

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ

«Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ» КЕАҚ

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»
XIX Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XIX Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»**

**PROCEEDINGS
of the XIX International Scientific Conference
for students and young scholars
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»**

**2024
Астана**

УДК 001

ББК 72

G99

«ǴYLYM JÁNE BILIM – 2024» студенттер мен жас ғалымдардың XIX Халықаралық ғылыми конференциясы = XIX Международная научная конференция студентов и молодых ученых «ǴYLYM JÁNE BILIM – 2024» = The XIX International Scientific Conference for students and young scholars «ǴYLYM JÁNE BILIM – 2024». – Астана: – 7478 б. - қазақша, орысша, ағылшынша.

ISBN 978-601-7697-07-5

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

ББК 72

G99

ISBN 978-601-7697-07-5

**©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2024**

НАНОПАРАҚТАРДЫҢ СУДЫ ЫДЫРАТУЫНЫҢ ФОТОКАТАЛИТИКАЛЫҚ ҚАБІЛЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ ҮШІН DFT ӘДІСІН ҚОЛДАНУ ВІОХ (X=I, Cl, Br).

Хайрушева Айнұр Берікқызы, ТФ-43

ainurkhairusheva@gmail.com

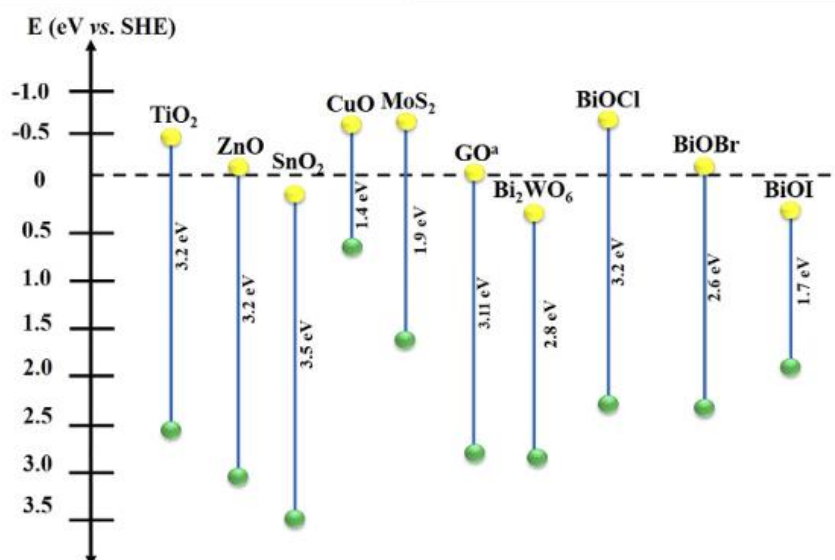
Л. Н. Гумилев атындағы ЕҰУ Физика-техника факультеті, Техникалық физика кафедрасының 4 курс студенті, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – А. Алдонгаров

Соңғы кездері экомномиканың тез дамуына байланысты қазбалы материалдардың да (мұнай, көмір және т.б.) энергияларының дамуына артып келеді. Осыған орай, энергетикалық кризис экомномиканың әрі қарай дамуын тоқтатып тұрған факторлардың бірі болып саналады [1]. Алайда, басқа тарапынан қарасақ қазбалы энергиялар басқа да мәселелерге әкеліп соғады. Мысалы, ауаның және судың ластануы, тұмандану, парниктік эффект және т.б. Осы мәселелердің шешімі ретінде ең қолайлысы жартылай өткізгіш материалдардың фотокатализдік қасиетін ұлғайту. Жартылай өткізгіш материалдар күн жарығын өзіне сіңіру арқылы суды H_2O ыдыратып H_2 және O_2 қышқыл газдарға бөле алатын қасиетке ие. Және көмірқышқыл газдарын органикалық көміртегі ресурстарына (мысалы, метан, көміртегі тотығы, метанол т.б.) [2-4], органикалық ластаушы заттарды ыдырады, бактерияларды өлтіреді. Жоғарыда атап өткеніміздей, күн көзін пайдалану арқылы біз таза ауа энергетикасын фотокатализ көмегімен жақсарту аламыз. Қазіргі кездегі қоғамдағы маңызды мәселелердің шешімін табуға болады.

Қазіргі таңда өзінің жартылай өткізгіш қасиетін белсенді көрстеіп жүрген материалдардың бір түрі – $BiOX$ (I, Cl, Br). Бұл құрылым – $PbFCI$ кристалдық типті құрылым (кеңістік топтасы $R4/nmm$, $D4h$ симметриялы тетрагональдық жүйе. Сонымен қатар, $[X-Bi-O-BI-x]$ қабаттары әлсіз Ван-дер-Ваальс өзара әрекеттесуімен байланысады [5]. Бұл фотокатализдік қасиеті бар $BiOX$ ($X=I, Cl, Br$) құрылымын тығыздықтың функционалдық теориясының әдісі мен есептейміз. Кванттық есептеу қолдану арқылы осы құрылымның тиімділігін, маңыздылығын және қандай өзгерістерге ие бола алатынын қарастырамыз.

Теория және эксперимент

Ab initio есептеулеріне негізделген теориялық зерттеулер осы материалдардың кейбір электронды, оптикалық және құрылымдық қасиеттерін ($BiOX$) сәтті болжауға мүмкіндік береді. Бұл қасиеттердің кейбіреулері энергия деңгейлерінің (атомдық орбиталдар) үздіксіз жолақтарының пайда болуымен байланысты. Жартылай өткізгіш материалдардың басқа фотокатализаторларға қарағанда маңызды артықшылықтарының бірі-олардың жіңішке өткізу қабілеті. Позняк пен Кулак (1990) висмуттың анодты тотығу әдісін қолдана отырып [7], $BiOX$ -тың фотоэлектрхимиялық қасиеттерін бірінші болып талдады; олар 3,50 эВ ($BiOCl$), 2,92 эВ ($BiOBr$) және 1,90 эВ ($BiOI$) өткізу қабілеттілігінің мәндерін анықтау арқылы $BiOX$ ($X=Cl, Br$ және I) пленкаларын синтездеді. Бұл өткізу қабілеттілігі энергиясының мәндері тығыздықтың функционалдық теориясын (DFT) қолдана отырып есептеу арқылы расталды [8]. $BiOX$ валенттік жолағының максимумы галогендердің NP орбитальдарынан (сәйкесінше Cl, Br және I үшін $N = 3, 4$ және 5) және оттегінің 2p орбитальдарынан тұрады, ал өткізгіштік жолағының минимумында висмуттың 6p орбитальдары бар [8]. Жақында Бархуми мен Саид (2021) [9] $BiOI$ жолақ құрылымын теориялық тұрғыдан зерттеді, соның ішінде $BiOF$, жалпыланған градиенттік жуықтауды (GGA) және GW жуықтауды (GWA) қолдана отырып, тығыздық функционалдығы теориясымен (DFT) нығайтылды және эксперименттік деректерге сәйкес келетін өткізу қабілеттілігі нәтижелерін алды, $BiOI$ үшін 2,33 эВ-ден 4,04 эВ-ге дейін $BiOF$.



2.1 Оптикалық қасиеттері

BiOX-тың көрінетін спектрдегі жарықты сіңіру қабілеті олардың фотокаталитикалық белсенділігінде шешуші рөл атқарады [10]. Фотокаталитикалық және фотоэлектрокаталитикалық қосымшалардағы BIOS негізіндегі материалдардың жетістігі олардың беткі құрылымдарының иерархиясымен байланысты, бұл BiOXs-ке қатысты көрінетін жарықты сіңіру қабілетін айтарлықтай жақсартады. Осыған байланысты *in situ* химиялық тұндыру әдісін қолдана отырып [11], 2D/2D *BiOBr/Bi₁₂O₁₇Cl₁₂* гетеротүсірілімін синтездеді және оның судағы ластаушы заттардың деградациясына қатысты фотокаталитикалық қабілетін бағалады. Таук диаграммаларына сүйене отырып, олар *BiOBr/Bi₁₂O₁₇Cl₁₂* композиті үшін 2,28 эВ өткізу қабілеттілігін алды. Сонымен қатар, күкіртті легирлеу оттегі бос орындарының түзілуін күшейтетіні көрсетілген, бұл фотогенерацияланатын зарядты тасымалдауға ықпал етеді [11]. Химиялық тұндыру әдісімен BiOS (X=Cl және Br)-Au-Cd типті гетеротүйінді дайындады. UV-Vis DRS спектрлеріне сәйкес, композит таза BiOS -пен салыстырғанда аздап қызыл ауысуды көрсетті, бұл Au мен CdS арасындағы күшті өзара әрекеттесуге байланысты. Сонымен қатар, фотолюминесценция спектроскопиясының нәтижелері гетероперация қарқындылығы төмен шың екенін көрсетті, бұл фотогенерацияланатын e_{CB}^-/h_{VB}^+ жұптарының рекомбинация коэффициентінің төмендеуін білдіреді.

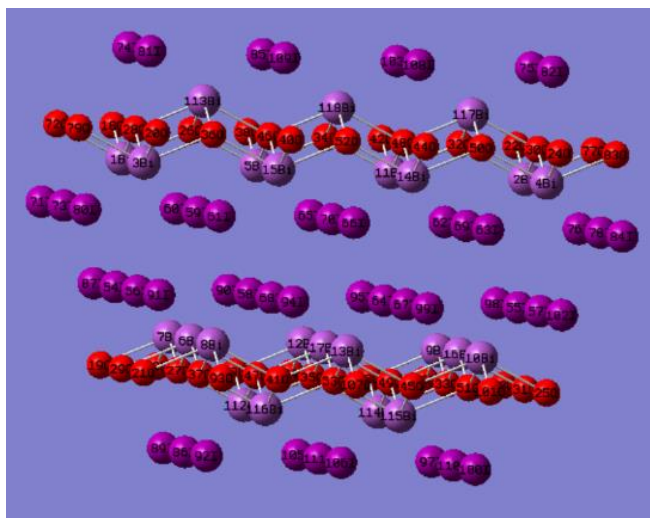
BiOI-бұл *BiOCl* және *BiOBr* ге қарағанда (шамамен 1,70 эВ) өткізу қабілеті одан да аз р-типті жартылай өткізгіш, сондықтан фотокаталитикалық және фотоэлектрокаталитикалық жүйелерде қоршаған ортаны қалпына келтірудің ең перспективалы материалдарының бірі болып саналады. Жақында көптеген зерттеулер фотокаталитикалық процестер арқылы әртүрлі ластаушы заттарды өңдеуге арналған жаңа *BiOI* негізіндегі материалдарды, соның ішінде *BiOI/TiO₂* гетероқосылыстарын және *Fe₃O₄/BiOCl/BiOI* Z-типті гетероқұрылымдарды әзірлеуге бағытталған. Сонымен қатар, висмутқа бай висмут оксидтері деп аталатын стехиометриялық емес, висмут оксидтеріне (*Bi_xO_yX_z*) негізделген жартылай өткізгіштер алынды, олардың құрылымдары тұрақтылықты жоғарылатады және жолақ құрылымдары фотокаталитикалық процестерге қолайлы.

Нәтижелер және анализ

Жартылай өткізгіш материалдардың әсіресе BiOX (X=I, Cl, Br) фотокаталитикалық қасиеттері зертханалық түрде нанопарақтар түрінде өсірілген және микроскопиялық және рентген зерттеулерінен кейін өткізгіштік қасиетінің жақсарғанын дәлелдеген.

Алайда, бұл жартылай өткізгіш материалдың теориялық түрінде берілген мәліметтері аз.

Осы жұмыста біз тығыздық функционалдығы теориясымен (DFT) әдісі арқылы теориялық түрде кванттық есептеулер нәтижесін ұсынамыз.

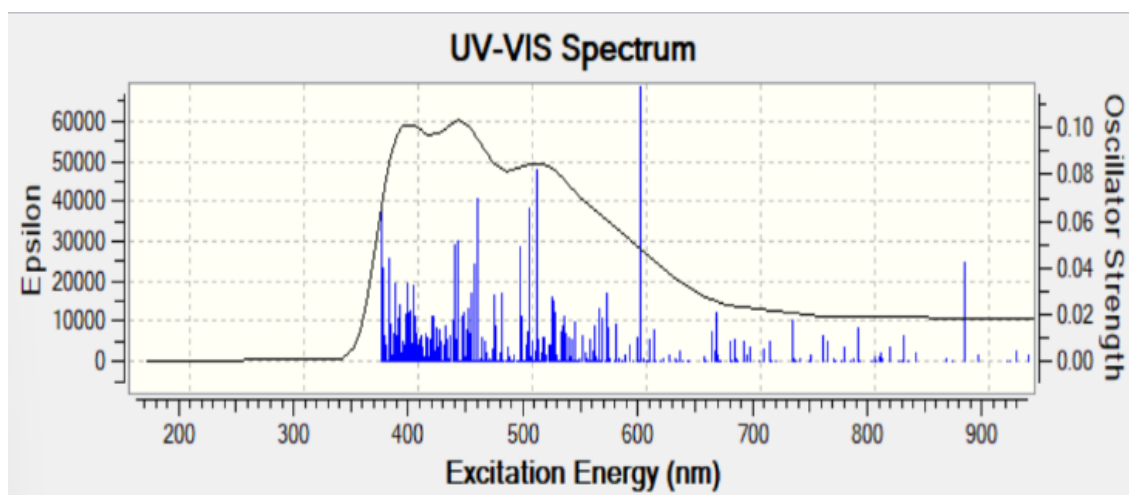


1-сурет. GaussView 5.0 программасында 118 атомға дейін өсірілген BiOI жартылай өткізгіш материалы

1-суретте көрсетілген BiOI жартылай өткізгіш материалы алдымен $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ матрицадағы құрылымды [6] сайтынан алып, Vesta программасы арқылы

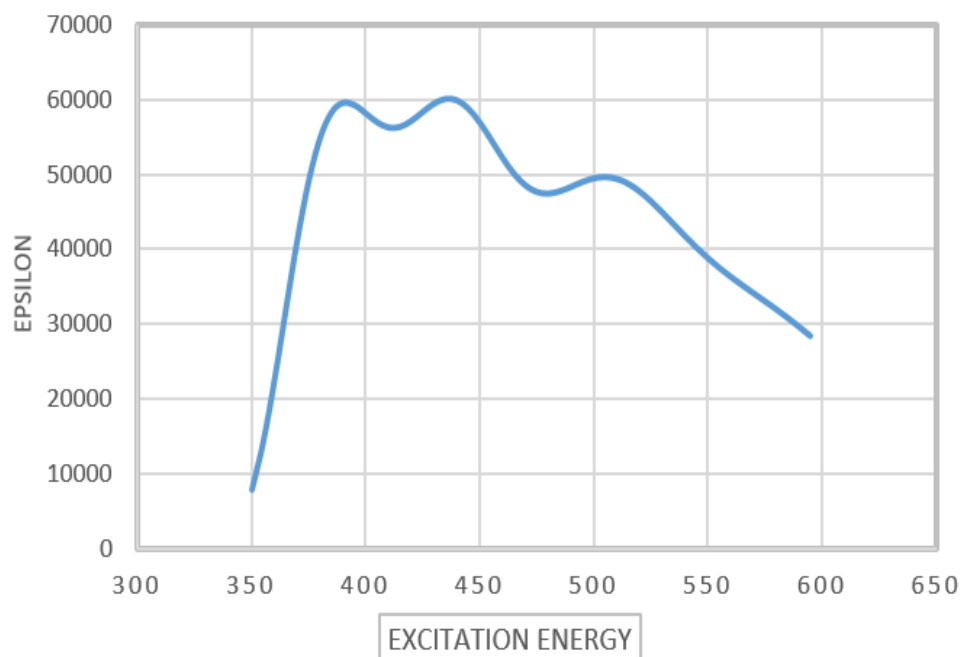
өсіреміз. 118 атомнан құралған құрылымды, $\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ матрицаны алғаннан кейін,

форматын “GJF” форматына ауыртыру керек. GaussView 5.0 программасын қолдану арқылы құрылымын тексереміз (2-сурет). $\text{Bi}+3\text{O}-2\text{I}-1$ (24 46 48) заряды [-68] мәнін есептегеннен кейін, Gaussian 09W програмасында ашамыз. Программа бізге кванттық есептеулер береді, сол мәндер арқылы Origin программасында график тұрғызамыз (3-сурет). Басқа зертхана түрінде жасалған мақалармен салыстыра отырып, жеткен нәтижемізді тексереміз. 3-суретте көрсетілген графиктерде “UV/VIS Peak Half-Width at Half Height” параметрін өзгертеміз 0.15 эВ-қа өзгерту керек.



2-сурет. GaussView 5.0 программасынан алынған BiOI жартылай өткізгіш материалының УК спектрлары

BiOI 118-TD530



3-сурет. Origin программасына алынған мәндер арқылы тұрғызылған график

Қорытынды

Жоғарыда айтылып өткендей Хлор(Cl) мен Бромға (Br) құрылымы жағынан жартылай өткізгіштік, және спектрларды жұту бағытында ең қолайлысы болып табылады. Осы мақалада келтірілген есептеу нәтижелері 1-3 қабатты ультра жұқа BiOI пленкасы судың бөлінуінің жалпы фотокаталикалық реакциясы үшін қолайлы екенін көрсетеді, өйткені СВ шеті H^+/H_2 тотықсыздану потенциалынан жоғары позицияға ауысады, ал VB шеті O_2/H_2O тотығу потенциалынан төмен болып қалады. төмендеуімен электронды құрылымның өзгеруіне сәйкес қабаттың қалыңдығы, бұл өзгерістер фотогенерацияланған тасымалдаушылардың қозғалғыштығын едәуір арттыра алатын кванттық ұстау әсерлеріне байланысты деп саналады. Сонымен қатар, кванттық тосқауыл әсері ендірілген электр өрісінің айтарлықтай күшеюіне әкелді, бұл ультра жұқа BiOI пленкаларының фотокаталикалық тиімділігін одан әрі арттыруы мүмкін. Алайда, қабаттың қалыңдығының төмендеуі жарықтың сіңуінің төмендеуіне әкеледі, оны практикалық қолданудан аулақ болу керек.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Zhao, W.; Chen, Z.; Yang, X.R.; Qian, X.X.; Liu, C.X.; Zhou, D.T.; Sun, T.; Zhang, M.; Wei, G.Y.; Dissanayake, P.D.; et al. Recent advances in photocatalytic hydrogen evolution with high-performance catalysts without precious metals. *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2020, 132, 110040. [<https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110040>]
2. Xie, Y.; Chen, J.; Wu, X.; Wen, J.; Zhao, R.; Li, Z.; Tian, G.; Zhang, Q.; Ning, P.; Hao, J. Frustrated Lewis Pairs Boosting Low-Temperature CO₂ Methanation Performance over Ni/CeO₂ Nanocatalysts. *ACS Catal.* 2022, 12, 10587–10602. [<https://doi.org/10.1021/acscatal.2c02535>]
3. Zhu, J.; Cannizzaro, F.; Liu, L.; Zhang, H.; Kosinov, N.; Filot, I.A.W.; Rabeah, J.; Bruckner, A.; Hensen, E.J.M. Ni-In Synergy in CO₂ Hydrogenation to Methanol. *ACS Catal.* 2021, 11, 11371–11384. [<https://doi.org/10.1021/acscatal.1c03170>]
4. Li, Y.; Li, B.; Zhang, D.; Cheng, L.; Xiang, Q. Crystalline Carbon Nitride Supported Copper Single Atoms for Photocatalytic CO₂ Reduction with Nearly 100% CO Selectivity. *ACS Nano* 2020, 14, 10552–10561. [<https://doi.org/10.1021/acsnano.0c04544>] [<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/32806072>]

5. Z Yuan, Z.; Jiang, Z. Applications of BiOX in the Photocatalytic Reactions. *Molecules* 2023, 28, 4400. [https://doi.org/ 10.3390/molecules28114400](https://doi.org/10.3390/molecules28114400)
6. <https://www.crystallography.net/cod/search.html>
7. Poznyak, S. K., and Kulak, A. I. (1990). Photoelectrochemical Properties of Bismuth Oxyhalide Films', *Electrochimica Acta*. Pergamon 35 (11–12), 1941–1947. doi:10.1016/0013-4686(90)87103-9
8. Zhao, L., Xang, Z., and Fan, C. (2012). First-principles Study on the Structural, Electronic and Optical Properties of BiOX (X=Cl, Br, I) Crystals. *Phys. B Condens. Matter* 407 (17), 3364–3370. doi:10.1016/j.physb.2012.04.039
9. Barhoumi, M., and Said, M. (2021). Electronic and Optical Properties of Bismuth Oxyhalides from Ab Initio Calculations. *Mater. Sci. Eng. B* 264, 114921. doi:10.1016/j.mseb.2020.114921
10. Wilczewska, P., Malankowaska, A., and Ryl, J. (2021). Morphology Regulation Mechanism and Enhancement of Photocatalytic Performance of BiOX (X = Cl, Br, I) via Mannitol-Assisted Synthesis. *Catalysts* 2021 Vol. 1111 (3), 312312. doi:10.3390/CATAL11030312
11. Wang, L, L., Min, X., and Zhu, X. (2020). Facile Construction of Novel BiOBr/ Bi₁₂O₁₇Cl₂ Heterojunction Composites with Enhanced Photocatalytic Performance. *J. Colloid Interface Sci.* 560, 21–33. doi:10.1016/j.jcis. 2019. 10.048