

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

$\text{Si}_{130}(\text{CH}_3)_{61}$; $\text{Si}_{172}(\text{CH}_3)_{77}$; $\text{Si}_{214}(\text{CH}_3)_{94}$. На рисунке 4, на 1 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны от нанокластера $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с числом атомов. Мы можем видеть уменьшение ширины запрещенной зоны, когда число атомов Si увеличиваются.

На рисунке 4, на 2 кривой показана зависимость ширины запрещенной зоны нанокластера $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с одной вакансией решетки кремния от количества атомов кремния. Наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны с увеличением числа атомов кремния.

На рисунке 4, на 3 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны нанокластера $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с одним атомом (V) замещения от количества атомов кремния, наблюдается так же снижение запрещенной зоны. На рисунке 4, на 4 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны нанокластера $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с одним атомом (As) замещения от количества атомов кремния, так же наблюдается снижение запрещенной зоны.

Закключение. Таким образом, в данной работе моделированы нанокластеры кремния Si_{18} , Si_{30} , Si_{50} , Si_{90} , Si_{130} , Si_{172} , Si_{214} , имеющие различные количества атомов кремния и соответственно небольшие размеры (1~2 нм). Моделированы нанокластеры, включающие в себя вакансий, атомы замещения 3 и 5 групп. Эти кластеры также моделированы в окружении алкилов CH_3 . Результаты моделирования показали, что ширина запрещенной зоны в целом уменьшается с увеличением количества атомов. Создание вакансий и внедрение атомов замещения в кристаллической решетке приводит к деформации решетки и незначительному изменению ширины запрещенной зоны.

Список использованных источников

1. Ostraat, M.L.; De Blauwe, J.W.; Green, M.L.; Bell, L.D.; Brongersma, M.L.; Casperson, J.; Flagan, R.C.; Atwater, H.A. Synthesis and characterization of aerosol silicon nanocrystal nonvolatile floating-gate memory devices // Appl. Phys. Lett. 2001. Vol. 79. P. 433.
2. Lockwood, D., Ed.; Several reviews of nanocrystal optical properties appear in: Light Emission in Silicon of Semiconductors and Semimetals; // Academic Press: New York. 1998. Vol 49.
3. Z. Zhou, R.A. Friesner, and L. Brus, "Electronic structure of 1 to 2 nm diameter silicon core/shell nanocrystals: surface chemistry, optical spectra, charge transfer, and doping," // Journal of the American Chemical Society. 2003. Vol. 125. № 50. P. 15599-15607.
4. M.A. Abdulsattar, "Size effects of semiempirical large unit cell method in comparison with nanoclusters properties of diamond-structured covalent semiconductors," // Physica E. 2009. Vol. 41. № 9. P. 1679-1688.
5. I. Vasiliev, J.R. Chelikowsky, and R.M. Martin, Surface oxidation effects on the optical properties of silicon nanocrystals. // Phys. Rev. B 65. 2002. 121302(R).
6. J.J.P. Stewart, "Optimization of Parameters for Semiempirical Methods VI: More Modifications to the NDDO Approximations and Re-Optimization of Parameters," // J. Mol. Model. 2013. № 19 (1). P. 1–32.

УДК 538.9

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОКРИСТАЛЛА CDS/CDSE

Хусаинова Сабина Мараткызы

Магистрант 2-курса физико-технического факультета,
ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан
Научный руководитель - Салиходжа Ж. М.

Введение. Полупроводниковые нанокристаллы за счет квантового эффекта проявляют различные оптические свойства в отличие от их объемных аналогов. Известно, что при

уменьшении размеров нанокристаллов оптическое поглощение переходит к более высоким энергиям. Для устранения поверхностных дефектов, таких как органические молекулы, полимеров и неорганических соединений используют защитный слой для наночастиц. Было обнаружено, что нанокристаллы, покрытые сверху (снаружи) неорганическими материалами более высокой ширины запрещенной зоны нанокристаллов типа ядро/оболочка обладают высокой интенсивности фотолюминесценции за счет эффективной ликвидации поверхности безызлучательной рекомбинации.

Метод исследования. В настоящее время для моделирования процессов в полупроводниковых наноструктурах успешно применяются квантово-химические методы из первых принципов (*ab initio*), методы молекулярной механики и полуэмпирические методы.

В настоящей работе применялся пакет квантово-химических программ MOPAC 2016, основанный на полуэмпирических методах, разработанный Дж. Стюартом (J. J. P. Stewart). Пакет квантово-химических программ MOPAC 2016 позволяет проводить квантово-химические расчеты в таких приближении как MINDO/3, MNDO, AM1 и PM3, в последних версиях – PM7.

В качестве расчетного метода был выбран квантово-химический метод NDDO PM7 (для расчета электронных свойств) [1,2]. Выбор именно данного метода обусловлен хорошей степенью надежности и воспроизводимости результатов [3-5]. Поскольку, применение неэмпирических квантово-химических методов имеет ограничение по размеру исследуемой системы в несколько порядков, поэтому для задачи вычисления энергии взаимодействия между большим числом атомов и лигандами применяются полуэмпирические квантово-химические методы. Эти методы занимают промежуточное положение между точными *ab initio* методами квантовой химии и методами молекулярной механики. Они гораздо более универсальны, чем методы молекулярной механики, и в значительной степени опережают неэмпирические методы по скорости вычислений благодаря использованию приближенных расчетов в тех случаях, где требуются значительные вычислительные ресурсы, и благодаря эмпирическим параметрам, определенным таким образом, чтобы предсказанные результаты наилучшим образом соответствовали экспериментальным данным.

В этом исследовании использовалась последняя модификация квантово-химического полуэмпирического пакета программ MOPAC2016, которая производит вычисления энергии (1SCF) среднего размера молекулярных систем, используя копроцессоры GPU [6].

Для полуэмпирических методов используется приближение ЛКАО (LCAO- Linear Combination of Atomic Orbitals), в котором молекулярные орбитали Ψ_i представляют собой линейные комбинации атомных орбиталей ϕ_λ : $\Psi_i = \sum_{\lambda=1}^M c_{\lambda i} \phi_\lambda$, где суммирование ведется по числу используемых атомных орбиталей M .

В результате того, что молекулярные орбитали зависят от матрицы Фока, а матрица Фока зависит от молекулярных орбиталей, уравнения самосогласованного поля должны решаться самосогласованно методом итераций. В этом приближении матрица плотности P , составленная из функций молекулярных орбиталей, имеет вид

$$\hat{P} = 2 \sum_{i=1}^N c_{\lambda i} c_{\sigma i}.$$

Объект исследования. Для квантово-химического моделирования были построены наноразмерные структуры CdS и CdS/CdSe, содержащие 32 - 144 атомов. Наноструктуры CdS, CdSe имеют гексагональную пространственную симметрию со структурой вюрцита с постоянной решеткой $a=b=4,1368 \text{ \AA}$, $c=6,7163 \text{ \AA}$.

Результаты и обсуждение. Целью работы является исследование квантово-размерного эффекта для структур CdS, CdS/CdSe имеющих разные размеры, т.е. зависимость ширины запрещенной зоны от размеров наноструктур. Ширину запрещенной зоны в данной работе оценили по разности энергии ВЗМО (верхняя занятая молекулярная орбиталь) и НСМО

(нижняя свободная молекулярная орбиталь) (HOMO – highest occupied molecular orbital, LUMO lowest unoccupied molecular orbital).

Рассмотрены наноструктуры, имеющие высоту равную одному параметру c и увеличивающиеся по направлениям a и b . Эти наноструктуры состоят из 38, 44, 48, 56, 60, 64, 96 атомов. Одна из таких структур заряд, которого равен 0, содержит равные количества атомов кадмия и серы. Симметрия нанокластера с 38 атомами также соответствует гексагональной структуре вюрцита. Полная энергия этой структуры принимает значение равной -3908.45662 эВ, потенциал ионизации равен 7.307002 эВ. Одним из важнейших параметров является ширина запрещенной зоны, что соответствует разности значений HOMO и LUMO и для данной структуры равна 3,371 эВ. Распределение зарядов атомов равномерное, т.е. атомы кадмия имеют небольшой положительный заряд, а атомы серы отрицательный заряд. Наноструктура содержащая 44 атомов состоит из 22 атомов серы и кадмия, а ширина запрещенной зоны составила 3,099 эВ, соответственно для структуры из 48 атомов – 3,115 эВ, 56 – 3,064 эВ, 60 – 3,022 эВ, 64 – 3,095 эВ, 96 – 2,987 эВ. По результатам моделирования этих структур построена зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов в структуре (см. рисунок 1, кривая 1).

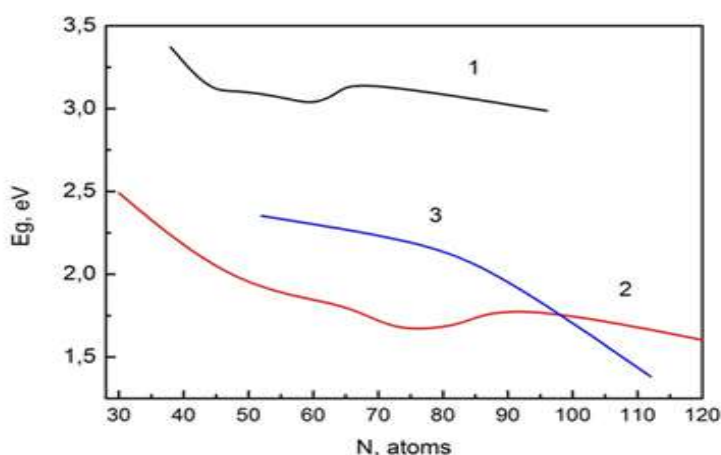


Рисунок 1. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов в наноструктурах CdS: 1 – для наноструктур с высотой равной параметру c ; 2 – с высотой равной $2c$; 3 – $3c$.

Также изучены наноструктуры имеющие высоту $2c$ и увеличивающиеся по направлениям a и b . Данные наноразмерные структуры содержат 30, 48, 66, 72, 84, 90, 144 атомов кадмия и серы (см. рисунок 1, кривая 2). Ширина запрещенной зоны составила соответственно для структуры из 30 атомов – 2,491 эВ, для 48 атомов – 1,905 эВ, 66 – 1,826 эВ, 72 – 1,647 эВ, 84 – 1,688 эВ, 90 – 1,861, также для 144 атомов $E_g = 1,401$ эВ. Рассмотрены также наноструктуры CdS, которые были построены вдоль параметров a и b и имеющие высоту равную $3c$. Эти структуры разных размеров, с количеством атомов 52, 76, 88, 112 (см. рисунок 1, кривая 3.). Разности значений HOMO и LUMO для данных структур соответственно 52 – 2,352 эВ, 76 – 2,205 эВ, 88 – 2,032 эВ, 112 – 1,383 эВ. Данные структуры являются более стабильными по сравнению с остальными изученными структурами. Симметрия структур соответствует гексагональной структуре вюрцита. Данные структуры имеют гексагональные плотные упаковки слоями (AB) вдоль оси c .

Известно, что значения ширина запрещенной зоны в полупроводниках равна 0,1 - 4 эВ. Ширина запрещенной зоны кристалла сульфида кадмия составляет 2,42 эВ, для сульфида селена около 1,74 эВ при комнатной температуре. Из полученной зависимости ширины запрещенной зоны от количества атомов в наноструктуре видно, что наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны по мере увеличения числа атомов. Такой характер зависимости ширины запрещенной зоны по нашему предположению связано с небольшим количеством атомов в наноструктурах.

Исследовано нанокластеры, содержащие вакансий в центральной части структуры. Изученные нанокластеры содержат две вакансии. На рисунке 2 приведены зависимости ширины запрещенной зоны кластера CdS различных размеров с двумя вакансиями. Кривая 1, на рисунке 2 соответствует наноструктурам с высотой равной одному параметру c , также кривая 2 соответственно структурам с высотой $2c$. Третья кривая на рисунке 2 соответствует наноструктурам CdS с высотой $3c$. Из графиков видно, что с увеличением числа атомов в нанокластерах с двумя вакансиями ширина запрещенной зоны увеличивается.

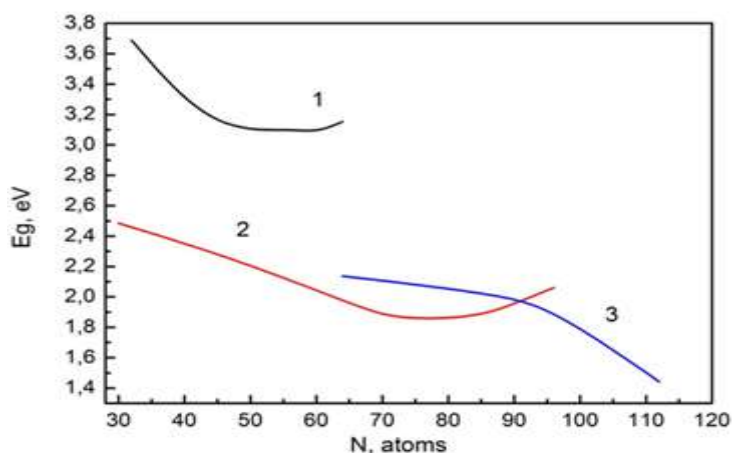


Рисунок 2. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов в наноструктурах CdS с двумя вакансиями: 1 – для наноструктур с высотой равной параметру c ; 2 – с высотой равной $2c$; 3 – $3c$.

Далее нами были рассмотрены нанокластеры сульфида кадмия, в которых все атомы серы находящиеся в центральной части решетки замещены атомами Se. Количество замещенных атомов зависит от размеров нанокластеров. Число замещенных атомов в нанокластерах составляют от 1 до 15, например, для структур с одним параметром c для 38 атомов 3 Se, 44 - 4 Se, 48 - 6 Se, 56 - 6 Se, 60 – 8 Se. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов для данных структур показана на рисунке 3, кривая 1.

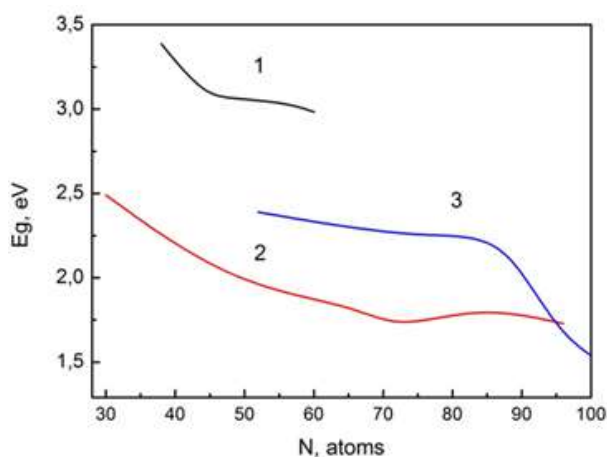


Рисунок 3. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов в наноструктурах CdS с атомами замещения Se: 1 – для наноструктур с высотой равной параметру c ; 2 – с высотой равной $2c$; 3 – $3c$.

Наноструктуры с высотой $2c$ соответственно для 30 атомов один атом серы замещен одним атомом Se, для 48 - 3 Se, 66 - 6 Se, также для 72 атомов - 9 Se, 84 - 9 Se и 96 - 15 Se.

Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов для данных структур показана на рисунке 3, кривая 2. Также для наноструктур CdS, имеющие высоту равную 3 с, центральные атомы серы были замещены атомами селена (см. рисунок 3, кривая 3). Так для 52 атома соответственно 2 атома Se, для 76 - 6 Se, 88 - 8 Se, также для 96 атомов - 12 Se и 112 - 12 Se. На рисунке 3 показана зависимость ширины запрещенной зоны от числа атомов в кластере CdS с замещенными атомами селена. Из зависимостей видно, что ширина запрещенной зоны уменьшается с увеличением числа атомов селена в нанокластерах.

Заключение. Таким образом, в данной работе, рассмотрены CdS, CdS/CdSe имеющие различные размеры. Нанокластеры были построены с включением вакансий и атомов замещения. Результаты моделирования показали, что ширина запрещенной зоны в целом уменьшается с увеличением числа атомов. Создание вакансий и встраивание в решетку атомов замещения приводят к деформации решетки до 5% и незначительному изменению ширины запрещенной зоны.

Список использованных источников

1. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods // J. Comput. Chem. 1989. Vol. 10. №2. P. 209-264.
2. Stewart J.J.P. Optimization of Parameters for Semi-Empirical Methods III-Extension of PM3 to Be, Mg, Zn, Ga, Ge, As, Se, Cd, In, Sn, Sb, Te, Hg, Tl, Pb, and Bi // J. Comput. Chem. 1991. Vol. 12. №3. P. 320-341
3. Чернотатонский Л.А. Новый класс диоксидных нанотруб MO_2 ($\text{M} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}, \text{Pb}$) из "квадратных" решеток атомов – их структура и энергетические характеристики // Письма в ЖЭТФ. Т. 80. № 10. С. 732-736.
4. Курганский С.И., Борщ Н.А. Геометрическая и электронная структура кремниевых и кремнево-металлических наночастиц. // Изв. РАН. Сер.физич. 2004. Т. 68. № 7. С. 1023-1025.
5. Власов А.Н., Филиппов В.В. Квантово-энергетические и кинетические свойства материалов кремниевой наноэлектроники на основе кластеров $\text{Si}_2\text{-Si}_{10}$ // Журнал радиоэлектроники. 2011. № 8.
6. Электронный ресурс: <http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs00894-012-1667-x>

Подсекция 1.5 Ядерная физика, новых материалов и технологии

UDC 620.22-419.8:661.8'074.3

POLY(LACTIC-ACID)-BASED POLYMER COMPOSITES AND THEIR CHARACTERIZATION

Ernar T. Amitov, Sergey M. Lebedev, Olga S. Gefle, Denis Yu. Berchuk,
Denis V. Zhuravlev

National Research Tomsk Polytechnic University

Abstract

Polymer composites on the basis of biodegradable poly(lactic acid) (PLA) were studied in this work. Pristine single-walled carbon nanotubes (CNTs) and powder of natural graphite (G) were used as fillers in these composites. PLA-based composites were prepared by melt-compounding method. The samples for this study were prepared by hot-pressing method. The volume resistivity of PLA/CNT composites can be changed by more than ten orders of magnitude compared to that for neat PLA. The thermal conductivity (λ) of PLA/G composites can be changed from the thermal conductivity of neat PLA up to $2.73 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Loading small quantity of CNTs into PLA/G