



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



Студенттер мен жас ғалымдардың  
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2014» атты  
IX халықаралық ғылыми конференциясы

IX Международная научная конференция  
студентов и молодых ученых  
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2014»

The IX International Scientific Conference for  
students and young scholars  
«SCIENCE AND EDUCATION-2014»

2014 жыл 11 сәуір  
11 апреля 2014 года  
April 11, 2014



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

**Студенттер мен жас ғалымдардың  
«Ғылым және білім - 2014»  
атты IX Халықаралық ғылыми конференциясының  
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ  
IX Международной научной конференции  
студентов и молодых ученых  
«Наука и образование - 2014»**

**PROCEEDINGS  
of the IX International Scientific Conference  
for students and young scholars  
«Science and education - 2014»**

**2014 жыл 11 сәуір**

**Астана**

**УДК 001(063)**  
**ББК 72**  
**Ғ 96**

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2014» атты студенттер мен жас ғалымдардың IX Халықаралық ғылыми конференциясы = IX Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2014» = The IX International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2014».  
– Астана: <http://www.eni.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2014. – 5831 стр.  
(қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-610-4

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.

**УДК 001(063)**  
**ББК 72**

ISBN 978-9965-31-610-4

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық  
университеті, 2014

### Список использованных источников

1. Hailmann A. Polymer films with embedded metal nanoparticles-Berlin: Springer, 2002. p 216.
2. Stepanov A.L. Optical extinction of metal nanoparticles synthesised in polymer by ion implantation // Metal-polymer nanocomposites. Eds. Nicolaic L., Carotenuto G., Hoboken: John Wiley, 2005. p 300.

УДК 538.958

## НАНОӨЛШЕМДІ CdS КЛАСТЕРЛЕРІНІҢ ОПТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН КВАНТТЫҚ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Асильбекова Алия Молдабековна

[aliya\\_2.5.4.2@mail.ru](mailto:aliya_2.5.4.2@mail.ru)

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Физика-техникалық факультеті, «Техникалық физика»  
мамандығының 1-ші курс магистранты, Астана, Қазақстан  
Ғылыми жетекшісі – А. А. Алдонгаров

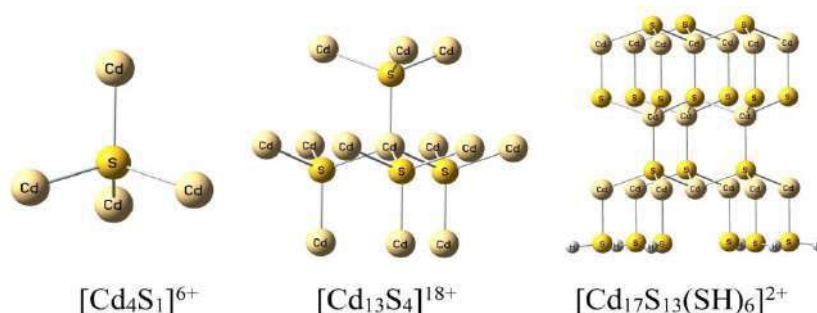
Соңғы жылдары әр түрлі жартылай өткізгіш нанокристаллдар қарқынды зерттелуде. Оның ішінде материалда экситонның бірінші Бор радиусынан кіші өлшемге ие және тұрақтандырылған беттік қабаты бар кванттық нүктелер ерекше назарға алынуда. Барлық үш координата бойынша шектеулер дискретті энергетикалық спектрлердің пайда болуына алып келеді, сонымен қатар энергия бойынша рұқсат етілген деңгейлер нанобөлшек өлшеміне тәуелді болады. Бұл шектеудің жанама эффектісі – жарық квантын сәулелендірумен жүретін электрон-кемтік жұбының (экситонның) рекомбинациялануының жоғары ықтималдығы. Бұл қасиет флуоресцентті биотаңба жасауда қолданылып жүр [1, 2]. Бұлардың негізінде күн батареялары мен лазерлердің жаңа түрлерін жасауға мүмкіндік туады [3, 4].

Зерттеу объектісі – нанобөлшек кадмий сульфидінің кластерлері.

Зерттеу жұмысының мақсаты – нанобөлшек CdS кластерлерінде тыйым салынған зона шамасының нақты сипаттамасын беретін тығыздық функционалын анықтау.

Нанобөлшек CdS кристалдарында кванттық-химиялық зерттеуді жүргізу барысында Gaussian09 [5] бағдарламалық пакетінде орындалатын DFT тығыздық функционал әдісі қолданылды. Қазіргі таңда бұл әдіс тыйым салынған зона енінің шамасын нақты анықтауына тестілеу қажет әр түрлі функционалдар жиынтығынан тұрады. Ұзақ әсерлі түзетулері бар функционалдар кезінде бұл шаманың ең нақты сипаттамасын алуға болады. Гибридті функционалдармен, мысалы B3LYP, салыстырғанда ұзақ әсерлі түзетулері бар функционалдар зарядтың кеңістіктік бөлінуімен байланысты ауысу энергиясының шамасын төмендетпейді.

Функционалдарды тестілеу үшін 1-ші суретте көрсетілген және құрылымы туралы белгілі эксперимент мәліметтеріне [6, 7] сәйкес салынған әр түрлі  $[Cd_4S_1]^{6+}$ ,  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$  және  $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]^{2+}$  гексагональды кластерлері қарастырылды. Белгілі эксперимент нәтижелеріне сәйкес көлемді кристалдар және кадмий сульфидінің нанокристалдары кристалдық ұяшықтың өте ұқсас құрылымдық параметрлеріне ие екендігін атап өту қажет [6, 7]. Кластерлерді оптимизациялау жүргізілмеді, себебі гексагональды құрылымды сақтау үшін периодтық шартын қолдан енгізу немесе зерттеуге қажет өлшемнен өте үлкен кластерлерді қолдану талап етіледі.



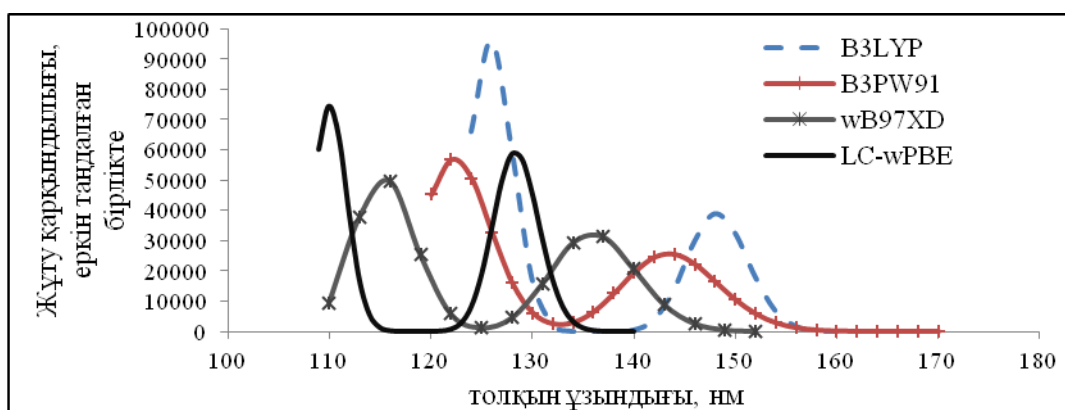
Сурет 1 –  $[Cd_4S_1]^{6+}$ ,  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$  және  $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]^{2+}$  кластерлерінің құрылымы

Уақытқа тәуелді тығыздық функционалының TD DFT әдісімен [8-10] қарастырылып отырған кластерлердің электрондық жұту спектрлері есептелді.

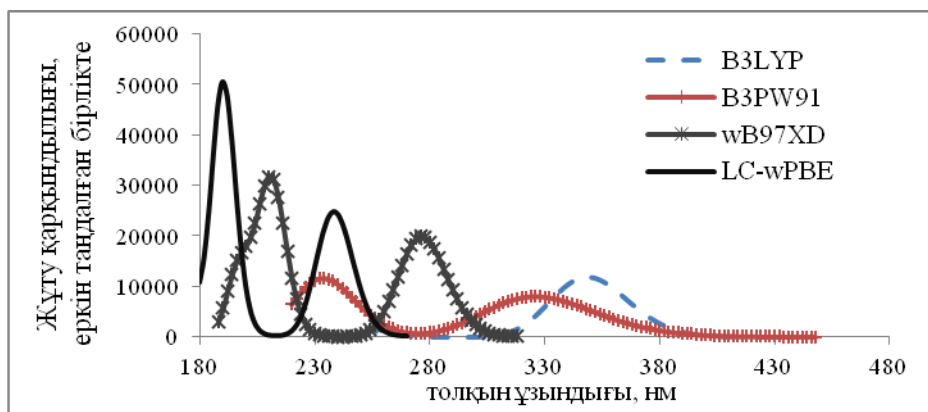
Тыйым салынған зона енін бағалау үшін әр түрлі функционалдар қолданылды: әр түрлі объектілердің қасиеттерін бағалау үшін кең қолданылатын B3LYP [11, 12], Бэкке үш параметрлі гибриді Пердю және Вонг функционалы B3PW91 [13, 14], бұл функционал CdS тәрізді көлемді жартылай өткізгіш кристалдардың тыйым салынған зона енін есептеуге қолдануға ұсынылған [15], сонымен қатар LC-wPBE [16-19] және wB97XD [20] секілді ұзақ әсерлі түзетулері бар кейбір функционалдар. High Performance Computing Center North ғылыми және параллель есептеулердің ұлттық орталығының Akka кластерінде Swedish National Infrastructure for Computing (SNIC) есептеу ресурсын қолдану арқылы барлық есептеулер жүргізілді (<http://www.hpc2n.umu.se/resources/akka>).

Үлгілі CdS кластерлері үшін келесі базис жиынтықтары қолданылды: кадмий атомдары үшін DZ базис жиынтығы бар эффективті ядролық потенциал LanL2 [21], сутегі атомдары үшін 3-21G және басқа барлық атомдар үшін стандартты базис жиынтығы 6-31G(d). Жалпы формуласы  $Cd_gS_j(SH)_k$  болатын кластер үшін кластер заряды мына формуламен анықталды:  $2*(g-j) - k$ .

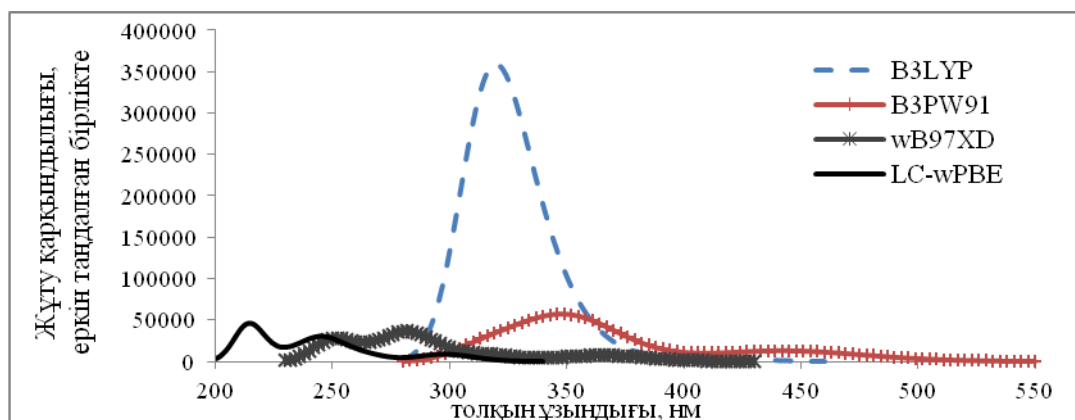
$[Cd_4S_1]^{6+}$ ,  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$  және  $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]^{2+}$  кластерлерінің есептелген электрондық жұту спектрлері 2-ші, 3-ші және 4-ші суреттерде берілген. Бұл суреттерде келтірілген спектрлер формалары жалпы CdS кванттық нүктелері үшін сипаттамалы жұту спектрлерінің формаларын береді.  $[Cd_4S_1]^{6+}$  және  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$  кластерлері үшін симметрияның болуына байланысты интенсивті ауысулар үш ретті айну дәрежесіне ие.



Сурет 2 –  $[Cd_4S_1]^{6+}$  кластерінің төрт түрлі функционалмен есептелген спектрлері



Сурет 3 -  $[Cd_{13}S_4]_{18+}$  кластерінің төрт түрлі функционалмен есептелген спектрлері



Сурет 4 -  $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]_{2+}$  кластерінің төрт түрлі функционалмен есептелген спектрлері

$[Cd_4S_1]_{6+}$ ,  $[Cd_{13}S_4]_{18+}$  және  $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]_{2+}$  кластерлері үшін бірінші қарқынды ауысудың толқын ұзындықтарын есептеу нәтижелері 1-ші кестеде белгілі эксперимент нәтижелерімен бірге берілген. Бірінші қарқынды ауысу тыйым салынған зона енін немесе фундаменталды жұту энергиясын анықтайды. Барлық функционалдар үшін кадмий атомдарын 4-тен 17-ге дейін арттырған кезде бірінші қарқынды ауысудың толқын ұзындығы артатындығы (ауысу энергиясының азаюы) бақыланатындығын 1-ші кестеден көруге болады. Бұл нәтиже кванттық конфайнмент эффектісіне сәйкес келеді және TD DFT жуықтауын қолдануды ақтайды. Үш қарастырылған кластерлердің ең кішкентайы  $[Cd_4S_1]_{6+}$  үшін барлық қарастырылған функционалдар эксперимент нәтижелерінен айтарлықтай ауытқу береді. Бақыланатын ауытқулар спектрдің ультракүлгін облысында белсенді жұтатын органикалық топтардың (фенолятты) кластердің беткі қабатында кездесуіне ([22-24] мақалаларда) байланысты болуы мүмкін. Басқа екі  $[Cd_{13}S_4]_{18+}$  және  $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]_{2+}$  кластерлері үшін стандартты гибридті B3PW91 және B3LYP функционалдарына қарағанда ұзақ әсерлі түзетулері бар LC-wPBE және wB97XD функционалдары эксперимент нәтижелеріне сәйкес нәтиже береді. B3PW91 және B3LYP функционалдары жағдайында алынған ауысу энергиясын бағалаудағы айтарлықтай қателіктер стандартты ауысу-корреляциялық DFT функционалдарының белгілі проблемасына байланысты деп болжанады. Бұл проблема: заряд тасымалдаумен байланысты ауысу энергиясын ескермейді [25], себебі фотоқоздыру кезінде жартылай өткізгіш CdS кластерінде электрон мен кемтіктің кеңістіктік бөліну жүреді деп болжанды.  $[Cd_{13}S_4]_{18+}$  кластерінде ең нақты мәнді wB97XD функционалы береді, ал LC-wPBE функционалының нәтижесі эксперимент нәтижесінің диапазонынан тек 0,3 эВ-қа ғана айырмашылыққа ие. Керісінше,  $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]_{2+}$  комплексі үшін нақты нәтиже LC-wPBE функционалымен (айырмашылық 0,12 эВ) алынды,

ал wB97XD функционалы үшін қателік 0,9 эВ-ты береді. Алынған нәтижелерді негізге ала отырып, LC-wPBE функционалы тыйым салынған зона шамасының ең жарамды бағасын қамтамасыз етеді деп есептеуге болады.

Кесте 1 – Эксперимент нәтижелерімен салыстыра отырып,  $[Cd_4S_1]^{6+}$ ,  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$  және  $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]^{2+}$  кластерлері үшін есептелген бірінші қарқынды ауысудың толқын ұзындықтары және энергиялары (f – осцилятор күші)

| Кластерлер                   | Функционалдар                           |                                         |                                         |                                         | Эксперимент                      |
|------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|----------------------------------|
|                              | LC-wPBE                                 | wB97XD                                  | B3PW91                                  | B3LYP                                   |                                  |
| $[Cd_4S_1]^{6+}$             | 128,35 нм<br>(9,6600 эВ);<br>f=3*0,2930 | 135,88 нм<br>(9,1249 эВ);<br>f=3*0,2664 | 143,41 нм<br>(8,6455 эВ);<br>f=3*0,2122 | 148,19 нм<br>(8,3667 эВ);<br>f=3*0,1932 | от 4,77 эВ до<br>4,98 эВ [49-51] |
| $[Cd_{13}S_4]^{18+}$         | 239,45 нм<br>(5,1780 эВ);<br>f=2*0,1196 | 277,20 нм<br>(4,4728 эВ);<br>f=2*0,0962 | 328,74 нм<br>(3,7715 эВ);<br>f=3*0,0659 | 351,60 нм<br>(3,5263 эВ);<br>f=3*0,0592 | от 4,28 эВ до<br>4,88 эВ [51]    |
| $[Cd_{17}S_{13}(SH)_6]^{2+}$ | 298 нм<br>(4,16 эВ)                     | 366 нм<br>(3,39 эВ)                     | 460 нм<br>(2,70 эВ)                     | 356 нм<br>(3,48 эВ)                     | 290 нм [54]<br>(4,28 эВ)         |

Алынған нәтижелер келесі қорытындыны жасауға мүмкіндік береді: Қарастырылғын төрт түрлі LC-wPBE, wB97XD, B3PW91 және B3LYP тығыздық функционалдарының ішінде кадмий сульфидінің кластерлері үшін тыйым салынған зона энергиясының ең нақты сипаттамасын ұзақ әсерлі түзетулерді ескеретін LC-wPBE функционалы береді.

#### Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. X.Michalet, F.F.Pinaud, L.A.Bentolila et al. // Science, 307, 538-544 (2005).
2. Michalet X., Pinaud F.F., Bentolila L.A. et al. Quantum Dots for Live Cells, in Vivo Imaging, and Diagnostics // Science. 2005. V. 307. P. 538–544.
3. Huynh W.U., Dittmer J.J., Alivisatos A.P. Hybrid Nanorod-Polymer Solar Cells // Science. 2002. V. 295. P. 2425–2427.
4. Klimov V.I., Mikhailovsky A.A., Xu S. et al. Optical Gain and Stimulated Emission in Nanocrystal Quantum Dots // Science. 2000. V. 290. P. 314–317.
5. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G. A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H. P., Izmaylov A. F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J. L., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Vreven T., Montgomery J. A., Peralta J. E., Ogliaro F., Bearpark M., Heyd J. J., Brothers E., Kudin K. N., Staroverov V. N., Keith T., Kobayashi R., Normand J., Raghavachari K., Rendell A., Burant J. C., Iyengar S. S., Tomasi J., Cossi M., Rega N., Millam J. M., Klene M., Knox J. E., Cross J. B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R. E., Yazyev O., Austin A. J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J. W., Martin R. L., Morokuma K., Zakrzewski V. G., Voth G. A., Salvador P., Dannenberg J. J., Dapprich S., Daniels A. D., Farkas O., Foresman J. B., Ortiz J. V., Cioslowski J. Fox D. J. Gaussian 09, Revision C.01(Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010).
6. Rockenberger J., Troger L., Kornowski, A., Vossmeier T., Eychmüller A., Feldhaus J., Weller H. EXAFS Studies on the Size Dependence of Structural and Dynamic Properties of CdS Nanoparticles // J. Phys. Chem. B – 1997. – Vol. 101. – P. 2691-2701.
7. Banerjee R., Jayakrishnan R., Ayyub P. Effect of the Size-Induced Structural Transformation on the Band Gap in CdS Nanoparticles // J. Phys.: Condens. Matter – 2000. – Vol. 12. – P. 10647–10654.



8. 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.
9. 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.
10. 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.
11. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J. Chem. Phys. – 1993. – Vol. 98. – P. 5648-5652.
12. Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Phys. Rev. B. – 1988. – Vol. 37. – P. 785-789.
13. Perdew J. P. Unified Theory of Exchange and Correlation Beyond the Local Density Approximation in Electronic Structure of Solids // Akademie Verlag – 1991. – Vol. 5. - P. 11-20.
14. Perdew J. P., Burke K., Wang Y. Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54. – P. 16533-16539.
15. Xiao H., Tahir-Kheli J., Goddard W. A. Accurate Band Gaps for Semiconductors from Density Functional Theory // J. Phys. Chem. Lett. – 2011. – Vol. 2. – P. 212-217.
16. Tawada Y., Tsuneda T., Yanagisawa S., Yanai T., Hirao K. A long-range-corrected time-dependent density functional theory // J. Chem. Phys. – 2004. – Vol. 120. – P. 8425(1-9)
17. Vydrov O. A., Scuseria G. E. Assessment of a long-range corrected hybrid functional // J. Chem. Phys. – 2006. – Vol. 125. – P. 234109(1-9)
18. Vydrov O. A., Heyd J., Krukau A., Scuseria G. E. Importance of short-range versus long-range Hartree-Fock exchange for the performance of hybrid density functionals // J. Chem. Phys. – 2006. – Vol. 125. – P. 074106(1-9)
19. Vydrov O. A., Scuseria G. E., Perdew J. P. Tests of functionals for systems with fractional electron number // J. Chem. Phys. – 2007. – Vol. 126. – P. 154109(1-9)
20. Chai J.-D., Head-Gordon M. Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom–atom dispersion corrections // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2008. – Vol. 10. – P. 6615-6620.
21. Hay P. J., Wadt W. R. Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for the transition metal atoms Sc to Hg // J. Chem. Phys. – 1985. – Vol. 82. – P. 270-283.
22. Turk T., Resch U., Fox M. A., Vogler A. Cadmium Benzenethiolate Clusters of Various Size: Molecular Models for Metal Chalcogenide Semiconductors // J. Phys. Chem. – 1992. – Vol. 96. - P. 3818 - 3822.
23. Dean P. A. W., Vittal J. Cadmium-113 nuclear magnetic resonance spectroscopic study of mixed-ligand teranuclear clusters of the type  $[\text{Cd}_4(\text{ERh})_x(\text{E}'\text{R})_{10-x}]_2$  and of the mixed metal clusters  $[\text{Cd}_x\text{Zn}_{4-x}(\text{SPh})_{10}]_2$  // J. Inorg. Chem. – 1986. – Vol. 25. – P. 514-519.
24. Lippens P. E., Lannoo M. Calculation of the band gap for small CdS and ZnS crystallites // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 39. – P. 10935-10942.
25. Dreuw A., Fleming G. R., Head-Gordon M. Charge-Transfer State as a Possible Signature of a Zeaxanthin–Chlorophyll Dimer in the Non-photochemical Quenching Process in Green Plants // J. Phys. Chem. B. – 2003. – Vol. 107. - P. 6500-6503.

УДК539.1.074.3

# **CdS, CdTe, CdSe, CdSe-CdS, CdTe-CdS НАНОКРИСТАЛДАРЫНЫҢ СИНТЕЗІ ЖӘНЕ ОПТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ**