda_1 = -2854,42$; $\lambda_{\text{int}} = 298,82$; f = 0,1177	

2-ші кесте бойынша сыртқы электростатикалық өрістің аз шамасында $[\text{Cd}_4\text{S}(\text{SH})_2]^{4+}$ кластерінің электрондық спектрінде λ_1 шамасының қысқа толқынды аймаққа ығысуын бақылауға болады. Күшті электростатикалық өрістің әсері электрондық жұту спектрінде айқын көрініс бермейді, алайда молекулалық орбитальдардың локализациясындағы өзгерістерді бақылай аламыз (сурет 2, б).

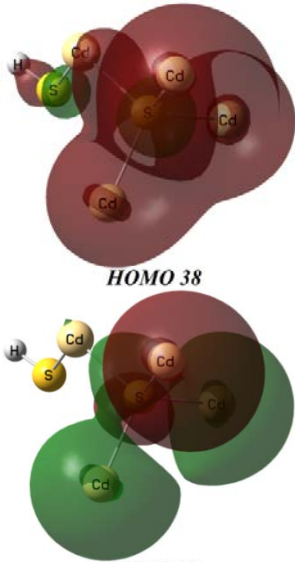
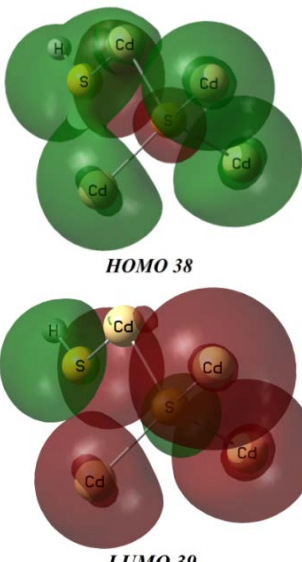
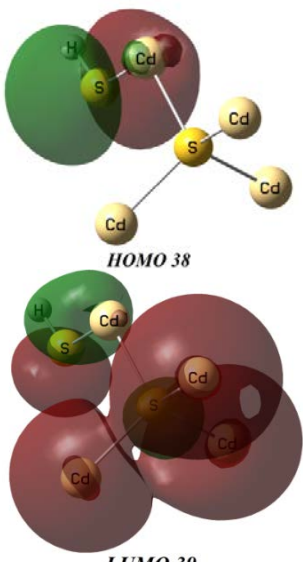
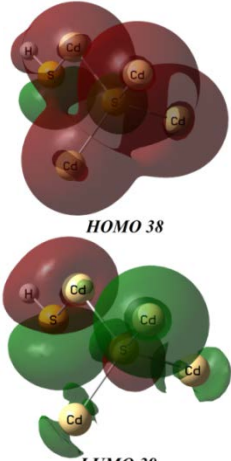
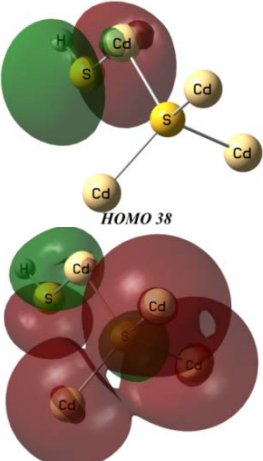
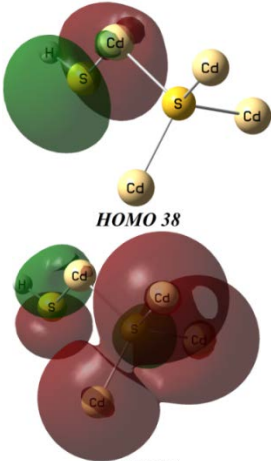
Содан кейін, екі нүктелік зарядтар туғызған электростатикалық өрістің кванттық нүктелердің электрондық ауысуларына әсері қарастырылды. Есептеулер үшін бір SH^- беттік ионы бар $[\text{Cd}_4\text{S}_1(\text{SH})_1]^{5+}$ кластері ($\lambda_1 = -4819,17$ нм, $\lambda_{\text{int}} = 247,86$ нм, $f=0.1968$, дипольдық момент $11,0695$ Дб. тең) алынды. Оның құрылымы 3-ші суретте берілген. Әр түрлі заряд шамасында және әр түрлі координатада алынған нүктелік зарядтардың қатысуымен $[\text{Cd}_4\text{S}_1(\text{SH})_1]^{5+}$ кластері үшін НОМО және LUMO молекулалық орбитальдары, диполь моментінің D (Дб), λ_1 және λ_{int} (нм) және оның сәйкес осциллятор күштерінің f шамалары 3-ші кестеде берілген.



Сурет 3 – $[\text{Cd}_4\text{S}_1(\text{SH})_1]^{5+}$ кластерінің дипольдық моментінің бағытымен алынған құрылымы.

Кесте 3. $[\text{Cd}_4\text{S}_1(\text{SH})_1]^{5+}$ кластері үшін НОМО және LUMO молекулалық орбитальдары, диполь моментінің D (Дб), λ_1 және λ_{int} (нм) және оның сәйкес осциллятор күштерінің f шамалары.

	$q_1(-2; 0; 5,5),$ $q_2(2; 0; -5,50), d_1 = 11,7$	$q_1(-4; 0; 11),$ $q_2(4; 0; -11),$ $d_2 = 23,41$	$q_1(-6; 0; 16,5),$ $q_2(6; 0; -16,5), d_3 = 35,11$
--	--	---	--

$q_1 = -2,$ $q_2 = 2$	$D = 42,1715$ $\lambda_1 = -2017,96;$ $\lambda_{int} = 728,34; f=0,2643;$  <i>HOMO 38</i> <i>LUMO 39</i>	$D = 9,4854$ $\lambda_1 = 2537,32;$ $\lambda_{int} = 1250,45; f=0,1469;$  <i>HOMO 38</i> <i>LUMO 39</i>	$D = 2,3019$ $\lambda_1 = -2494,47;$ $\lambda_{int} = 1262,14; f=0,1205;$  <i>HOMO 38</i> <i>LUMO 39</i>
$q_1 =$ $-1,0, q_2 =$ $1,0$	$D = 23,2369$ $\lambda_1 = -1489,55;$ $\lambda_{int} = 1480,78; f=0,1004;$  <i>HOMO 38</i> <i>LUMO 39</i>	$D = 2,4443$ $\lambda_1 = -2341,27;$ $\lambda_{int} = 1256,55; f=0,1246;$  <i>HOMO 38</i> <i>LUMO 39</i>	$D = 2,8863$ $\lambda_1 = -3186,50;$ $\lambda_{int} = 1279,63; f=0,1046;$  <i>HOMO 38</i> <i>LUMO 39</i>

Алынған нәтижелер келесі қорытындыны жасауға мүмкіндік береді: сыртқы электростатикалық өрістің аз шамасында дипольдық моменттің максимал артуын және кемуін бақылауға болады, алайда мұндай өрістер электрондық жұту спектрлеріне әсер етпейді. Күшті электростатикалық өрістерде λ_1 шамасының қысқа толқынды аймаққа ығысқанын бақылаймыз, бұл өз кезегінде тыйым салынған зонада оқшауланған күйлердің орналасуын азайтады.

Қолданылған әдебиеттер

1. Henglein, A. Chem. Rev. 1989, 89, 1861.
2. Bawendi, M. G.; Steigerwald, M. L.; Brus, L. E. Annu. Rev. Phys. Chem. 1990, 41, 477.
3. Collier, C. P.; Vossmeier, T.; Heath, J. R. Annu. Rev. Phys. Chem. 1998, 49, 371.

4. 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.
5. Schmid G. Ed. Nanoparticles. From Theory to Application. Weinheim: Wiley-VCH, 2004. 434 p.
6. Liu L., Xu X., Luo T. Liu Y., Yang Zh., Lei J. Metal enhanced photoluminescence of near-infrared $\text{CdTe}_x\text{Se}_{1-x}$ quantum dots. *Solid State Communications* 2012, v.152. P 1103–1107
7. 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, v 356. P 1016–1020.
8. Sarkar S., Makhal 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, v 116 (27). P 14248–14256.
9. Klimov Vol. I., Mikhailovsky A. A., Xu S., Malko A., Hollingsworth J. A., Leatherdale C. A., Eisler H.-J., Bawendi M. G. Optical Gain and Stimulated Emission in Nanocrystal Quantum Dots. *Science.* 2000. Vol. 290. P. 314-317.
10. Li Q., Guo B., Yu J., Ran J., Zhang B., Yan H., Gong R. J., Highly efficient visible-light-driven photocatalytic hydrogen production of CdS-cluster-decorated graphene nanosheets. *J. Am. Chem. Soc.* 2011. Vol. 133(28). P. 10878-10884.
11. Frisch M. J., et al. Gaussian 09, Revision C.01(Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010).
12. 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.
13. Frenzel, J., Joswig, J.-O., Seifert, G. Optical Excitations in Cadmium Sulfide Nanoparticles. *J. Phys. Chem. C.* 2007. Vol. 111. P. 10761-10770.

УДК 543.62

ОРГАНИКАЛЫҚ БОЯҒЫШТАРДЫ КҮН ЖАРЫҒЫНЫҢ ТОЛҚЫН ҰЗЫНДЫҒЫМЕН ЭФФЕКТИВТІ ТРАНСФОРМАЦИЯЛАУШЫ МАТЕРИАЛ РЕТІНДЕ ҚОЛДАНУ

Бірлес Айнұр₁, Маулен Жазира₂

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ,

Физика – техникалық факультеті, Техникалық физика мамандығының

12- курс магистранты, 24-ші курс студенті

ainur.birles@mail.ru, zhazi_93_kz@mail.ru

Ғылыми жетекші: Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық университеті, радиоэлектроника және техникалық физика кафедрасының аға оқытушысы, физика-математика ғылымдарының аға оқытушысы Бекмырза К.Ж.

Ғылыми жетекші: Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық университеті, радиоэлектроника және техникалық физика кафедрасының аға оқытушысы, физика-математика ғылымдарының кандидаты Кайнарбай А.Ж.

Люминесцентті күн концентраторларының матрицасы

Полимерлі матрицаға (ПММА ПС, ПК, эпоксидті композициялар және т.б) органикалық бояғыштарды (люминофорларды) енгізу люминесцентті күн концентраторларына оптикалық орта құру үшін қолданылады (ЛКК). Қазіргі уақытқа дейін ЛКК-нің көмегімен күн сәулесінің концентрациясын тұжырымдау қандайда бір теориялық ойдан даму алып практикалық қолданысқа дейін ие болды. ЛКК күннің сәулелену