



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ТҰҢҒЫШ ПРЕЗИДЕНТІ - ЕЛБАСЫНЫҢ ҚОРЫ

«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ – 2017»

студенттер мен жас ғалымдардың
XII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ – 2017»

PROCEEDINGS
of the XII International Scientific Conference
for students and young scholars
«SCIENCE AND EDUCATION - 2017»



14th April 2017, Astana



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

**«Ғылым және білім - 2017»
студенттер мен жас ғалымдардың
XII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2017»**

**PROCEEDINGS
of the XII International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2017»**

2017 жыл 14 сәуір

Астана

УДК 378

ББК 74.58

Ғ 96

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2017» студенттер мен жас ғалымдардың XII Халықаралық ғылыми конференциясы = The XII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2017» = XII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2017». – Астана: <http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2017. – 7466 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-827-6

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 978-9965-31-827-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2017

0,05мг/мл	564	70	0,185	576	40	1,17	1,60
-----------	-----	----	-------	-----	----	------	------

Как видно из данных, представленных в таблице 1 и на рисунке 3 при добавлении SLGO спектры поглощения красителя батохромно сдвигаются. При этом происходит уширение спектра, а также его деформация, о чем свидетельствует рост оптической плотности коротковолнового плеча в спектре поглощения красителя. Между оксидом графена и спектром флуоресценции красителя нет перекрытия, поэтому тушение флуоресценции красителя происходит посредством процесса переноса электрона. При этом взаимодействие между возбужденным красителем и SLGO приводит к уменьшению выхода флуоресценции красителя и такое тушение представляет собой межграничный процесс переноса заряда с возбужденного красителя на поверхность графена. В случае статического тушения время жизни оставалось бы практически неизменным. Наблюдаемое тушение длительности флуоресценции также было описано другими авторами в случае адсорбции красителя на поверхности наночастиц диоксида титана, когда тушение обусловлено переносом электрона от красителя к полупроводнику.

Проведенные исследования дают представление о том, каким образом осуществляется взаимодействие оксида графена и молекул органического красителя, что позволит эффективно его использовать в сенсibilизированных красителем солнечных ячейках. Кроме того, полученные данные позволят расширить область применения в фундаментальной науке и технологических применениях, в органических солнечных элементах, в сенсорах для определения отдельных молекул и его использование для изготовления электродов в ионисторах и т.п.

Список использованных источников

1. Ю.М.Шульга и др. Окрасивание наночастиц оксида графена и цветные полимерные композиции на их основе //Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies// 2013, т.11, №1, С. 161-171.
2. А.Г.Алексенко “Графен”. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. – 168с.
3. В.И.Земский, Ю.Л.Колесников, И.К. Мешковский «Физика и техника импульсных лазеров на красителях». – СПб.: СПбГУ ИТМО, 2005.–176 с
4. В.И.Земский, Ю.Л.Колесников, И.К. Мешковский «Физика и техника импульсных лазеров на красителях». – СПб.: СПбГУ ИТМО, 2005.–176 с.

ӘОЖ 547.52; 539.89

АЛҒАШҚЫ ҚАҒИДАЛАР ӘДІСІ КӨМЕГІМЕН ЖОҒАРЫ ТЕМПЕРАТУРА КЕЗІНДЕГІ ПОЛИЦИКЛДІ АРОМАТТЫ КӨМІРСУТЕКТЕРДІҢ СЕРПІМДІЛІК ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ

Ибрагимова А.

ibragimova.ad.1@gmail.com

Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Физика-техникалық факультетінің 2-курс магистранты,
Астана

Ғылыми жетекші - Ф.Абуова

Жоғары қысымда көмірсутекті қосылыстарды зерттеу, оларды органикалық жартылай өткізгіш негізінде көміртекті нанотехнология, фотоника және микроэлектроникада белсенді қолданылатындығына байланысты, қатты дене химиясының негізгі міндеті болып табылады

[1]. Полициклді ароматты көмірсутекті (ПАК) бірегей оптикалық және электрондық қасиеттер қатарына ие. Көбінесе, жоғары барлық түрлендіруде асқынөткізгіштік температурасы жоғарылайды, мысалы, фенантрен және пицен негізінде жасалған асқын өткізгіштерде [2]. Құрамында бензолды сақиналары бар, ПАК графен және графен тәріздес құрылымдарды моделдеу кезінде ең маңызды зерттеу объектісі болып табылады [3].

Бұдан өзге, ПАК термодинамикасын зерттеу қатты және сұйық табиғи көмірсутекті жүйелерді, сонымен қатар С-О-Н және өте күрделі флюидтер бар жүйелерді моделдеу үшін маңызды. ПАК жоғары қысымда тұрақты болуы мүмкін, себебі, алмаз және метеоритті зат құрамынан табылған болатын, сонымен қатар космостық кеңістіктегі екпінді әсерлесу өнімдерінің ажыратылмас бөлігі болып табылады. Инфракызыл спектрлердің зерттеулері бойынша әлемде 20% жоғары жұлдызаралық көміртек ПАК болуы мүмкін [4].

Бұл жұмыста алғаш рет молекулалық және кристалдық құрылымдарына, сонымен қатар элементар ұяшықтағы атомдар саны мен молекула өлшеміне байланысты ПАК сығылғыштық параметрлерін жүйелеу әрекеті жасалды. Бұл оларды кейінгі жоғары температура мен қысым кезіндегі эксперименталды және теориялық зерттеулер үшін критикалық мәнге ие [5].

Кристалдық құрылымдарды есептеу VASP [6] программалық пакетінде ортPBE-vdW формасында айырбас – корреляциялық градиенттік аппроксимациясымен тығыздық функционалы теориясы төңірегінде жүргізілді. Жазық толқындарды кесу энергиясы 600эВ тең болды. Электрондық құрылымды есептеу үшін Монкхорст – Пак схемасы бойынша Бриллюэн зонасында, шамамен 2000/*N* тең, қажетті (затқа байланысты) *k*- нүктелер саны қолданылды. Мұндағы *N*– элементар ұяшықтағы атомдар саны. Есептеулер құрылымына байланысты ұяшықта 2 немес 4 молекула бар бір элементар ұяшық үшін жүргізілді.

ПАК серпімді параметрлерін есептеу үшін есептен алынған деректерді $P = -\partial F / \partial V$ теңдеуі бойынша топтастырды және одан ары қарай 0–20ГПа қысым интервалында Винэннің күй теңдеуін қолдана отырып аппроксимация жасалды [39]: $P = 3K_0 \frac{1-x^{1/3}}{x^{2/3}} \exp[\eta(1-x^{1/3})]$, мұндағы $x = V/V_0$ және $\eta = 3/2(K'_0 - 1)$. Есептеу әдісі сол, біз нафталинді зерттеу үшін қолданылған әдіс [7].

Зерттелген қосылыстардың жиынтығы 1 – сурет пен 1 – кестеде көрсетілген. Үш, төрт және алты бензолды сақиналардан тұратын қосылыстар үшін молекула құрылымын ескере отырып нафталиннен бастап короненге дейінгі ПАК таңдалынып алынған. Жоғары қысым кезіндегі ПАК тұрақты құрылымын теориялық есептеу басқа міндет болып табылады. Элементар ұяшықта көп атомдар саны бар заттар үшін, және, бұдан басқа, Ван-дер-ваальстік әсерлесуді есепке алатын, псевдопотенциалдарды таңдау маңызды болып табылатын, молекулалық қосылыстар арасында құрылымға еркін іздеу жүргізу әзірше қиын. Сондықтан біз бұл жұмыста қалыпты шарт, 298,15 К және 0,1 Мпа кезінде тұрақты құрылымдарды қарастырдық. Қосылыстардың көбісі үшін $P2_1/c$ немесе $P2_1/a$ немесе соған ұқсас $P-1$ (2-3 суреттер) құрылым тән. Бұл құрылымдар қысым артқан кезде тіптен тұрақты болады. Мысалы, бензолдың сондай құрылымы 190 ГПа қысымға дейін термодинамикалық тұрақты. Дегенменде, қосылыстар қатары үшін 1 кестеде суммаланған жоғарыбарлы түрлендіру орнатылған. Жоғары қысым кезінде ПАК үшін орнатылған фазалық ауысулардың бөлігі, соның салдарынан құпталынбайды, ал полиморфты ауысулардың бөлігі бір кеңістіктік топтар ішінде жүзеге асырылады.

Кесте 1

298K^a және жоғары қысым кезіндегі бензол мен ПАК фазалық ауысуының әйгілі параметрлері мен құрылымдары

№			1 атм	P, ГПа		P, ГПа	
1	Бензол	C ₆ H ₆	Pbca	1,5	P4 ₃ 2 ₁ 2 Y ⁰	[21]	4.8 P2 ₁ /c Y
2	Нафталин	C ₁₀ H ₈	P2 ₁ /a	13 ^B		[24]	
3	Антрацен	C ₁₄ H ₁₀	P2 ₁ /a	23 ^B		[47]	

4	Фенантрен	C ₁₄ H ₁₀	P2 ₁	0,7	P2 ₁ /n	[49]		
5	Аценафтен	C ₁₂ H ₁₀	Pmc2 ₁					
6	Пирен	C ₁₆ H ₁₀	P2 ₁ /a	0.3	P2 ₁ /aY	[23]		
7	Тетрацен	C ₁₈ H ₁₂	P-1	5 ^Г	P-1	[26] ^Г		
8	Пентацен	C ₂₂ H ₁₄	P-1	7 ^Г	P-1	[26] ^Г		
9	Коронен	C ₂₄ H ₁₂	P2 ₁ /a	1,0-1.5	P2/m N	[27, 28]	12.2	Pmmm N
10	Гексацен	C ₂₆ H ₁₆	P-1					

Y – құрылым түсіндірілген. N – құрылым түсіндірілмеген.

^a бензолдан басқа.

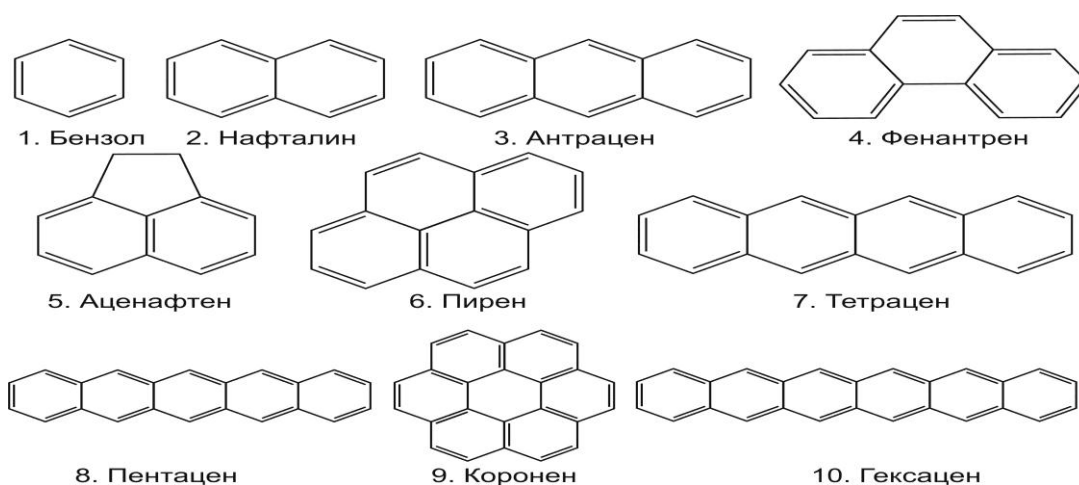
^b метастабильді фаза болуы мүмкін,

^b фазалық ауысымсыз экспериментальды зерттелген фазаға дейінгі қысым.

^Г эксперименттік мәліметтер сонымен қатар құрылым өзгертпей ауысуды көрсететін, фазалық ауысу теориялық жұмыста болжанған [8]

Бензол шамамен 30 ГПа қысымға дейін эксперименттік зерттелген, күрделі фазалық диаграммаға ие. Тұрақты құрылымдарды теориялық іздеу 200 ГПа дейінгі қысымда жүргізілген. Эксперименттік және теориялық деректер біркелкі қысым аумағында жақсы үйлеседі. Фазалардың номенклатурасы әртүрлі жұмыстарда түрленіп отырады, біз келесідей белгілеулер орнатылған жұмысты ұстандық: I – *Pbca*, II – *P4₃2₁2*, III – *P2₁/c(P2₁/a)* (Кесте 1). Экспериментальды деректерге сәйкес III фаза 298K – де шамамен 40 ГПа қысым кезінде аморфизацияланады. Теориялық есептеулер III фазаның, V (*P2₁*) фазасына айналатын, 40 – 50 ГПа дейін тұрақты екендігін көрсетеді. Жоғары қысым кезіндегі бензолдың мүмкін полимеризациясын және барлық ПАК тән болуы мүмкін, грефентәріздес құрылымдардың түзілуін атап өту керек.

Пирен мен фенантрен үшін 0,1 МПа кезінде тұрақтылыққа жақын құрылымға ие жоғарыбарлық түрленулер анықталған. Сонымен бірге кристалдық құрылым айтарлықтай өзгермей, ұшықтардың параметрлері өте қатты өзгереді. Нафталин, антрацен, тетрацен және пентацен үшін, 9 -12 ГПа (антрацен үшін 23 ГПа) қысымға дейін сығылғыштығы зерттелген – бұл ретте фазалық ауысулар байқалмаған (кесте 1). Алайда эксперименттік деректің толықтай талдауы, сонымен қатар кейінгі теориялық есептеулер тетрауен мен пентацендегі 5 -7 ГПа –да құрылымын өзгертпейтін полиморфты ауысуларды көрсетті. Жоғарғы қысым кезіндегі фазалық қатынас аценафтен мен гексацен үшін анықталмады.



Сурет 1. Зерттелген бензол мен ПАК молекулалық құрылымы

Қорытынды

Жұмыста бензол және ПАК қатарының кристалдық құрылымдар мен сығылғыштық параметрлерінің алғашқыпринципті есептеулер нәтижелері келтірілген. optPBE-vdW Ван дер

Ваальстік әсерлесуді есепке ала отырып PBE формасында қысымның 0-20ГПа интервалында VASP программасы көмегімен айырбас-корреляциялық потенциалдың градиенттік аппроксимациясымен тығыздық функционалы теориясы қолданылды. Эксперименттік деректер мен алдындағы теориялық есептеулерді салыстыру таңдалынып алынған әдістің орынды екендігін көрсетеді.

Бензолдан бастап коронен және гексаценге дейінгі барлық зерттелінген заттар (алты бензолды сақинасы бар) 8ГПа – дан 12ГПа дейінгі қысымда барлық жақты сығылу модульімен ұқсас сығылғыштыққа ие және оның қысым бойынша туындысы 6,9-7,5. Бұл молекула аралық қашықтықтың азаюын және молекулалардың өздері мен бензолды сақиналардың әлсіз деформациясын көрсетеді. Заттың молекуласында сығылғыштықтың атомдар санына немес е кристалдық құрылымның типіне тәуелділігі орнатылған. Бензолды сақинаның көп мөлшеріне, сонымен қатар сақиналардың өте мықты құрылымдарына ие қосылыс - тығыздығы төмен ПАК (тетрацен, гексацен) қарағанда циклды түрде аз сығылғыштыққа ие. Кейбір ПАК жоғарыбарлық түрленуге ие, алайда серпімді модульді алуға мүмкіндік беретін, олардың құрылымын айқын сипаттау әле жасалмаған және қосымша зерттеуді талап етеді.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Watanabe M., Chang Y.J., Liu S.-W., et al. // Nature chemistry. – 2012. – 4. – P.574-578.
2. Witte G., Woll C. // Journal of Material Research. – 2004. – 19. – P.1889-1916.
3. Wang X., Liu R., Gui Z., et al. // Nature communications. – 2011. – 2. – P.507.
4. Mitsuhashi R., Suzuki Y., Yamanari Y., et al. // Nature. – 2010. – 464. – P.76-79.
5. Gotovac S., Honda H., Hattori Y., et al. // Nano letters. – 2007. – 7. – P.583-587.
6. Podszwa R. // The Journal of Chemical Physics. – 2010. – 132. – P.044704.
7. Rochefort A., Wuest J.D. // Langmuir. – 2008. – 25. – P.210-215.
8. Schatschneider B., Monaco S., Tkatchenko A., Liang J.-J. // The Journal of Physical Chemistry A. – 2013. – 117. – P.8323-8331.

ӘОЖ 620.9

АРАЛДЫҚ КҮМІС ҚАБЫРШАҚ БЕТІНДЕГІ ПОЛИ(3-ГЕКСИЛТИОФЕННІҢ) ФОТОФИЗИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

Зейниденов А.К., Исаева А.Ж.

Академик Е.А. Бөкетов атындағы ҚарМУ Физика-техникалық факультеттің
магистранты, Қарағанды
Ғылыми жетекшісі – Н.Ибраев

Соңғы жылдары жартылай өткізгіш полимерлер мен металл нанобөлшектер (НБ) негізіндегі нанокөмпазитті материалдарға қызығушылық артып келеді. Берілген материалдарға қызығушылық олардың спектрде көру аймағындағы қарқынды жұту жолақтарының пайда болуынан байқалатын беттік плазмондық резонанс (БПР) құбылысымен шартталған өзіндік оптикалық қасиеттеріне байланысты [1-4]. Мұндай нанокөмпазиттерді зерттеу механизмін түсіну мәселесі, және де БПР үрдістерін эффективті оптоэлектрондық және фотовольтаикалық құрылғылар үшін жаңа материалдарды жасауда қолданудың кең мүмкіншілігі болып табылады.

Көлемді гетероәтулерге ие органикалық күн ұяшықтары (OSCs) үшін poly(3-hexylthiophene) (P3HT) перспективті болып табылады. Бұл P3HT жоғары тесіктік қозғалғыштыққа ие болуымен ($\approx 0,1 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{c}^{-1}$), едәуір жақсы химиялық тұрақтылықпен және тыйым салынған аймақтың төмен енімен байланысты (1,9-2,0 эВ). P3HT:PCBM негізіндегі көлемді гетероәтуде белсенді орта үшін ПӘК-тің максималды мәні 4-5% [5-9]. P3HT:PCBM белсенді қабатында әр жұтылған фотон электродтарда қос заряд береді, берілген