



Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2018»
XIII Халықаралық ғылыми конференциясы

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

XIII Международная научная конференция
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2018»

The XIII International Scientific Conference
for Students and Young Scientists
«SCIENCE AND EDUCATION - 2018»



12th April 2018, Astana

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

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2018»
атты XIII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XIII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2018»**

**PROCEEDINGS
of the XIII International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2018»**

2018 жыл 12 сәуір

Астана

УДК 378

ББК 74.58

Ғ 96

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2018» атты студенттер мен жас ғалымдардың XIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XIII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2018» = The XIII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2018». – Астана: <http://www.eni.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2018. – 7513 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-997-6

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 378

ББК 74.58

ISBN 978-9965-31-997-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2018

ОРГАНИКАЛЫҚ МОЛЕКУЛАЛАР АРАСЫНДАҒЫ ФЕРСТЕРЛІК ЭНЕРГИЯ ТАСЫМАЛДАНУЫН ЗЕРТТЕУ

Тәжіғалиева Жанна Тұрақбайқызы

Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ Техникалық физика кафедрасының магистранты

Ғылыми жетекші – А.М. Жүнісбеков

1. Кіріспе. Органикалық молекулалардағы индуктивті резонанстық энергия тасымалы

1.1. Молекулааралық күштер. Органикалық люминофорлардағы электрондық процесстер.

Молекулааралық өзара әрекеттестік (МАӨӘ) – әр түрлі физикалық құбылыстарда байқалатын және сұйықтар мен молекулалық кристалдардың өмір сүруін анықтайтын молекулалар немесе атомдар арасындағы өзара әрекеттестік[6]. Молекулааралық өзара әрекеттестік молекулалар арасындағы r арақашықтыққа тәуелді және әрекеттесудің $U(r)$ потенциалдық энергиясымен сипатталады (молекулааралық өзара әрекеттестік потенциалымен), себебі осы әрекеттесудің орташа потенциалдық энергиясы заттың күйін және қасиеттерін анықтайды.

МАӨӘ заряд тасымалдануы немесе сутектік байланысы бар кешендер секілді күрделі химиялық кешендердің пайда болуын қамтамасыз етеді, оның негізінде коллоид түзілу процесі жатыр. Қарапайым химиялық процестердің жүру механизмін өзара әрекеттесуші молекулалар арасындағы электрондық, ілгерілемелі және электронды-тербелмелі энергиялар алмасуын білмей зерттеу мүмкін емес. Молекулааралық өзара әрекеттестіктің биологияда да маңызы зор. Молекулааралық күштер ДНҚ, РНҚ секілді адам өмірі үшін маңызды байланыстарды қамтамасыз ететіндігін айта кетсек жеткілікті.

Молекулааралық күштер туралы ақпараттың негізгі көздері [8]:

- атом-молекулалық шоғырлардағы шашырауды зерттеуге арналған тәжірибелер;
- спектроскопиялық өлшеулер;
- газ және сұйықтардың термофизикалық қасиеттері жөнінде мәліметтер;
- кристалдардың қасиеттері жөніндегі мәліметтер;
- қатты денелердегі радиациялық ақаулардың түзілуіне қатысты тәжірибелер;
- қатты денелер мен сұйықтардағы ядролық магниттік резонанс түзілуіне қатысты тәжірибелер.

Органикалық люминофорлар негізіндегі молекулалар жүйесіндегі электрондық қозу энергиясының трансформация және релаксация процестері табиғи және жасанды жарық жинағыш антеналар жасауда маңызды рөл атқарады.

Электрондық қозу энергиясының тасымалы – электрондардың қозу актісі мен электрондардың қозу энергиясы қолданылатын соңғы құбыластар арасындағы аралық процесс деп есептеледі [6.30]. Энергия тасымалын молекулалардың спецификалық өзара әрекеттесуі деп қарастырсақ болады [5.9]. Энергия тасымалы өзара әрекеттесетін молекулалардың әрекеттесу типіне қарай алмасу немесе индуктивті – резонанстық механизм есебінен жүзеге асады.

Электрондық қозу энергиясының тасымалын зерттеген кезде энергияның донор және акцептор молекулаларының орналасуын сипаттайтын факторды есепке алған жөн. Бұл факторлардың молекулааралық энергия тасымалына әсерін тәжірибелік тұрғыда зерттеу үшін ЛБ технологиясын қолдануымызға болады, ол донорлы-акцепторлы жүйені қалыптастыруға мүмкіндік береді. Бұл технологияны қолдану арқылы нанокұрылымдардағы басқарылатын электрондық қозу энергиясының тасымалын іске асыруға болады.

Энергия тасымалы процесінің өзектілігі фотовольтаикалық ұяшықтарда энергия тасымалдану процесіне қызығушылықтың артуымен түсіндіріледі.

1.2. Ферстер механизмі бойынша энергия тасымалдану моделі.

Жүйеде энергия тасымалдануы болған кезде флуоресценция сөнуінің аналитикалық сипаттамасын жасау күрделірек болып келеді. Донорлы-акцепторлы жұптан тұратын қарапайым жүйені алып қарастырайық. Жүйеде энергия тасымалы мен флуоресценциядан басқа жүйеде ешқандай процесс жүрмейді деп болжанады. Акцептор өздігінен флуоресценцияламайды, яғни энергия тасымалы болмаған кезде донордың флуоресценциясы ғана байқалады.

Энергия тасымалы $D' + A \rightarrow D + A'$ (мұндағы D, A - сәйкесінше донор жән акцептор молекулалары) сызбасы бойынша фотондардың аралық шығарылу немесе жұтылу процесінсіз жүреді. Қозу тасымалы донор флуоресценциясының өмір сүру ұзақтығы мен кванттық шығуының азаюымен қатар жүреді, бұл процесс акцептор есебінен іске асады. Донор және акцептор молекулаларының өзара әрекеттесуінің сипатына қарай энергия тасымалының әр түрлі механизмдері жүзеге асырылады. Біз тасымалданудың индуктивті резонанстық механизмін қарастырдық. Алғаш рет сандық түрде бұл механизмді 1948 жылы Ферстер сипаттаған болатын. Ферстердің теориясы бойынша энергия тасымалдану жылдамдығы донордың флуоресценция және акцептордың жұтылу спектрларының жабылу деңгейіне, әрекеттесуші молекулалардың арақашықтығына тәуелді. Әрекеттесуші молекулалар арасындағы арақашықтық донор қоздырылған күйде болған уақыт ішінде тұрақты болуы қажет. Индуктивті – резонанстық механизм бойынша энергия тасымалдану жылдамдығының тұрақтысы:

$$k_{et} = \frac{1}{\tau_d} \left(\frac{R_0}{r} \right)^6,$$

мұндағы τ_d – акцептор болмаған кездегі донордың қоздырылған күйде өмір сүру ұзақтығы;

R_0 - сипаттамалық арақашықтық (Ферстер радиусы), яғни энергия тасымалының жылдамдық тұрақтысы акцептор болмаған кездегі донордың флуоресценция жылдамдығына тең болатын арақашықтық. Осылайша $C = R_0$ болған кезде молекулалардың жартысы тасымалдану энергиясы есебінен, ал қалған бөлігі сәуле шығарылатын және сәуле шығарылмайтын механизмдер есебінен дезактивациялайды.

r – донор мен акцептор арақашықтығы.

Ферстер радиусы келесі түрде анықталады:

$$R_0^6 = \frac{9000(\ln 10)k^2 Q_d}{128\pi^5 N_A n^4} \int \frac{F_d(\bar{\nu}) \varepsilon_0(\bar{\nu})}{\bar{\nu}^4} d\bar{\nu}$$

мұндағы k^2 – донор және акцептор өтулерінің дипольдік моменттері кеңістігіндегі өзара бағдарын сипаттайтын фактор;

Q_d - акцептор болмаған кездегі донордың кванттық шығуы;

N_A - Авогадро саны;

n - ортаның сыну көрсеткіші;

$F(\bar{\nu})$ - $\bar{\nu}$ мен $\bar{\nu} + \Delta\bar{\nu}$ аралығында толқындық сандар шкаласындағы донор флуоресценциясының қалыптасқан интенсивтілігі;

$\varepsilon(\bar{\nu})$ - $\bar{\nu}$ санына сәйкес акцептордың экстинкция коэффициенті. Энергия тасымалының эффективтілігі донормен жұтылған фотондар санының акцепторға өткен фотондар санына қатынасымен анықталады [4]:

$$P_{et} = \frac{k_{et}}{\tau_d^{-1} + k_{et}}$$

Немесе

$$P_{et} = \frac{1}{1 + (r/R_0)^6}$$

Ферстер теориясы қолданылу шарттары қанағаттандырылған кезде ғана тәжірибемен сәйкес келеді. Қолданылу шарттарына өзара әрекеттесу төмен, ал релаксация жоғары болуы жатады. R_0 -ден 5-10 есе аз арақашықтықта өзара әрекеттесу жоғары болады.

2. Эксперименттік нәтижелер және талдау

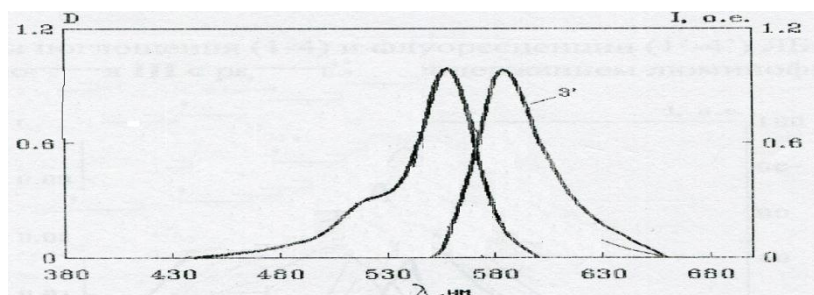
Синглет – синглетті энергия тасымалының сәуле шығару процесі келесідей: донорлы-акцепторлы молекулалары бар қоспаға акцептор молекулаларының тікелей фотоқозуы жүріп кетпейтіндей толқын ұзындықтағы жарық түсіру қажет. Донордың флуоресценция интенсивтілігі жүйеде акцептор молекулалары болмаған кездегі молекулалар интенсивтілігімен салыстыруға келетіндей дәрежеде болуға тиіс. Донор секілді акцептор энергия флуоресценциясы да жеткілікті дәрежеде кванттық шығуға ие болуға тиісті. Сондықтан біз ксантенон бояғыштары молекулаларының жұтылу және флуоресценция электрондық спектрлерін өлшеп алдық. Сонымен қатар родамин С және флуоресцеиннің спирттегі ерітінділерінің флуоресценция және жұтылу спектрлері өлшеп алынды.

Алынған мәліметтер негізінде энергия доноры ретінде флуоресцеин молекулалары, ал энергия акцепторы ретінде родамин С молекулалары қолданылды. Аталған байланыстар спектрлері 1 – суретте көрсетілген.

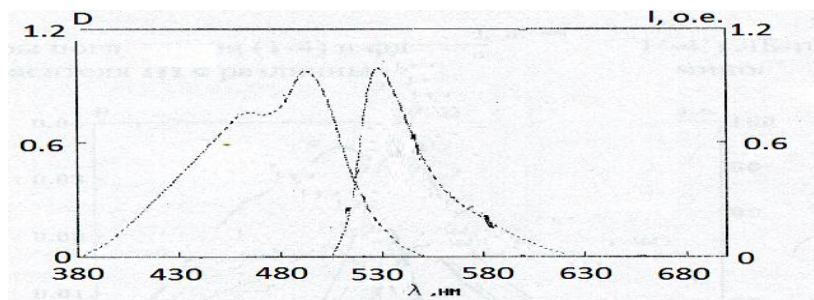
[3,4] бойынша ксантенон бояғыштары молекулалары ассоциат түзуге бейім болып келеді. Қоспадағы молекулалар концентрациясын арттырумен ассоциаттар процесінің эффективтілігі де артады. Молекулалар үшін критикалық концентрация мәні таңдап алынған ерітіндіге байланысты болады. Мысалы родамин С молекулалары үшін молекулаларының судағы ассоциациясы $C=10^{-5} - 4$ моль/л концентрациясынан, ал спиртте $C=10^{-5} - 3$ моль/л – ден басталады.

Көпкомпонентті жүйелерде біртекті ассоциаттардың түзілуімен қатар, біртекті ассоциаттардың да түзілуі байқалады. Ассоциаттардың түзілу процесін жұтылудың электрондық спектрімен ғана емес, флуоресценция спектрімен де зерттейді [5-7].

Жұтылу спектрлерінде молекулалардың ассоциациясы қосымша жолақтардың пайда болуымен түсіндіріледі, яғни бұл жолақтар мономерлердің жұтылу спектрлерге қатысты қысқа толқынды немесе ұзын толқынды жағынан байқалады. Жолақтардың қысқа немесе ұзын толқынды жағынан пайда болуы түзілген димерге байланысты болады. Кейбір бояғыштардың ассоциаттары флуоресценциялауы мүмкін. Мұндай спектральдық өзгерістер әртекті ассоциаттар түзілген кезде де байқалады [8]. Ассоциаттар электрондық спектрлерді қармай отырып мономер молекулаларының флуоресценциясын бәсеңдетуі мүмкін. Бәсеңдету механизмі мономерлерден ассоциаттарға резонанстық энергия тасымалымен және мономерлердің жұтылу жолақтарындағы қоздыру сәулелерінің ассоциаттармен жұтылуымен байланысты болады. Мономер және ассоциаттар ерітіндісінде донор немесе акцепторлардың жеткілікті мөлшерде болуы молекулаларлық энергия тасымалын зерттеуге кері әсерін тигізеді. Сондықтан молекулаларлық байланыс энергиясын зерттеу үшін біздің жұмысымызда молекулалардың концентрациясы келесідей болды: донор молекулалары үшін $C_{ДД} = 2 \cdot 10^{-5} - 5$ моль/л, ал акцептор молекулалары үшін от $10^{-5} - 7 \cdot 10^{-6}$ моль/л до $5 \cdot 10^{-5} - 6 \cdot 10^{-6}$ моль/л аралығында өзгеріп отырды.

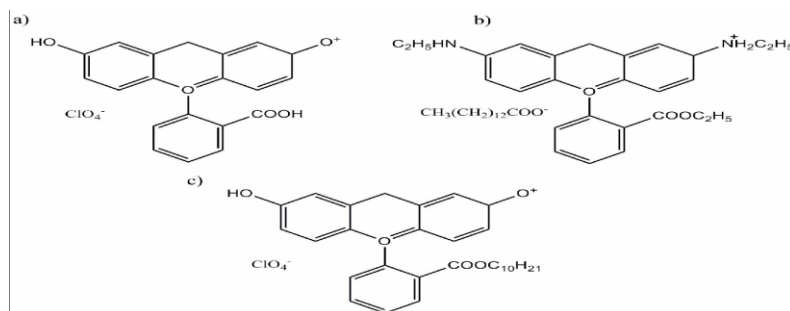


Сурет-1. Родамин С молекуласының жұтылу және флуоресценция спектрі

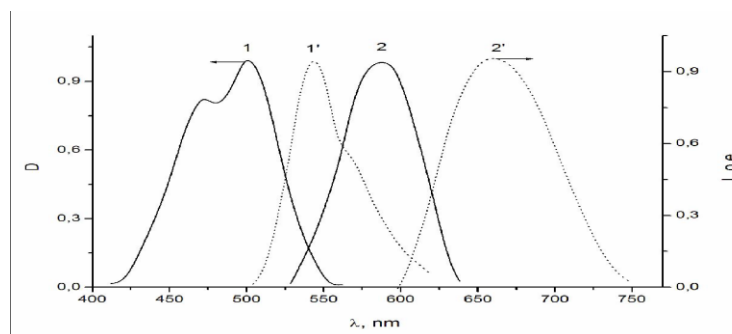


Сурет-2. Флуоресцеин молекуласының жұтылу және флуоресценция спектрі.

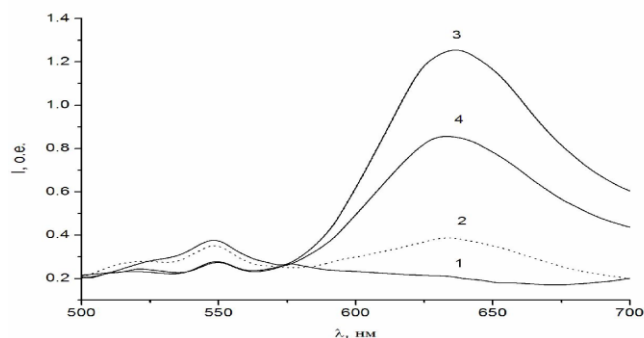
Флуоресцеин және родамин С молекулалары арасындағы энергия алмасу процесін қарастырайық. 3 – суретте зерттелген байланыстардың құрылымдық формуласы көрсетілген. Көріп отырғанымыздай люминофорлар құрамындағы ұзын көмірсутекті байланыспен ерекшеленеді. Құрамында көмірсутекті байланысы бар молекулалар гидрофобты молекулалар болып табылады, сондықтан мұндай молекулалар беттік-активті деп есептеледі. 4- суретте көріп отырғанымыздай спектрлердің қабаттасу деңгейі жақсы, бұл өз кезегінде молекулааралық энергия тасымалын іске асыруға септігін тигізеді. Ал екікомпонентті жүйенің флуоресценциясы 5 – суретте көрсетілген. 1 қисық – $C=2 \cdot 10^{-5} - 5 \cdot 10^{-5}$ моль/л кезіндегі қоспада акцептор молекулалары болмаған кездегі флуоресцеин молекулаларының флуоресценция спектрі. Ерітіндіге $C=5 \cdot 10^{-5} - 7 \cdot 10^{-5}$ моль/л родамин С қосқан кезде донордың флуоресценция интенсивтілігінің төмендеуі байқалады. Егер де ары қарай акцептор концентрациясын арттыра беретін болсақ, ол донор молекулаларының флуоресценция интенсивтілігінің төмендеуіне алып келеді және ұзын толқынды аймақта акцептор молекулаларының жарқырау спектрлері пайда болады. Осыған ұқсас мәліметтер беттік-активті молекулалар үшін де алынды. Тәжірибе барысында қоспа флуоресцеин молекулаларымен жақсы жұтылатын $0 - 470$ нм толқын ұзындығындағы жарықпен қоздырылды.



Сурет-3. Зерттелетін люминофорлардың құрылымдық формулалары



Сурет-4. Нормаланған жұтылу спектрлері (1,2) және флуоресценция (1',2') спектрлері. Энергия донор (1,1') және акцептор (2,2')



Сурет-5. Акцептордың әртүрлі концентрацияларындағы пайда болған люминесценция спектрлері

Ксантенон бояғыштарындағы беттік – активті бөлшектер қоспадағы молекулалар диффузиясына әсер етеді. Жоғарыда бачналған жұмыста донор мен акцептор арақашықтығы диффузия әсерінен де өзгеріп отыратындығы анықталды. Сондықтан бәсеңдеу кинетикасын өлшеген кезде де осы факторды есепке алған жөн.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Горбачевич С.К. Спектроскопия молекулярных взаимодействий нелинейные эффекты. Минск.: БГУ, 2002. С.151.
2. Каплан И.Г., Родимова О.Б. Межмолекулярные взаимодействия // Усп. физ. наук. Т. 126, №3, 1978, С. 405-449.
3. Ермолаев В.Л., Бодунов Е.Н., Свешникова Е.В., Шахвередов Т.А., Безизлучательный перенос энергии электронного возбуждения, – Л.: Наука, 1977, С.311.
4. Бахшиев Л.Н. Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий, Л.: Наука, 1972, С.210 с.
5. Силиныш Э.А., Курик М.В., Чапек В. Электронные процессы в органических молекулярных кристаллах: Явления локализации и поляризации. – Рига.: Занатне, 1988, С.329.

УДК 538.958

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕФТИ С ПОМОЩЬЮ ИНФРАКРАСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Түлеухан Алинур Нурланович

Магистрант кафедры Технической физики ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан
Научный руководитель – А.М. Жунусбеков

По сей день наиболее важную, порой и ведущую роль в жизни человека занимают нефть и нефтепродукты. Последние образуются в результате обработки нефти, и находят широкое применение в повседневной жизни. Продуктами переработки нефти являются такие, как резина, пластмасса, моющие средства и другие. При этом наиболее известными являются бензин, керосин, дизельное топливо, мазут.

Более того, непрерывное потребление нефти по всему миру, и постоянно повышающиеся требования к его качеству, а также увеличившиеся случаи выбросов нефти, повлекли за собой необходимость в поисках научных и технологических решений, которые могли бы повлиять на качественные показатели, и на химический состав нефти, так и на результаты его переработки.