

ISSN 2616-6836

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

# ХАБАРШЫСЫ

---

---

**ВЕСТНИК**

Евразийского национального  
университета имени Л.Н. Гумилева

**BULLETIN**

of the L.N. Gumilyov Eurasian  
National University

**ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ** сериясы

Серия **ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

**PHYSICS. ASTRONOMY** Series

№1(122)/2018

1995 жылдан бастап шығады

Издается с 1995 года

Founded in 1995

Жылына 4 рет шығады

Выходит 4 раза в год

Published 4 times a year

Астана, 2018

Astana, 2018

*Бас редакторы*  
ф.-м.ғ. докторы  
**А.Қ. Арынгазин** (Қазақстан)

*Бас редактордың орынбасары*

**А.Т. Ақылбеков**, ф.-м.ғ.д., профессор  
(Қазақстан)

*Редакция алқасы*

<b>Алдонгаров А.А.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Балапанов М.Х.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
<b>Бахтизин Р.З.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Ресей)
<b>Гиниятова Ш.Г.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Даулетбекова А.Қ.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Ержанов Қ.К.</b>	ф.-м.ғ.к., PhD (Қазақстан)
<b>Жұмаділов Қ.Ш.</b>	PhD (Қазақстан)
<b>Здоровец М.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Қадыржанов Қ.К.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Кутербеков Қ.А.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Лущик А.Ч.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Эстония)
<b>Морзабаев А.К.</b>	ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)
<b>Мырзақұлов Р.Қ.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Нұрахметов Т.Н.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Сауытбеков С.С.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Тлеукенов С.К.</b>	ф.-м.ғ.д., проф. (Қазақстан)
<b>Усеинов А.Б.</b>	PhD (Қазақстан)

*Редакцияның мекенжайы:* 010008, Қазақстан, Астана қ., Сатпаев к-сі, 2, 408 б.  
Тел.: (7172) 709-500 (ішкі 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Жауапты хатшы, компьютерде беттеген*  
А. Нұрболат

**Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің хабаршысы. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы**

Меншіктенуші: ҚР БжҒМ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" ШЖҚ РМК  
Мерзімділігі: жылына 4 рет.

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігімен тіркелген.  
27.03.2018ж. №16999-ж тіркеу куәлігі. Тиражы: 30 дана

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Астана қ., Қажымұқан к-сі, 12/1,  
тел.: (7172)709-500 (ішкі 31-428)

*Главный редактор*  
доктор ф.-м.н.  
**А.К. Арынгазин** (Казахстан)

*Зам. главного редактора*

**А.Т. Акылбеков**, доктор ф.-м.н.  
профессор (Казахстан)

*Редакционная коллегия*

<b>Алдонгаров А.А.</b>	PhD (Казахстан)
<b>Балапанов М.Х.</b>	ф.-м.н., проф. (Россия)
<b>Бахтизин Р.З.</b>	ф.-м.н., проф. (Россия)
<b>Гиниятова Ш.Г.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Даулетбекова А.К.</b>	кандидат ф.-м.н., PhD (Казахстан)
<b>Ержанов К.К.</b>	кандидат ф.-м.н., PhD (Казахстан)
<b>Жумадилов К.Ш.</b>	доктор PhD (Казахстан)
<b>Здоровец М.</b>	к.ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Кадыржанов К.К.</b>	ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Кутербеков К.А.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Лущик А.Ч.</b>	ф.-м.н., проф. (Эстония)
<b>Морзабаев А.К.</b>	кандидат ф.-м.н. (Казахстан)
<b>Мырзакулов Р.К.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Нурахметов Т.Н.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Сауытбеков С.С.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Тлеукенов С.К.</b>	доктор ф.-м.н., проф. (Казахстан)
<b>Усеинов А.Б.</b>	PhD (Казахстан)

*Адрес редакции:* 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Сатпаева, 2, каб. 408  
Тел.: (7172) 709-500 (вн. 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Ответственный секретарь, компьютерная верстка*  
А. Нурболат

**Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева. Серия.**  
**ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

Собственник РГП на ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева" МОН РК

Периодичность: 4 раза в год

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16999-ж от 27.03.2018г.

Тираж: 30 экземпляров

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Кажимукана, 12/1,

тел.: (7172)709-500 (вн. 31-428)

*Editor-in-Chief*  
Doctor of Phys.-Math. Sciences  
**A.K. Aryngazin** (Kazakhstan)

*Deputy Editor-in-Chief*

**A.T. Akilbekov**, Doctor of Phys.-Math. Sciences,  
prof. (Kazakhstan)

*Editorial board*

<b>Aldongarov A.A.</b>	PhD (Kazakhstan)
<b>Balapanov M.Kh.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Russia)
<b>Bakhtizin R.Z.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Russia)
<b>Dauletbekova A.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences, PhD (Kazakhstan)
<b>Giniyatova Sh.G.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
<b>Kadyrzhanov K.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Kazakhstan)
<b>Kainarbay A.Zh.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
<b>Kuterbekov K.A.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Kazakhstan)
<b>Lushchik A.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Estonia)
<b>Morzabayev A.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
<b>Myrzakulov R.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Kazakhstan)
<b>Nurakhmetov T.N.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Kazakhstan)
<b>Sautbekov S.S.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Kazakhstan)
<b>Tleukenov S.K.</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, prof. (Kazakhstan)
<b>Useinov A.B.</b>	PhD (Kazakhstan)
<b>Yerzhanov K.K.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences, PhD(Kazakhstan)
<b>Zdorovets M.</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences (Kazakhstan)
<b>Zhumadilov K.Sh.</b>	PhD (Kazakhstan)

*Editorial address:* 2, Satpayev str., of.408, Astana, Kazakhstan, 010008  
Tel.: (7172) 709-500 (ext. 31-428)  
E-mail: vest\_phys@enu.kz

*Responsible secretary, computer layout:*  
A.Nurbolat

**Bulletin of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. PHYSICS. ASTRONOMY Series**

Owner: Republican State Enterprise in the capacity of economic conduct "L.N. Gumilyov Eurasian National University" Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan. Registration certificate №16999-ж from 27.03.2018. Circulation: 25 copies

Address of printing house: 12/1 Kazhimukan str., Astana, Kazakhstan 010008;  
tel.: (7172) 709-500 (ext. 31-428)

Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ  
ХАБАРШЫСЫ. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

№1(122)/2018

МАЗМҰНЫ

**ФИЗИКА**

<i>Ақылбеков А.Т., Бижанова С.Б., Баубекова Г.М., Карипбаев Ж.Т.</i> «Таза» кристалдардың импульстік катодолюминесценция спектрлері	8
<i>Ахметова Г.А.</i> DVB-T және DVB-T2 жерсеріктік эфирлік хабар тарату желісінің қамту аймағын анықтаудың стандарттары мен әдіснамасын салыстыру	13
<i>Алдонгаров А.А., Асылбекова А.М., Иргібаева И.С., Ермекова Ж.К.</i> Родамин бояғышы мен CdS кластерлерінің кешендерінде электрондық ауысулардың табиғатын анықтау	19
<i>Бекова Г.Т., Уалиханова У.А., Есмаханова К.Р.</i> (2+1)-комплекті модификациялан Кортевег–де Фриз және Максвелл–Блох теңдеулерінің сақталу заңдары	28
<i>Борзев Д.Б., Здоровец М.В., Козловский А.Л.</i> Сыртқы факторлардың әсерінен металл наноқұрылымдарының құлдырауын зерттеу	33
<i>Қадыржанов Д.Б., Здоровец М.В., Козловский А.Л., Петров А.В.</i> Zn нанотүтікшелерінің құрылымдық қасиеттеріне сәулелендіру әсерін зерттеу	40
<i>Калиекперов М.Е., Козловский А.Л., Қадыржанов К.К.</i> Полимерлік матрицалар негізінде иондаушы сәуледен жұқа қорғаныш жабындарын синтездеу	46
<i>Жасыбаева М.Б., Нугманова Г.Н.</i> Интегралданатын Фокас-Ленэллстың теңдеуіне эквивалентті спиндік жүйе	53
<i>Есмаханова К.Р., Жубаева Ж.С., Тәпеева С.Қ.</i> (1+1)-өлшемді локалды емес бейсызықты Шредингер теңдеуінің нақты шешімдері	58
<i>Мусабаева Г.К., Ақылбеков А.Т., Мусабаев К.К.</i> Атомдардың өздігінен сәуле шығаруы туралы	64
<i>Мурзалынов Д.О., Власукова Л.А., Пархоменко И.Н., Комаров Ф.Ф., Ақылбеков А.Т., Мудрый А.В., Рябикин Ю.А., Гиниятова Ш.Г., Даулетбекова А.К.</i> Азотпен имплантталған кремний нитридті қабықшаларының люминесценциясы	68
<i>Морзабаев А.К., Гиниятова Ш.Г., Шаханова Г.А., Алымханова К., Айданұлы Б., Махмұтов В.С.</i> Астана қаласының Жер беті маңындағы дозалық және электрлік сипаттамаларын талдау	75
<i>Даулетбекова А., Баймұханов З., Козловский А., Гиниятова Ш., Мурзағалиев М., Журкин Е., Наурызбаева Р.</i> SiO <sub>2</sub> /Si тіректі темплэйт негізінде нанокөмізгітті материалдарды зерттеу және әзірлеу	82
<i>Даулетбекова А., Скуратов В., Маника И., Маникс Я., Забельс Р., Кирилкин Н., Ақылбеков А., Гиниятова Ш., Байжұманов М., Сейтбаев А., Кудайбергенова С.</i> Люминесценцияның өшуінің дислокациялану механизмі	91

ВЕСТНИК ЕВРАЗИЙСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА  
ИМЕНИ Л.Н.ГУМИЛЕВА. Серия ФИЗИКА.

№1(122)/2018

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА	
<i>Акылбеков А.Т., Бижанова С.Б., Баубекова Г.М., Карипбаев Ж.Т.</i> Спектры импульсной катодолюминесценции «чистых» кристаллов	8
<i>Ахметова Г.</i> Сравнение стандартов и методика определения зоны покрытия сети цифрового наземного вещания DVB-T и DVB-T2	13
<i>Алдонгаров А.А., Асылбекова А.М., Иргибиева И.С., Ермекова Ж.К.</i> Определение природы электронных переходов в комплексах родаминового красителя и кластерах CdS	19
<i>Бекова Г.Т., Уалиханова У.А., Есмаханова К.Р.</i> Законы сохранения для (2+1)-мерных уравнений комплексно модифицированного Кортевега-де Фриза и Максвелла-Блоха	28
<i>Боргеков Д.Б., Здоровец М.В., Козловский А.Л.</i> Изучение деградации металлических наноструктур под действием внешних факторов	33
<i>Кадыржанов Д.Б., Здоровец М.В., Козловский А.Л.</i> Петров А.В, Исследование влияния облучения на структурные свойства Zn нанотрубок	40
<i>Калиекперов М.Е., Козловский А.Л., Кадыржанов К.К.</i> Синтез тонких защитных покрытий от ионизирующего излучения на основе полимерных матриц	46
<i>Жасыбаева М.Б., Нугманова Г.Н.</i> Спиновая система, эквивалентная интегрируемому уравнению Фокаса-Ленэллса	53
<i>Есмаханова К.Р., Жубаева Ж.С., Тапеева С.Қ.</i> Нелокальные нелинейные уравнения Шредингера и ее точные решения	58
<i>Мусабаева Г.К., Акылбеков А.Т., Мусабаев К.К.</i> К вопросу возникновения спонтанного излучения атомов	64
<i>Мурзалинов Д.О., Власукова Л.А., Пархоменко И.Н., Комаров Ф.Ф., Акылбеков А.Т., Мудрый А.В., Рябикин Ю.А., Даулетбекова А.К., Гиниятова Ш.Г.</i> Люминесценция пленок нитрида кремния, имплантированных азотом	68
<i>Морзабаев А.К., Гиниятова Ш.Г., Шаханова Г.А., Алимханова К., Айданұлы Б., Махмұтов В.С.</i> Анализ дозовых и электрических характеристик в приземном слое атмосферы г. Астаны	75
<i>Даулетбекова А., Баймуханов З., Козловский А., Гиниятова Ш., Мурзагалиев М., Журкин Е., Наурызбаева Р.</i> Разработка и исследование нанокompозитных материалов на основе трекового темплэйта $SiO_2/Si$	82
<i>Даулетбекова А., Скуратов В., Маника И., Маникс Я., Забельс Р., Кирилкин Н., Акылбеков А., Гиниятова Ш., Байжуманов М., Сейтбаев А., Кудайбергенова С.</i> Дислокационный механизм затухания люминесценции	91

BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY.  
PHYSICS.ASTRONOMY SERIES

№1(122)/2018

CONTENTS

PHYSICS

<i>Akylbekov A.T., Bizhanova S.B., Baubekova G.M., Karipbayev Zh.T.</i> The pulsed cathodoluminescence spectra of "pure" crystals	8
<i>Akhetmetova G.</i> Comparison of standards and methodology of determining the coverage area of the digital terrestrial broadcasting network DVB-T and DVB-T2	13
<i>Aldongarov A.A., Assilbekova A.M., Irgibaeva I.S., Ermekova Zh.K.</i> Determination of the nature of electronic transitions in the complexes of rhodamine dye and CdS clusters	19
<i>Bekova G.T., Ualikhanova U.A., Yesmakhanova K.R.</i> Conservation laws of the (2+1)-dimensional complex modified Korteweg-de Vries and Maxwell-Bloch equations	28
<i>Borgekov D.B., Zdorovets M.V., Kozlovskiy A.L.</i> Study of the degradation of metallic nanostructures under the influence of external factors	33
<i>Kadyrzhanov D.B., Zdorovets M.V., Kozlovskiy A.L., Petrov A.V.</i> Investigation of the effect of irradiation on the structural properties of Zn nanotubes	40
<i>Kaliyekperov M.E., Kozlovskiy A.L., Kadyrzhanov K.K.</i> Synthesis of thin protective coatings from ionizing radiation based on polymer template	46
<i>Nugmanova G.N., Zhassybayeva M.B.</i> Spin system equivalent to the integrable Fokas-Lenells equation	53
<i>Yesmakhanova K.R., Zhubaeva Zh.S., Tapeyeva S.K.</i> Exact solutions of the (1+1)-dimensional nonlocal nonlinear Schrodinger equation	58
<i>Musabayeva G.K., Akylbekov A.T., Musabayev K.K.</i> On the origin of spontaneous emission of atoms	64
<i>Murzalinov D.O., Vlasukova L.A., Parkhomenko I.N., Komarov F.F., Akilbekov A.T., Mudryi A.V., Ryabikin Yu.A., Giniyatova Sh.G., Dauletbekova A.K.</i> The photoluminescence of nitrogen-implanted silicon nitride films	68
<i>Morzabaev A.K., Giniyatova Sh.G., Shakhanova G.A., Alimkhanova K., Aidanuli B., Makhmutov B.S.</i> Analysis of dose and electrical characteristics in the underground layer of astana atmosphere	75
<i>Dauletbekova A., Baymukhanov Z., Kozlovskii A., Giniyatova Sh., Murzagaliyev M., Zhurkin E., Nauryzbaeva P.</i> Development and research for nanocomposite materials based on track templates of $SiO_2/Si$	82
<i>Dauletbekova A., Skuratov V., Manika I., Maniks J., Zabels R., Kirilkin N., Akilbekov A., Giniyatova Sh., Baizhumanov M., Seitbayev A., Kudaibergenova S.</i> Dislocation mechanism of fading of luminescence intensity	91

МРНТИ 29.29.49.

**А.А Алдонгаров, А.М Асылбекова, И.С Иргibaева, Ж.К Ермекова**

*Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан  
ТОО «Центр исследования люминесцентных материалов», Астана, Казахстан  
(E-mail: asylaliya@yandex.kz)*

### **Определение природы электронных переходов в комплексах родаминового красителя и кластерах CdS**

**Аннотация:** Методом TD-DFT было рассмотрено явление переноса энергии возбуждения между квантовыми точками и органическими красителями на их поверхности. Были исследованы комплексы  $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$  и  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$ . Показано, что в комплексах красителя  $[RhB]^+$  с кластерами сульфида кадмия наблюдается появление новых полос в длинноволновой области спектра, причем значительная часть из них имеют низкую интенсивность. Данное обстоятельство можно объяснить значительным увеличением дипольного момента системы при образовании комплексов. Также показано, что возможно наблюдение интенсивных полос переноса заряда. Увеличение положительного заряда кластера сульфида кадмия, как следствие увеличения числа ионов кадмия  $Cd^{2+}$ , приводит к изменению направления переноса фотовозбужденного электрона. Также был проведен анализ природы молекулярных орбиталей участвующих в интенсивных переходах. Эти данные указывают на возможность переноса заряда с кластеров сульфида кадмия на катион красителя и наоборот.

**Ключевые слова:** Квантовые точки, CdS, метод функционала плотности DFT, пассивирование, локализованные состояния, молекулярные орбитали.

**Введение.** Полупроводниковые и металлические наночастицы находятся в центре внимания научных исследований в течение последних трех десятилетий. Их основная особенность заключается в том, что их размер определяет электронные и оптические свойства [1,2]. Поэтому эти частицы демонстрируют новые физические свойства, которые характерны промежуточному состоянию вещества, располагающемуся между атомным (или молекулярным) состоянием и объемным кристаллом. Их уникальная электронная природа дает им преимущество для широкого круга практических применений, таких как создание биологических маркеров [3,4], дисплеев [5], солнечных элементов [6,7] и т.д.

При размере частиц меньше 10 нм физические свойства вещества определяются квантово-механическими эффектами. Пространственное ограничение частицы уменьшает длину волны де Бройля электрона. Этот эффект называется квантовым конфайнментом или квантово размерным эффектом, который наглядно может быть описан квантово-механической задачей о частице в ящике. Влияние поверхности является важнейшим условием для определения оптических свойств малых наночастиц. При относительно большом отношении площади поверхности к общему объему частицы, квантовые точки становятся подвержены значительному влиянию неидеально пассивированных поверхностей, что приводит к образованию локализованных состояний. Такие локализованные состояния приводят к нежелательным последствиям, таким как рекомбинирование носителей заряда понижая квантовый выход свечения наноразмерных полупроводниковых кристаллов. Поэтому оптические процессы в квантовых точках (КТ) сильно зависят от структуры поверхности [8,9]. Подобные наночастицы могут образовывать комплексы с органическими молекулами, например, с красителями. При этом может наблюдаться перенос заряда между ними при фотовозбуждении.

**Расчет электронной структуры молекулы катиона родамина Б.** Одна из тем, не получившая должного внимания со стороны теоретиков, - перенос энергии возбуждения между квантовыми точками и органическими красителями на их поверхности [10-13]. В частности в работе [13], указывалось на возможность переноса энергии фотовозбуждения с КТ CdS на родамином Б (RhB), адсорбированных на поверхности КТ. Поэтому нами были рассмотрены комплексы КТ CdS и красителя RhB, структурная формула которого приведена на рисунке 1а. Оптимизация катиона красителя методом проводилась гибридным трехпараметрическим



функционалом Бекки, Ли, Янга и Пара ВЗLYP [14,15] с использованием базисного набора 6-31G(d). Полученная оптимизированная структура представлена на рисунке 1б,в. Для полученной структуры был проведен расчет электронного спектра поглощения методом TD DFT в приближении LC-wPBE (таблица 1), реализованный в программном пакете Gaussian09W (рисунок 2) [16]. В таблице 1 указаны номера молекулярных орбиталей (МО), участвующих в длинноволновых электронных переходах  $[RhB]^+$  согласно методу LC-wPBE. Визуализация спектра поглощения производилась с использованием программного пакета GaussView 5.0 при этом полуширина на полувысоте составляла 0,3 эВ.

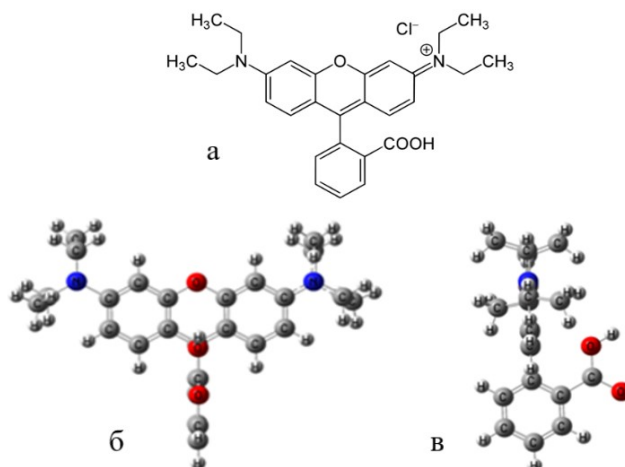


Рисунок 1 – а) Структурная химическая формула Родамина Б; б, в) Оптимизированная структура катиона красителя  $[RhB]^+$

Таблица 1 – Рассчитанные интенсивные переходы катиона  $[RhB]^+$

Номер возбужденного состояния	МО	Длина волны, нм	Сила осциллятора $f$
1	118 $\rightarrow$ 119	412	1,0973
3	116 $\rightarrow$ 119	260	0,2183
6	118 $\rightarrow$ 121	240	0,4761

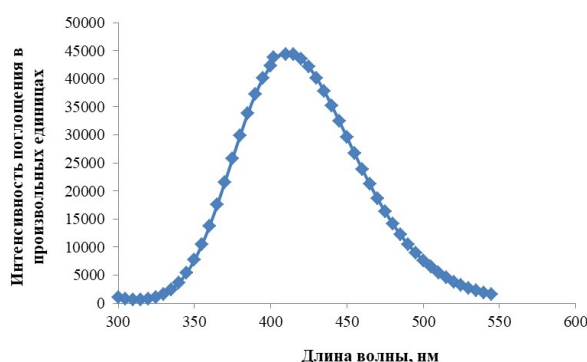


Рисунок 2 – Рассчитанный спектр поглощения  $[RhB]^+$

Как видно из таблицы 1 и рисунка 2 первый интенсивный переход расположен на длине волны 412 нм, что сильно отличается от экспериментальных данных для водных или спиртовых растворов с максимумом поглощения около 560 нм. Такое расхождение между рассчитанными и экспериментальными данными может быть связано с не учетом влияния растворителя в модельной системе. На рисунке 3 представлены МО, участвующие в первых интенсивных переходах рассчитанного спектра катиона красителя  $[RhB]^+$ .

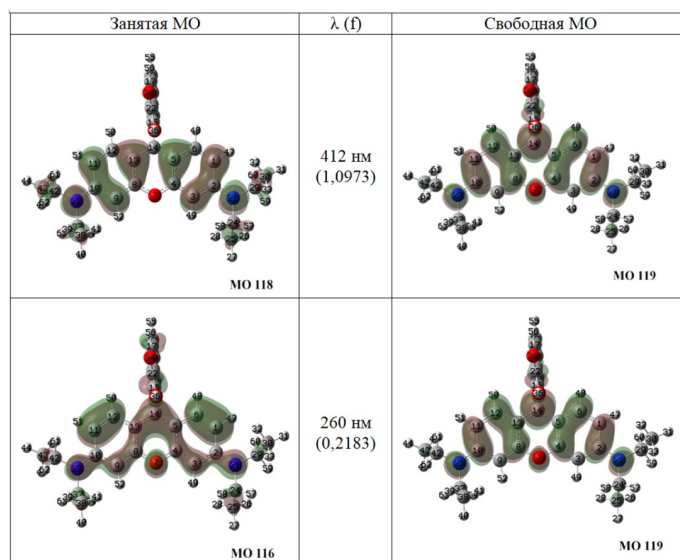


Рисунок 3 – Визуализированные молекулярные орбитали  $[RhB]^+$  участвующие в первых двух интенсивных переходах (НОМО и LUMO имеют номера 118 и 119)

Как видно из рисунка 3 НОМО и LUMO орбитали имеют делокализованную природу  $\pi$  орбиталей.

#### Расчет электронных переходов в комплексе $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$ .

Предположительно краситель связывается с поверхностью сульфида кадмия через образование связи между атомом кислорода красителя и ионом Cd поверхности сульфида кадмия. В соответствии с экспериментальными данными это расстояние составляет 2,3 Å [17]. С учетом этих данных нами был построен комплекс  $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$  (рисунок 4). Оптимизация структуры комплекса не проводилась. Для данной структуры был произведен расчет электронного спектра методом TD DFT в приближении LC-wPBE. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Рассчитанные интенсивные переходы комплекса  $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$

Номер возбужденного состояния	МО	Длина волны, нм	Сила осциллятора $f$
1	147 $\rightarrow$ 151	873	0,3840
2	146 $\rightarrow$ 149	687	0,1672
3	146 $\rightarrow$ 148	662	0,1772
5	146 $\rightarrow$ 150	615	0,2527
7	143 $\rightarrow$ 151	550	0,7897
21	139 $\rightarrow$ 151	340	0,1769
24	146 $\rightarrow$ 152	321	0,1001
26	146 $\rightarrow$ 151	318	0,1133
27	147 $\rightarrow$ 156	315	0,1415
30	146 $\rightarrow$ 153	299	0,1449
39	146 $\rightarrow$ 155	275	0,2687
42	144 $\rightarrow$ 158	268	0,5441

Данные расчетов показывают, что в комплексе могут наблюдаться интенсивные переходы в широком диапазоне длин волн, включая длинноволновую. Следует заметить, эти переходы не наблюдаются в рассчитанных спектрах поглощения, как самого катиона красителя, так и кластера  $[Cd_4S_1]^{6+}$ . Был проведен анализ МО участвующих в интенсивных переходах. Первый интенсивный переход на длине волны 873 нм связан с возбуждением электрона на катионе красителя. Переходы на длинах волн 687 нм, 662 нм, 615 нм и 321 нм образованы исключительно за счет МО кластера  $[Cd_4S_1]^{6+}$ . Переходы на длинах волн 550 нм, 340 нм и 315 нм образованы за счет вкладов МО локализованных только на кумариновом красителе.

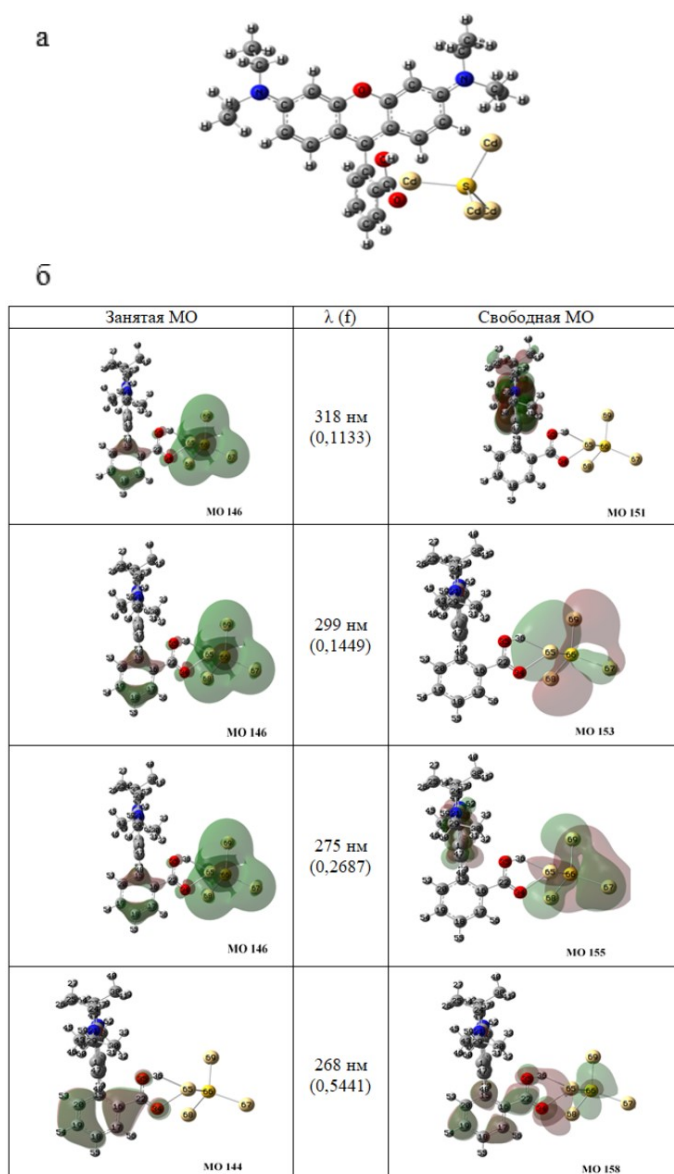


Рисунок 4 – а) Комплекс  $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$ ; б) МО соответствующие интенсивным переходам связанными с переносом электрона между катионами  $[Cd_4S_1]^{6+}$  и  $[RhB]^+$  (HOMO и LUMO имеют номера 147 и 148)

При этом можно выделить группу переходов на длинах волн 318 нм, 299 нм, 275 нм и 268 нм, которые сформированы с участием, как МО красителя, так и кластера сульфида кадмия (Рисунок 4). При этом 26-й переход на длине волны 318 нм явно указывает на перенос электрона с кластера  $[Cd_4S_1]^{6+}$  на катиона красителя. Присутствие подобного интенсивного перехода указывает на возможность переноса заряда с кластера сульфида кадмия на катион красителя, подтверждая предположение сделанное авторами [13].

**Расчет электронных переходов в комплексе  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$ .** Нами был также рассмотрен другой комплекс катиона  $[RhB]^+$  с кластером сульфида кадмия -  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$ . В данном комплексе расстояние между атомом кислорода катиона  $[RhB]^+$  и ближайшим атомом кадмия также составляло 2,3 Å (рисунок 5). Для данной структуры был произведен расчет электронного спектра методом TD DFT в приближении LC-wPBE. Данные по рассчитанным интенсивным переходам представлены в таблице 3.

Теория предсказывает для данного комплекса большое число малоинтенсивных переходов, которые не характерны для отдельного катиона  $[RhB]^+$  или кластера  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$ . При этом наблюдаются интенсивные переходы в длинноволновой области спектра. Анализ природы МО участвующих в интенсивных переходах комплекса  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$  показал

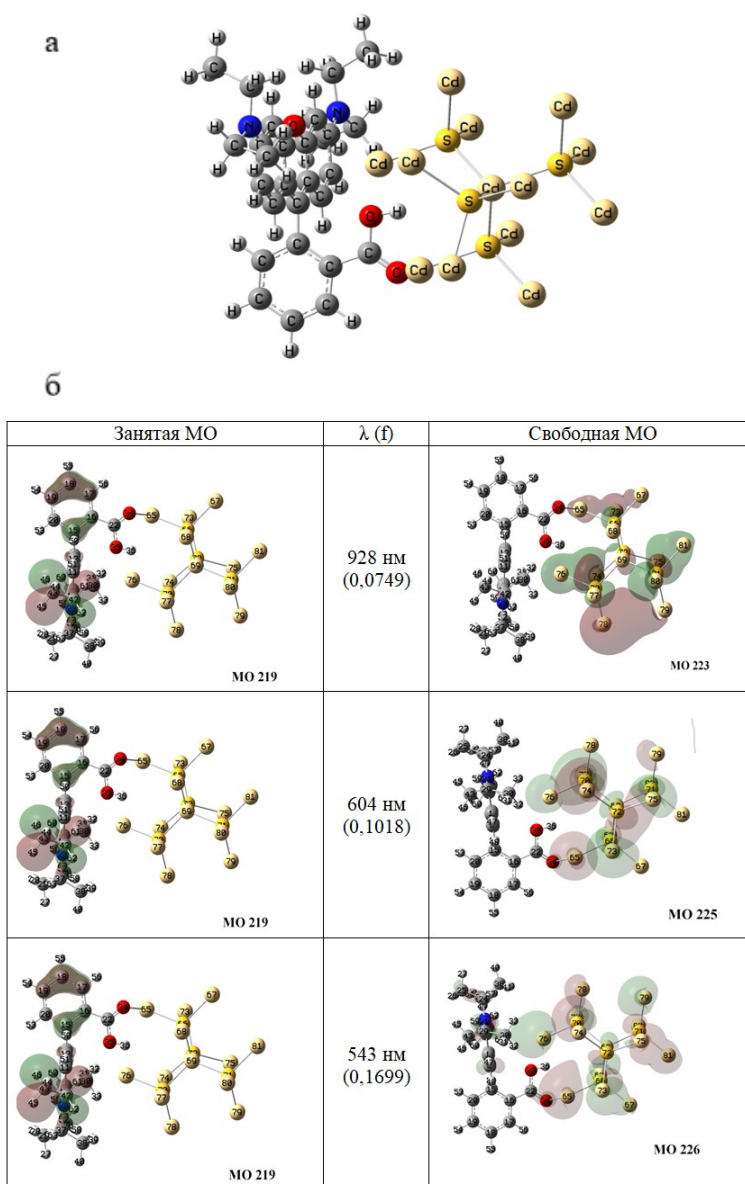


Рисунок 5 – а) Комплекс  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$ ; б) МО связанные с интенсивными переходами с переносом электрона с катиона  $[RhB]^+$  на кластер  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$  в комплексе  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$  (НОМО и ЛУМО имеют номера 219 и 220)

Таблица 3 – Рассчитанные интенсивные переходы комплекса  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$

Номер возбужденного состояния	МО	Длина волны, нм	Сила осциллятора $f$
20	219 $\rightarrow$ 223	928	0,0749
46	215 $\rightarrow$ 225	611	0,1649
48	219 $\rightarrow$ 225	604	0,1018
56	219 $\rightarrow$ 226	543	0,1699
58	215 $\rightarrow$ 227	530	0,4094
60	209 $\rightarrow$ 228	515	0,4325

следующее. Переходы, соответствующие длинам волн 928 нм, 604 нм и 543 нм связаны с переносом электрона с катиона красителя на кластер  $[Cd_{13}S_4]^{19+}$ , что также свидетельствует противоречит предположению сделанных в работе [13] о переносе электрона при фотовозбуждении с кластера сульфида кадмия на катион красителя. Другие переходы на длинах волн 611 и 530 нм сформированы исключительно за счет МО кластера сульфида

кадмия  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$ . Рассчитанный пик поглощения на длине волны 515 нм связан с МО катиона красителя  $[RhB]^+$ .

**Заклучение.** Сравнивая данные для комплексов  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$  и  $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$  можно заметить, что с увеличением размера кластера сульфида кадмия значительно увеличивается число длинноволновых неинтенсивных переходов, что возможно связано с квантово-размерным эффектом КТ. Данное обстоятельство можно также объяснить значительным увеличением дипольного момента системы при образовании комплексов. При этом в случае кластера  $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$  возможно наблюдение интенсивной полосы с переносом заряда с кластера сульфида кадмия на катион красителя. При увеличении размера кластера сульфида кадмия за счет увеличения числа атомов кадмия и соответствующего возрастания заряда кластера, т.е. переход от кластера  $[Cd_4S_1]^{6+}$  к  $[Cd_{13}S_4]^{18+}$ , приводит к исчезновению интенсивной полосы с переносом заряда с CdS на  $[RhB]^+$  и появлению полос с переносом электрона с красителя  $[RhB]^+$  на CdS. Учитывая, что подобные переходы имеют значительные силы осцилляторов, можно утверждать, что они могут наблюдаться в измеряемых спектрах поглощения.

### Список литературы

1. Yoffe A.D. Semiconductor quantum dots and related systems: Electronic, optical, luminescence and related properties of low dimensional systems // *Adv. Phys.* – 2001. – Vol. 50. – P. 1-208.
2. Schmid G. Ed. Nanoparticles. From Theory to Application. – Weinheim: Wiley-VCH, 2004. – 434 p.
3. Orlova A.O., Martynenko I.V., Maslov V.G., Fedorov A.V., Gun'ko Yu. K., Baranov A.V. Investigation of Complexes of CdTe Quantum Dots with the AlOH-Sulphophthalocyanine Molecules in Aqueous Media // *J. Phys. Chem. C.* – 2013. - Vol. 117 (44). - P 23425–23431.
4. Liu L., Xu X., Luo T. Liu Y., Yang Zh., Lei J. Metal enhanced photoluminescence of near-infrared CdTexSe1-x quantum dots // *Solid State Communications.* – 2012. - Vol. 152. - P 1103–1107.
5. Wu W., Qu W., Ye H-A., Zheng Zh., Yang Y. Photoluminescent spectroscopic and kinetic studies on green-emitting CdSeS quantum dot/polymethyl methacrylate composite // *Journal of Non-Crystalline Solids.* – 2010. - Vol. 356. – P 1016–1020.
6. Sarkar S., Makhil A., Lakshman K., Bora T., Dutta J., Pal S.K. Dual-Sensitization via Electron and Energy Harvesting in CdTe Quantum Dots Decorated ZnO Nanorod-Based Dye-Sensitized Solar Cells // *J. Phys. Chem. C.* – 2012. – Vol. 116 (27). - P 14248–14256.
7. Gur I., Fromer N. A., Geier M. L., Alivisatos A. P. Air-Stable All-Inorganic Nanocrystal Solar Cells Processed from Solution // *Science.* – 2005. - Vol. 310. – P. 462-465.
8. Alivisatos A. Perspectives on the Physical Chemistry of Semiconductor Nanocrystals // *J. Phys. Chem.* – 1996. - Vol. 100. – P. 13226-13239.
9. Eychmuller A. Structure and Photophysics of Semiconductor Nanocrystals // *J. Phys. Chem. B.* – 2000. - Vol. 104. – P. 6514-6528.
10. Halivni Sh., Sitt A., Hadar I., Banin U. Effect of Nanoparticle Dimensionality on Fluorescence Resonance Energy Transfer in Nanoparticle Dye Conjugated Systems // *ACS Nano.* – 2012. – Vol. 6 (3), - P 2758–2765.
11. Xiong Sh., Xi B., Qian Y. CdS Hierarchical Nanostructures with Tunable Morphologies: Preparation and Photocatalytic Properties // *J. Phys. Chem. C.* – 2010. – Vol. 114. - P 14029–14035.
12. McArthur E. A., Godbe J. M., Tice D. B., Weiss E. A. A Study of the Binding of Cyanine Dyes to Colloidal Quantum Dots Using Spectral Signatures of Dye Aggregation // *J. Phys. Chem. C* – 2012. – Vol. 116. - P 6136-6142.
13. Boulesbaa A., Issac A., Stockwell D., Huang Zh., Huang J., Guo J., Lian T. Ultrafast Charge Separation at CdS Quantum Dot/Rhodamine B Molecule Interface // *Journal of American Chemical Society.* – 2007. – Vol. 129. – p. 15132-15133.
14. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // *J. Chem. Phys.* – 1993. – Vol. 98. – P. 5648-5652.

15. 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.

16. 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., et al Gaussian, Inc., Wallingford CT, Available at: <http://gaussian.com/g09citation/> (accessed 2010).

17. Jang E., Jun Sh., Chung Y., Pu L. Surface Treatment to Enhance the Quantum Efficiency of Semiconductor Nanocrystals // J. Phys. Chem. B. – 2004. - Vol. 108. – P. 4597-4600.

**А.А. Алдонгаров, А.М. Асильбекова, И.С. Иргибаета, Ж.К. Ермекова**

*Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан  
«Люминесцентті материалдарды зерттеу орталығы» ЖШС, Астана, Қазақстан*

### **Родамин бояғышы мен CdS кластерлерінің кешендерінде электрондық ауысулардың табиғатын анықтау**

**Аннотация:** Кванттық нүктелер мен органикалық бояғыштар арасындағы олардың бетінде қозу энергиясының ауысу құбылысы TD-DFT әдісімен қарастырылды.  $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$  және  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$  кешендері зерттелді. Кадмий сульфиді кластерімен  $[RhB]^+$  бояғышының кешендерінде спектрдің ұзынтолқынды облыста жаңа жолақтардың пайда болуы бақыланатындығы көрсетілді және бұл жолақтардың көп бөлігі төмен қарқындылыққа ие. Бұл жағдайды кешеннің түзілуі кезінде жүйенің диполь моментінің айтарлықтай өсуімен түсіндіруге болады. Сонымен қатар, заряд тасымалдауының қарқынды жолақтарын бақылау мүмкіндігі көрсетілді. Кадмий сульфиді кластерінің оң зарядының өсуі, яғни  $Cd^{2+}$  кадмий ионы санының артуы фотоқозған электрон тасымалының бағытын өзгертуге алып келеді. Сондай-ақ, қарқынды ауысуларға қатысатын молекулалық орбитальдардың табиғатына талдау жүргізілді. Алынған нәтижелер бояғыш катионына кадмий сульфиді кластерінің заряд тасымалдау мүмкіндігін және кері бағытта да заряд тасымалдау мүмкіндігін көрсетеді.

**Түйін сөздер:** Кванттық нүктелер, CdS, DFT тығыздық функционал әдісі, пассивациялау, оқшауланған күйлер, молекулалық орбитальдар.

**A.A. Aldongarov, A.M. Assilbekova, I.S. Irgibaeva, Zh.K. Ermekova**

*L.N.Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan  
LLP «Center for research of luminescent materials», Astana, Kazakhstan*

### **Determination of the nature of electronic transitions in the complexes of rhodamine dye and CdS clusters**

**Abstract:** The phenomenon of transfer of excitation energy between quantum dots and organic dyes on their surface was considered by the TD-DFT method. Complexes of  $[RhB - Cd_4S_1]^{7+}$  and  $[RhB - Cd_{13}S_4]^{19+}$  were studied. It was shown that in the dye complex  $[RhB]^+$  with cadmium sulfide clusters, new bands appear in the long-wave region of the spectrum, with a significant part of them having a low intensity. This circumstance can be explained by a significant increase in the dipole moment of the system in the formation of complexes. It is also shown that it is possible to observe intense charge transfer bands. The increase in the positive charge of the cadmium sulfide cluster, as a consequence of the increase in the number of cadmium ions  $Cd^{2+}$ , leads to a change in the direction of the transfer of the photoexcited electron. Also, an analysis was made of the nature of molecular orbitals participating in intense transitions. These data indicate the possibility of charge transfer from clusters of cadmium sulfide to cation dye and vice versa.

**Key words:** Quantum dots, CdS, DFT density functional method, passivation, trap states, molecular orbitals.

## References

1. Yoffe A.D. Semiconductor quantum dots and related systems: Electronic, optical, luminescence and related properties of low dimensional systems, *Adv. Phys.*, **50**, 1-208 (2001).
2. Schmid G. Ed. Nanoparticles. From Theory to Application (Weinheim: Wiley-VCH, 2004).
3. Orlova A.O., Martynenko I.V., Maslov V.G., Fedorov A.V., Gun'ko Yu. K., Baranov A.V. Investigation of Complexes of CdTe Quantum Dots with the AlOH-Sulphophthalocyanine Molecules in Aqueous Media, *J. Phys. Chem. C*, **117** (44), 23425–23431 (2013).
4. Liu L., Xu X., Luo T. Liu Y., Yang Zh., Lei J. Metal enhanced photoluminescence of near-infrared CdTe<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub> quantum dots, *Solid State Communications*, **152**, 1103–1107 (2012).
5. Wu W., Qu W., Ye H-A., Zheng Zh., Yang Y. Photoluminescent spectroscopic and kinetic studies on green-emitting CdSeS quantum dot/polymethyl methacrylate composite, *Journal of Non-Crystalline Solids*, **356**, 1016–1020 (2010).
6. Sarkar S., Makhil A., Lakshman K., Bora T., Dutta J., Pal S.K. Dual-Sensitization via Electron and Energy Harvesting in CdTe Quantum Dots Decorated ZnO Nanorod-Based Dye-Sensitized Solar Cells, *J. Phys. Chem. C*, **116** (27), 14248–14256 (2012).
7. Gur I., Fromer N. A., Geier M. L., Alivisatos A. P. Air-Stable All-Inorganic Nanocrystal Solar Cells Processed from Solution, *Science*, **310**, 462-465 (2005).
8. Alivisatos A. Perspectives on the Physical Chemistry of Semiconductor Nanocrystals, *J. Phys. Chem.*, **100**, 13226-13239 (1996).
9. Eychmuller A. Structure and Photophysics of Semiconductor Nanocrystals, *J. Phys. Chem. B*, **104**, 6514-6528 (2000).
10. Halivni Sh., Sitt A., Hadar I., Banin U. Effect of Nanoparticle Dimensionality on Fluorescence Resonance Energy Transfer in Nanoparticle Dye Conjugated Systems, *ACS Nano*, **6** (3), 2758–2765 (2012).
11. Xiong Sh., Xi B., Qian Y. CdS Hierarchical Nanostructures with Tunable Morphologies: Preparation and Photocatalytic Properties, *J. Phys. Chem. C*, **114**, 14029–14035 (2010).
12. McArthur E. A., Godbe J. M., Tice D. B., Weiss E. A. A Study of the Binding of Cyanine Dyes to Colloidal Quantum Dots Using Spectral Signatures of Dye Aggregation, *J. Phys. Chem. C*, **116**, 6136-6142 (2012).
13. Boulesbaa A., Issac A., Stockwell D., Huang Zh., Huang J., Guo J., Lian T. Ultrafast Charge Separation at CdS Quantum Dot/Rhodamine B Molecule Interface, *Journal of American Chemical Society*, **129**, 15132-15133 (2007).
14. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange, *J. Chem. Phys.*, **98**, 5648-5652 (1993).
15. 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*, **37**, 785-789 (1988).
16. 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., et al Gaussian, Inc., Wallingford CT, Available at: <http://gaussian.com/g09citation/> (accessed 2010).
17. Jang E., Jun Sh., Chung Y., Pu L. Surface Treatment to Enhance the Quantum Efficiency of Semiconductor Nanocrystals, *J. Phys. Chem. B*, **108**, 4597-4600 (2004).

### Сведения об авторах:

*Алдонгаров А.А.* – доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. К.Мунайтпасова 13, Астана, Казахстан.

*Асылбекова А.М.* – преподаватель кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. К.Мунайтпасова 13, Астана, Казахстан.

*Иргибаева И.С.* – директор ТОО «Центр исследования люминесцентных материалов», профессор кафедры химии, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. К.Мунайтпасова 13, Астана, Казахстан.

*Ермекова Ж.К.* – и.о.доцента кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. К.Мунайтпасова 13, Астана, Казахстан.

*Aldongarov A.A.* – associate professor at the department of technical physics, L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov str., Astana, Kazakhstan.

*Assilbekova A.M.* – teaching assistant at the department of technical physics, L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov str., Astana, Kazakhstan.

*Irgibaeva I.S.* – Head of LLP «Center for research of luminescent materials», professor at the department of chemistry, L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munitpasov str., Astana, Kazakhstan.

*Ermekova Zh.K.* – acting associate professor at the department of technical physics, L.N.Gumilyov Eurasian National University, 13 Munitpasov str., Astana, Kazakhstan.

*Поступила в редакцию 26.01.2018*