

ISSN: 1991-346X (Print)
ISSN: 2518-1726 (Online)

**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

**№1
2026**

ISSN 2518-1483 (Online),
ISSN 2224-5227 (Print)

2026 • 1



**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND
CHEMICAL SCIENCES**

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

EDITOR-IN-CHIEF

ZHURINOV Murat Zhurinovich, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of IAAS and NAS RK, General Director Oil refining and Petrochemistry Research Institute (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

DEPUTY EDITOR-IN-CHIEF:

KALIMOLDAYEV Maksat Nuradilovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detailuri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

ABILMAGZHANOV Arlan Zainutallaevich, PhD in Chemistry, General Director of JSC "Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry named after D.V. Sokolsky", (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

EDITORIAL BOARD:

ADEKENOV Sergazy Mynzhasarovich, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Director of the JSC "Phytochemistry Research and Production Center", (Karaganda, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

RAMAZANOV Tlekkabul Sabitovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

ABIEV Rufat, Doctor of Technical Sciences (Biochemistry), Professor, Head of the Department of Optimization of Chemical and Biotechnological Equipment, St. Petersburg State Technological Institute (St. Petersburg, Russia), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

OLIVIERO Rossi Cesare, PhD (Chemistry), Professor at the University of Calabria (Calabria, Italy), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

TIGINYANU Ion Mihailovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician, President of the Academy of Sciences of Moldova, Technical University of Moldova (Chisinau, Moldova), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

SANG SU Kwak, PhD (Biochemistry, Agricultural Chemistry), Professor, Chief Scientist, Research Center for Plant Systems Engineering, Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology (KRIBB), (Daecheon, Korea), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

BERSIMBAYEV Rakhmetkazhi Iskenderovich, Doctor of Biological Sciences, Professor, Academician of NAS RK, L.N. Gumilyov Eurasian National University (Astana, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

CALANDRA Pietro, PhD (Physics), Professor, Institute for the Study of Nanostructured Materials (Rome, Italy), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/616360>

BOSHKAEV Kuantai Avgazyevich, PhD, Associate Professor, Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

BURKITBAEV Mukhambetkali, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29017135>

QUEVEDO Hernando, Professor, National Autonomous University of Mexico (UNAM), Institute of Nuclear Sciences (Mexico City, Mexico), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ZHUSUPOV Marat Abzhanovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

KOVALEV Alexander Mikhailovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician of NAS of Ukraine, Institute of Applied Mathematics and Mechanics (Donetsk, Ukraine), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

TAKIBAEV Nurgali Zhabagaevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

KHARIN Stanislav Nikolaevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Kazakh-British Technical University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

ABISHEV Medeu Erzhanovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Corresponding Member of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES.

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

Owner: «Central Asian Academic Research Center» LLP (Almaty).

The certificate of registration of a periodical printed publication in the Committee of Information of the Ministry of Information and Social Development of the Republic of Kazakhstan № KZ93VPY00121157 issued 05.06.2025

Thematic scope: *physics and chemistry*.

Periodicity: 4 times a year.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

БАС РЕДАКТОР

ЖҰРЫНОВ Мұрат Жұрынулы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ХҒАҚ және ҚР ҰҒА академигі, Мұнай өңдеу және мұнай-химиясы ғылыми-зерттеу институтының бас директоры (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=6602177960>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

БАС РЕДАКТОРДЫҢ ОРЫНБАСАРЛАРЫ:

КАЛИМОЛДАЕВ Мақсат Нұрәділұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/rec-ord/2428551>

ӘБИЛМАҒЖАНОВ Арлан Зайнуталлайұлы, химия ғылымдарының кандидаты, Д.В. Сокольский атындағы «Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ Бас директоры (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=57197468109>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

ӘДЕКЕНОВ Серғазы Мынжасарұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, «Фитохимия» ғылыми-өндірістік орталығы» АҚ директоры (Қарағанды, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

РАМАЗАНОВ Тілеккабыл Сәбитұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

ӘБИЕВ Руфат, техника ғылымдарының докторы (биохимия), профессор, Санкт-Петербург мемлекеттік технологиялық институты «Химиялық және биотехнологиялық аппаратураны оңтайландыру» кафедрасының меңгерушісі (Санкт-Петербург, Ресей), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

ОЛИВЬЕРО Росси Сесаре, PhD (химия), Калабрия университетінің профессоры (Калабрия, Италия), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, академик, Молдова Ғылым академиясының президенті, Молдова техникалық университеті (Кишинев, Молдова), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

САНГ-СУ Квак, PhD (биохимия, агрохимия), профессор, Корей Биоғылым және биотехнология ғылыми-зерттеу институты (KRIBB), өсімдіктердің инженерлік жүйелері ғылыми-зерттеу орталығының бас ғылыми қызметкері (Дэчон, Корея), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

БЕРСІМБАЕВ Рахметқажы Ескендірұлы, биология ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті (Астана, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=7004012398>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

КАЛАНДРА Пьетро, PhD (физика), нанокүрылымды материалдарды зерттеу институтының профессоры (Рим, Италия), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=7004303066>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/616360>

БӨШКАЕВ Қуантай Авғазыұлы, PhD теориялық және ядролық физика кафедрасының доценті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=54883880400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

БҮРКІТБАЕВ Мұхамбетқали, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29017135>

QUEVEDO Hernando, профессор, Мексика ұлттық автономиялық университеті (UNAM), Ядролық ғылымдар институты (Мехико, Мексика), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ЖҮСІПОВ Марат Абжанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, теориялық және ядролық физика кафедрасының профессоры, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, Украина ҰҒА академигі, Қолданбалы математика және механика институты (Донецк, Украина), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

ТАКИБАЕВ Нұрғали Жабағаұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

ХАРИН Станислав Николаевич, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

ӘБИШЕВ Медеу Ержанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/author/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

Меншіктеуші: «Орталық Азия академиялық ғылыми орталығы» ЖШС (Алматы қ.).

Ақпарат агенттігінің мерзімді баспасөз басылымын, ақпарат агенттігін және желілік басылымды қайта есепке қою туралы ҚР Мәдениет және Ақпарат министрлігі «Ақпарат комитеті» Республикалық мемлекеттік мекемесі 05.06.2025 ж. берген № KZ93VPY00121157 Куәлік.

Тақырыптық бағыты: *физика, химия.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР

ЖУРИНОВ Мурат Журинович, доктор химических наук, профессор, академик МААН и НАН РК, Генеральный директор Научно-исследовательского института нефтепереработки и нефтехимии (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

ЗАМЕСТИТЕЛИ ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА:

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нурадилович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

АБИЛЬМАГЖАНОВ Арлан Зайнуталлаевич, кандидат химических наук, Генеральный директор АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

АДЕКЕНОВ Сергазы Мынжасарович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, директор АО «Научно-производственного центра «Фитохимия» (Караганда, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

РАМАЗАНОВ Тлеккабул Сабитович, (заместитель главного редактора), доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

АБИЕВ Руфат, доктор технических наук (биохимия), профессор, заведующий кафедрой «Оптимизация химической и биотехнологической аппаратуры», Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Санкт-Петербург, Россия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

ОЛИВЬЕРО Россини Чезаре, доктор философии (PhD, химия), профессор Университета Калабрии (Калабрия, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, доктор физико-математических наук, академик, президент Академии наук Молдовы, Технический университет Молдовы (Кишинев, Молдова), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

САНГ-СУ Квак, доктор философии (PhD, биохимия, агрохимия), профессор, главный научный сотрудник, Научно-исследовательский центр инженерных систем растений, Корейский научно-исследовательский институт бионауки и биотехнологии (KRIBB) (Дэчон, Корея), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

БЕРСИМБАЕВ Рахметкажи Искендерович, доктор биологических наук, профессор, академик НАН РК, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева (Астана, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

КАЛАНДРА Пьетро, доктор философии (PhD, физика), профессор Института по изучению наноструктурированных материалов (Рим, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/616360>

БОШКАЕВ Куантай Агазыевич, PhD, преподаватель, доцент кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

БУРКИТБАЕВ Мухамбетали, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29017135>

QUEVEDO Hernando, профессор, Национальный автономный университет Мексики (UNAM), Институт ядерных наук (Мехико, Мексика), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ЖУСУПОВ Марат Абжанович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет имени аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, академик НАН Украины, Институт прикладной математики и механики (Донецк, Украина), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

ТАКИББАЕВ Нурғали Жабағаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

ХАРИН Станислав Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

АБИШЕВ Мелеу Ержанович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)

Собственник: ТОО «Центрально-азиатский академический научный центр» (г. Алматы).

Свидетельство № KZ93VPY00121157 о повторной регистрации периодического печатного издания информационного агентства, информационного агентства и сетевого издания, выданное Республиканским государственным учреждением «Комитет информации» Министерства культуры и информации Республики Казахстан **05.06.2025**Тематическая направленность: *физика, химия*.

Периодичность: 4 раза в год.

<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>

CONTENTS

PHYSICS

Aimaganbetova Z.K., Kulshymbayev Y.A., Zhanturina N.N., Beketova G.K.
First-principles calculation of the electronic properties of the Double Halide Perovskite $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ based on the quantum ESPRESSO software.....14

Amangeldinova S., Zhuniskhan S., Kalzhigitov N., Kurmangaliyeva V.
Study of the cluster structure of ^5He and ^5Li mirror nuclei in two-cluster approximation.....35

Chokin K., Otunchi Ye., Kozhahmetova A., Kasenova A., Shongalova A.
Development and testing of a laboratory pyrometallurgical installation for recycling lithium-ion batteries.....46

Issayeva A., Beisebayeva A., Madybekova G., Shynazbekova Sh., Issa A.
Comparative analysis of physico-chemical characteristics of drinking, spring and natural water in the South Kazakhstan.....65

Kim V.Yu., Aimuratov Y.K.
Search for transient cosmic events by scanning the sky with wide-field telescopes.....78

Koshtybayev T.B., Tatenov A.M., Aliyeva M.E., Tugelbaeva G.T., Zhanaliyeva G.Zh.
Study of the electromagnetic field based on thermodynamics principles.....89

Mukamedenkyzy V., Akberdiyev B.
Numerical investigation of the effect of inclination angle on the stability of mechanical equilibrium in Ar–N₂ binary gas mixtures.....105

Myasnikova L.N., Uzakbaeva S.S., Shanina Z.K., Bekeshev A.Z.
Kinetic properties of high-density polyethylene filled with chromium spinel powder.....119

Nurbayev B.M., Dmitriyeva E.A., Kemelbekova A.E.
The role of low-dimensional layered structures in enhancing the stability of tin-based perovskite materials.....136

Sattinova Z., Ermakhanova F., Assilbekov B., Taimuratova L.
Influence of various cooling conditions and heat transfer coefficients on solidification during the formation of beryllium ceramic products.....149

Shestakova L.I., Serebryanskiy A.V., Spassyyuk R.R., Omarov Ch.T.
Search for gas of comet-meteor origin in the inner Solar System: caii ion emission.....165

Ualikhanova U., Tursynkazy F., Syzdykova A.M., Altayeva G.S., Altaibayeva A.B.
Studying the amplitude of $f(T)$ gravitational waves using Bessel functions.....179

Zhexenbayeva G.A., Nasirova D.M., Aimanova G.K., Shomshekova S.A. Photometric study of the symbiotic object V725 Tau.....	194
Zhusupova N.K., Zhadyranova A.A. Bounce cosmology in $f(T, \mathcal{T})$ gravity based on energy condition analysis.....	205
Ziyatbekova G., Abdimanapova P., Sagyntay O., Nurym A., Ilinov R. Using artificial intelligence to predict diseases based on medical data.....	225

CHEMISTRY

Almassov N.Zh., Zhumagaliyeva A.N., Duisenbekov S.E., Zhakiyev N.K. Design and optimization of hybrid renewable energy systems for hydrogen production in Kazakhstan.....	236
Amangeldi B., Zhanikulov N., Taimasov B., Aitureev M.M., Dauletiyarov M. Calculation of the Raw material composition for obtaining white Portland cement clinker.....	251
Baeshov A., Tashenov E.A., Atykhanova S.B., Koshkarbayeva Sh.T. Preparation of cadmium sulfide by electrochemical method using a composite sulfur-graphite electrode.....	267
Baisalova G.Zh., Azhikhanova Zh., Taltenov A.A., Kuzhatova P. Determination of the total phenolic content in perennial herbaceous plants of the flora of Kazakhstan.....	277
Darmenbayeva A.S., Rajasekharan R., Zhussipnazarova G.M., Mukazhanova Zh.B., Begenova B.E. Composites based on chitosan and cellulose: synthesis, properties, and application prospects.....	287
Erkasov R.Sh., Zhamkenova A.S., Sergazina S.M., Nurmukhanbetova N.N., Kassenova N.B. Halide-dependent modulation of hydrogen bonding in Mn(II) complexes with protonated acetamide: a QAIM, NCI, and energy decomposition study.....	304
Kalimoldina L.M., Shaikhova Zh.E., Kaliyeva B.K., Bubish Sh., Askarova Sh.K. The effect of silver nanoparticles on the germination of bean, lemon, tangerine and avocado seeds.....	320
Kurtebayeva A.A., Alvarez-Torrellas S., Gomes H.T., Orynbayev S.A., Kalmakhanova M.S. Activated-carbon-enhanced polymeric membranes for efficient elimination of emerging contaminants.....	334

Massenova A.T., Zhumakanova A.S., Torlopov I.I., Rakhmetova K.S., Abilmagzhanov A.Z. Optimization of the hierarchical zeolite ZSM-5 synthesis process by steam-assisted alkaline modification.....	350
Mutushev A.Zh., Nuraly A.M., Sanat A.S., Shaukharova M.A., Yessimsiitova Z.B. The effect of light-converting films on the accumulation of bioactive compounds and the quality of fruits.....	366
Nefedov A.N., Taikenova A.T. Current state of organic corrosion inhibitor application in oil refining.....	379
Omarov B.T., Altybayev Zh.M., Serikbayeva B.S. Production of biohumus by vermicomposting of organic wastes and study of its agroecological effectiveness.....	399
Rakhman D.M., Kappasuly A., Makhayeva D.N., Kazybayeva D.S., Irmukhametova G.S. Development and investigation of mucoadhesive hydrogels based on gellan–cysteine complexes.....	414
Sabyrzhanova A.E., Bolatkyzy N., Berganaeva G.E., Dyusebaeva M.A. Study of amino acids and fatty acids in the aerial part of <i>Plantago major</i>	428
Satayeva S., Akhmetova F., Urazova A., Aituganova S., Yerniyazova K. The influence of PEPA concentration on the physical, mechanical, and operational properties of ED-20 epoxy adhesives.....	439
Zamanbek A.Zh., Koshkarbayeva Sh.T., Satayev M.S. Methods of Obtaining Silver Nanoparticles and Antibacterial Properties.....	450
Zhortarova A.A., Salkeyeva L.K., Minayeva Ye.V., Ibrayev M.K., Fazylov S.D. New possibilities for the synthesis and phosphorylation of phosphonoacetic acid ester.....	462

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

Аймағанбетова З.К., Құлшымбаев Е.А., Жантурина Н.Н., Бекетова Г.К. Quantum Espresso бағдарламасы негізінде Cs ₂ Ag _{0.2} Na _{0.4} In _{0.6} Ti _{0.4} Cl ₆ кос галогенді перовскиттің электрондық қасиеттерін бірінші принциптік есептеу.....	14
Амангелдинова С., Жүнісхан С., Калжигитов Н., Курманғалиева В. Екі кластерлік жуықтауда 5He және 5Li айналық ядроларының кластерлік құрылымын зерттеу.....	35
Чокин К., Отунчи Е., Кожаметова А., Касенова А., Шонғалова А. Литий-ионды аккумуляторларды қайта өндеуге арналған зертханалық пирометаллургиялық қондырғыны әзірлеу және сынау.....	46
Исаева А.Б., Бейсебаева А.С., Мадыбекова Г.М., Шиназбекова Ш.С., Иса А.Б. Сравнительный анализ физико-химических характеристик питьевой, родниковой и природной воды юга Казахстана.....	65
Ким В.Ю., Аймуратов Е.К. Кең бұрышты телескоптармен аспанды сканерлеу арқылы өтпелі ғарыштық оқиғаларды іздеу.....	78
Коштыбаев Т.Б., Татенов А.М., Алиева М.Е., Тугелбаева Г.Т., Жаналиева Г.Ж. Электромагниттік өрісті термодинамикалық бастамалар тұрғысында зерттеу.....	89
Мукамеденқызы В., Ақбердиев Б. Ar–N ₂ бинарлы газ қоспаларындағы механикалық тепе-теңдік тұрақтылығына қиғаш бұрыштың әсерін сандық зерттеу.....	105
Мясникова Л.Н., Узакбаева С.С., Шанина З.К., Бекешев А.З. Хром-шпинельді ұнтақ қосылған жоғары тығыздықты полиэтиленнің кинетикалық қасиеттері.....	119
Нұрбаев Б.М., Дмитриева Е.А., Кемелбекова А.Е. Қалайы негізіндегі перовскитті материалдардың тұрақтылығын арттырудағы төменөлшемді қабатты құрылымдардың рөлі.....	136
Саттинова З., Ермаханова Ф., Асылбеков Б., Таймуратова Л. Бериллий керамикалық бұйымдарын қалыптастыру кезінде әр түрлі салқындату жағдайлары мен жылу беру коэффициенттерінің қатаюға әсері.....	149
Шестакова Л.И., Серебрянский А.В., Спасюк Р.Р., Омаров Ш.Т. Күн жүйесінің ішкі аймағындағы комета-метеорлық тектегі газды іздеу: CaII иондарының жарқырауы.....	165

Уалиханова У.А., Тұрсынқазы Ф., Сыздықова А.М., Алтаева Г.С., Алтайбаева А.Б.
Бессель функцияларын пайдаланып $f(T)$ гравитациялық толқындардың
амплитудасын зерттеу.....179

Жексенбаева Г.А., Насирова Д.М., Айманова Г.К., Шомшекова С.А
V725 Тау симбиотикалық объектiсiн фотометрлiк зерттеу.....194

Жусупова Н.К., Жадыранова А.А.
Энергия шарттарын талдауға негiзделген $f(T, T)$ серпiлiс космологиясы.....205

Зиятбекова Г.З., Абдиманапова П.Б., Сағынтай О.А., Нұрым А.А., Ильинов Р.А.
Жасанды интеллект көмегiмен медициналық деректер бойынша
ауруларды болжау.....225

ХИМИЯ

Алмасов Н.Ж., Жумагалиева А.Н., Дүйсенбеков С.Е., Жакиев Н.К.
Қазақстанда сутегi өндiруге арналған гибрирдiк жаңартылатын энергия жүйелерiн
жобалау және оңтайландыру.....236

Амангелдi Б., Жаникулов Н., Таймасов Б., Айтуреев М., Даулетияров М.
Ақ портландцемент клинкерiн алу үшiн шикiзат шихта құрамын есептеу.....251

Баешов А., Ташенов Е.А., Атыханова С.Б., Кошкарбаева Ш.Т.
Композициялы күкiрт-графит электродын қолдану арқылы кадмий
сульфидiн электрохимиялық әдiспен алу.....267

Байсалова Г.Ж., Ажиханова Ж., Талтенов А.А., Құжатова П.
Қазақстан флорасындағы көпжылдық шөптесiн өсiмдiктердiң фенолдық
қосылыстарының жиынтық мөлшерiн анықтау.....277

**Дарменбаева А.С., Rajasekharan R., Жусипназарова Г.М., Мукажанова Ж.Б.,
Бегенова Б.Е.**
Хитозан және целлюлоза негiзiндегi композиттер: синтез, қасиеттерi және қолдану
перспективалары.....287

**Еркасов Р.Ш., Жамкенова А.С., Сергазина С.М., Нурмуханбетова Н.Н.,
Касенова Н.Б.**
Mn (II) кешендерiндегi сутектiк байланыстардың энергиясы мен табиғатына
галогеннiң әсерi: QТАІМ, NCI және энергия декомпозициясы.....304

Калимолдина Л.М., Шаихова Ж.Е., Калиева Б.К., Бубиш Ш., Аскарова Ш.К.
Күмiс нанобөлшектерiнiң бұршақ, лимон, мандарин, авокадо тұқымдарының
өнуiне әсерi.....320

Қуртебаева А.А., Álvarez-Torrellas S., Gomes Н.Т., Орынбаев С.Ә., Калмаханова М.С. Алаңдаушылық тудыратын ластаушы заттарды тиімді жою үшін белсендірілген көмір полимерлі мембраналар.....	334
Масенова А.Т., Жұмақанова А.С., Торлопов И.И., Рахметова К.С., Абильмагжанов А.З. ZSM-5 иерархиялық цеолитін бумен сілтілі модификациялау арқылы алу процесін онтайландыру.....	350
Мутушев А.Ж., Нұралы Ә.М., Санат А.С., Шаукарова М.А., Есимситова З.Б. Жарық түрлендіретін пленкалардың биоактивті қосылыстардың жинақталуына және жеміс сапасына әсері.....	366
Нефедов А.Н., Тайекенова А.Т. Мұнай өңдеу өнеркәсібінде органикалық коррозия ингибиторларын қолданудың қазіргі жағдайы.....	379
Омаров Б.Т., Алтыбаев Ж.М., Серикбаева Б.С. Органикалық қалдықтарды вермикомпостинг арқылы биогумус өндіру және оның агроэкологиялық тиімділігін зерттеу.....	399
Рахман Д.М., Қаппасұлы Ә., Махаева Д.Н., Қазыбаева Д.С., Ирмухаметова Ғ.С. Геллан–цистеин кешендері негізінде мукоадгезиялық гидрогельдерді әзірлеу және зерттеу.....	414
Сабыржанова А.Е., Болатқызы Н., Берганаева Г.Е., Дюсебаева М.А. Plantago Major жер үсті бөлігінің құрамындағы амин қышқылдары мен май қышқылдарын зерттеу.....	428
Сатаева С., Ахметова Ф., Уразова А., Айтуганова С., Ерниязова К. ЭД-20 эпоксидті желімдерінің физика-механикалық және эксплуатациялық қасиеттеріне ПЭПА концентрациясының ықпалы.....	439
Заманбек А.Ж., Кошкарбаева Ш.Т., Сатаев М.С. Күміс нанобөлшектерінің алыну әдістері мен антибактериалдық қасиеттері.....	450
Жоргарова А.А., Салькева Л.К., Минаева Е.В., Ибраев М.К., Фазылов С.Д. Фосфоносірке қышқылының эфирін синтездеу мен фосфорландырудың жаңа мүмкіндіктері.....	462

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Аймаганбетова З.К., Кулшымбаев Е.А., Жантурина Н.Н., Бекетова Г.К. Расчет по первому принципу электронных свойств двойного галогенидного перовскита Cs ₂ Ag _{0.2} Na _{0.4} In _{0.6} Ti _{0.4} Cl ₆ на основе программы Quantum Espresso.....	14
Амангелдинова С., Жүнісхан С., Калжигитов Н., Курмангалиева В. Исследование кластерной структуры зеркальных ядер ⁵ He и ⁵ Li в двухкластерном приближении.....	35
Чокин К., Отунчи Е., Кожрахметова А., Касенова А., Шонгалова А. Разработка и испытания лабораторной пирометаллургической установки для переработки литий-ионных аккумуляторов.....	46
Исаева А.Б., Бейсебаева А.С., Мадыбекова Г.М., Шиназбекова Ш.С., Иса А.Б. Сравнительный анализ физико-химических характеристик питьевой, родниковой и природной воды юга Казахстана.....	65
Ким В.Ю., Аймуратов Е.К. Поиск транзиентных космических событий методом сканирования неба широкоугольными телескопами.....	78
Коштыбаев Т.Б., Татенов А.М., Алиева М.Е., Тугелбаева Г.Т., Жаналиева Г.Ж. Исследование электромагнитного поля на основе термодинамических принципов.....	89
Мукамеденкызы В., Акбердиев Б. Численное исследование влияния угла наклона на устойчивость механического равновесия в бинарной газовой смеси Ar–N ₂	105
Мясникова Л.Н., Узакбаева С.С., Шанина З.К., Бекешев А.З. Кинетические свойства высокоплотного полиэтилена с добавлением хром-шпинельного порошка.....	119
Нурбаев Б.М., Дмитриева Е.А., Кемелбекова А.Е. Роль низкоразмерных слоистых структур в повышении стабильности перовскитных материалов на основе олова.....	136
Саттинова З., Ермаханова Ф., Асылбеков Б., Таймуратова Л. Влияние различных условий охлаждения и коэффициентов теплопередачи на затвердевание при формировании бериллиевых керамических изделий.....	149

Шестакова Л.И., Серебрянский А.В., Спасюк Р.Р., Омаров Ш.Т. Поиск газа кометно-метеорного происхождения во внутренней области Солнечной Системы: Свечение ионов СаII.....	165
Уалиханова У.А., Турсынказы Ф., Сыздыкова А.М., Алтаева Г.С., Алтайбаева А.Б. Изучение амплитуды $f(T)$ гравитационных волн с использованием функций Бесселя.....	179
Жексенбаева Г.А., Насирова Д.М., Айманова Г.К., Шомшекеева С.А. Фотометрическое исследование симбиотического объекта V725 Tau.....	194
Жусупова Н.К., Жадыранова А.А. Космология отскока в $f(T, \mathcal{J})$ гравитации на основе анализа энергетических условий.....	205
Зиятбекова Г.З., Абдимананова П.Б., Сағынтай О.А., Нұрым А.А., Ильинов Р.А. Использование искусственного интеллекта для прогнозирования заболеваний на основе медицинских данных.....	225

ХИМИЯ

Алмассов Н.Ж., Жумагалиева А.Н., Дуйсенбеков С.Е., Жакиев Н.К. Проектирование и оптимизация гибридных возобновляемых источников энергии для производства водорода в Казахстане.....	236
Амангелді Б., Жаникулов Н., Таймасов Б., Айтуреев М., Даулетияров М. Расчёт состава сырьевой шихты для получения белого порландцементного клинкера.....	251
Башов А., Ташенов Е.А., Атыханова С.Б., Кошкарбаева Ш.Т. Получение сульфида кадмия электрохимическим методом с использованием композитного сера-графитового электрода.....	267
Байсалова Г.Ж., Ажиханова Ж., Талтенов А.А., Кужатова П. Определение суммы фенольных соединений в многолетних травянистых растениях флоры Казахстана.....	277
Дарменбаева А.С., Rajasekharan R., Жусиппазарова Г.М., Мукажанова Ж.Б., Бегенова Б.Е. Композиты на основе хитозана и целлюлозы: синтез, свойства и перспективы применения.....	287
Еркасов Р.Ш., Жамкенова А.С., Сергазина С.М., Нурмуханбетова Н.Н., Касенова Н.Б. Влияние галогена на энергетику и природу водородных связей в Mn(II): QTAIM, NCI и энергодекомпозиция.....	304

Калимолдина Л.М., Шаихова Ж.Е., Калиева Б.К., Бубиш Ш., Аскарлова Ш.К. Влияние наночастиц серебра на прорастание семян фасоли, лимона, мандарина, авокадо.....	320
Куртебаева А.А., Álvarez-Torrellas S., Gomes Н.Т., Орынбаев С.А., Калмаханова М.С. Полимерные мембраны с активированным углем для эффективного удаления загрязняющих веществ вызывающих обеспокоенность.....	334
Масенова А.Т., Жұмақанова А.С., Торлопов И.И., Рахметова К.С., Абильмагжанов А.З. Оптимизация процесса получения иерархического цеолита ZSM-5 паровой щелочной модификацией.....	350
Мутушев А.Ж., Нуралы А.М., Санат А.С., Шаукарова М.А., Есимсиитова З.Б. Влияние светопреобразующих плёнок на накопление биоактивных соединений и качество плодов.....	366
Нефедов А.Н., Тайекенова А.Т. Современное состояние применения органических ингибиторов коррозии в нефтепереработке.....	379
Омаров Б.Т., Алтыбаев Ж.М., Серикбаева Б.С. Получение биогумуса путем вермикомпостирования органических отходов и исследование его агроэкологической эффективности.....	399
Рахман Д.М., Қаппасұлы Ә., Махаева Д.Н., Казыбаева Д.С., Ирмухаметова Г.С. Разработка и исследование мукоадгезивных гидрогелей на основе комплексов геллан–цистеин.....	414
Сабыржанова А.Е., Болаткызы Н., Берганаева Г.Е., Дюсебаева М.А. Исследование аминокислот и жирных кислот в составе надземной части <i>Plantago Major</i>	428
Сатаева С., Ахметова Ф., Уразова А., Айтуганова С., Ерниязова К. Влияние концентрации ПЭПА на физические, механические и эксплуатационные свойства эпоксидных клеев ЭД-20.....	439
Заманбек А.Ж., Кошкарбаева Ш.Т., Сатаев М.С. Методы получения наночастиц серебра и антибактериальные свойства.....	450
Жоргарова А.А., Салькева Л.К., Минаева Е.В., Ибраев М.К., Фазылов С.Д. Новые возможности синтеза и фосфорилирования фосфонуксусного эфира.....	462

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 14–34

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.402>

UDC: 538.9
IRSTI: 44.41.35

©**Aimaganbetova Z.K., Kulshymbayev Y.A., Zhanturina N.N.,
Beketova G.K.***, 2026.

K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan.

E-mail: Diko_2006@mail.ru

FIRST-PRINCIPLES CALCULATION OF THE ELECTRONIC PROPERTIES OF THE DOUBLE HALIDE PEROVSKITE $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ BASED ON THE QUANTUM ESPRESSO SOFTWARE

Aimaganbetova Zukhra — PhD, Associate Professor, docent, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: zukhraaimaganbetova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8765-516X>;

Kulshymbayev Yesbolat — Master's Student, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: ekulsymbaev@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0002-7210-3394>;

Zhanturina Nurgul — PhD, Associate Professor, docent, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9540-6334>;

Beketova Gulnara — PhD student, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: Diko_2006@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-9213-7586>.

Abstract. Double halide perovskites are considered among the most promising materials in the field of energy applications. In recent years, these materials have attracted significant interest in solar energy, light-emitting diodes, photodetectors, and photocatalysis. Their main advantages include environmental friendliness, the absence of toxic lead in their composition, and the ability to effectively tune their physicochemical properties by modifying the chemical composition.

In this article, the electronic properties of a complex multicomponent double halide perovskites material $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$, are investigated using first-principles calculation methods. The calculations were performed within the framework of Density Functional Theory (DFT) using the Quantum ESPRESSO software package with the Burai 1.3.1 graphical interface.

The research focuses on the calculation of the perovskite band structure, including the determination of the dispersion of the valence band maximum (VBM) and conduction band minimum (CBM), the evaluation of the band gap energy (E_g), and the calculation



and analysis of the electronic density of states (DOS). In addition, the contributions of different elements to the formation of the material's energy bands were analyzed, which is particularly important for assessing the influence of transition metals such as Ti and Ag, as well as for evaluating the light absorption properties of perovskites.

The obtained results make it possible to predict the light-absorption capability of the material and to assess its potential application in photoelectric devices. This study contributes to a deeper understanding of how the electronic properties of double halide perovskites change upon the incorporation of elements such as Ti and Na, and it may serve as a scientific basis for the design of highly efficient and stable perovskite materials in the future.

Moreover, the presented results provide an important foundation for subsequent comparison with experimental data and for the development of synthesis strategies for new functional materials and their optimization for advanced optoelectronic applications.

Keywords: Double halide perovskite, QE, DFT, DOS, band gap, band structure, dopants, first-principles calculations

Acknowledgments: *This research has been funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP26195173).*

For citations: *Aimaganbetova Z.K., Kulshymbayev Y.A., Zhanturina N.N., Beketova G.K. First-Principles Calculation of the Electronic Properties of the Double Halide Perovskite $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ Based on the Quantum ESPRESSO Software. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 14–34. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.402>*

©Аймаганбетова З.К., Құлшымбаев Е.А., Жантурина Н.Н.,
Бекетова Г.К.* , 2026.

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан.
E-mail: Diko_2006@mail.ru

QUANTUM ESPRESSO БАҒДАРЛАМАСЫ НЕГІЗІНДЕ $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ ҚОС ГАЛОГЕНДІ ПЕРОВСКИТТИҢ ЭЛЕКТРОНДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН БІРІНШІ ПРИНЦИПТИК ЕСЕПТЕУ

Аймаганбетова Зухра — PhD, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: z.aimaganbetova@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-8765-516X>;

Құлшымбаев Есболат — магистрант, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: ekulsymbayev@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0002-7210-3394>;

Жантурина Нургул — PhD, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: nzhanurina@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9540-6334>;

Бекетова Гульнара — PhD докторант, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: Diko_2006@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9213-7586>.

Аннотация. Қос галогенді перовскиттер энергетикада келешегі бар материалдардың бірі болып есептелінеді. Соңғы жылдары бұл материалдар күн энергетикасы, жарық шығаратын диодтар, фотодетекторлар және фотокатализ салаларында ерекше қызығушылық тудырып отыр. Олардың басты артықшылығы – экологиялық тұрғыдан қауіпсіз болуы, құрамында улы қорғасынның болмауы және физика-химиялық қасиеттерін, құрамын өзгерту арқылы тиімді басқару мүмкіндігі.

Мақалада қос галогенді перовскиттер қатарындағы $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ күрделі көпкомпонентті материалдың электрондық қасиеттерін бірінші принциптік есептеу әдістері негізінде зертелді. Есептеулер Density Functional Theory (DFT) негізінде құралған Quantum ESPRESSO бағдармалық пакетінің графикалық интерфейсі Vuray 1.3.1 бағдарламасында жасалынды. Зерттеу бағыттары, перовскит зоналық құрылымын есептеу, яғни валенттік және өткізгіштік аймақтарының дисперсиясы анықталу (VBM және CBM), тыйым салынған аймақ ені анықтау (E_g), электрондық күйлерлердің тығыздығы (Density of states – DOS) анықтау, талдау, әртүрлі материалдардың энергетикалық аймақтарын қалыптастыруға қосқан үлестерін анықтау, әсіресе ауыспалы Ti мен Ag сияқты ауыспалы металдардың әсерін бағалау үшін маңызды, сонымен қатар перовскиттердің жарық сіңіру қасиеттерін бағалау. Алынған нәтижелер материалдың жарық сіңіру қабілетін болжауға және оның фотоэлектрлік құрылғыларда қолдану мүмкіндігін бағалауға мүмкіндік береді. Бұл мақала Ti және Na сияқты элементтерді қос галогенді перовскиттерге еңгізу арқылы олардың электрондық қасиеттерін реттеу жолдарын терең түсінуге, болашақта жоғары тиімді және тұрақты перовскитті материалдарды жобалауға ғылыми негіз бола алады.

Сонымен қатар алынған нәтижелер болашақта эксперименттік зерттеулермен салыстыруға және жаңа функционалдық материалды синтездеу стратегиясын анықтауға маңызды бағыт-бағдар береді.

Түйін сөздер: Қос галогенді перовскит, QE, DFT, DOS, тыйым салынған аймақ, зоналық құрылым, допанттар, бірінші принциптік есептеулер

©Аймаганбетова З.К., Құлшымбаев Е.А., Жантурина Н.Н.,
Бекетова Г.К.*, 2026.

Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова,
Актобе, Казахстан.
E-mail: Diko_2006@mail.ru

**РАСЧЕТ ПО ПЕРВОМУ ПРИНЦИПУ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ
ДВОЙНОГО ГАЛОГЕНИДНОГО ПЕРОВСКИТА
 $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ НА ОСНОВЕ ПРОГРАММЫ
QUANTUM ESPRESSO**

Аймаганбетова Зухра — PhD, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: z.aimaganbetova@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-8765-516X>;



Кулшымбаев Есболат — магистрант, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, Актюбе, Казахстан,

E-mail: ekulsymbaev@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0002-7210-3394>;

Жантурина Нургул — PhD, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, Актюбе, Казахстан,

E-mail: nzhanurina@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9540-6334>;

Бекетова Гульнара — PhD докторант, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, Актюбе, Казахстан,

E-mail: Diko_2006@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9213-7586>.

Аннотация. Двойные галогенидные перовскиты рассматриваются как одни из наиболее перспективных материалов в энергетике. В последние годы они вызывают повышенный интерес в области солнечной энергетики, светоизлучающих диодов, фотодетекторов и фотокатализа. Их основными преимуществами являются экологическая безопасность, отсутствие в составе токсичного свинца, а также возможность эффективного управления физико-химическими свойствами путем изменения химического состава. В статье исследованы электронные свойства сложного многокомпонентного материала из ряда галогенидных перовскитов - $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_2$ - на основе методов *ab initio*. Расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности (Density Functional Theory, DFT) с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO, реализованного через графический интерфейс Vurai 1.3.1. В ходе исследования были рассчитаны зонная структура перовскита, дисперсии валентной и проводящей зон (VBM и CBM), определена ширина запрещенной зоны (E_g), а также выполнены расчет и анализ плотности электронных состояний (density of states, DOS) и выявлены вклады различных элементов в формирование энергетических зон материала. Это имеет особое значение для оценки влияния переходных металлов, таких как Ti и Ag, а также для анализа светопоглощающих свойств перовскитов. Полученные результаты позволяют прогнозировать способность материала к поглощению света и оценивать перспективы его применения в фотоэлектрических устройствах. Данная работа способствует более глубокому пониманию изменений электронных свойств двойных галогенидных перовскитов при введении таких элементов, как Ti и Na, и может служить научной основой для проектирования высокоэффективных и стабильных перовскитных материалов. Кроме того, полученные результаты создают важную базу для последующего сопоставления с экспериментальными данными и определения стратегий синтеза новых функциональных материалов.

Ключевые слова: Двойные галогенидные перовскиты, QE, DFT, DOS, запрещенная зона, зонная структура, допанты, расчеты первых принципов

Кіріспе. Соңғы жылдары қорғасынсыз қос галогенді перовскиттер оптоэлектроника, фотовольтаика және фотондық құрылғылар саласында ерекше назарға ие болып отыр. Бұл материалдарға деген қызығушылықтың артуы, ең алдымен, олардың экологиялық қауіпсіздігімен, салыстырмалы түрде төмен уыттылығымен, жоғары химиялық және термиялық тұрақтылығымен, сондай-ақ электрондық және оптикалық қасиеттерін кең ауқымда реттеуге болатындығымен

байланысты (Obada D.O. et.al., 2024; Wang Y. et.al., 2024; Heo D.Y. et.al., 2024). Қорғасын негізді перовскиттермен салыстырғанда, қос галогенді перовскиттер қоршаған ортаға зияны аз балама ретінде қарастырылып, болашақта өнеркәсіптік қолданбалар үшін перспективті материалдар қатарына қосылуда

Әсіресе күміс, натрий, индий және титан иондарымен легирленген қос галогенді перовскиттер ерекше ғылыми қызығушылық тудырады. Бұл иондардың әртүрлі валенттілігі мен иондық радиустары кристалдық тор параметрлерін, зоналық құрылымды және заряд тасымалдау механизмдерін айтарлықтай өзгертуге мүмкіндік береді. Осындай көпкомпонентті жүйелер қорғасын негізді аналогтарға функционалдық тұрғыдан балама бола отырып, олардың кемшіліктерін жоюға бағытталған жаңа материалдар класын қалыптастырады.

Қос галогенді перовскиттер құрылымдық тұрғыдан икемді жүйелер болып табылады және олардың физикалық қасиеттері катиондық және аниондық құрамды мақсатты түрде өзгерту арқылы тиімді басқарылуы мүмкін (Su H. et.al., 2024). $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ типті қос галогенді перовскиттер кең тыйым салынған аймаққа ие болуына байланысты жарық шығаратын диодтарда, ультракүлгін фотодетекторларда, сцинтилляторларда және фотокатализдік процестерде қолдануға қолайлы материалдар ретінде қарастырылады (Huang X. et.al., 2023). Алайда таза $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ перовскитінің жанама тыйым салынған аймағы сәуле шығару тиімділігін төмендетіп, практикалық қолданылуын белгілі бір деңгейде шектейді.

Осы кемшілікті жою мақсатында соңғы жылдары көпкомпонентті катиондық алмастыру әдісі кеңінен қолданылуда. Ag^+ , Na^+ , In^{3+} және Ti^{4+} иондарының бір мезгілде енгізілуі кристалдық тордың симметриясын бұзып, электрондық зоналардың қайта құрылуына және тыйым салынған аймақтың ені мен сипатының өзгеруіне алып келеді (Magdalena N. Rowinska, et.al., 2025; Wang Y. et.al., 2024). Мұндай легирлеу нәтижесінде заряд тасымалдаушылардың тиімділігі артып, электрондық және оптикалық қасиеттердің жақсаруы күтіледі. Атап айтқанда, $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ құрамды қос галогенді перовскит тыйым салынған аймақтың тарылуымен, электрондар мен кемтіктердің тиімді массасының өзгеруімен және оптикалық жұтылудың күшеюімен сипатталуы мүмкін.

Материалдардың электрондық қасиеттерін терең және жүйелі түрде түсіну үшін бірінші принциптік есептеулер, әсіресе тығыздық функционалы теориясына негізделген әдістер кеңінен қолданылады (Nie K. et.al., 2023). Бұл әдістер эксперименттік зерттеулерге дейін материалдардың зоналық құрылымын, күйлер тығыздығын, заряд тығыздығының таралуын және диэлектрлік сипаттамаларын болжауға мүмкіндік береді. Quantum ESPRESSO бағдарламалық кешені ab initio есептеулер жүргізуге арналған ең танымал және сенімді ашық кодты пакеттердің бірі болып табылады. Бағдарлама жазық толқындар әдісіне және псевдопотенциалдар формализміне негізделген, бұл күрделі көпатомды жүйелердің электрондық құрылымын жоғары дәлдікпен зерттеуге мүмкіндік береді (Yu J. et.al., 2023).

Соңғы теориялық және есептеу жұмыстары аралас және легирленген қос галогенді перовскиттердің электрондық және оптикалық қасиеттерінің

айтарлықтай жақсаратынын көрсетті. Мысалы, $\text{Cs}_2\text{Ag}(\text{Sb}_x\text{Bi}_{1-x})\text{Br}_6$ қатты ерітінділерінде тыйым салынған аймақтың төмендеуі байқалған (Huang Y. et.al., 2024), ал Cu немесе Li сияқты қоспалармен легирлеу оптикалық жауаптың күшеюіне алып келетіні анықталған (Guo J. et.al., 2025). Бұл нәтижелер көпкомпонентті перовскиттерді функционалдық тұрғыдан қорғасын негізді аналогтарға балама ретінде қарастыруға мүмкіндік береді .

Материалдардың электрондық қасиеттерін терең және жүйелі түрде зерттеу үшін бірінші принциптік есептеулер, әсіресе тығыздық функционалы теориясына негізделген әдістер кеңінен қолданылады (Nishitha P. et.al., 2020). Көптеген ғалымдардың еңбектері қазіргі заманғы электрондық құрылым есептеулерінің теориялық негізін қалады (<https://doi.org/10.1016/j.chphi.2024>). Бұл әдістер эксперименттік зерттеулерге дейін материалдардың зоналық құрылымын, күйлер тығыздығын, заряд тығыздығының таралуын және диэлектрлік сипаттамаларын болжауға мүмкіндік береді (Carnimeo I. et.al., 2023).

Осы жұмыста Quantum ESPRESSO бағдарламасы негізінде $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0,2}\text{Na}_{0,4}\text{In}_{0,6}\text{Ti}_{0,4}\text{Cl}_6$ қос галогенді перовскитінің электрондық қасиеттері бірінші принциптік әдістер арқылы жан-жақты зерттелді. Зерттеу барысында зоналық құрылым, күйлер тығыздығы және электрондық өтулер талданды. Алынған нәтижелер жаңа қорғасынсыз перовскиттік материалдарды мақсатты түрде жобалау, олардың электрондық және оптоэлектрондық қасиеттерін болжау және болашақта практикалық құрылыстарда қолдану үшін маңызды ғылыми негіз болып табылады.

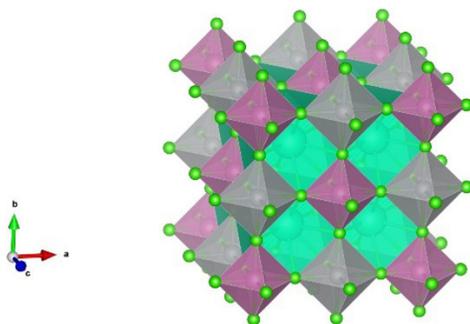
Зерттеу әдістері. Барлық есептеулер Quantum Espresso ашық бағдармалық пакетінде орындалды. Бұл бағдарламалық кешен конденсацияланған заттар физикасында және материалтануда кең қолданылатын ab initio есептеу құралдарының бірі болып табылады. Quantum Espresso мультиплатформалы құрылымға ие, жазық толқындар базисіне және псевдопотенциалдар әдісіне сүйенеді, сондықтан күрделі көпатомды жүйелерді жоғары дәлдікпен модельдеуге мүмкіндік береді. Бағдарламаның негізгі модульдері тығыздық функционалы теориясына (Density Functional Theory, DFT) негізделген, ол материалдардың электрондық құрылымын қазіргі таңда ең тиімді және кең таралған әдістердің бірі ретінде сипаттайды.

Quantum Espresso құрамындағы pw.x, ph.x, dos.x және басқа қосымша модульдер зерттеулерге қажетті әртүрлі есептеу міндеттерін орындауға бейімделген. Атап айтқанда, pw.x модулі кристалдық құрылымдардың толық геометриялық релаксациясын, жалпы энергияны, электрондық күйлерді және зоналық құрылымды есептеуге қолданылады. Псевдопотенциалдардың кең спектрі электрон ядро өзара әрекеттесуін тиімді сипаттауға мүмкіндік беріп, есептеуді жылдам әрі тұрақты жүргізеді. Сонымен қатар, бағдарламаның GGA-PBE, LDA және гибридік функционалдар сияқты әртүрлі алмасу-корреляция тәсілдерін қолдауы зерттелетін материалдың нақты ерекшеліктеріне сәйкес ең қолайлы параметрлерді таңдауға жол ашады.

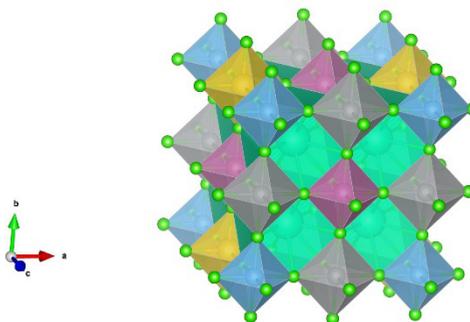
Quantum Espresso бағдарламасы оптикалық қасиеттерді, диэлектрлік

функцияларды, электрон-фонон өзара әсерін есептеуге және жоғары температурадағы молекулалық динамиканы модельдеуге де жиі қолданылады. Бұл мүмкіндіктер материалдардың энергетикалық аймақ құрылымын, олардың жарықпен әрекеттесуін және жылулық тұрақтылығын жан-жақты талдауға жағдай жасайды. Осы себепті QE қос галогенді перовскиттер сияқты күрделі көпкомпонентті жүйелердің табиғатын зерттеу үшін сенімді әрі әмбебап платформа болып табылады. Зерттеу барысында екі түрлі қос галогенді перовскиттер құрылымы пайдаланылды. Біріншісі таза үлгі $Cs_2AgInCl_6$, екіншісі допталған $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$.

Ең алғашқы атомдық модельдерді VESTA бағдармасында құрастырылып симметриясы тексерілді, $Ag \rightarrow Na$, $In \rightarrow Ti$ орынбасулары бар суперұяшылық жасалды.



Сурет 1– Vesta бағдарламасындағы $Cs_2Ag_{0.2}In_{0.6}Cl_6$



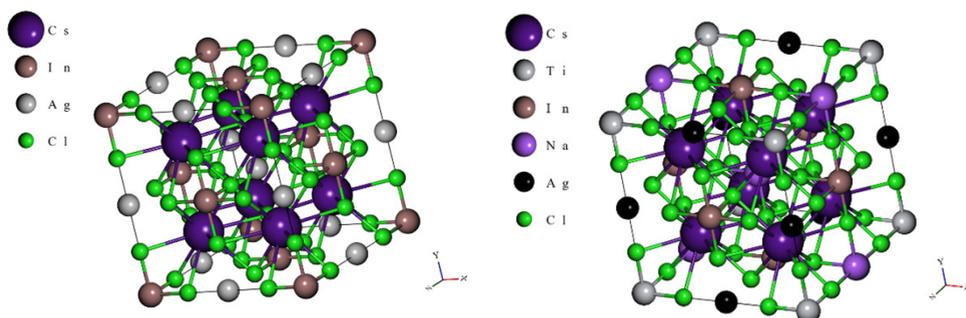
Сурет 2– Vesta бағдарламасындағы $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$

Кристалдық құрылым Cs цезийдің 8 кубтық октаэдрлік орнын, Ag/Na 4 октаэдрлік орнын, 4 In/Ti октаэдрлік орнын және октаэдр төбесіндегі Cl хлордың 24 атомын қамтиды. Элементарлық ұяшықта төрт формулалық бірлік ($Z = 4$) бар. Модельдеу зерттелетін кристалдың 40 атомымен жүзеге асты (3 сурет).

Құрылымдық геометриялық оптимизациялар Quantum ESPRESSO кешенінің `pw.x` модулінде жүргізілді. Бұл модуль кристалдық жүйелердің толық релаксациясын орындауға арналған және атомдық орналасулар мен тор параметрлерін энергия минимумы шартына келтіріп есептеуге мүмкіндік береді.

Есептеулер тығыздық функционалы теориясы негізінде жүргізіліп, алмасу корреляция эффектілерін сипаттау үшін кең таралған GGA-PBE функционалы қолданылды. Бұл функционал көпкомпонентті галогенді перовскиттер сияқты күрделі жүйелер үшін сенімді нәтижелер беретіндіктен таңдалды.

Электрон мен ион арасындағы өзара әрекеттесулерді дәл сипаттау мақсатында PSLibrary жинағындағы PAW және ультражұмсақ псевдопотенциалдар қолданылды. Бұл псевдопотенциалдар есептеу тиімділігін сақтай отырып, валенттік электрондардың кванттық қасиеттерін нақты көрсетуге мүмкіндік береді. Осындай әдістемелік таңдау релаксация процесінің тұрақтылығын қамтамасыз етіп, кейінгі зоналық құрылым, электрондық күйлер тығыздығы және оптикалық сипаттамалардың дұрыс есептелуіне негіз болды.



Сурет 3– $\text{Cs}_2\text{AgIn}_0\text{Cl}_6$; $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ элементал ұяшықтары

Релаксация процесі кезінде барлық атомдарға түсетін күштің шамасы $0.2 \text{ eV/\text{Å}}$ мәнінен төмен болғанға дейін есептеу жалғастырылды. Мұндай шектеу геометриялық конфигурацияның тұрақты күйге жетуін қамтамасыз етеді және кейінгі электрондық құрылым мен оптикалық сипаттамаларды есептеудің дәлдігін арттырады.

Оптикалық қасиеттерді модельдеу DFT-GGA шеңберінде жүргізілді. Материалдың жарықпен өзара әрекеттесуін сипаттау үшін диэлектрлік қабылдағыштық Кўбо Гринвуд тендеуі арқылы анықталды. Бұл тәсіл электрондық өтулерге негізделген және өткізгіштік, жұтылу, сыну көрсеткіші сияқты сипаттамаларды тікелей есептеуге мүмкіндік береді. Диэлектрлік қабылдағыштық келесі өрнекпен беріледі:

$$\chi_{ij}(\omega) = -\frac{e^2 \hbar^2}{m_e^2 \varepsilon_0 V \omega^2} \sum_{nm} \frac{f(E_m) - f(E_n)}{E_{nm} - \hbar\omega - i\hbar\Gamma} \pi_{nm}^i \pi_{mn}^j, \quad (1)$$

мұнда

$\chi_{ij}(\omega)$ - электрлік сезімталдық тензорының i, j компоненті, e - электрон заряды, \hbar - редуцияланған Планк тұрақтысы, m_e - электрон массасы, ε_0 - вакуумның диэлектрлік өтімділігі, V - жүйе көлемі, ω - сыртқы өрістің бұрыштық жықдамдығы, n, m - кванттық күй индекстері, E_m, E_n - n және m күйлерінің

энергиясы, $E_{nm} = E_m - E_n$ - энергия айырмасы, $f(E)$ - Ферми-Дирак таралу функциясы, Γ - релаксация немесе өшу параметрі, π - импульс операторының i және i бағытындағы матрицалық элемент.

Жоғарыдағы өрнек арқылы материалдың толық диэлектрлік функциясы анықталады:

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \chi(\omega), \quad (2)$$

мұнда:

$\varepsilon(\omega)$ - кешенді диэлектрлік функция;

$\chi(\omega)$ - кешенді электрлік сезімталдық.

Диэлектрлік функцияның нақты және жорамал бөліктерін пайдаланып, сөндіру коэффициенті былай есептеледі:

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{\text{Re}(\varepsilon)^2 + \text{Im}(\varepsilon)^2 - \text{Re}(\varepsilon)}{2}}, \quad (3)$$

мұнда:

$\text{Re}(\varepsilon)$ - дисперсияны, яғни жарықтың таралуын сипаттайды;

$\text{Im}(\varepsilon)$ - энергияның жұтылуын сипаттайды (Zhanturina N. et al., 2022).

Сөндіру коэффициенті анықталғаннан кейін оптикалық жұтылу коэффициенті келесі формуламен табылады:

$$\alpha = 2 \frac{\omega}{c} k, \quad (4)$$

мұнда:

ω - жарықтың бұрыштық жиілігі;

c - вакуумдағы жарық жылдамдығы;

k – жұтылу немесе сөну көрсеткіші;

Материалдың сыну көрсеткіші:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\text{Re}(\varepsilon)^2 + \text{Im}(\varepsilon)^2 + \text{Re}(\varepsilon)}{2}}. \quad (5)$$

Шағылысу қабілеті төмендегі өрнекпен есептеледі:

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}. \quad (6)$$

мұнда:

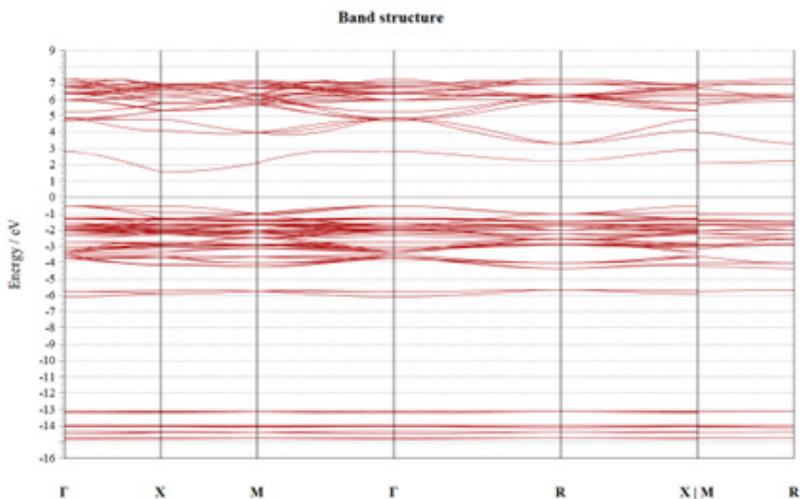
n – сыну көрсеткіші;

k – жұтылу немесе сөну көрсеткіші.

Энергия жоғалу функциясы:

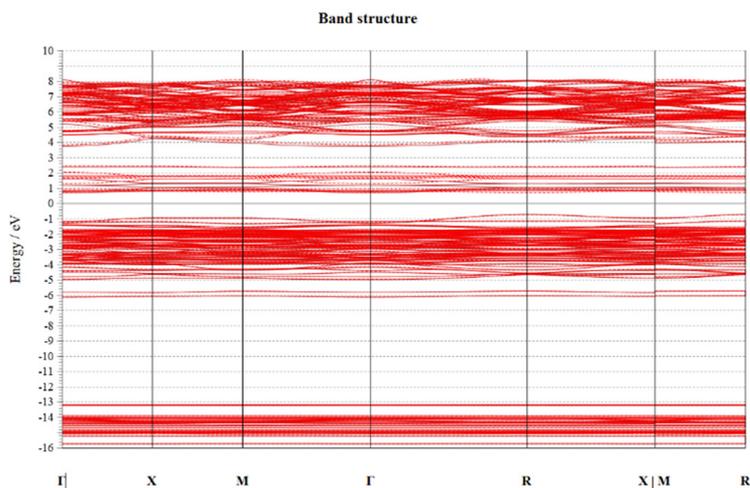
$$L(\omega) = -\text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon(\omega)} \right) = \frac{\text{Im}(\varepsilon)}{\text{Re}(\varepsilon)^2 + \text{Im}(\varepsilon)^2}. \quad (7)$$

Нәтижелер. *Зоналық құрылым.* Есептелген зоналық құрылымдар мен күйлердің толық тығыздығы $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ және $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ қос галогенді перовскиттерінің жартылай өткізгіштік қасиетке ие екенін көрсетеді (4 сурет және 5 сурет).



Сурет 4– $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ зоналық құрылымы

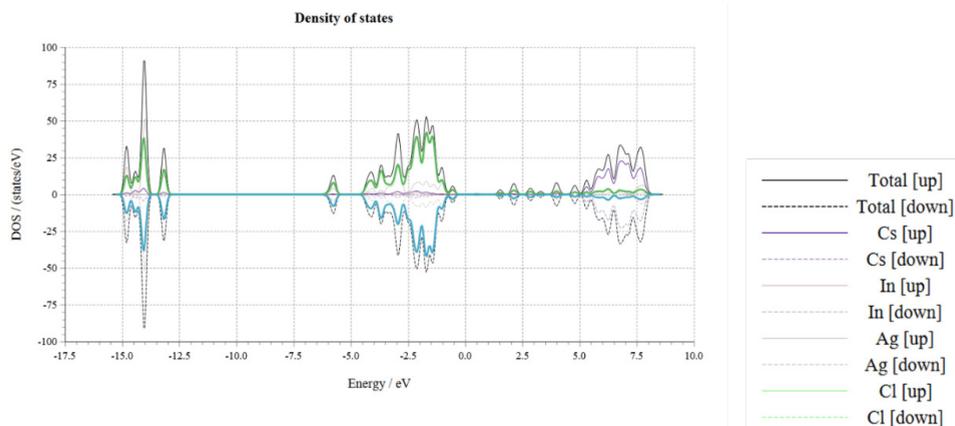
$\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ кристалында валенттік зонаның жоғарғы шегі мен өткізгіштік зонаның төменгі шегі Бриллюэн аймағының әртүрлі жоғары симметриялық нүктелерінде орналасқан, бұл жанама тыйым салынған аймақтың бар екенін білдіреді. Есептелген тыйым салынған аймақ шамамен 2.3–2.5 эВ құрайды, бұл $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ негізіндегі қорғасынсыз перовскиттер үшін белгілі теориялық мәндердің шегінде жатыр (Nishitha P. et.al., 2020).



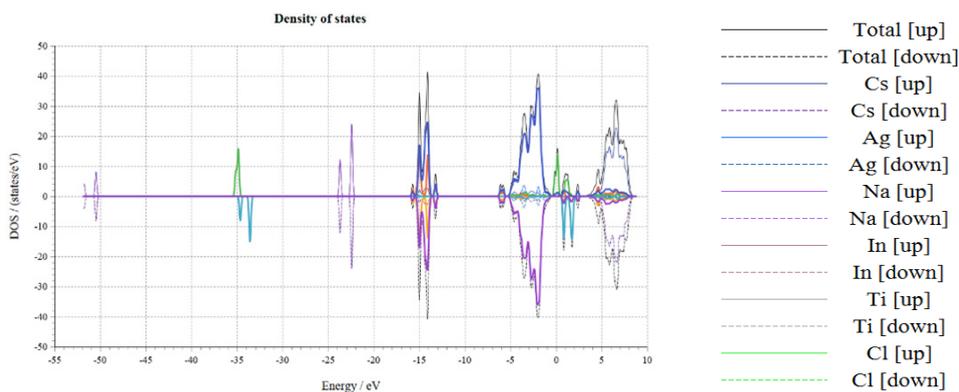
Сурет 5– $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ зоналық құрылымы

Na және Ti иондарымен бірлесіп легирленген $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ жүйесінде электрондық құрылымның елеулі өзгерістері байқалады. Атап айтқанда, өткізгіштік зонаның төменгі шегі төмен энергия аймағына ығысып, тыйым салынған аймақтың тарылуына әкеледі. Бұл жағдайда тыйым салынған аймақ шамамен 1.7–2.0 эВ мәніне дейін азаяды. Мұндай өзгеріс титанның 3d электрондық күйлерінің өткізгіштік зонаның қалыптасуына белсенді қатысуымен түсіндіріледі. Сонымен қатар, легирленген үлгіде зоналардың дисперсиясының артуы байқалады, бұл заряд тасымалдаушылардың тиімді массасының азайғанын көрсетеді. Нәтижесінде электрондар мен кемтіктердің қозғалғыштығы жоғарылап, оптикалық өтулердің ықтималдығы артады. Осылайша, Na және Ti иондарымен легирлеу $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ негізіндегі қос галогенді перовскиттердің электрондық қасиеттерін тиімді түрде басқаруға мүмкіндік беретінін көрсетеді.

Күйлер тығыздығы. 6 және 7 суретте CsAgInCl_6 және $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ қос галогенді перовскиттерінің толық және парциалды күйлер тығыздығы (DOS) көрсетілген.



Сурет 6– CsAgInCl_6 күйлер тығыздығының функционалы



Сурет 7– $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ күйлер тығыздығының функционалы

Суретте “(up)” және “(down)” белгілері сәйкесінше оң және теріс бағыттағы күйлер тығыздығын сипаттайды, бұл спиндік поляризацияның ескерілгенін білдіреді. Қара сызықтар толық күйлер тығыздығына сәйкес келеді, ал түрлі түсті сызықтар Cs, Ag, Na, In, Ti және Cl атомдарының парциалды үлестерін көрсетеді. Теріс энергия аймағы толтырылған валенттік күйлерге, ал оң энергия аймағы бос өткізгіштік күйлерге сәйкес келеді. Тыйым салынған аймақ валенттік зонаның жоғарғы шегі мен өткізгіштік зонаның төменгі шегі арасындағы күйсіз аймақпен анықталады. Берілген жүйе үшін Ферми деңгейінің маңында күйлердің болмауы материалдың жартылай өткізгіштік сипатын көрсетеді.

Төмен энергиялы валенттік зоналар шамамен – 15 eV пен – 10 eV аралығында орналасқан және негізінен Cl-s күйлерінен, сондай-ақ Ag және In атомдарының s және d орбитальдарынан құралған. Бұл аймақтағы күйлердің жоғары тығыздығы химиялық байланыстардың иондық сипатының басым екенін көрсетеді.

Жоғарғы валенттік зоналар – 6 eV пен 0 eV аралығында орналасып, негізінен Cl-p күйлерінен тұрады және олар Ag-d, In-d және Ti-d күйлерімен гибридтенген. Дәл осы аймақ валенттік зонаның төбесін қалыптастырып, материалдың оптикалық өтулерінде маңызды рөл атқарады.

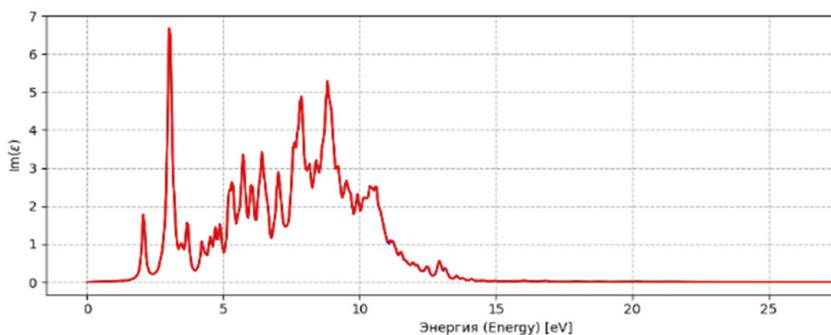
Өткізгіштік зонасы негізінен Ti-3d, In-5d және Ag-4d күйлерінен құралған, сонымен қатар Cl-2p орбитальдарының аздаған үлесі байқалады. Бұл жағдай тыйым салынған аймақтан жоғары энергияларда d-күйлердің басым екенін және электрондардың козуы кезінде осы орбитальдардың негізгі рөл атқаратынын көрсетеді.

Көпкомпонентті катиондық алмастыру нәтижесінде (Ag^+ , Na^+ , In^{3+} және Ti^{4+} иондарының бір мезгілде енгізілуі) күйлер тығыздығының құрылымында айқын өзгерістер байқалады. Атап айтқанда, өткізгіштік зонаның төменгі шекарасы төмен энергиялар жағына ығысып, тыйым салынған аймақтың тарылуына алып келеді. Бұл құбылыс электрондық зоналық құрылымның модификацияланғанын және заряд тасымалдаушылардың тиімділігінің артқанын көрсетеді.

Сонымен қатар, қоспа атомдарының концентрациясы артқан сайын, негізгі тор атомдарының күйлер тығыздығы азайып, қоспа элементтерінің үлесі арта түсетіні байқалады. Төмен концентрация жағдайында қоспа күйлері энергия бойынша локалданған күйде болады, ал концентрация артқанда олардың өзара әсерлесуі күшейіп, күйлердің энергия бойынша кеңеюіне алып келеді. Нәтижесінде қоспа деңгейлері өткізгіштік зонамен қабаттасып, қоспалық жолақтың қалыптасуына себеп болады.

Жалпы алғанда, алынған DOS нәтижелері $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ қос галогенді перовскитінің электрондық құрылымы қоспалау арқылы тиімді басқарылатынын және бұл материалдың оптоэлектрондық құрылғыларда, соның ішінде ультракүлгін детекторлар мен жарық шығаратын диодтарда қолдануға перспективті екенін көрсетеді.

Оптикалық қасиеттер. Диэлектрлік функцияның жорамал бөлігі. Диэлектрлік функцияның жорамал бөлігі $\text{Im}(\epsilon)$ материалдың оптикалық жұтылу спектрін тікелей сипаттайды (8 сурет).

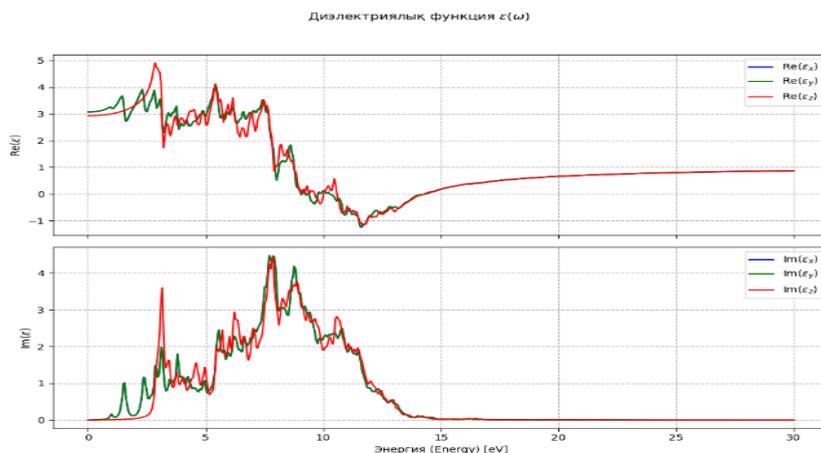


Сурет 8– CsAgInCl_6 диэлектрлік функциясының $\text{Im}(\epsilon)$ бөлігі

CsAgInCl_6 қос галогенді перовскитінің $\text{Im}(\epsilon)$ спектрінен төмен энергия аймағында айқын анизотропия байқалмайды, бұл оның оптикалық қасиеттерінің бағыттарға тәуелсіз екенін көрсетеді.

Жұтылу шегі шамамен 3 eV энергиядан басталады. Жұтылу спектрінде негізгі интенсивті шың 3.5 eV аймағында байқалады, бұл электрондардың валенттік зонаның жоғарғы бөлігінен өткізгіштік зонасына ауысуымен байланысты. Көрінетін аймақта жұтылудың болмауы бұл материалдың көрінетін жарық үшін мөлдір екенін көрсетеді (14 эВ бастап). Сонымен, бұл перовскиттің жұтылу аймағы көрінетін жарық және ультракүлгінді қамтитынын көріп отырық.

$\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ жүйесінде Na және Ti атомдарымен легирлеу нәтижесінде $\text{Im}(\epsilon)$ спектрінде айқын өзгерістер байқалады (9 сурет).

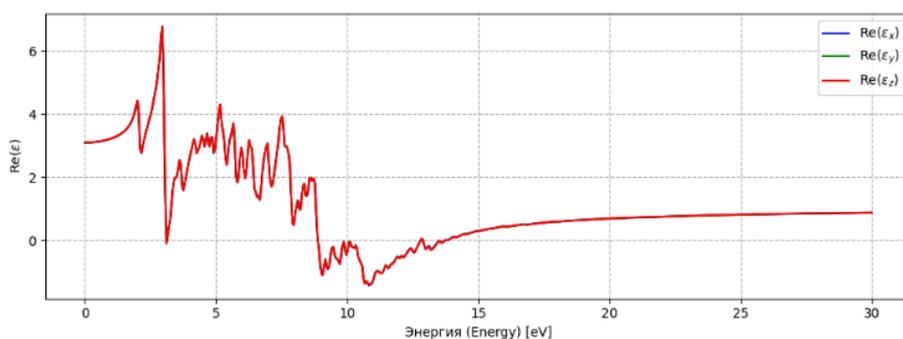


Сурет 9– $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ диэлектрлік функциясының $\text{Im}(\epsilon)$ бөлігі

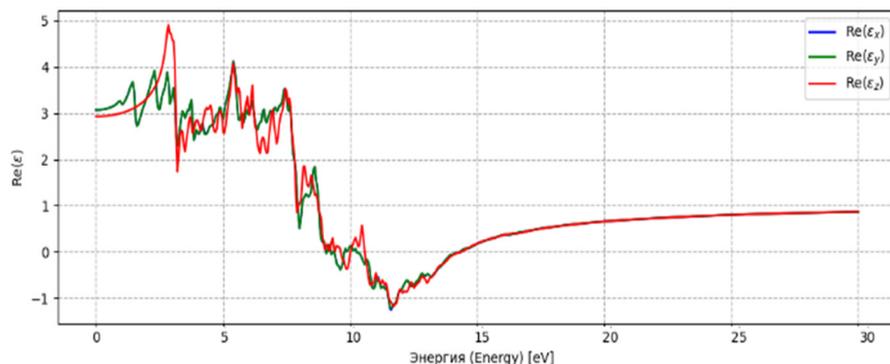
Атап айтқанда, 6–10 eV энергия диапазонында жұтылу интенсивтілігі айтарлықтай артады және бірнеше қосымша шыңдар пайда болады. Сонымен қатар, X, Y және Z бағыттары бойынша жорамал бөліктің мәндерінде айырмашылықтар байқалып, оптикалық анизотропияның пайда болғанын көрсетеді.

Бұл өзгерістер Ti-дің d-орбитальдарының электрондық өтулерге қосқан үлесімен және Na атомдарының тордағы зарядтық теңгерімді өзгертуімен түсіндіріледі. Легирлеу кезінде қосымша электронды күйлер пайда болады да, жұтылу жоғары энергиялы жақта интесивті болады.

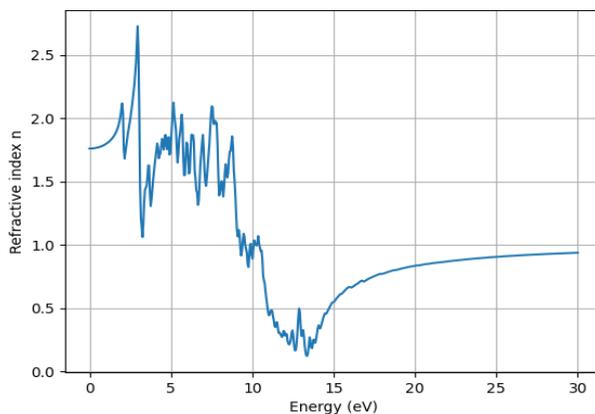
Диэлектрлік функцияның нақты бөлігі. Диэлектрлік функцияның нақты бөлігі $\text{Re}(\epsilon)$ материалдың поляризациялық қасиеттерін сипаттайды. $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ үшін нөлдiк энергиядағы статикалық диэлектрлік тұрақты шамамен 3 ке тең. Статикалық диэлектрлік тұрақты мәні графиктен нольдiк энергия кезінде алынады. 8–12 eV энергия аймағында аномальды дисперсия аймағы байқалады, бұл жұтылу шындарымен сәйкес келеді.

Диэлектрлялык функция $\epsilon(\omega)$ Сурет 10– CsAgInCl_6 диэлектрлік функциясының нақты $\text{Re}(\epsilon)$ бөлігі

$\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ жүйесінде $\text{Re}(\epsilon)$ мәндері төмен энергия аймағында жоғарырақ болып, дисперсияның күрделене түскені байқалады. Аномальды дисперсия аймағы кеңейіп, шамамен 7–13 eV энергия диапазонын қамтиды. Бұл легирлеудің материалдың диэлектрлік жауабын күшейтетінін көрсетеді. Резонансті электронды ауысулардың спектралды кеңею байқалады.

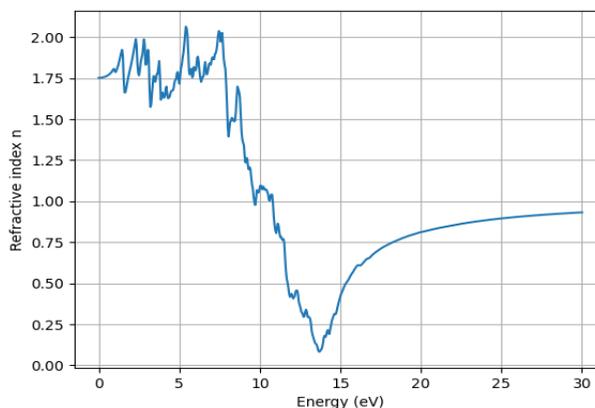
Сурет 11– $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ диэлектрлік функциясының нақты $\text{Re}(\epsilon)$ бөлігі

Сыну көрсеткіші. Диэлектрлік функцияның нақты және жорамал бөліктері арқылы сыну көрсеткіші n есептелді, $n(\omega) = \sqrt{\frac{Re\epsilon(\epsilon)^2 + Im\epsilon(\epsilon)^2 + Re\epsilon(\epsilon)}{2}}$. Сыну көрсеткіші материалдың жарықты тарату қабілетін сипаттайды. $Cs_2AgInCl_6$ үшін n төмен энергия аймағында 1.7–1.9 аралығында өзгеріп, энергия артқан сайын біртіндеп азаяды. 2.5 эВ шамасында сыну көрсеткіші күрт артады да 2.7 мәнге дейін жетеді.



Сурет 12– $CsAgInCl_6$ сыну көрсеткіші $n(E)$.

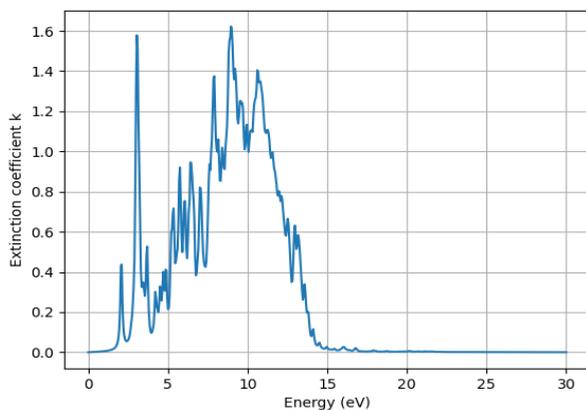
$Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ жүйесінде сыну көрсеткіші төмен энергияларда жоғарырақ мәндерге ие және 8–13 эВ аймағында айқын аномальды дисперсия байқалады. Бұл аймақ диэлектрлік функциядағы жұтылу шыңдарымен сәйкес келеді.



Сурет 13– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ сыну көрсеткіші $n(E)$.

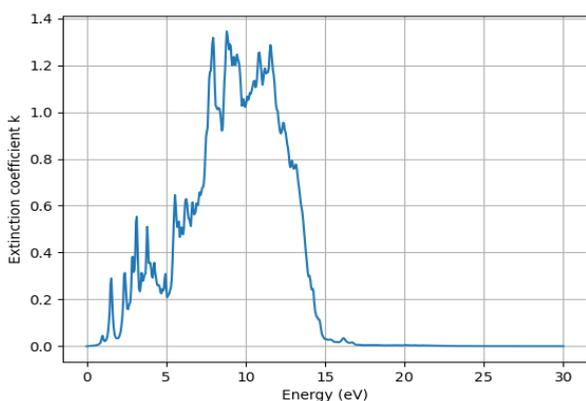
Өшу коэффициенті $k(E)$. Өшу коэффициенті k диэлектрлік функцияның жорамал бөлігімен тікелей байланысты және материалдағы жарықтың әлсіреуін сипаттайды.

CsAgInCl_6 үшін k мәні төмен энергияларда нөлге жуық болып, тек ультракүлгін аймақта ғана өседі. Бұл материалдың жоғары мөлдірлігін дәлелдейді.



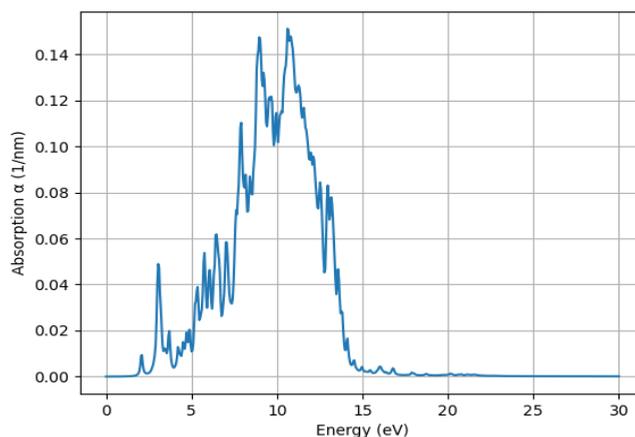
Сурет 14– CsAgInCl_6 өшу коэффициенті $k(E)$.

Ал $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ жүйесінде k мәні жоғарырақ және энергияға тәуелділігі күрделірек. 7–11 eV аймағында бірнеше максимум байқалады. Бұл Ti -дің d -күйлерінің оптикалық өтулерге қосқан үлесімен байланысты.



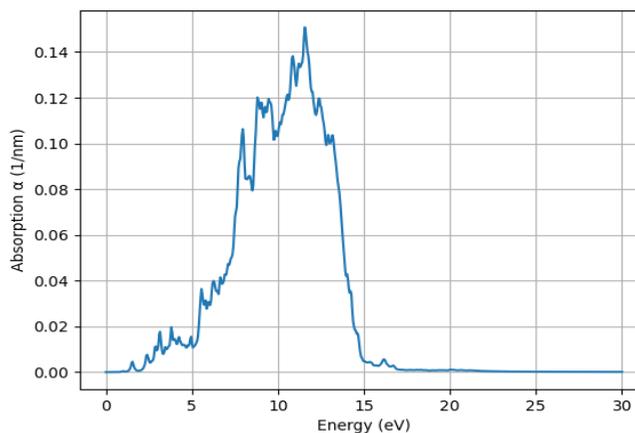
Сурет 15– $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ өшу коэффициенті $k(E)$.

Жұтылу коэффициентінің энергияға тәуелділігі. $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ және $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ перовскиттері үшін, $\alpha = 2 \frac{\omega}{c} k$ формуласы арқылы жұтылу коэффициенті табылды. $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ жүйесінде жұтылу коэффициенті шамамен 5 eV энергиядан бастап күрт өседі және негізгі максимумдар 9–12 eV аймағында байқалады. Бұл материалдың көрінетін аймақта жұтылуы әлсіз екенін және ультракүлгін аймақта белсенді екенін көрсетеді.



Сурет 16– CsAgInCl_6 жұтылу коэффициенті $\alpha(E)$

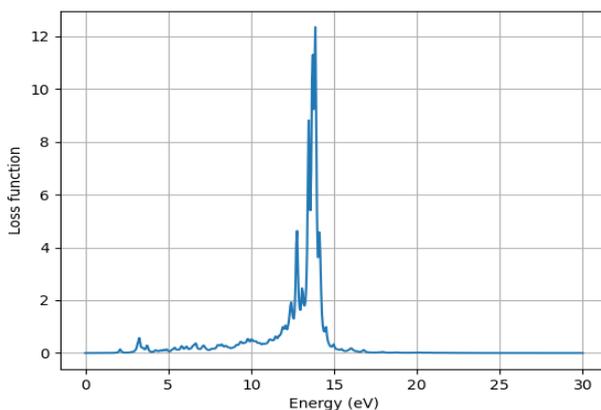
Na және Ti енгізілген $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ перовскитінде жұтылу коэффициенті едәуір жоғары мәндерге ие. Жұтылу спектрі кеңейіп, 6–14 eV аралығында бірнеше айқын шыңдар пайда болады. Бұл легирлеу нәтижесінде электрондық өтулердің күшейгенін және жаңа рұқсат етілген ауысулардың пайда болғанын көрсетеді.



Сурет 17– $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ жұтылу коэффициенті $\alpha(E)$.

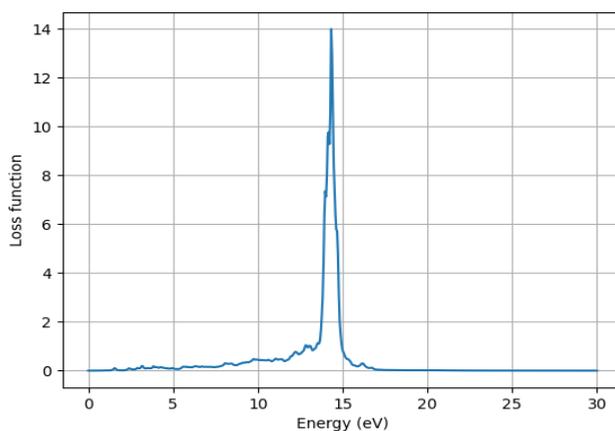
Энергия жоғалту функциясы $L(\omega)$. Энергия жоғалту функциясы материалдағы плазмондық тербелістерді сипаттайды.

$\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ үшін $L(\omega)$ функциясында негізгі плазмондық шың шамамен 13–14 eV энергияда байқалады. Бұл жүйеде еркін тасымалдаушылардың концентрациясы салыстырмалы түрде төмен екенін көрсетеді.



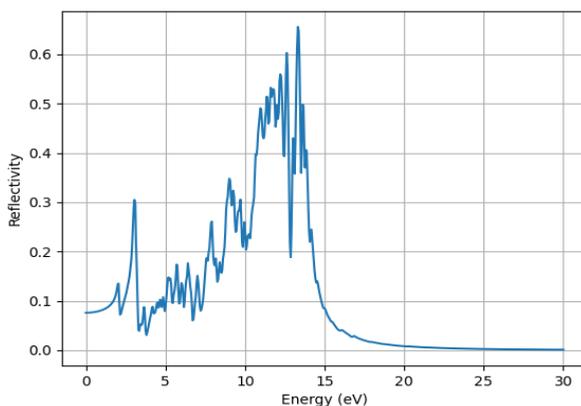
Сурет 18– CsAgInCl өшу энергия жоғалту функциясы $L(\omega)$

$\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ перовскитінде плазмондық шың айқынырақ және интенсивтілігі жоғары. Сонымен қатар, шыңның энергиясы сәл төмен мәндерге ығысқан. Бұл легирлеу нәтижесінде электрон тығыздығының артқанын және ұжымдық тербелістердің күшейгенін білдіреді.



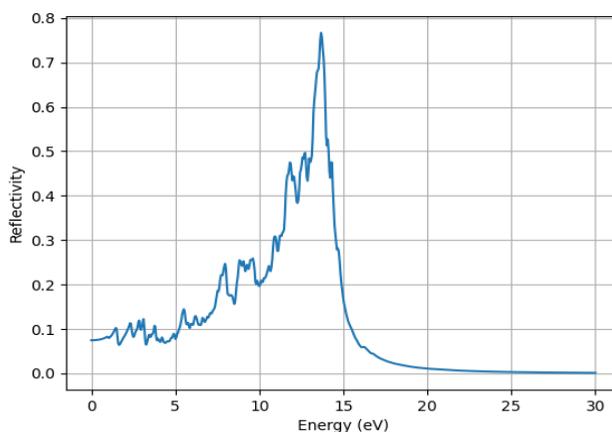
Сурет 19– $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ энергия жоғалту функциясы $L(\omega)$.

Шағылу коэффициенті $R(E)$. Шағылу коэффициенті $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ үшін төмен энергияларда аз мәндерге ие, бұл материалдың жақсы оптикалық мөлдір екенін көрсетеді. Шағылу коэффициентінің негізгі максимумдары ультракүлгін аймақта орналасқан.



Сурет 20– CsAgInCl шағылу коэффициенті R(E).

Ал Na және Ti легирленген перовскитте шағылу коэффициенті айтарлықтай артады және 9–12 eV аймағында айқын максимум байқалады. Бұл материалдың ультракүлгін сәулелерді тиімді шағылдыратынын көрсетеді.



Сурет 21– Cs₂Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl₆ шағылу коэффициенті R(E)

Қорытынды. Бұл жұмыста қорғасынсыз қос галогенді перовскиттер класына жататын Cs₂AgInCl₆ және Na, Ti иондарымен легирленген Cs₂Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl₆ күрделі көпкомпонентті жүйелерінің электрондық және оптикалық қасиеттері бірінші принциптік есептеулер негізінде жан-жақты зерттелді. Зерттеу Quantum ESPRESSO бағдарламалық кешені шеңберінде DFT-GGA-PBE әдісін қолдану арқылы жүргізілді.

Зоналық құрылым нәтижелері екі материалдың да жартылай өткізгіштік сипатқа ие екенін көрсетті. Таза Cs₂AgInCl₆ перовскитінде жанама тыйым салынған аймақтың кең мәнге ие болуы байқалып, бұл оның көрінетін аймақтағы оптикалық белсенділігін шектейтіні анықталды. Ал Na және Ti иондарымен бірлескен легирлеу нәтижесінде өткізгіштік зонаның төменгі шегі төмен энергияларға

ығысып, тыйым салынған аймақ ені айтарлықтай тарылатыны анықталды. Бұл өзгерістер Ti-дің d-күйлерінің электрондық зоналардың қалыптасуына белсенді қатысуымен және зоналар дисперсиясының артуымен түсіндірілді.

Күйлер тығыздығын талдау валенттік зонаның негізінен Cl-p күйлерінен, ал өткізгіштік зонаның Ti-3d, In-d және Ag-d күйлерінен құралатынын көрсетті. Легирлеу қоспа деңгейлерінің пайда болуына, олардың энергия бойынша кеңеюіне және өткізгіштік зонамен қабаттасуына алып келіп, заряд тасымалдаушылардың тиімділігін арттыратыны анықталды.

Оптикалық қасиеттерді зерттеу нәтижелері Na және Ti енгізу материалдың диэлектрлік жауабын күшейтіп, жұтылу коэффициентін арттыратынын, оптикалық анизотропияның пайда болатынын көрсетті. Легирленген жүйеде ультракүлгін аймақта жұтылу, өшу коэффициенті және шағылу қабілеті айтарлықтай жоғарылағаны байқалды.

Сонымен қатар, энергия жоғалту функциясының өзгеруі электрон тығыздығының артқанын және плазмондық тербелістердің күшейгенін дәлелдейді. Жалпы алғанда, алынған нәтижелер көпкомпонентті катиондық алмастыру арқылы қос галогенді перовскиттердің электрондық және оптикалық қасиеттерін мақсатты түрде басқаруға болатынын көрсетті. $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.2}\text{Na}_{0.4}\text{In}_{0.6}\text{Ti}_{0.4}\text{Cl}_6$ перовскиті ультракүлгін фотодетекторлар, жарық шығаратын диодтар және басқа да оптоэлектрондық құрылғылар үшін перспективті қорғасынсыз материал ретінде қарастырылуы мүмкін. Бұл жұмыс болашақта жаңа экологиялық қауіпсіз перовскиттік материалдарды жобалау мен эксперименттік зерттеулерге теориялық негіз бола алады.

References

- Carnimeo I., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Nardelli M.B., Calandra M., et al. (2023). Quantum ESPRESSO: One further step toward the exascale. *Journal of Chemical Theory and Computation*. – Vol. 19, (20). – P. 6992–7006. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00249> (in Eng).
- Guo J., Wang F., Li L., Zhang C., Kong J., Chen J. et al. (2025). Optical properties and electronic structures of lithium doped double perovskite $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$ crystals. *Scientific Reports*. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-95934-7> (in Eng).
- Heo D.Y., Tekalgne M.A., Kim S.Y. (2024). Research progress and perspectives on photocatalysts based on the lead-free double halide perovskite. *EES Catalysis*. – Vol. 2. – P. 94-108. <https://doi.org/10.1039/D3EY00229B> (in Eng).
- Huang X., Zhang Y., Li Z., et al. (2023). Highly responsive lead-free perovskite photodiode based on $\text{Cs}_2\text{Ag}_{0.35}\text{Na}_{0.65}\text{InCl}_6$ nanocrystals. *ACS Applied Nano Materials*. <https://doi.org/10.1021/acsanm.3c04427> (in Eng).
- Huang Y., Zhang X., Li Z. et al. (2024). Extending the absorption of $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$ double perovskite to the near infra-red region by copper doping. *Journal of Materials Chemistry C*. <https://doi.org/10.1039/d3tc03567k> (in Eng).
- Investigation of lead-free halide $\text{K}_2\text{AgSbBr}_6$ double perovskite's structural, electronic, and optical properties using DFT functionals (2024). *Chemical Physics Impact* – <https://doi.org/10.1016/j.chphi.2024.100207> (in Eng).
- Magdalena N. Rowinska, Korolevych O., Kabański A., Stefanska D., Bednarchuk T., Piecha-Bisiorek A. (2025) Hybrid Bismuth(III)-Halide Double Perovskite-Derived Ferroelastic $(\text{Pip})_2(\text{KBiBr}_6)$ with Excitonic and Bi(III) Luminescence due to Electronic Confinement along Inorganic Pillars. *Chemistry of Materials*. – Vol. 37(18). – P. 7125-7135. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.5c01183> (in Eng).

Nie K., Zhang Q., Li Y., Huang X., et al. Effectively tuning the band gap of double perovskite $\text{Cs}_2\text{Ag}(\text{B}_x\text{Bi}_{1-x})\text{Br}_6$ ($\text{B} = \text{Sb}^{3+}, \text{In}^{3+}$) thin films // *Chemical Physics Letters*. – 2023. – Vol. 830. – Article No. 140805. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2023.140805> (in Eng).

Nishitha P. Mathew a,b, N. Rajeev Kumar b, R. Radhakrishnan (2020). First principle study of the structural and optoelectronic properties of direct bandgap double perovskite $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$. *Materials Today: Proceedings*. <https://arxiv.org/abs/2009.12490> (in Eng).

Obada D.O., El-Maghraby H.F., Shaban M., Bekheet M.F. (2024). Structural, optoelectronic, mechanical, and thermoelectric properties of lead-free double perovskites from first-principles calculations. *Crystals*. – Vol. 14(1). – P. 86. <https://doi.org/10.3390/cryst14010086> (in Eng).

Su H., Liu Y., Zhang X., Wang J., Chen Z. et al. (2024) Excitation-mode-selective emission through multiexcitonic states in lead-free double perovskite crystals. *Light: Science and Applications*. – Vol. 13 (215). <https://doi.org/10.1038/s41377-024-01689-7> (in Eng).

Wang Y., Liu J., Liu Y., Li S., Xu X., Lou Z. (2024). Recent advances in lead-free halide perovskites: from synthesis to applications. *Journal of Materials Chemistry C*. – Vol. 12. – P. 10267-10329. <https://doi.org/10.1039/D4TC01556H> (in Eng).

Wang Y., Liu J., Liu Y., Li S., Xu X., Lou Z. (2024). Recent advances in lead-free halide perovskites: from synthesis to applications. *Journal of Materials Chemistry C*. – Vol. 12(28). – P. 10267-10329. <https://doi.org/10.1039/D4TC01556H> (in Eng).

Yu J., Ri I., Ri H., Jang J., Kim Y., Jong U. (2023). First-principles study on structural, electronic and optical properties of halide double perovskite Cs_2AgBX_6 ($\text{B} = \text{In}, \text{Sb}$; $\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$). *RSC Advances*. <https://doi.org/10.1039/D3RA02566G> (in Eng).

Zhanturina N., Sergeev D., Aimaganbetova Z., Zhubaev A. and Bizhanova K. (2022). Structural Properties of Yttrium Aluminum Garnet, Doped with Lanthanum. *Crystals*. – Vol.12. – P. - 1132. <https://doi.org/10.3390/cryst12081132> (in Eng).

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the Central Asian Academic Research Center LLP

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the journals of the Central Asian Academic Research Center LLP implies that the described work has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The Central Asian Academic Research Center LLP follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the Cross Check originality detection service <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the Central Asian Academic Research Center LLP.

The Editorial Board of the Central Asian Academic Research Center LLP will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

**www.nauka-nanrk.kz
ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)
<http://reports-science.kz/index.php/en/archive>**

Ответственный редактор *А. Ботанқызы*
Редакторы: *Д.С. Аленов, Т. Апендиев*
Верстка на компьютере *Г.Д. Жадырановой*

Подписано в печать 16.03.2026.

Формат 60x881/8.

18,0 п.л. Заказ 1.