

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



ЖАС ҒАЛЫМДАР КЕҢЕСІ



Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2016» атты
XI Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XI Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2016»

PROCEEDINGS
of the XI International Scientific Conference
for students and young scholars
«SCIENCE AND EDUCATION - 2016»

2016 жыл 14 сәуір
Астана

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

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2016»
атты XI Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XI Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2016»**

**PROCEEDINGS
of the XI International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2016»**

2016 жыл 14 сәуір

Астана

ӘӨЖ 001:37(063)

КБЖ 72:74

Ғ 96

Ғ96 «Ғылым және білім – 2016» атты студенттер мен жас ғалымдардың XI Халық. ғыл. конф. = XI Межд. науч. конф. студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2016» = The XI International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2016» . – Астана: [http://www.enu.kz/ru/nauka/ nauka-i-obrazovanie/](http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/), 2016. – б. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-764-4

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.

ӘӨЖ 001:37(063)

КБЖ 72:74

ISBN 978-9965-31-764-4

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2016

люмиенценция қозу спектрі күлгін аймағына келеді. Осыны Родамин 6 Ж және Флуоресцеинге қатысты айтсақ болады.

- Бұл мәселелердің шешімін эффективті энергия тасымалы механизмі беретіні анық.
- Флуоресцентті спектр түрлендіргішінің құрылымдық моделі тұрғызылды.
- Сондай-ақ, ғылыми-зерттеу жұмыстарын орындау кезінде алынған нәтижелер әртүрлі энергия тасымалы механизмі бар жағдайдағы фотофизикалық процестердегі имитациялық модельдеу әдісінің дамуында маңызды орын алады.
- Радиалды полимеризация әдісімен полимерлерді алу жолдарын меңгердік, ЛСК моделі зерттелді.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. McKinsey D.N. et al. Fluorescence Efficiencies of Thin Scintillating Films in the Extreme Ultraviolet Spectral Region // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 1997. 132. P. 351-358.
2. Вакуумные фотоэлектронные приборы / А.Г. Берковский, В.А. Гаванин, И.Н. Зайдель. – 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Радио и связь, 1988, 272 с.
3. Lakowicz J. R. Principles of fluorescence spectroscopy. Kluwer Academic/Plenum Publishers: New York. 1999. 725 p.
4. Förster T. Delocalized excitation and energy transfer // Modern quantum chemistry. Vol. 3.
5. Sinanoglu O. Ed.; Academic Press: New York. 1965. P. 93-137.
6. Stryer L. Fluorescence energy transfer as a spectroscopic ruler. // Annu. Rev. Biochem. 1978. 47. P. 819-846.
7. Chigginio K.P., Smith T.R. // Prog. Reaction Kinetics. 1993. 18. P. 375-436.
8. Bruner E.C. Sensitive Visual Test for Concave Diffraction. // J. Opt. Soc. Am. 1969. № 59. P. 204.
9. Samson J.A.R., Techniques of Vacuum Ultraviolet Spectroscopy. - New York: Wiley, 1967, 212 p.
10. Translucent off-white diffusing nylon 6/6 tape purchased from McMaster-Carr Supply Company, Dayton, NJ, catalog number 8730K15.
11. Airbrush model CCAKCC, Paasche Airbrush Co., Harwood Heights, IL.
12. Jones B., et. al. Nanocrystalline Luminescence Solar Converters. // Photovoltaic Material. 2004.
13. W.G.J.H.M. van Sark, Meijerink A., Schropp R.E.I., J.A.M. van Roosmalen, Lysen E.H. // Proc. Symp. Efficient Use of Solar Rad. In Photovoltaic Power Eng. St Petersburg. Russia. 2003.

УДК 544.182.3

ПАССИВИРОВАНИЕ КЛАСТЕРОВ CdTe ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Бимуханов Асхат Нурлыбекович

bimukhanov.92@gmail.com

Магистрант 2-го курса физико-технического факультета

ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

Научный руководитель – А. А. Алдонгаров

Введение

Квантовые точки, КТ, – полупроводниковые нанокристаллы, являются перспективным объектом для биологических и медицинских применений благодаря их уникальным оптическим, химическим и физическим свойствам. Одна КТ может состоять из нескольких

сотен атомов, поэтому квантовые точки занимают промежуточное место между твердыми телами и отдельными атомами. Благодаря эффекту квантового пространственного ограничения, оптические свойства квантовых точек зависят от размеров нанокристаллов [1]. Поэтому, меняя их размеры и химический состав, можно получить спектры излучения квантовых точек в широкой области длин волн: весь видимый диапазон, иногда инфракрасную и ультрафиолетовую области.

Благодаря своим уникальным характеристикам, квантовые точки являются альтернативой традиционным люминофорам на основе органических красителей, активно применяющимся в медико-биологическом анализе [2]. Использование КТ может значительно повысить эффективность существующих методик исследования, диагностики и лечения [2]. Квантовые точки могут также найти применение в оптоэлектронных системах, таких как светоизлучающие диоды, ячейки солнечных батарей [3], полупроводниковые лазеры [1]. Массовому распространению КТ в науке и технике препятствует сложность определения концентраций нанокристаллов в суспензиях.

Широкозонное полупроводниковое соединение CdTe представляет значительный интерес для производства эффективных некогерентных источников света, лазеров, преобразователей солнечной энергии, детекторов, счетчиков рентгеновского и гамма-излучения и др.

В данной работе объектом исследования являются малые кластеры теллурида кадмия.

Целью данной работы является рассмотрение пассивирования, на основе метода функционала плотности, малых кластеров теллурида кадмия.

Методы расчетов

При реализации квантово-химического исследования наноразмерных кристаллов CdTe использовался метод функционала плотности DFT реализуемый в программном пакете Gaussian09 [4]. На сегодняшний день этот метод включает широкий набор различных функционалов.

Методом время-зависимого функционала плотности TD DFT [5-7] рассчитывались электронные спектры поглощения рассматриваемых кластеров.

Для расчета свойств объектов был использован широко используемый функционал LC-wPBE [8-10]. Все расчеты проводились с использованием вычислительных ресурсов Национальной научной лаборатории коллективного пользования информационных и космических технологий (ННЛ КП ИКТ) при Казахском национальном исследовательском техническом университете имени К. И. Сатпаева [11].

Для модельных кластеров CdTe использовались следующие базисные наборы: DGDZVP [12-13]. Заряд кластеров определялся по следующей формуле $2*(g-j) - k$ для кластера с общей формулой $Cd_gTe_j(TeH)_k$ [14]

Для проведения расчетов были рассмотрены различные кластеры CdTe представленные на Рисунке 1 структуры которых были построены по известным экспериментальным данным [15]. Оптимизация кластеров не проводилась, так как для сохранения вюрцитовой структуры требуется искусственное наложение условия периодичности, либо использование кластеров чрезвычайно больших для расчетов размеров.

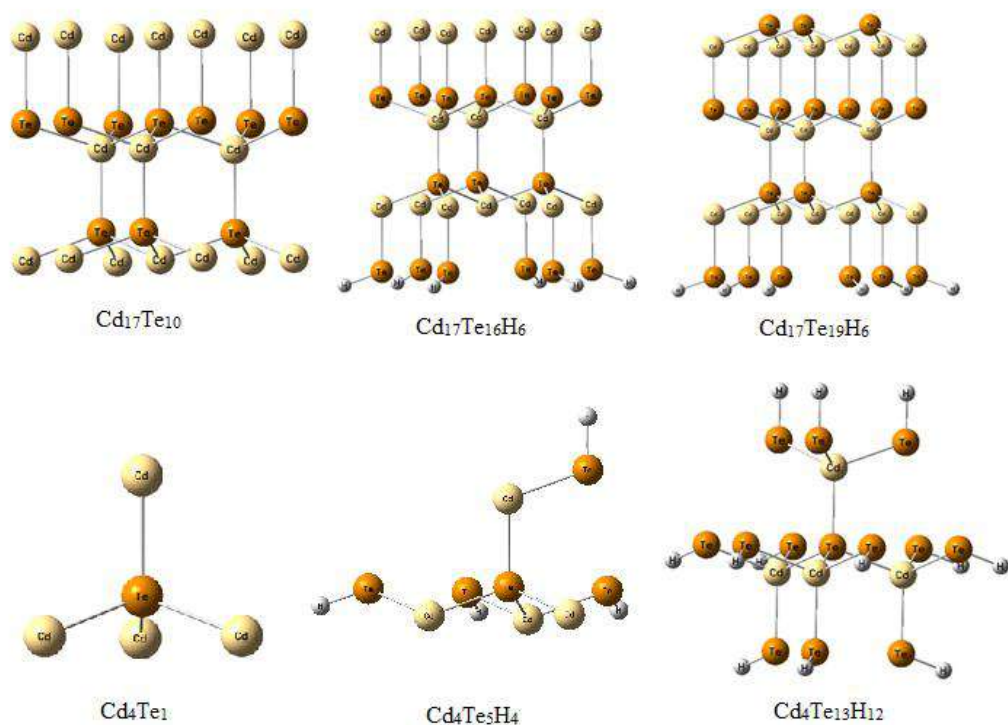


Рисунок 1 – Структура кластеров $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{10}]^{14+}$, $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{16}\text{H}_6]^{8+}$, $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{19}\text{H}_6]^{2+}$, $[\text{Cd}_4\text{Te}_1]^{6+}$, $[\text{Cd}_4\text{Te}_5\text{H}_4]^{2+}$ и $[\text{Cd}_4\text{Te}_{13}\text{H}_{12}]^{6-}$

Результаты расчетов длин волн первых и интенсивных переходов для кластеров $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{10}]^{14+}$, $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{16}\text{H}_6]^{8+}$, $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{19}\text{H}_6]^{2+}$, $[\text{Cd}_4\text{Te}_1]^{6+}$, $[\text{Cd}_4\text{Te}_5\text{H}_4]^{2+}$ и $[\text{Cd}_4\text{Te}_{13}\text{H}_{12}]^{6-}$ обобщены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1 – Длины волн и энергии первых интенсивных переходов рассчитанные для кластеров $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{10}]^{14+}$, $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{16}\text{H}_6]^{8+}$, и $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{19}\text{H}_6]^{2+}$, λ – длина волны, f – сила осциллятора, МО – молекулярные орбитали (переходов).

$\text{Cd}_{17}\text{Te}_{10}$				
<i>Дипольный момент = 8.5048 (Дебай)</i>				
№ перехода	λ		f	МО
	(нм)	(эВ)		
1	-3996.41	-0.3102	-0.0000	661→662
24	1012.61	1.2244	0.1126	659→664
25	1010.38	1.2271	0.1775	659→665
26	1001.27	1.2383	0.2742	659→665
$\text{Cd}_{17}\text{Te}_{16}\text{H}_6$				
<i>Дипольный момент = 26.7203 (Дебай)</i>				
№ перехода	λ		f	МО
	(нм)	(эВ)		
1	1975.39	0.6276	0.0000	819→825
5	1873.63	0.6617	0.2085	821→824
6	1873.59	0.6617	0.2085	822→824
15	958.56	1.2934	0.1777	823→826

16	958.56	1.2934	0.1777	823→825
Cd₁₇Te₁₉H₆ Дипольный момент = 3.9982 (Дебай)				
№ перехода	λ		f	МО
	(нм)	(эВ)		
1	1205.23	1.0287	0.0000	904→905
21	589.23	2.1042	0.1708	894→905

Из рисунка 1 видно, что изначально построенный нанокластер $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{10}]^{14+}$, имеет множество оборванных связей. По данным таблицы 1 можно сказать, что имеется множество неинтенсивных переходов в длинноволновых областях. Следующий нанокластер $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{16}\text{H}_6]^{8+}$, полученный путем пассивирования группы H^+Te^- , также имеет неинтенсивные переходы, которые являются признаком наличия большого количества локализованных состояний. В случае с $[\text{Cd}_{17}\text{Te}_{19}\text{H}_6]^{2+}$, мы сократили число оборванных связей до нуля, сохраняя симметрию. Как видно из таблицы, уменьшился дипольный момент, и сократилось количество неинтенсивных переходов. Соответственно можно сказать, что атом хорошо пассивирован.

Таблица 2 – Длины волн и энергии первых интенсивных переходов рассчитанные для кластеров $[\text{Cd}_4\text{Te}_1]^{6+}$, $[\text{Cd}_4\text{Te}_5\text{H}_4]^{2+}$ и $[\text{Cd}_4\text{Te}_{13}\text{H}_{12}]^{6-}$, λ – длина волны, f – сила осциллятора, МО – молекулярные орбитали (переходов).

Cd₄Te₁ Дипольный момент = 0.0095 (Дебай)				
№ перехода	λ		f	МО
	(нм)	(эВ)		
1	192.22	6.4502	0.2827	119→120
2	192.17	6.4518	0.2809	118→120
3	192.17	6.4518	0.2809	117→120
9	171.56	7.2268	0.3103	119→121
10	171.52	7.2288	0.3111	117→122
16	131.68	9.4154	0.4313	118→125
17	131.68	9.4155	0.4328	119→124
18	131.68	9.4155	0.4328	119→125
25	116.32	10.6593	0.7058	119→126
26	116.31	10.6597	0.7050	118→128
27	116.31	10.6598	0.7051	118→127
Cd₄Te₅H₄ Дипольный момент = 16.3836 (Дебай)				
№ перехода	λ		f	МО
	(нм)	(эВ)		
1	3039.85	0.4079	0.0285	227→228
20	330.96	3.7462	0.1038	224→229
32	265.04	4.6779	0.1061	223→231
34	260.40	4.7614	0.1482	216→228
38	250.30	4.9535	0.3247	227→235
39	247.93	5.0008	0.1609	220→230
Cd₄Te₁₃H₁₂ Дипольный момент = 0.8378 (Дебай)				
№	λ		f	МО

перехода	(нм)	(эВ)		
1	292.18	4.2434	0.0000	443→444
31	228.39	5.4285	0.1552	441→445
32	228.36	5.4293	0.1568	440→445
33	226.86	5.4653	0.3589	442→447
34	226.84	5.4657	0.2932	442→448
35	226.82	5.4661	0.3545	442→447

По данным таблицы 2 можно сказать, что нанокластер $[\text{Cd}_4\text{Te}_1]^{6+}$, имеющий множество оборванных связей, не имеет длинноволновых переходов и обладает почти нулевым дипольным моментом и интенсивный первый переход. Все это является результатом высокой симметрии нанокристалла и как следствие симметричным распределением заряда по объему. Это говорит о том, что кластер не требует как такового пассивирования. При пассивировании поверхности кластера $[\text{Cd}_4\text{Te}_1]^{6+}$ группой H^+Te^- можно сказать, что увеличился дипольный момент, наблюдаются множество неинтенсивных переходов в длинноволновых областях. В случае с кластером $[\text{Cd}_4\text{Te}_{13}\text{H}_{12}]^{6-}$ из рисунка 1 мы видим высокую симметрию, за счет уменьшения оборванных связей, что привело к уменьшению дипольного момента.

Полученные результаты позволяют сформулировать вывод, что симметрия кристалла, соответственно распределение заряда по объему нанокластера и как следствие дипольный момент является определяющим фактором формирования локализованных состояний. Таким образом, для хорошего пассивирования малых нанокластеров теллурида кадмия требуется наличие симметричной структуры с минимальным дипольным моментом.

Список использованных источников

1. V.I. Klimov. Nanocrystal quantum dots. From fundamental photophysics to multicolor lasing // Los Alamos Sc. 2003. Vol. 28. P. 214-220.
2. S.W. Lee, C. Mao, C.E. Flynn. Ordering of quantum dots using genetically engineered viruses // Science, 2002. Vol. 296. P. 982-895.
3. R.B.Vasiliev, S.G.Dorofeev, D.N.Dirin, D.A.Belov, T.A.Kuznetsova. Synthesis and optical properties of PbSe and CdSe colloidal quantum dots capped with oleic acid // Mend, Comm. 2004. № 14(4). P. 169-171.
4. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. Gaussian 09, Revision C.01 (Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010).
5. 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.
6. 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.
7. 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.
8. O.A. Vydrov and G. E. Scuseria, Assessment of a long range corrected hybrid functional, J. Chem. Phys. 2006. № 125. P. 234109.
9. O.A. Vydrov, J. Heyd, A. Krukau, and G. E. Scuseria, Importance of short-range versus long-range Hartree-Fock exchange for the performance of hybrid density functionals, J. Chem. Phys. 2006. № 125. P. 074106.
10. O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, and J.P. Perdew, Tests of functionals for systems with fractional electron number, J. Chem. Phys. 2007. № 126. P. 154109.
11. Электронный ресурс: <http://www.kazntu.kz/ru/node/1894>
12. N. Godbout, D.R. Salahub, J. Andzelm, and E. Wimmer, Optimization of Gaussian-type basis sets for local spin density functional calculations. Part I. Boron through neon, optimization technique and validation, Can. J. Chem. 1992. № 70. P. 560-571.

13. C. Sosa, J. Andzelm, B. C. Elkin, E. Wimmer, K. D. Dobbs, and D. A. Dixon, A Local Density Functional Study of the Structure and Vibrational Frequencies of Molecular Transition-Metal Compounds, J. Phys. Chem. 1992. № 96. P 6630-6636.
14. Frenzel J., Joswig, J.-O., Seifert, G. Optical Excitations in Cadmium Sulfide Nanoparticles // J. Phys. Chem. C. 2007. Vol. 111. P. 10761-10770.
15. Feng Tao, Zha Gangqiang, Yang Jian, Li Jiong, Jiang Zheng, Xu Lingyan, Wang Tao and Jie Wanqi. XAFS and XRD Studies of the $Cd_{1-x}Zn_xTe$ Crystal Fine Structure // Journal of Physics: Conference Series. 2013. № 430. P. 012087.

ӘОЖ 621.039:330.45.

АВТОНОМДЫ СУТЕКТІ ЭНЕРГЕТИКАЛЫҚ ҚОНДЫРҒЫЛАРДЫҢ ҚҰРАМЫНА КІРЕТІН ОТЫНДЫҚ ЭЛЕМЕНТТЕРДІ РАЗРЯДТЫ ҚИСЫҚТАР МЕН ИМПЕДАНСТЫ СПЕКТРОСКОПИЯ ӘДІСТЕРІМЕН ЗЕРТТЕУ

Ешмұратов Ақсұлтан Бауыржанұлы

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, техникалық физика (6М072300) мамандығының екінші
курс магистранты, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – К.А. Кутербеков

Ток көздерінің оттекті-сутекті көздерінің вольтамперлік және қуатты сипаттамаларының разрядты қисықтар мен импедансты спектроскопия әдістерімен зерттеу өткізілді. Токтың оттекті-сутекті көздерінің сипаттамалары көбіне сутекті отын элементтерінің мембраналық-электродты блогының қасиетімен анықталады. Отын элементтеріне қатысты талаптар олардың электр кедергілерін азайту, каталитикалық қабаттардағы газ алмасуды жақсарту мен қоршаған ортамен су алмасуды оңтайландыру қозғалады. 100 °С дейін температура кезінде жұмыс істейтін зерттеулердің негізгі әдістерінің бірі разрядты қисық әдісі болып табылады.

Кілттік сөздер: оттегі, ауа, сутегі, сутектіотын процессоры, отынэлементі.

Қазіргі уақытта сутекті отын элементінің мембраналық-электродты блоктарына (МЭБ-на) қойылатын жалпы талаптар бізге танымал. Олар катализатордың электрокаталитикалық белсенділігін, каталитикалық қабаттардың төмен диффузиялық кедергісін, фазааралық шекаралардың үлкен шоғырлануын қамтамасыз ететін тасымалдау кезеңінің дамыған жүйесімен олардың оңтайлы құрылымын қарастырады. Отын элементтеріне қатысты талаптар олардың электр кедергілерін азайту, каталитикалық қабаттардағы газ алмасуды жақсарту мен қоршаған ортамен су алмасуды оңтайландыру қозғалады.

Сутекті отын элементтерінің құрамында (МЭБ) бірқатар зерттеулері өткізілді. Жұмыс істеу зерттеулері сутекті отын процессоры қондырғысының құрамында әр түрлі жұмыс режимдері кезінде сутегіні қайта өңдеудің электр химиялық құрылғысы зертханалық үлгіде өткізілді. 100 °С дейін температура кезінде жұмыс істейтін зерттеулердің негізгі әдістерінің бірі разрядты қисық әдісі болып табылады. МЭБ-мен жиынтықта отындық элемент (ОЭ) әр түрлі режимдерінің жұмыс істеу тиімділігін оңтайландыру мақсатымен разрядты қисықтар мен импедансты спектроскопия әдістерімен зерттеу өткізілді.

Отын элементіне арналған мембраналық-электродты блок (МЭБ). өнертабыс отын элементтері облысына, атап айтқанда отын ретінде сутегіні және тотықтандырғыш ретінде оттегіні (таза немесе ауадан) қолданатын температурасы 120-200°С диапазонымен жұмыс істейтін отын элементтері облысына жатады. Мембраналық-электродты блоктың протон-өткізуші мембранасы ретінде сұйық қышқылмен допирленген полимерлік мембрана қолданылатын және жұмыс диапазоны 200°С температураға дейін болатын отын элементтері