



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

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

***Джунисбекова Диана Алтаевна, Ысқақова Қымбат Өмірбекқызы, Әсіл Меруерт Серікбайқызы, Жанат Данара Жанатқызы**
1991.11.15@mail.ru

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, физика – техникалық факультеті, техникалық физика кафедрасының *1-ші курс магистранты, 4-ші курс студенттері, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – ф.-м. ғ. к., доцент А. Ж. Қайнарбай

1. Кіріспе

Кванттық нүктелер (КН) – құрамы ұқсас көлемді заттармен салыстырғанда қасиеттері айтарлықтай ерекшеленетін нанобөлшектер. Жартылай өткізгіш нанокристалдар, яғни өте кішкентай өлшемді кристалдар (шамамен 10–20 нм), орыс әдебиетінде кванттық нүктелер деп аталды. Өте кішкене өлшемде оларда кванттық, яғни дискретті электрондар қасиеті байқалған соң, оларды кванттық деп атады. Кванттық нүктелер «жас» зерттеу объектісі болып табылғанымен, қазірдің өзінде оның қолданыс аясы кең екені анықталды, мысалы оларды лазер мен жаңа дәуір дисплейлерін жасауда қолданады.

КН оптикалық қасиеттері ғылымның бірнеше салаларында қолданылады, мысалы медициналық зерттеулерде олардың көмегімен ауруға шалдыққан тканьдарды “сәулелендіруге” болады [1]. Кванттық нүктелердің соңғы кезде люминесценттік материалдар ретінде сұранысы жоғарылады. Кванттық нүктелер фотостабильді, кең жолақты жұтылу және жіңішке эмиссиондық спектрге ие. Жартылай өткізгіш нанокристалдардың негізгі практикалық маңызды ерекшелігі – люминесценция спектрінің бөлшек өлшеміне тәуелділігі. Оптикалық қасиеттері толқын ұзындығы бойынша түрлендірілуі талап етілетін салаларда осы қасиет негізінде кванттық нүктелерді қолдану мүмкіндігіне ие болады. Кванттық нүктелер жарық диодтар, күн батареялары үшін материал ретінде қолданылады. Кванттық нүктелердің золь түрінде болуы, технологиялық жағынан өте тиімді, мысалы оларды әртүрлі матрицаларға салу мүмкіндігі бар.

1. Эксперименттік нәтижелер

1.1. Кванттық нүктелерді алу әдістері

Жұмыста золь-гель технология әдісі арқылы алынған жартылай өткізгіш кванттық нүктелер қатары қолданылды. CdS, CdSe, CdTe, CdSe-CdS, CdTe-CdS кванттық нүктелері стабилизатор негізінде олейн қышқылын қолданып ерітінді әдісі арқылы синтезделді [2]. Жұмыстың негізгі тапсырмасы, берілген спектр аймағында люминесценцияның жоғары кванттық шығуы бар кванттық нүктелерді алу технологияларын жетілдіру болып табылады. Берілген тарауда золь-гель технологиясы бойынша әртүрлі температураларда синтезделген кванттық нүктелердің нәтижелері көрсетілген. Химиялық реакциялардың кейбір параметрлерін жүйелік түрлендіру, алынатын кванттық нүктелерге әсер етуін және синтез шартын жақсарту үшін толық зерттелді. Прекурсорлардың әртүрлі типтері (Pb, S, Se, Te), сонымен бірге стабилизаторлар, олардың көптеген концентрациялары алынатын кванттық нүктелердің өлшеміне әсер етеді [3,4]. Кванттық нүктелердің синтезі және прекурсорларды дайындау 1-ші суретте схемалық көрсетілген аспапта жүргізілді.



Сурет 1 - КН синтездеуге арналған аспап схемасы

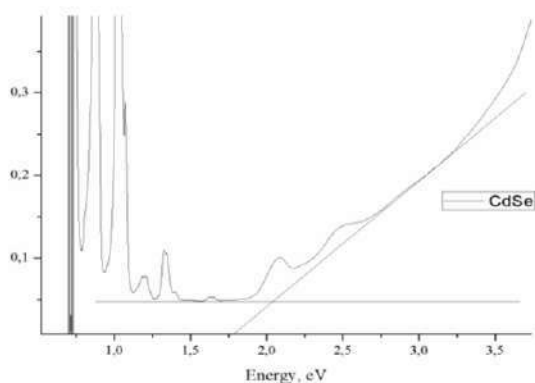
CdTe нанокристалдарының синтезі. Синтез үшбасты шыны сауытта жүргізіледі. 0,133 г кадмий ацетаты, 0,56 гр. олейн қышқылы және 5 мл дифенил эфирін осы сауытта араластырамыз. 1,5 сағат бойы аргон тогында 150°C температурада қыздырамыз. 0,064 г теллурды 0,5 мл триоктилфосфинда (ТОР) ерітеміз. Кадмий прекурсорына ТОР-Те инъектерлейміз.

CdSe нанокристалдарының синтезі. Жалпы CdSe КН триоктилфосфорлы қышқылдық шешімде кейбір өзгертулермен сілтемелерге орай синтезделді. Олар өлшемі 5,8% жіңішке таралулармен аяқталады. CdSe жартылай өткізгішті кванттық нүктелері конденсатормен, магниттік араластырушымен, термोजұппен және жылытқыш қабықшамен жабдықталған үш мойынды құтыда синтезделді. Ереже бойынша қорғасын қоспасы (0,4 ммоль), олеин қышқылы (0,8 ммоль), дифинил эфиірі (10 ммоль) және дистилденген триоктилфосфин (0,4 ммоль) қоспасы 1 сағат бойы 90⁰ С температурада вакуумда қыздырылды және келесі 1 сағатта 100⁰ С температурада N₂ әсерімен толық синтезделіп бітеді.

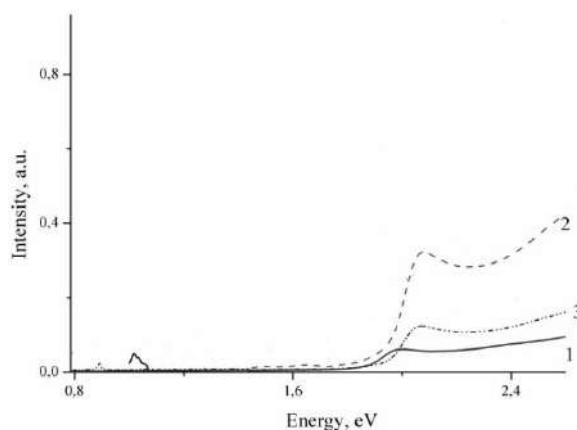
CdSe-CdS кванттық нүктелері жұмыста суреттелген әдіс бойынша синтезделеді [5]. Қарастырылған әдістер бойынша қорытындылар. Жаңа материалдарды алу технологиясы бойынша эксперименттер, кванттық нүктелерді берілген спектральдық, оптикалық, люминесценттік сипаттамаларда синтездеуге, кванттық нүктелердің тыйым салынған зонасының қажет енің береміз, кванттық нүктелердің құрылымын өзгертуге мүмкіндік береді. Кванттық нүктелердің құрылымының өзгеруі олардың қасиеттеріне әсер етеді.

1.2. Жартылай өткізгіштердің тыйым салынған зона енін бағалау бойынша эксперименттік нәтижелер

УК түрлендіруде және күннің көрінетін қызыл сәулелену бөлігінде қолдану үшін, арнаулы ерітінділерде немесе полимерлі негізде синтезделген КН зерттелді. Іргелі жұтылу жолақтары 1,9-2,0 эВ шамасында ультракүлгін спектр облысында басталады. Ерітінді немесе полимер негіздегі кванттық нүктелер көрінетін және УК спектрді жұтады, және спектрдің қызыл аймағында сәулеленеді.



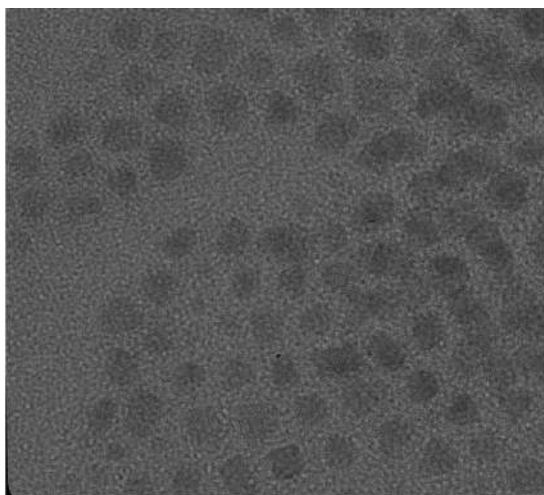
Сурет 2 - CdSe нанокристалының жұтылу спектрі, синтез температурасы 200⁰С



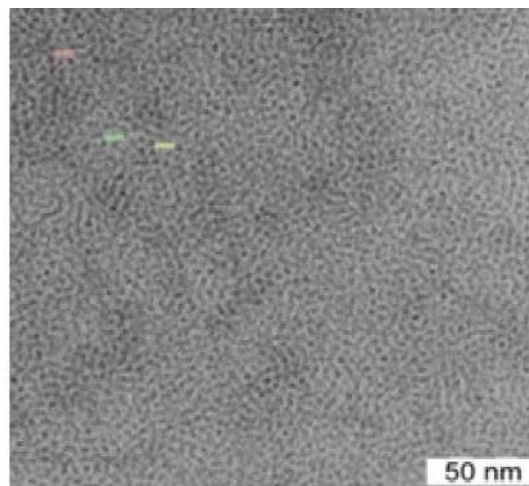
Сурет 3 – Зерттелген кванттық нүктелердің жұтылу спектрлері

Жұтылу спектрі бойынша кристалдың тыйым салынған зона енін E_g бағалауға болады. Осындай бағалау оптикалық тығыздық квадратының жұтылатын квант энергиясына тәуелділігі $D^2(E)$ анализі негізінде жүргізілді [6,7]. Е осі бар оптикалық жұтылу спектрінің тік сызықты аймағының қиылысу сызығы әрбір нанокристалдың тыйым салу зонасының өлшемін көрсетеді. Оптикалық жұтылу спектрі бойынша біз CdSe, CdTe, PbS-CdS кристалдарының тыйым салынған зона енін өлшедік. CdSe нанокристалы үшін тыйым салынған зона ені 1,7 эВ тең болды (Сурет 2). PbS-CdS нанокристалы үшін тыйым салынған зона ені 1,45 эВ (Сурет 3, қисық 1), CdTe үшін 1,8 эВ (Сурет 3, қисық 2, 3) тең.

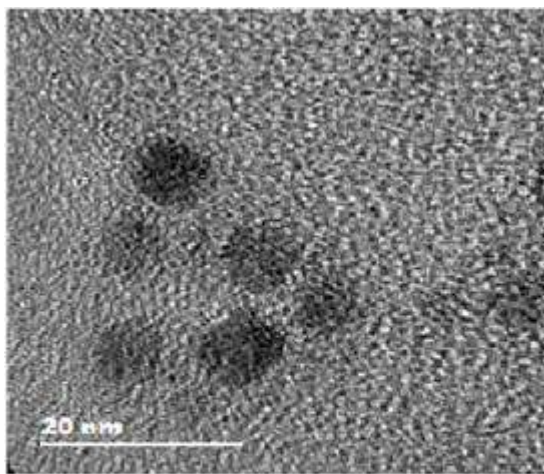
Әр түрлі температурада синтезделген CdS, CdSe, CdTe, CdSe-CdS, CdTe-CdS кванттық нүктелері үшін JEOLJEM-2000 FXII (ФНМ, Ломаносов ат. ММУ) өткін электрондық микроскоп арқылы бірнеше суреттер алынды. Алынған кванттық нүктелер өлшем бойынша тар таралыммен сипатталады (5 пен 7,5 нм арасында).



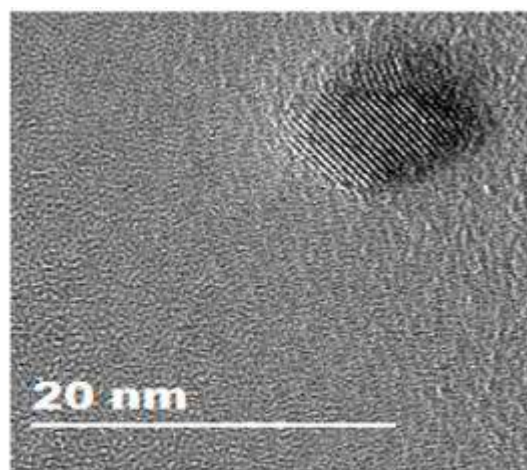
Сурет 4 - CdSe-CdS КН ПЭМ кескіні



Сурет 5 - ПЭМ изображение НК CdSe-CdS



Сурет 6 - ПЭМ изображение НК CdSe КН өткін электрондық микроскопия арқылы алынған көрінісі, синтез температурасы – 180°С

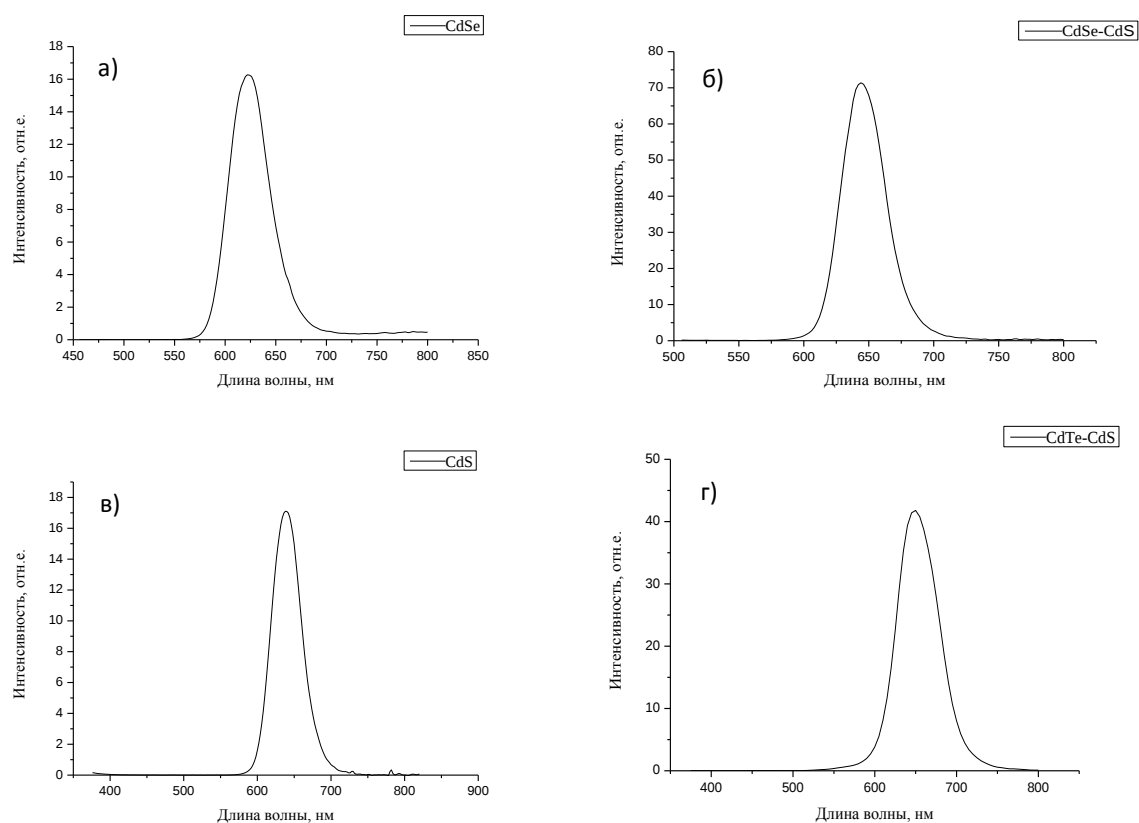


Сурет 7 - CdTe КН өткін электрондық микроскоп алынған көрінісі, синтез температурасы – 250 °С.

250°С температурада синтезделген CdTe үлгісі өткін электрондық микроскоп арқылы анализденді. Суретте нанокристалдың беттік құрылымы көрсетілген, және алынған нанокристалдардың жоғары кристалдығы туралы айта аламыз.

2.3. Кванттық нүктелердің оптикалық қасиеттерін анықтау

Жоғарыда айтып кеткендей, CdS, CdSe және CdTe кванттық нүктелерінің тыйым салынған зона ені кванттық нүктелердің өлшеміне байланысты. Негізінен кванттық нүктелер қызыл немесе инфрақызыл спектр облыстарында сәулеленеді. Бұл жұмыста біз CdS, CdSe, CdTe-CdS и CdSe-CdS кванттық нүктелерінің бөлмелік температура жағдайында, сәйкесінше 300 нм, 420 нм, 320 нм, 450 нм толқын ұзындығындағы ультракүлгін фотондармен қоздырылған люминесценция спектрлері өлшенді. Төмендегі суреттен әрбір объектінің өзіне тән интенсивті сәулелену жолақтарын байқауға болады: CdS – 640 нм; CdSe – 620 нм; CdTe-CdS – 650 нм; CdSe-CdS -654 нм.



а) CdSe нанокристаллы, б) CdSe-CdS нанокристаллы, в) CdS нанокристаллы, г) CdTe-CdS нанокристаллы

Сурет 8 – Нанокристалдардың люминесценция спектрлері

Қорытынды

Берілген жұмыста золь – гель әдісіне негізделген технологиялардың көмегімен наноразмерлі CdS, CdTe, CdSe, CdSe-CdS, CdTe-CdS кванттық нүктелері синтезделді. Физикалық қасиеттері, яғни жартылай өткізгіштердің тыйым салынған зона ені, кванттық нүктелердің орташа статистикалық өлшемдері, спектрдің кең облыстарында люминесценция және оптикалық жұтылу спектрлері эксперименттік жолмен зерттелді. Люминесценция және жұтылу спектрлерінде кванттық өлшемдік эффект анық байқалады.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Кульбачинский В.А. История квантовых точек. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 2007, 350- 353 с.
2. Murray C. B., Norris D. J., and Bawendi M.G. //J. Am. Chem.Soc. 115, 1993, P. 8706.
3. Lokteva N., Radychev, F., Witt, H., Borchert J., Parisi and Kolny-Olesiak J. // Phys. Chem(C). 2010. V.114. P.12784.
4. Kolny-Olesiak J., Kloper V., Osovsky R., Sashchiuk A. and Lifshitz E. // Surf. Sci. 2007. V.601. P. 2667.
5. Лукашин А.В., Елисеев А.А. Синтез полупроводниковых наночастиц сульфида свинца и сульфида кадмия. Методическое описание спецпрактикума «Методы получения и анализа неорганических материалов». ФНМ МГУ. - М., 2011. 38 с.
6. Киреев П.С. Физика полупроводников. - М.: Высшая школа, 1969. 290 с.
7. Фам Тхи Хан Мьен, Ключев В. Г, Нгуен Тхи Ким Чунг // Конденсированные среды и межфазные границы. Т.13, № 4, 2011, С. 515-510.