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

CENTRAL ASIAN ACADEMIC
RESEARCH CENTER

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

2026 • 1

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

© «Central Asian Academic Research Center» LLP, 2026

БАС РЕДАКТОР

ЖҰРЫНОВ Мұрат Жұрынұлы, 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/authid/detail.uri?authorId=6602177960, https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489

БАС РЕДАКТОРДЫҢ ОРЫНБАСАРЛАРЫ:

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

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

РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

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

РАМАЗАНОВ Тілекқабыл Сәбитұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), https://www.scopus.com/authid/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/authid/detail.uri?authorId=6602431781, https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661

ОЛИВЬЕРО Росси Сезаре, PhD (химия), Калабрия университетінің профессоры (Калабрия, Италия), https://www.scopus.com/authid/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/authid/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/authid/detail.uri?authorId=59286321700, https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581

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

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

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

БҰРКІТБАЕВ Мұхамбетқали, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), https://www.scopus.com/authid/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/authid/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/authid/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/authid/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/authid/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/authid/detail.uri?authorId=6701353063, https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295

ӘБІШЕВ Медеу Ержанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), 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)
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

© «Орталық Азия академиялық ғылыми орталығы» ЖШС, 2026

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

2026 • 1

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 Росси 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 Искендирович, 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 Авгазыевич, 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 Мухамбеткали, 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

ТАКИБАЕВ Нургали Жабагаевич, 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 Медеу 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

© ТОО «Центрально-азиатский академический научный центр», 2026

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 $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ based on the quantum ESPRESSO software.....14

Amangeldinova S., Zhuniskhan S., Kalzhigitov N., Kurmangaliyeva V.
Study of the cluster structure of ^{5}He and ^{5}Li 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–N_2 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., Spassyuk 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., ZhanikulovN., 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 QTAIM, 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., Taiekenova 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 Plantago major.....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

Аймаганбетова З.К., Құлшымбаев Е.А., Жантурина Н.Н., Бекетова Г.К.
Quantum Espresso бағдарламасы негізінде Cs2Ag 0.2Na 0.4In0.6Ti0.4Cl6
қос галогенді перовскиттің электрондық қасиеттерін бірінші принциптік есептеу.....14

Амангелдинова С., Жүнісхан С., Калжигитов Н., Курмангалиева В.
Екі кластерлік жуықтауда 5He және 5Li айналық ядроларының кластерлік
құрылымын зерттеу.....35

Чокин К., Отунчи Е., Кожахметова А., Касенова А., Шонғалова А.
Литий-ионды аккумуляторларды қайта өңдеуге 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

Мукамеденкызы 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., Сыздыкова 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 Tau симбиотикалық объектісін фотометрлік зерттеу.....194

Жусупова Н.К., Жадыранова А.А.
Энергия шарттарын талдауға негізделген $f(T,\mathcal{T})$ серпіліс космологиясы.....205

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

ХИМИЯ

Алмассов Н.Ж., Жумагалиева А.Н., Дүйсенбеков С.Е., Жакиев Н.К.
Қазақстанда сутегі өндіруге арналған гибридтік жаңартылатын энергия жүйелерін жобалау және оңтайландыру.....236

Амангелді Б., Жаникулов Н., Таймасов Б., Айтуреев М., Даулетияров М.
Ақ портландцемент клинкерін алу үшін шикізат шихта құрамын есептеу.....251

Баешов А., Ташенов Е.А., Атыханова С.Б., Кошкарбаева Ш.Т.
Композициялы күкірт-графит электродын қолдану арқылы кадмий сульфидін электрохимиялық әдіспен алу.....267

Байсалова Г.Ж., Ажиханова Ж., Талтенов А.А., Құжатова П.
Қазақстан флорасындағы көпжылдық шөптесін өсімдіктердің фенолдық қосылыстарының жиынтық мөлшерін анықтау.....277

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

Еркасов Р.Ш., Жамкенова А.С., Сергазина С.М., Нурмуханбетова Н.Н., Касенова Н.Б.
Mn (II) кешендеріндегі сутектік байланыстардың энергиясы мен табиғатына галогеннің әсері: QTAIM, NCI және энергия декомпозициясы.....304

Калимолдина Л.М., Шаихова Ж.Е., Калиева Б.К., Бубиш Ш., Аскарова Ш.К.
Күміс нанобөлшектерінің бұршақ, лимон, мандарин, авокадо тұқымдарының өнуіне әсері.....320

Куртебаева А.А., Álvarez-Torrellas S., Gomes H.T., 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 оңтайландыру.....350

Мутушев А.Ж., Нұралы Ә.М., Санат А.С., Шаукарова М.А., Есимсиитова 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

Жортарова 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 Cs2Ag 0.2Na 0.4In0.6Ti0.4Cl6 на основе программы Quantum Espresso.....14

Амангелдинова С., Жүнісхан С., Калжигитов Н., Курмангалиева В.
Исследование кластерной структуры зеркальных ядер 5He и 5Li в двухкластерном приближении.....35

Чокин К., Отунчи Е., Кожахметова А., Касенова А., Шонғалова 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 CaII.....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., Шомшекова С.А.
Фотометрическое исследование симбиотического объекта V725 Tau.....194

Жусупова Н.К., Жадыранова А.А.
Космология отскока в $f(T,\mathcal{T})$ гравитации на основе анализа энергетических условий.....205

Зиятбекова Г.З., Абдиманапова 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 портландцементного клинкера.....251

Баешов 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., Жусипназарова 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., Аскарова Ш.К.
Влияние наночастиц серебра на прорастание семян фасоли, лимона, мандарина, авокадо.....320

Куртебаева А.А., Álvarez-Torrellas S., Gomes H.T., Орынбаев С.А., Калмаханова М.С.
Полимерные мембраны с активированным углем для эффективного удаления загрязняющих веществ вызывающих обеспокенность.....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 Plantago Major.....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

Жортарова 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 $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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 $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_2$, 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 (Eg), 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 ПЕРОВСКИТТІҢ ЭЛЕКТРОНДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН БІРІНШІ ПРИНЦИПТІК 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: ekulsymbaev@gmail.com, https://orcid.org/0009-0002-7210-3394;
Жантурина Нургул — PhD, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,
E-mail: nzhanturina@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 перевоскиттер 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 $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_2$ күрделі көпкомпонентті материалдың электрондық қасиеттерін бірінші принциптік есептеу әдістері негізінде зертелді. Есептеулер Density Functional Theory (DFT) негізінде құралған Quantum ESPRESSO бағдармалық пакетінің графикалық интерфейсі Burai 1.3.1 бағдарламасында жасалынды. Зерттеу бағыттары, перовскит зоналық құрылымың есептеу, яғни валенттік және өткізгіштік аймақтарының дисперсиясы анықталу (VBM және CBM), тиым салынған аймақ ені анықтау (E_g), электрондық күйлерлердің тығыздығы (Density of states – DOS) анықтау, талдау, әртүрлі материалдардың энергетикалық аймақтарын қалыптастыруға қосқан үлестерін анықтау, әсіресі ауыспалы Ti мен Ag сияқты ауыспалы металдардың әсерін бағалау үшін маңызды, сонымен қатар перевоскиттердің жарық сіңіру қаситтерін 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 қаситтерің 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 принципттік есептеулер

©Аймаганбетова З.К., Кулшымбаев 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, Актобе, Казахстан,
E-mail: ekulsymbaev@gmail.com, https://orcid.org/0009-0002-7210-3394;
Жантурина Нургул — PhD, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz, https://orcid.org/0000-0001-9540-6334;
Бекетова Гульнара — PhD докторант, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, Актобе, 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 - $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_2$ - 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 Burai 1.3.1. В ходе исследования были рассчитаны зонная структура перовскита, дисперсии валентной и проводящей зон (VBM и CBM), определена ширина запрещенной зоны (Eg), 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 галогенидые перовскиты, QE, DFT, DOS, запрещенные 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). $Cs_2AgInCl_6$ 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 $Cs_2AgInCl_6$ 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, $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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, $Cs_2Ag(Sb_xBi_{1-x})Br_6$ 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 $Cs_2Ag_{0,2}Na_{0,4}In_{0,6}Ti_{0,4}Cl_6$ 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 құрылғыларда қолдану үшін маңызды ғылыми негіз болып табылады.

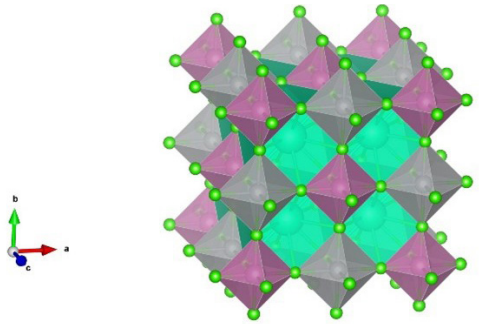
Зерттеу әдістері. Барлық есептеулер Quantum Espresso ашық бағдармалық пакетінде орындалды. Бұл бағдарламалық кешен конденсацияланған заттар физикасында және материалтануда кең қолданылатын ab initio есептеу құралдарының бірі болып табылады. Quantum Espresso мультиплатформалы құрылымға ие, жазық толқындар 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 гибридтік функционалдар сияқты әртүрлі алмасу-корреляция тәсілдерін қолдауы зерттелетін материалдың нақты ерекшеліктеріне сәйкес ең қолайлы параметрлерді таңдауға жол ашады.

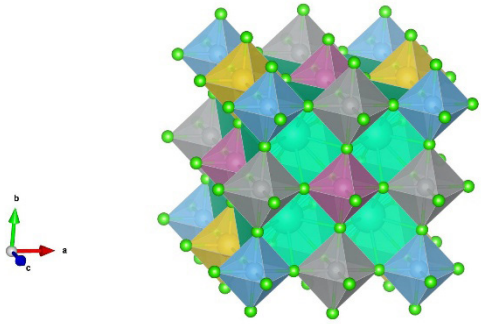
Quantum Espresso бағдарламасы оптикалық қасиеттерді, диэлектрлік

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 перевоскиттер 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→Na, In→Ti орынбасулары бар суперұяшылық жасалды.



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



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

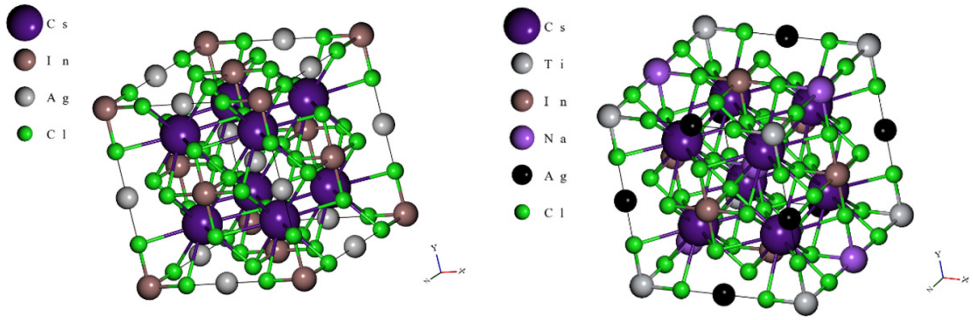
Кристалдық құрылым Cs цезийдің 8 кубтық октаэдрлік орнын, Ag/Na 4 октаэдрлік орнын, 4 In/Ti октаэдрлік орнын және октаэдр төбесіндегі Cl хлордың 24 атомын қамтиды. Элементарлық ұяшықта төрт формулалық бірлік (Z = 4) бар. Модельдеу зерттелетін кристалдың 40 атомымен жүзеге асты (3 сурет).

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.

CC BY NC

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– $Cs_2AgIn_0Cl_6$; $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ элементал ұяшықтары

Релаксация процессі кезінде барлық атомдарға түсетін күштің шамасы 0.2 eV/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 Кубо Гринвуд теңдеуі 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, $\hbar$ - редукцияланған Планк тұрақтысы, m_e - электрон массасы, ε_0 - вакуумның диэлектрлік өтімділігі, V - жүйе көлемі, ω - сыртқы өрістің бұрыштық жылдамдығы, 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:

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

мұнда:

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

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

Сөндіру коэффициенті анықталғаннан кейін оптикалық жұтылу коэффицинеті 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:

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

Шағылысу қабілеті төмендегі өрнекпен есептеледі:

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

мұнда:

n – сыну көрсеткіші;

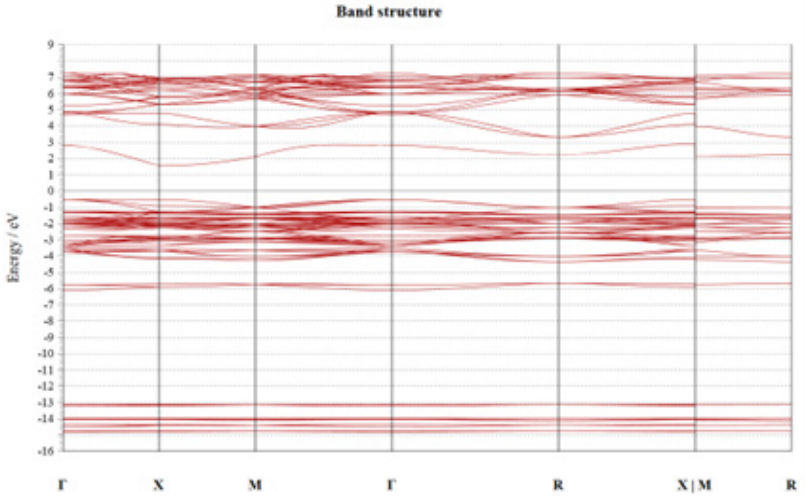
k – жұтылу немесе сөну көрсеткіші.

Энергия жоғалу функциясы:

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

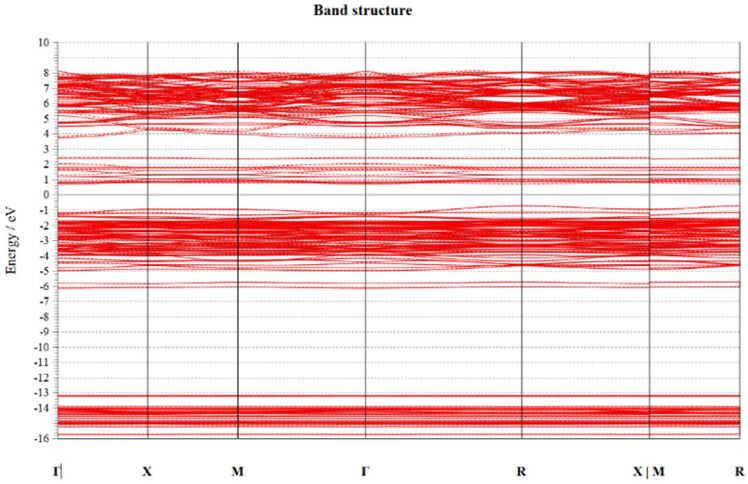
CC BY NC

Нәтижелер. *Зоналық құрылым.* Есептелген зоналық құрылымдар мен күйлердің толық тығыздығы $Cs_2AgInCl_6$ және $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ қос галогенді перовскиттерінің жартылай өткізгіштік қасиетке ие екенін көрсетеді (4 сурет және 5 сурет).



Сурет 4– $Cs_2AgInCl_6$ зоналық құрылымы

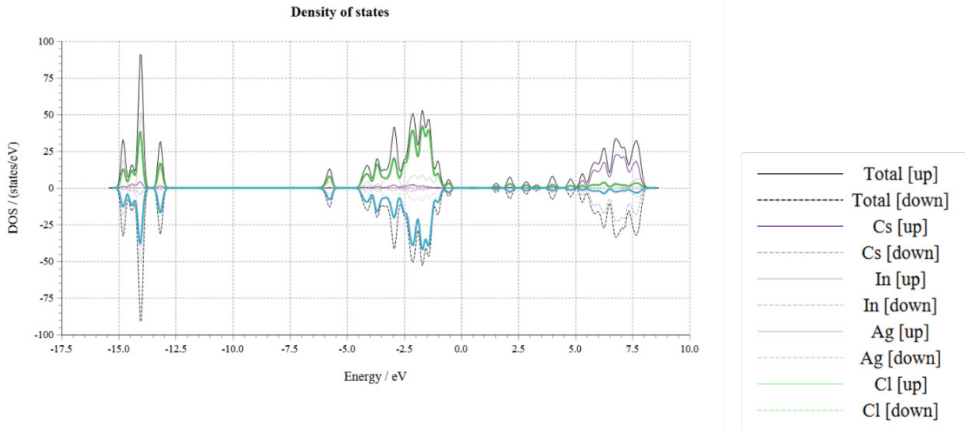
$Cs_2AgInCl_6$ кристалында валенттік зонаның жоғарғы шегі мен өткізгіштік зонаның төменгі шегі Бриллюэн аймағының әртүрлі жоғары симметриялық нүктелерінде орналасқан, бұл жанама тыйым салынған аймақтың бар екенін білдіреді. Есептелген тыйым салынған аймақ шамамен 2.3–2.5 эВ құрайды, бұл $Cs_2AgInCl_6$ негізіндегі қорғасынсыз перовскиттер үшін белгілі теориялық мәндердің шегінде жатыр (Nishitha P. et.al., 2020).



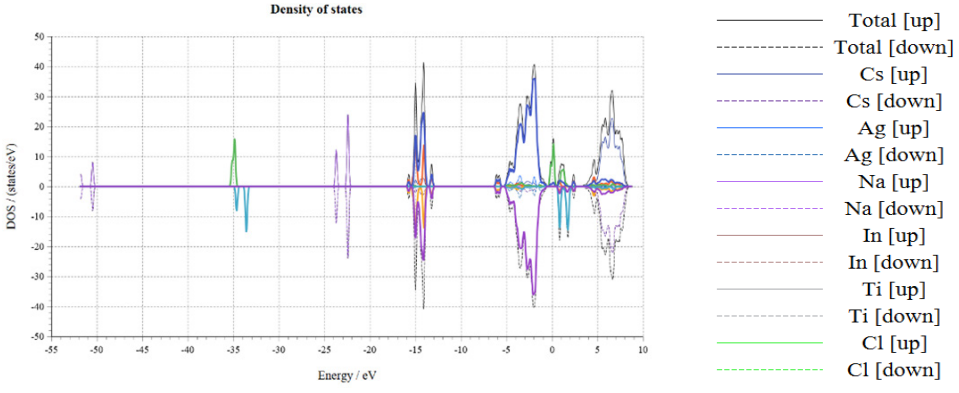
Сурет 5– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ зоналық құрылымы

Na және Ti иондарымен бірлесіп легирленген $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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 $Cs_2AgInCl_6$ негізіндегі қос галогенді перовскиттердің электрондық қасиеттерін тиімді түрде басқаруға мүмкіндік беретінін көрсетеді.

Күйлер тығыздығы. 6 және 7 суретте $CsAgInCl_6$ және $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ қос галогенді перовскиттерінің толық және парциалды күйлер тығыздығы (DOS) көрсетілген.



Сурет 6– $CsAgInCl_6$ күйлер тығыздығының функционалы



Сурет 7– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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.

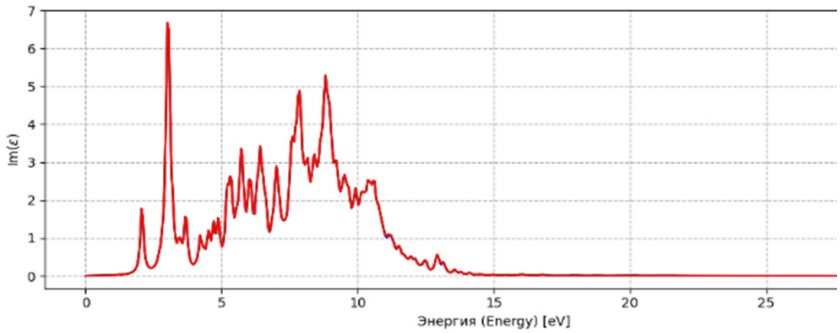
Өткізгіштік зонасы негізінен Ti-3d, In-5d және Ag-4d күйлерінен құралған, сонымен қатар Cl-2p орбитальдарының аздаған үлесі байқалады. Бұл жағдай тыйым салынған аймақтан жоғары энергияларда d-күйлердің басым екенін және электрондардың қозуы кезінде осы орбитальдардың негізгі рөл атқаратынын көрсетеді.

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 $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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 Im(ε) материалдың оптикалық жұтылу спектрін тікелей сипаттайды (8 сурет).

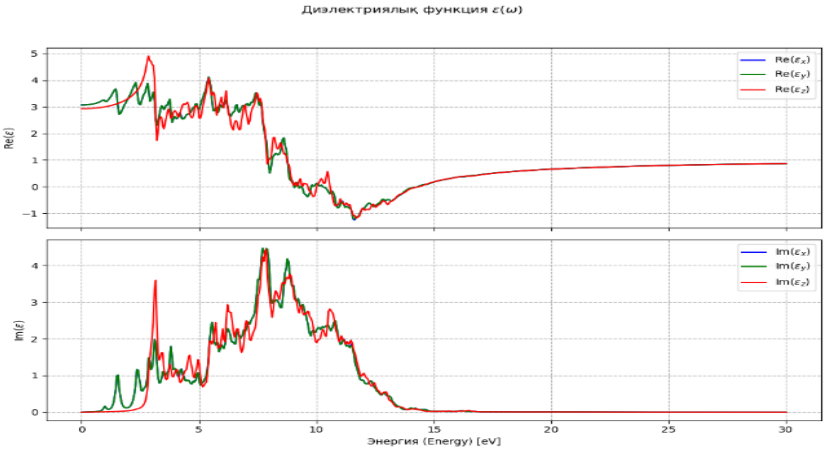


Сурет 8– $CsAgInCl_6$ диэлектрлік функциясының Im(ε) бөлігі

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

Жұтылу шеті 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.

$Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ жүйесінде Na және Ti атомдарымен легирлеу нәтижесінде Im(ε) спектрінде айқын өзгерістер байқалады (9 сурет).

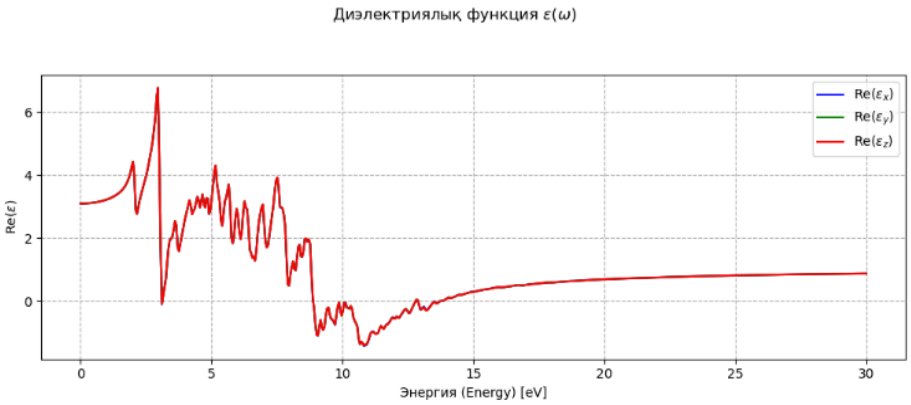


Сурет 9– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ диэлектрлік функциясының Im(ε) бөлігі

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.

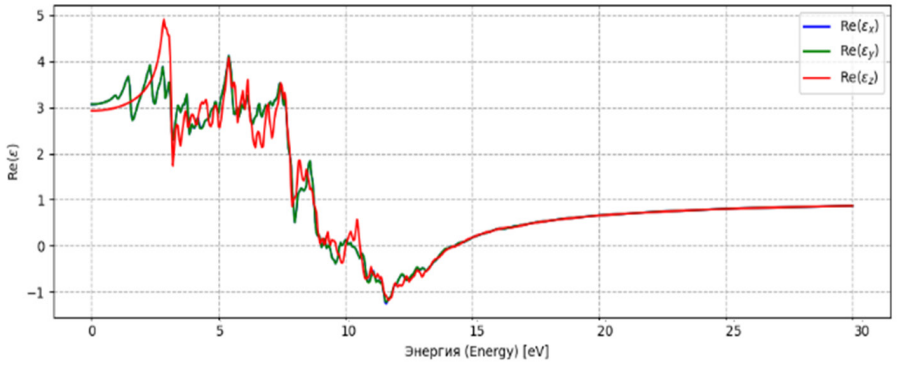
Бұл өзгерістер Ti-дің d-орбитальдарының электрондық өтулерге қосқан үлесімен және Na атомдарының тордағы зарядтық теңгерімді өзгертуімен түсіндіріледі. Легирлеу кезінде қосымша электронды күйлер пайда болады да, жұтылу жоғары энергиялы жақта интесивті болады.

Диэлектрлік функцияның нақты бөлігі. Диэлектрлік функцияның нақты бөлігі Re(ε) материалдың поляризациялық қасиеттерін сипаттайды. $Cs_2AgInCl_6$ үшін нөлдік энергиядағы статикалық диэлектрлік тұрақты шамамен 3 ке тең. Статикалық диэлектрлік тұрақты мәні графиктен нольдік энергия кезінде алынады. 8–12 eV энергия аймағында аномальды дисперсия аймағы байқалады, бұл жұтылу шыңдарымен сәйкес келеді.



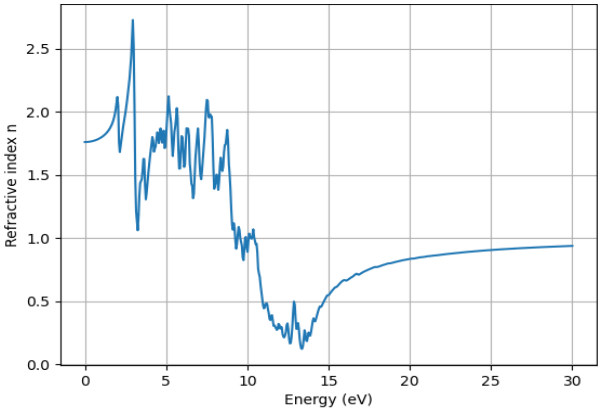
Сурет 10– $CsAgInCl_6$ диэлектрлік функциясының нақты Re(ε) бөлігі

$Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ жүйесінде Re(ε) 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.



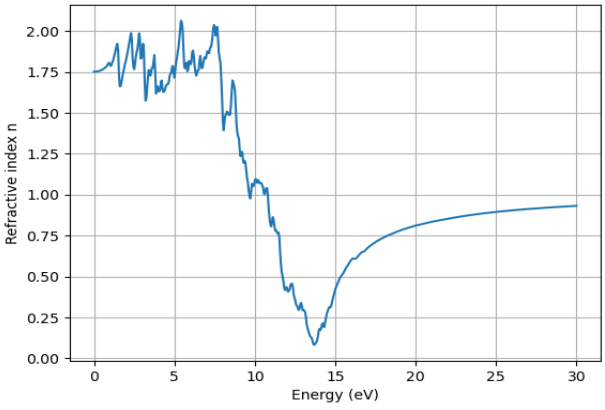
Сурет 11– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ диэлектрлік функциясының нақты Re(ε) бөлігі

Сыну көрсеткіші. Диэлектрлік функцияның нақты және жорамал бөліктері арқылы сыну көрсеткіші *n* есептелді, $n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{Re(\varepsilon)^2+Im(\varepsilon)^2}+Re(\varepsilon)}{2}}$. 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 eV аймағында айқын аномальды дисперсия байқалады. Бұл аймақ диэлектрлік функциядағы жұтылу шыңдарымен сәйкес келеді.

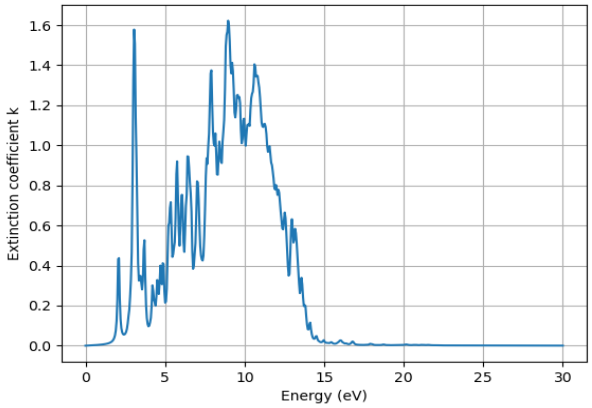


Сурет 13– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ сыну көрсеткіші n(E).

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

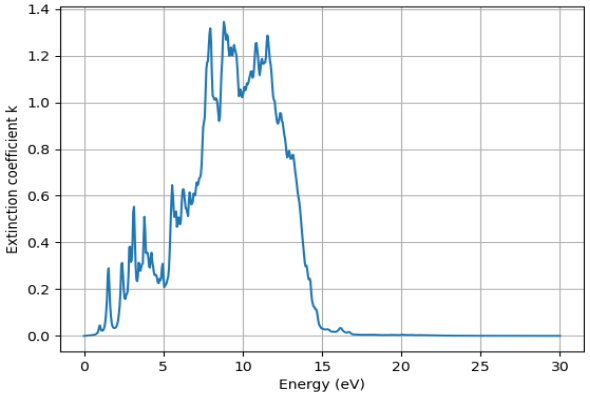
CC BY NC

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



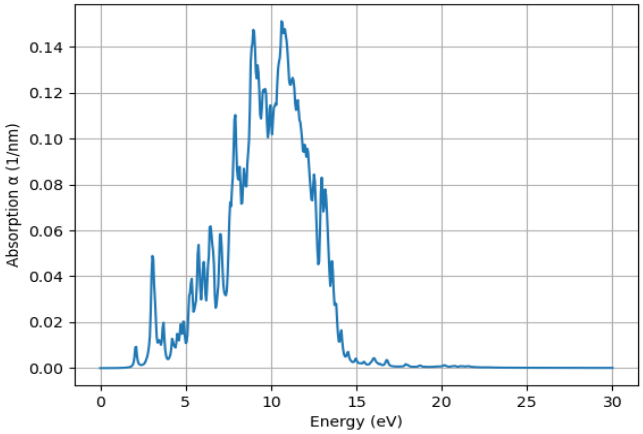
Сурет 14– $CsAgInCl_6$ өшу коэффициенті k(E).

Ал $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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.



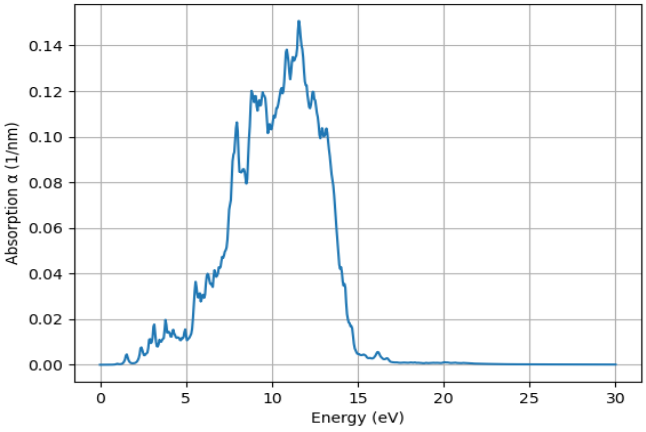
Сурет 15– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ өшу коэффициенті k(E).

Жұтылу коэффициентінің энергияға тәуелділігі. $Cs_2AgInCl_6$ және $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ перовскиттері үшін, $\alpha = 2\frac{\omega}{c}k$ формуласы арқылы жұтылу коэффициенті табылды. $Cs_2AgInCl_6$ 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 α(E)

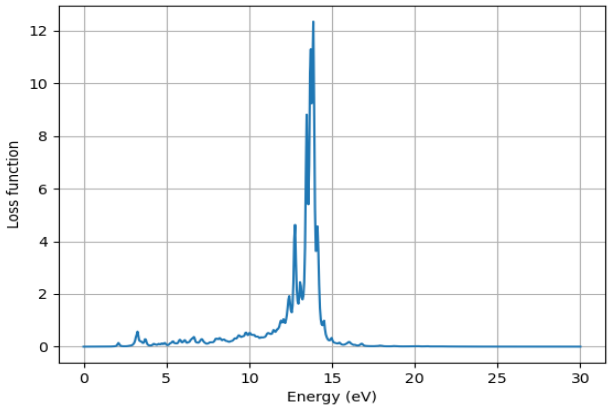
Na және Ti енгізілген $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ перовскитінде жұтылу коэффициенті едәуір жоғары мәндерге ие. Жұтылу спектрі кеңейіп, 6–14 eV аралығында бірнеше айқын шыңдар пайда болады. Бұл легирлеу нәтижесінде электрондық өтулердің күшейгенін және жаңа рұқсат етілген ауысулардың пайда болғанын көрсетеді.



Сурет 17– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ жұтылу коэффициенті α(E).

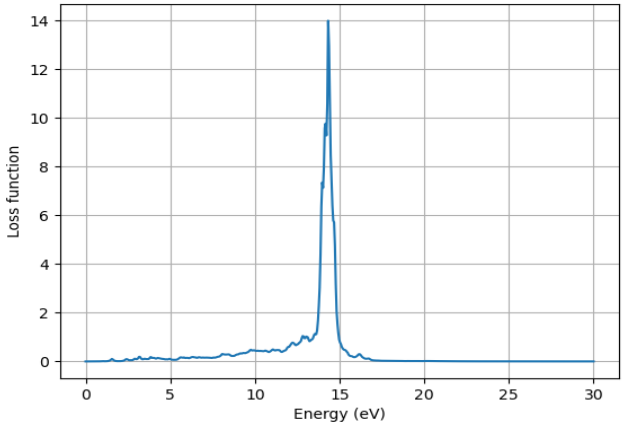
Энергия жоғалту функциясы L(ω). Энергия жоғалту функциясы материалдағы плазмондық тербелістерді сипаттайды.

$Cs_2AgInCl_6$ үшін L(ω) функциясында негізгі плазмондық шың шамамен 13–14 eV энергияда байқалады. Бұл жүйеде еркін тасымалдаушылардың концентрациясы салыстырмалы түрде төмен екенін көрсетеді.



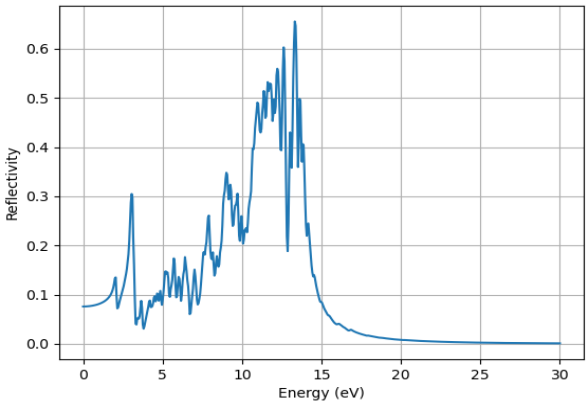
Сурет 18– CsAgInCl өшу энергия жоғалту функциясы L(ω)

$Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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.



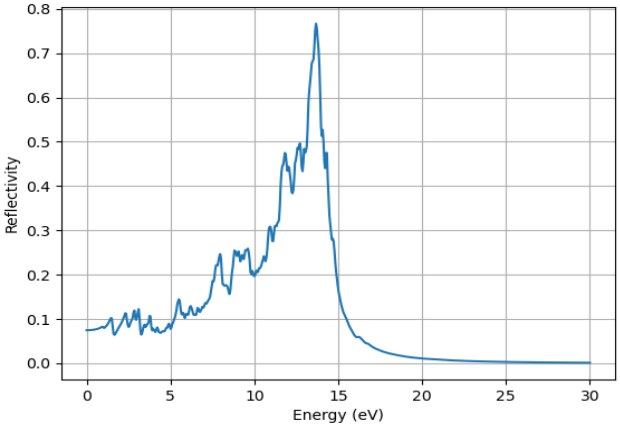
Сурет 19– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ энергия жоғалту функциясы L(ω).

Шағылу коэффициенті R(E). Шағылу коэффициенті $Cs_2AgInCl_6$ 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– $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ шағылу коэффициенті R(E)

Қорытынды. Бұл жұмыста қорғасынсыз қос галогенді перовскиттер класына жататын $Cs_2AgInCl_6$ және Na, Ti иондарымен легирленген $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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 $Cs_2AgInCl_6$ 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

CC BY NC

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. $Cs_2Ag_{0.2}Na_{0.4}In_{0.6}Ti_{0.4}Cl_6$ 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 $Cs_2AgBiCl_6$ 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 $Cs_2Ag_{0.35}Na_{0.65}InCl_6$ 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 $Cs_2AgBiCl_6$ 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 $K_2AgSbBr_6$ 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 $(Pip)_2(KBiBr_6)$ 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 $Cs_2Ag(B_xBi_{1-x})Br_6$ ($B = Sb^{3+}$, 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 $Cs_2AgInCl_6$. 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 (B = In, Sb; X = F, Cl, Br, I). RSC Advances. https://doi.org/10.1039/D3RA02566G (in Eng).

Zhanturina N., Sergeyev 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).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 35–45

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.403

UDC: 539.141/.142
IRSTI: 29.15.03; 29.15.19

©Amangeldinova S., Zhuniskhan S., Kalzhigitov N., Kurmangaliyeva V.*, 2026.
Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.
*E-mail: venera_baggi@mail.ru

STUDY OF THE CLUSTER STRUCTURE OF ^{5}He AND ^{5}Li MIRROR NUCLEI IN TWO-CLUSTER APPROXIMATION

Amangeldinova Sabina — PhD student, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, E-mail: sabinaa247@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-1062-1073;
Zhuniskhan Sardar — Master's student, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, E-mail: sardar_07@bk.ru, https://orcid.org/0009-0000-7950-273X;
Kalzhigitov Nursultan — PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, E-mail: knurto1@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2598-3176;
Kurmangaliyeva Venera — Candidate of physical and mathematical sciences, Associate Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: venera_baggi@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8046-8508.

Abstract. The nature of nuclear interaction currently remains one of the urgent problems in the fields of nuclear physics and nuclear astrophysics. In particular, in the study of primordial nucleosynthesis processes, the questions about the nature and structure of light nuclei such as ^{5}He and ^{5}Li remain largely open, requiring a more detailed analysis taking into account different approaches. Since these nuclei represent unstable resonant systems, the determination of their spectral characteristics plays an important role in understanding the properties of nuclear forces at short distances. One of these approaches is the well-proven cluster approximation, where nuclei are considered from the position of a group of interacting nucleon clusters. The cluster model provides a clear physically interpretation of the structure of light nuclei and enables a qualitative description of the nature of resonant states. The purpose of this study is to determine the features of nuclear interaction, describing the resonance states of ^{5}He and ^{5}Li nuclei from the position of cluster structures. The algebraic version of the Resonating Group Method is employed to describe the intercluster interaction. The calculations were performed using the modified Hasegawa-Nagata potential. The obtained resonance energies and widths were compared with available experimental data. The calculations show that the resonance energy of the ground state of ^{5}He is 0.78 MeV with a width of 0.68 MeV. For ^{5}Li, the corresponding values are 1.60 MeV and 1.32 MeV. The results are in good

agreement with experimental data and demonstrate the reliability and effectiveness of the applied model for describing the considered nuclear systems.

Key words: clusters, microscopic two-cluster model, resonating group method, light nuclei, resonant states

For citations: *Amangeldinova S., Zhuniskhan S., Kalzhigitov N., Kurmangaliyeva V. Study of the Cluster Structure of ^{5}He and ^{5}Li Mirror Nuclei in Two-Cluster Approximation. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 35–45. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.403*

©Амангелдинова С., Жүнісхан С., Калжигитов Н., Курмангалиева В. *, 2026.
Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Казахстан.
*E-mail: venera_baggi@mail.ru

ЕКІ КЛАСТЕРЛІК ЖУЫҚТАУДА ^{5}He ЖӘНЕ ^{5}Li АЙНАЛЫҚ ЯДРОЛАРЫНЫҢ КЛАСТЕРЛІК ҚҰРЫЛЫМЫН ЗЕРТТЕУ

Амангелдинова Сабина — PhD докторант, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: sabinaa247@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-1062-1073;
Жүнісхан Сардар — магистрант, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: sardar_07@bk.ru, https://orcid.org/0009-0000-7950-273X;
Калжигитов Нурсултан — PhD, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: knurto1@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2598-3176;
Курмангалиева Венера — физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: venera_baggi@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8046-8508.

Аннотация. Ядролық әсерлесудің табиғаты қазіргі уақытта ядролық физика және ядролық астрофизика салаларындағы ең өзекті мәселелердің бірі болып қала береді. Атап айтқанда, бастапқы нуклеосинтез процестерін зерттеуде ^{5}He және ^{5}Li сияқты жеңіл ядролардың табиғаты мен құрылымы туралы сұрақтар негізінен ашық күйінде қалады, бұл өз кезегінде әртүрлі тәсілдерді ескере отырып, егжей-тегжейлі талдауды қажет етеді. Бұл ядролар тұрақсыз резонанстық жүйелер болып табылатындықтан, олардың спектрлік сипаттамаларын анықтау ядролық күштердің қысқа қашықтықтағы қасиеттерін түсіну үшін маңызды рөл атқарады. Осындай тәсілдердің бірі жақсы қалыптасып келген кластерлік жуықтау болып табылады, бұл жерде ядролар өзара әсерлесетін нуклондық кластерлер тобы тұрғысынан қарастырылады. Кластерлік модель жеңіл ядролардың құрылымын физикалық тұрғыдан айқын интерпретациялауға және резонанстық күйлердің табиғатын сапалы сипаттауға мүмкіндік береді. Бұл зерттеудің мақсаты ^{5}He және ^{5}Li ядроларының резонанстық күйлерін кластерлік құрылымдар тұрғысынан

сипаттау арқылы ядролық өзара әрекеттесу ерекшеліктерін анықтау болып табылады. Кластер аралық әсерлесулерді сипаттау үшін резонансты топтар әдісінің алгебралық нұсқасы қолданылады. Есептеулер модификацияланған Хасегава-Нагата потенциалы арқылы орындалды. Зерттеу барысында алынған резонанстық күйлердің алынған энергиялары мен ендері тәжірибелік мәліметтермен салыстырылды. Есептеулер нәтижесінде ^{5}He ядросының негізгі күйінің резонанс энергиясы 0,78 МэВ, ал ені 0,68 МэВ екені анықталды. ^{5}Li ядросы үшін сәйкесінше 1,60 МэВ және 1,32 МэВ мәндері алынды. Бұл нәтижелер тәжірибелік мәндермен жақсы үйлесім таба білді. Таңдалған әдістің дәлдігін көрсететін алынған мәліметтер алға қойылған міндеттерді сипаттауда осы модельді қолданудың тиімділігін дәлелдейді.

Түйін сөздер: кластерлер, микроскопиялық екі кластерлік модель, резонанстық топтар әдісі, жеңіл ядролар, резонанстық күйлер

©Амангелдинова С., Жүнісхан С., Калжигитов Н., Курмангалиева В. *, 2026.
Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан.
*E-mail: venera_baggi@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ КЛАСТЕРНОЙ СТРУКТУРЫ ЗЕРКАЛЬНЫХ ЯДЕР ^{5}He И ^{5}Li В ДВУХКЛАСТЕРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Амангелдинова Сабина — PhD докторант, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: sabinaa247@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-1062-1073;
Жүнісхан Сардар — магистрант, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: sardar_07@bk.ru, https://orcid.org/0009-0000-7950-273X;
Калжигитов Нурсултан — PhD, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: knurto1@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2598-3176;
Курмангалиева Венера — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: venera_baggi@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8046-8508.

Аннотация. Природа ядерного взаимодействия в настоящее время остается одной из актуальных проблем ядерной физики и ядерной астрофизики. В частности, при исследовании процессов первичного нуклеосинтеза вопросы о природе и структуре легких ядер, таких как ^{5}He и ^{5}Li, во многом остаются открытыми и требуют более детального анализа с учетом различных подходов. Поскольку данные ядра являются неустойчивыми резонансными системами, определение их спектральных характеристик играет важную роль в понимании свойств ядерных сил на малых расстояниях. Одним из таких подходов является хорошо зарекомендовавшее себя кластерное приближение, в рамках которого ядра рассматриваются как системы взаимодействующих нуклонных кластеров. Кластерная модель позволяет дать физически наглядную интерпретацию

структуры легких ядер и обеспечивает качественное описание природы резонансных состояний. Целью данного исследования является выявление особенностей ядерного взаимодействия при описании резонансных состояний ядер ^{5}He и ^{5}Li с позиций кластерной структуры. Для описания межкластерного взаимодействия используется алгебраическая версия метода резонирующих групп. Расчеты выполнены с использованием модифицированного потенциала Хасегавы-Нагаты. В ходе исследования полученные энергии и ширины рассматриваемых резонансов были сопоставлены с экспериментальными данными. В результате расчетов установлено, что резонансная энергия основного состояния ядра ^5He составляет 0,78 МэВ при ширине 0,68 МэВ. Для ядра ^{5}Li соответствующие значения составляют 1,60 МэВ и 1,32 МэВ. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Таким образом, полученные данные подтверждают точность выбранного метода и свидетельствуют об эффективности применения данной модели для описания рассматриваемых задач.

Ключевые слова: кластеры, микроскопическая двухкластерная модель, метод резонирующих групп, легкие ядра, резонансные состояния

Кіріспе. Бұл жұмыстың шеңберінде ядролық әсерлесудің табиғатын зерттеу мақсатында, алғашқы нуклеосинтез кезінде альфа бөлшек пен нейтронның шашырауы нәтиженсінде пайда болған ^{5}He және альфа бөлшек пен протоның шашырауы нәтижесінде пайда болған ^{5}Li жеңіл ядроларының резонансты күйлері зерттеуге алынды.

Ядролық күштердің табиғатын зерттеуге деген қызығушылық ғалымдарды тұрақтылық аймағынан тысқары жатқан ядролардың резонанстық күйлерін зерттеуге бағыттайды. Резонансты күйлерді зерттеудің маңыздылығының себебі, олар әсерелесуші бөлшектер белгілі бір энергия мәніне жеткенде ыдырай отырып, ұзақ уақыт өмір сүруге бейімді. Басқа да энергетикалық диапазонда немесе басқа кванттық сандарда бұндай күйлер пайда болмайды. Осылайша резоннстық күйлерді зерттеу ядролық әсерлесулердің табиғатын жақсырақ түсінуге мүмкіндік береді.

^{5}He және ^{5}Li жеңіл ядролары айналық ядролар болып табылады. Олар бірдей массалар санын құрайды, бірақ бірінде нейтрондар саны көп болса, екіншісінде протондар саны көп. Бұл ядролар ұқсас құрылымға ие болғанымен, энергетикалық деңгейлерде зарядтық өзгешелікке байланысты сәйкессіздік пайда болады. Атап айтқанда кулондық эффектінің әсерінен ^{5}Li ядросында энергетикалық деңгейлер жоғарылайды, сәйкесінше резонанс ені де өзгереді.

Зерттеу материалдары мен әдістері. Бұл жұмыста атом ядролының әртүрлі қозған және байланысқан күйлерінің есептеулерін жүргізу үшін екікластерлік микроскопиялық модель қолданылды (Wheeler, 1937; Ikeda et al., 2010; Horiuchi and Beck, 2010). Екікластерлік микроскопиялық моделінің математикалық тұжырымдамасы резонансты топтар әдісінің алгебралық нұсқасы болып табылады. Алгебралық нұсқаның негізгі ерекшелігі, байланысқан және үздіксіз спектр жағдайында кластерлердің салыстырмалы қозғалысын сипаттау үшін

осцилляторлық функциялардың толық жиынын қолдану (Wildermuth and Tang, 1977; Tang et al., 1978).

Резонанстық топтар әдісінің шеңберінде екікластерлік жүйенің толық функциясы келесі түрде беріледі:

$$\Psi_J = \hat{A}\{[\varphi_1(A_1)\varphi_2(A_2)]_s \psi_{LS}^J(\vec{q})\} \quad (1)$$

мұндағы $\varphi_1(A_1)$ – бірінші кластерді құрайтын A_1 нуклондар жиынының ішкі қозғалысының толқындық функциясы, $\varphi_2(A_2)$ – екінші кластерді құрайтын A_2 нуклондар жиынының ішкі қозғалысының толқындық функциясы. Екі функция да жеке нуклонның кеңістіктік, спиндік, изоспиндік айнымалыларынан тәуелді. Екі функциядағы нуклондардың орын ауыстыруына байланысты антисимметриялы. Резонанстық топтар әдісінде, бұл функциялар белгілі деп болжай аламыз. Ал $\psi_{LS}^J(\vec{q})$ функциясы, кластерлердің бір-біріне қатысты салыстырмалы қозғалысын сипаттайтын толқындық функцияның динамикалық теңдеуін шешу арқылы табылады. Бұл функция, кластерлер арасындағы арақашықтықты анықтайтын $\vec{q}$ Якоби векторының функциясы болып табылады (Saito, 1969).

Резонансты топтар әдісінің алгебралық нұсқасы шеңберінде кластераралық әсерлесудің жіктелуі орындалады, $\psi_{LS}^J(\vec{q})$ толқындық функциясы үшөлшемді гармоникалық осцилляторлардың базистік қатарына жіктеледі:

$$\psi_{LS}^J(\vec{q}) = \sum_{n=n_0}^{\infty} C_{nL}\psi_{nL}(q, r_0) \quad (2)$$

мұндағы C_{nL} – жіктелу коэффициенті, q – Якоби векторының модулі. $\psi_n(q, r_0)$ осцилляторлық функциясының түрін келесі жұмыстан көруге болады (Filippov and Okhrimenko, 1981). Осцилляторлық функция ортонормаланған функциялар жиынынан тұратын болғандықтан, кез келген екікластерлік жүйенің толқындық функциясын осы функцияларға жіктеуге болады.

Екікластерлік жүйенің толқындық функциясы (1), (2) теңдеулерін ескере отырып Фурьенің жалпыланған қатары түрінде қарастырыла алады (Filippov, 1981)

$$\Psi_J = \sum_{n=n_0}^{\infty} C_{nL}\Psi_{nL} \quad (3)$$

Бұл өз кезегінде келесідей жіктеу коэффициенттерінің алгебралық теңдеулерінің жиынтығын береді:

$$\sum_{m=n_0}^{\infty}\left[\langle \vec{n}L|\hat{H}|\vec{m}L\rangle - E\delta_{n,m}\right]C_{mL} = 0 \quad (4)$$

мұндағы $\hat{H}$ – ядро гамильтонианы, E – ядролық жүйенің толық энергиясы, ал

$$\Psi_{nL} = \hat{A}\{\varphi_1(A_1)\varphi_2(A_2)\psi_{nL}(q, b)Y_{LM}(\vec{q})\} \quad (5)$$

кластерлік осциллятордың көп өлшемді функциясы.

Кіріс параметрлері. ^{5}He және ^{5}Li ядролары үшін тәжірибелік мәнге жақын байланыс энергиясын алу үшін есептеудің кіріс параметрлеріне өңдеу жүргізу қажет. Екі-кластерлік табалдырықтың энергиясын минимизациялау үшін модельдің еркін параметрі болып табылатын b – осцилляторлық ұзындық таңдап алынды. Бұл параметрдің таңдап алынуы ^{5}He және ^{5}Li ядроларындағы альфа бөлшектің ішкі құрылымын тиімді түрде сипаттауды қамтамасыз етеді. Сонымен қатар басым екі-кластерлік табалдырыққа қатысты ^{5}He және ^{5}Li ядроларының ең төменгі резонансты күйлерін көрсету шін Хасегава-Нагата потенциалының m Майоран параметріне де кішігірім өңдеу жүргізілді.

Екі-кластерлік жүйелердің үздіксіз спектрін анықтау үшін бұл жұмыста модификацияланған Хасегава-Нагата потенциалы (MHNP) қолданылды (Hasegawa, 1971). MHNP – бұл потенциал, жеңіл ядролардың кластерлік құрылымын зерттеу үшін арнайы шығарылған потенциал. Бұл потенциал резонанстық топтар әдісінің әртүрлі нұсқаларында ядроның құрылымын және ядролық реакцияларды зерттеуде жиі қолданылады. Өзіндік ерекшелігі бар бұл потенциал, центрге тартқыш және спин-орбиталық компоненттерден, сонымен қатар протондар арасындағы кулондық күштерді сипаттайын компоненттен тұрады:

$$V_{я} = V_{LS} + V_{ц} + V_{т} \qquad (6)$$

Центрлік компоненті:

$$V_{ц}(r_{ij}) = \sum_{n=1}^{3}\left(w_c^{(n)} + m_c^{(n)} P_{ij}^{M} + b_c^{(n)} P_{ij}^{B} + h_c^{(n)} P_{ij}^{H}\right) \cdot V_{C_0}^{(n)} \cdot e^{\left(-\mu_c^{(n)} r_{ij}^2\right)} \qquad (7)$$

Спин-орбиталдық компоненті:

$$V_{LS}(r_{ij};\ \sigma_i, \sigma_j) = \sum_{n=1}^{2}\left(w_{LS}^{(n)} + m_{LS}^{(n)} P_{ij}^{M}\right) \cdot V_{LS_0}^{(n)} \cdot e^{\left(-\mu_c^{(n)} r_{ij}^2\right)} \qquad (8)$$

мұндағы n – Гаусс функцияларының саны, μ – күш радиусының квадратына кері параметр, σ_i - і-ші нуклонның спин операторы, τ_i – изоспиндік айнымалы, алмасу операторлары (P^M – Майоран, P^B –Бартлетт, P^H – Гейзенберг операторлары), алмасу параметрлері (m – Майоран, b –Бартлетт, h – Гейзенберг параметрлері), w – Вигнер параметрі. m, b, h, w – 0 ден 1-ге дейін өзгеретін өлшемсіз параметрлер.

Кіріс параметрлерінің нақты мәндері 1-кестеде келтірілген, мұндағы b – осцилляторлық ұзындық, m – Майоран параметрі. Майоран параметрінің бастапқы мәні m_0= 0,4057-ға тең. Кестеде Майоран параметрінің осы шамаға қатысты модификациясы келтірілген, көрсетілгендей келтірілген өзгеріс шамасы өте аз.

Модификацияланған Хасегава-Нагата потенциалындағы спин-орбиталық бөлігінің әсері тым үлкен болғандықтан, физикалық емес нәтижелер алмау үшін f_{LS} көбейткішін вариациялық көбейткіш ретінде енгіземіз (Kalzhigitov et al., 2023).

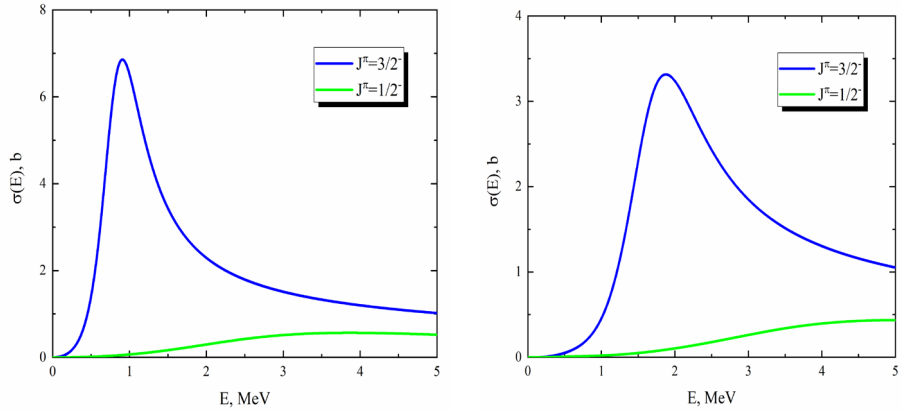
CC BY NC

Кесте 1 – Есептеулердің кіріс параметрлері

Потениал	Ядро	b, фм	Δm	f_{LS}
MHNP	^{5}He ^{5}Li	1.317	0.000	0.50

Нәтижелер мен талқылаулар. Ядроның спині мен жұптылығын есептей отырып, ^{5}He және ^{5}Li ядроларының негізгі күйлері анықталды. ^{5}He ядросы үшін 1-ші $s_{\frac{1}{2}}$ қабаттың толтырылу ережесіне сай 2 протон мен 2 нейтрон орналасады да, ал 3-ші нейтрон келесі $p_{\frac{3}{2}}$ қабатта орналасады. Сонда негізгі күй үшін орбиталық момент L=1 (яғни p қабат) және толық механикалық момент немесе толық спин, J=3/2 болатын күйде орналасады. $\pi = (-1)^{L}$ формуласына сәйкес, орбиталық момент L=1-ге тең болғандықтан, сәйкесінше $\pi = (-1)^{1} = -1$, яғни жұптылығы – теріс болады. Сонымен ^{5}He ядросының негізгі күйі келесідей түрге ие: $J^{\pi} = \frac{3}{2}^{-}$. Сонымен қатар бірінші қозған күйі де есептелінді. Бұл жерде L=1, J=3/2, онда бірінші қозған күйдің түрі келесідей жазылады: $J^{\pi} = \frac{1}{2}^{-}$. ^{5}Li ядросының негізгі және бірінші қозған күйі де осыған сәйкес есептелінді, олар да ^{5}He ядросының күйлері сияқты түрге ие: $J^{\pi} = \frac{3}{2}^{-}$ және $J^{\pi} = \frac{1}{2}^{-}$.

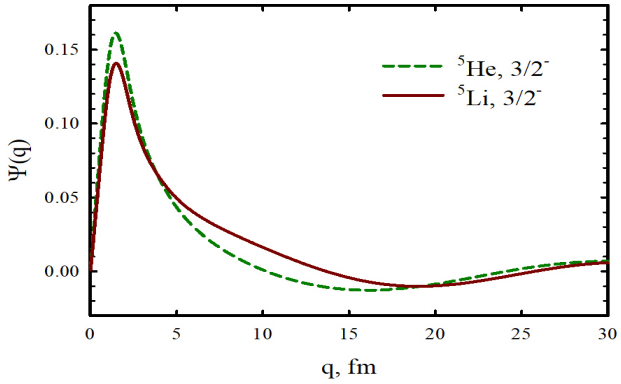
1-суретте ^{5}He және ^{5}Li ядроларының шашырау қималары бейнеленген. Суреттен шашырау қимасының күрт өсуін байқауа болады, бұл белгілі бір энергияның мәнінде резонанс бар екендігінің көрінісін білдіреді. Сонымен қатар суреттерден $\frac{1}{2}^{-}$ күйінің резонансы негізгі күйдің $\frac{3}{2}^{-}$ резонансына қарағанда кеңірек екендігін байқауға болады.



Сурет 1. а) $\alpha + {}^{1}_{0}n \rightarrow {}^{5}_{2}He$ реакциясының шашырау қималары.
б) $\alpha + {}^{1}_{1}p \rightarrow {}^{5}_{3}Li$ реакциясының шашырау қималары.

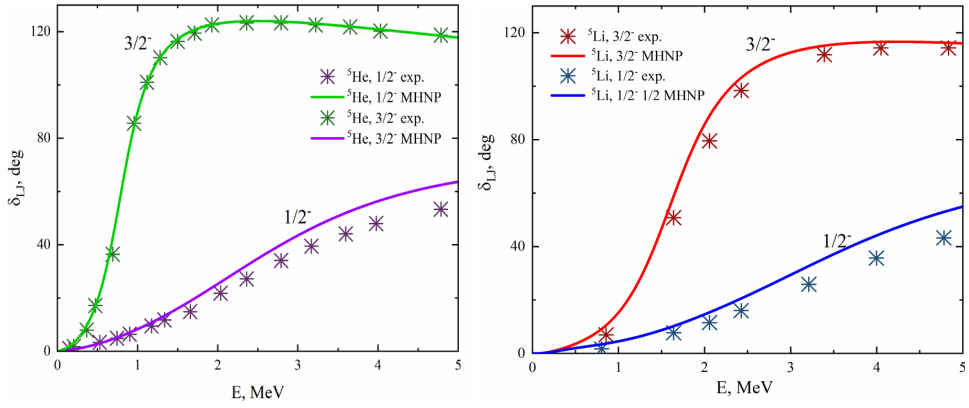
2-суретте бейнеленген ^{5}He және ^{5}Li ядроларының негізгі күйлерінің толқындық функциялары өте аз кластераралық қашықтықта түйіннің бар екендігін көрсетеді. Негізгі күйдің толқындық функциясы қарапайым екі бөлшектік кванттық

жүйелерде түйін құрамайды, ал екі-кластерлік жүйелерде Паули принципінің әсері негізінде олар сөзсіз пайда болады. Мұндай түйіндердің бар болуы ядролардың кластерлік құрылымына тән көрініс болып табылады және өз кезегінде толқындық функцияның нуклондар бойынша антисимметризациялау қажеттілігін көрсетеді.



Сурет 2. ^{5}He және ^{5}Li ядроларының негізгі күйлерінің координаталық кеңістіктегі $J^\pi = \frac{1}{2}^-$ толқындық функциялары.

Сонымен қатар ^{5}He и ^{5}Li ядроларының фазалық ығысулары, яғни шашырау бұрыштарының шашырау энергияларынан тәуелділігі қарастырылды. Альфа-бөлшек пен нейтрондардың серпімді шашырауларының фазалық ығысулары 3(а)-суретте келтірілген. Аналогиялық түрде альфа-бөлшек пен протондардың серпімді шашырауларының фазалық ығысулары 3(б)-суретте келтірілген. Бұл графиктерден $J^\pi = \frac{1}{2}^-$ және $J^\pi = \frac{1}{2}^-$ күйлерінің фазалық ығысулары толық орбиталық моменттің L=1 мәнінде резонанстық сипатқа ие екендігі көрініп тұр.



а) б)

Сурет 3. а) $\frac{3}{2}^-$ және $\frac{3}{2}^-$ кванттық сандарымен алынған ^5_2He ядросының б) $\frac{3}{2}^-$ және $\frac{3}{2}^-$ кванттық сандарымен алынған ^5_3Li ядросының MHNP потенциалын қолдану арқылы AV RGM әдісімен алынған фазалық ығысуларының (δ) шашырау энергиясынан (E) тәуелділігі.

CC BY NC

Резонанс байқалатын күйлердің резонанс параметрлері, яғни Е резонанс энергиясы мен Г резонанс ені резонансты топтар әдісінің алгебралық нұсқасы (AV RGM) арқылы есептелінді. Нуклон-нуклондық потенциал ретінде модификацияланған Хасегава-Нагата потенциалы (MHNP) таңдап алынды және есептеу нәтижелері келесі мәліметтерді көрсетті:

^{5}He ядросында $\frac{3}{2}^-$ күйі үшін резонанс энергиясының шамасы $E = 0{,}78$ МэВ құрайды және резонанс енінің шамасы $\Gamma = 0{,}68$ МэВ құрайды. Ал $\frac{1}{2}^-$ күйі үшін резонанс энергиясының шамасы $E = 2{,}12$ МэВ құрайды және резонанс енінің шамасы $\Gamma = 5{,}96$ МэВ құрайды.

^{5}Li ядросында $\frac{3}{2}^-$ күйі үшін резонанс энергиясының шамасы $E = 1{,}60$ МэВ құрайды және резонанс енінің шамасы $\Gamma = 1{,}32$ МэВ құрайды. Ал $\frac{1}{2}^-$ күйі үшін резонанс энергиясының шамасы $E = 3{,}00$ МэВ құрайды және резонанс енінің шамасы $\Gamma = 7{,}30$ МэВ құрайды.

Бұл әдіспен алынған мәндер тәжірибелік мәндермен салыстырылды, сонымен қатар AV RGM (Filippov & Okhrimenko, 1981) әдісі арқылы алынған резонанс параметрлері және тәжірибелік мәндер 2-кестеде келтірілген.

2-кестеден AV RGM әдісі арқылы есептелінген резонанс параметрлері тәжірибелік мәндерге жақын екендігі көрініп тұр, бұл салыстыруды 3-суретте бейнеленген графиктен байқауға болады.

Кесте 2 – ^{5}He және ^{5}Li ядролары үшін MHNP потенциалын қолдану арқылы AV RGM әдісімен алынған резонанс параметрлерінің мәндері. Салыстыру үшін (Tilley et al., 2002) жұмысынан тәжірибелік мәндер келтірілген.

Ядро	J^π	L	S	AV RGM (Filippov & Okhrimenko, 1981) MHNP (Hasegawa, 1971)		Тәжірибе (Tilley et al., 2002)	
				Е, МэВ	Г, МэВ	Е, МэВ	Г, МэВ
^{5}He	$\frac{3}{2}^-$	1	$\frac{1}{2}$	0,78	0,68	0,80	0,65
	$\frac{1}{2}^-$	1	$\frac{1}{2}$	2,12	5,96	2,07	5,57
^{5}Li	$\frac{3}{2}^-$	1	$\frac{1}{2}$	1,60	1,32	1,69	1,23
	$\frac{1}{2}^-$	1	$\frac{1}{2}$	3,00	7,30	3,18	6,60

MHNP потенциалын қолдану арқылы есептелген AV RGM әдісінің көрсеткішінің тәжірибелік мәндермен сәйкес келуі таңдап алынған потенциалдың ерекшелігіне байланысты. Модификацияланған Хасегава-Нагата потенциалы әсерлесудің үш түрін ескереді: кулондық әсерлесу, центрлік әсерлесу және спин-орбиталық әсерлесу.

Суреттерден көріп тұрғанымыздай ^{5}He және ^{5}Li айналық ядроларының резонансты күйлерін зерттеу зарядтық айырмашылықтың әсерін және

құрылымдық үйлесімін көрсетуге мүмкіндік береді. ^{5}Li ядросында ^{5}He ядросына қарағанда протондар саны көбірек болғандықтан, кулондық әсерлесудің әсерінен резонанстық күйдің энергиясы мен енінің ығысуы көрініс табады (Duisenbay et al., 2020; Kalzhigitov et al., 2021).

Зерттеу нәтижелері көрсеткендей, 2-кестеден ^{5}Li ядросының резонанс энергиялары көбірек мәнге ие, сонымен қатар резонанс ендері аса кең болып табылады. Бұл нәтиже зарядтық симметрияның бұзылуы туралы түсінікті және кулондық әсердің маңыздылығы туралы түсінікті толықтырады. Айналық ядроларға салыстыру жүргізу арқылы ядролық күштердің табиғатына тереңірек үңіліп, олардың зарядтан тәуелділік ерекшеліктерін түсінуге болады (Kalzhigitov et al., 2023; Odsuren et al., 2019).

Қорытынды. Бұл жұмыста резонансты топтар әдісінің алгебралық нұсқасын негізге ала отырып ^{5}He және ^{5}Li жеңіл ядроларының резонансты күйлері зерттелінді. Есептеулер екікластерлік микроскопиялық модель аясында модификацияланған Хасегава-Нагата потенциалы арқылы жүзеге асырылды. Зерттеу нәтижесінде негізгі күйдегі ^{5}He ядросының резонанс энергиясы 0,78 МэВ, ал ені 0,68 МэВ болатыны анықталды. Сәйкесінше ^{5}Li ядросының параметрлері 1,60 МэВ және 1,32 МэВ құрайтыны белгілі болды. Бұл нәтижелер тәжірибелік мәндермен жақсы үйлесім таба білді.

Микроскопиялық екікластерлік жүйені зерттеуге қолданылған - резонансты топтар әдісінің алгебралық нұсқасы, резонанс параметрлерін нақты сипаттайды және ядролық құрылымды зерттеуде жақсы құрал болып табылады деп қорытынды жасауға болады. Бұл әдіс жеңіл ядролардың қасиеттерін жақсы сипаттау арқылы, жұлдыздардағы нуклиеосинтезді терең түсінуге жол ашады.

References

Duisenbay A.D., Kalzhigitov N., Kato K., Kurmangaliyeva V.O., Takibayev N., Vasilevsky V.S. (2020) Effects of the Coulomb interaction on parameters of resonance states in mirror three-cluster nuclei. Nuclear Physics A, 996. https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2020.121692 (in Eng.).

Filippov G.F. (1981) On taking into account correct asymptotic behavior in oscillator-basis expansions. Soviet Journal of Nuclear Physics, 33. – P. 488-489. (in Eng.).

Filippov G.F., Okhrimenko I. (1981) Use of an oscillator basis for solving continuum problems. Soviet Journal of Nuclear Physics, 33. – P. 480-484. (in Eng.).

Hasegawa A. (1971) Ground state of ^{6}Li. Progress of Theoretical Physics, 45(6). – P. 1786-1807. DOI: https://doi.org/10.1143/PTP.45.1786 (in Eng.).

Horiuchi H., Beck C. (2010) Clusters in nuclei. Lecture Notes in Physics, 818. – P. 57. DOI: 10.1007/978-3-642-13899-7_2 (in Eng.).

Ikeda K., Myo T., Kato K., Toki H., Beck C. (2010) Clusters in nuclei. Lecture Notes in Physics, 818. – P. 165. DOI: 10.1007/978-3-642-13899-7_5 (in Eng.).

Kalzhigitov N., Kurmangaliyeva V.O., Takibayev N.Zh., Vasilevsky V.S. (2023) Resonance structure of 8Be within the two-cluster resonating group method. Ukrainian Journal of Physics, 68(1). – P. 3-18. DOI: https://doi.org/10.15407/ujpe68.1.3 (in Eng.).

Kalzhigitov N., Vasilevsky V.S., Takibayev N.Zh., Kurmangaliyeva V.O. (2021) Effect of cluster polarization on the spectrum of the 6Li nucleus. Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement, 14. – P. 711-717. DOI: https://doi.org/10.5506/APHYSPOLBSUPP.14.711 (in Eng.).

Lashko Yu.A., Filippov G.F., Vasilevsky V.S. (2015) Dynamics of two-cluster systems in phase space. Nuclear Physics A, 941. – P. 121-144. DOI: https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2015.06.006 (in Eng.).

Odsuren M., Khuukhenkhuu G., Kato K. (2019) Structure of continuum states of A = 5 mirror nuclei in the complex scaling method. Acta Physica Polonica B, 50(3). – P. 417-424. DOI: https://doi.org/10.5506/aphyspolb.50.549 (in Eng.).

Saito S. (1969) Interaction between clusters and Pauli principle. Progress of Theoretical Physics, 41(3). – P. 705-722. DOI: https://doi.org/10.1143/PTP.41.705 (in Eng.).

Tang Y.C., Lemere M., Thompson D.R. (1978) Resonating-group method for nuclear many-body problems. Physics Reports, 47. – P. 167-223. DOI: https://doi.org/10.1016/0370-1573(78)90175-8 (in Eng.).

Tilley D.R., Cheves C.M., Godwin J.L., Hale G.M., Hofmann H.M., Kelley J.H., Sheu C.G., Weller H.R. (2002) Energy levels of light nuclei A = 5, 6, 7. Nuclear Physics A, 708. – P. 3-163. DOI: https://doi.org/10.1016/S0375-9474(02)00597-3 (in Eng.).

Wheeler J.A. (1937) On the mathematical description of light nuclei by the method of resonating group structure. Physical Review, 52. – P. 1107-1122. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.1107 (in Eng.).

Wildermuth K., Tang Y.C. (1977) A unified theory of the nucleus. Braunschweig: Vieweg Verlag. DOl: 10.1007/978-3-322-85255-7 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 46–64

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.404

UDC: 669.018.4; 621.365.5
IRSTI: 53.37.19; 53.37.21; 31.29.00

©Chokin K.[1], Otunchi Ye.[1], Kozhahmetova A.[2], Kasenova A.[2], Shongalova A.[1,3]*, 2026.
[1]Institute of Physics and Technology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan;
[2]Kazakh Agrotechnical University named after S. Seifullin, Astana, Kazakhstan;
[3]Pennsylvania State University, State College, United States of America.
*E-mail: shongalova.aigul@gmail.com

DEVELOPMENT AND TESTING OF A LABORATORY PYROMETALLURGICAL INSTALLATION FOR RECYCLING LITHIUM-ION BATTERIES

Chokin Kanat — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Almaty, Kazakhstan, E-mail: k.chokin@satbayev.university, https://orcid.org/0000-0002-9516-5400;
Otunchi Yedil — master of technical sciences, engineer, Institute of Physics and technology, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: e.otunchi@satbayev.university, https://orcid.org/0009-0006-4361-8099;
Kozhahmetova Aigul — Candidate of Law, Associate Professor, Kazakh Agrotechnical University named after S. Seifullin, Astana, Kazakhstan,
E-mail: a.kozhakhmetova@kazatu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-2813-1745;
Kasenova Asiya — Candidate of Economic Sciences, Associate Professor, Kazakh Agrotechnical University named after S. Seifullin, Astana, Kazakhstan,
E-mail: as.kasenova@kazatu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-0853-6235**;**
Shongalova Aigul — PhD, IPT senior researcher, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: shongalova.aigul@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-7352-9007.

Abstract. The development of a laboratory pyrometallurgical installation for recycling lithium-ion batteries (LIBs) represents a highly relevant research direction driven by the rapid expansion of battery production and, consequently, the growing volume of waste containing both valuable and hazardous components. This article examines the design, operating principles, and experimental validation of the installation created to model high-temperature processes involved in the thermal treatment of LIBs. The relevance of the study is supported by global trends: by 2030, the number of electric vehicles is expected to reach 140 million, which will result in millions of tons of spent batteries containing organic solvents, graphite, metal foils, and transition-metal oxides. Such waste requires safe and efficient recycling methods that enable the recovery of valuable materials while minimizing environmental risks.

The article provides a detailed description of the restored 10 kW, 30 kHz induction furnace equipped with a new water-cooled inductor and a graphite crucible. Calculations of crucible wall thickness based on skin-depth considerations are presented, along with the rationale for selecting materials for the thermal insulation assembly. The gas-cleaning system, consisting of a gas cooler and a wet scrubber designed to capture and neutralize pyrolysis and hydrolysis products – including HF and organic vapors – is described. Special attention is given to ensuring the tightness of the reaction chamber and maintaining an inert atmosphere, which is essential for preventing metal oxidation and degradation of the graphite crucible.

The experimental section includes verification of pyrometric temperature control accuracy and preliminary tests on the reduction of iron oxide (Fe_2O_3) at 1500 °C. The formation of metallic iron droplets confirms the correct operation of the installation and the effectiveness of the reduction processes. The article also discusses engineering solutions that ensure safe operation, such as a scissor-type lifting mechanism and an ejector-based air pump for creating vacuum and removing gases.

The developed installation has demonstrated its operability and suitability for studying pyrometallurgical recycling processes of LIBs, optimizing technological parameters, and developing environmentally safe methods for battery waste treatment. It also provides a foundation for further fundamental and applied research aimed at improving metal recovery efficiency and reducing the environmental impact of battery recycling.

Keywords: lithium-ion batteries, pyrometallurgical methods, pyrolysis, hydrolysis, high-temperature processing

Financing. *The work was supported by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan under the program BR28712683 "Development of technology to reduce energy consumption and waste without compromising efficiency in the processing of lithium-ion batteries".*

For citations: *Chokin K., Otunchi Ye., Kozhahmetova A., Kasenova A., Shongalova A. Development and Testing of a Laboratory Pyrometallurgical Installation for Recycling Lithium-Ion Batteries. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 46–64. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.404*

©Чокин К.[1], Отунчи Е.[1], Кожахметова А.[2], Касенова А.[2], Шонғалова А.[1,3]*, 2026.
[1]Физика-техникалық институты, Satbayev University, Алматы, Қазақстан;
[2]С. Сейфуллин атындағы Қазақ агротехникалық зерттеу университеті, Астана, Қазақстан;
[3]The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Америка Құрама Штаттары.
*E-mail: shongalova.aigul@gmail.com

ЛИТИЙ-ИОНДЫ АККУМУЛЯТОРЛАРДЫ ҚАЙТА ӨҢДЕУГЕ АРНАЛҒАН ЗЕРТХАНАЛЫҚ ПИРОМЕТАЛЛУРГИЯЛЫҚ ҚОНДЫРҒЫНЫ ӘЗІРЛЕУ ЖӘНЕ СЫНАУ

Чокин Канат — физика-математика ғылымдарының докторы, аға ғылыми қызметкер, Алматы, Қазақстан,
E-mail: k.chokin@satbayev.university, https://orcid.org/0000-0002-9516-5400;
Отунчи Еділ — техника ғылымдарының магистрі, инженер, Алматы, Қазақстан,
E-mail: e.otunchi@satbayev.university, https://orcid.org/0009-0006-4361-8099;
Кожахметова Айгуль — заң ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор (доцент), С. Сейфуллин атындағы Қазақ агротехникалық зерттеу университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: a.kozhakhmetova@kazatu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-2813-1745;
Касенова Асия — экономика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, С. Сейфуллин атындағы Қазақ агротехникалық зерттеу университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: as.kasenova@kazatu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-0853-6235**;**
Шонғалова Айгуль — PhD, ФТИ аға ғылыми қызметкер, Алматы, Қазақстан,
E-mail: shongalova.aigul@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-7352-9007.

Аннотация. Литий-ионды аккумуляторларды (ЛИА) қайта өңдеуге арналған зертханалық пирометаллургиялық қондырғыны әзірлеу аккумулятор өндірісінің қарқынды өсуіне және құрамында әрі құнды, әрі қауіпті компоненттері бар қалдықтардың көлемінің артуына байланысты өзекті ғылыми бағыт болып табылады. Бұл мақалада ЛИА-ны жоғары температурада термиялық өңдеу процестерін модельдеуге арналған қондырғының құрылымы, жұмыс принциптері және оның эксперименттік тексеру нәтижелері қарастырылады. Зерттеудің маңыздылығы жаһандық үрдістермен расталады: 2030 жылға қарай әлемде 140 миллионға жуық электр көлігі пайдаланылатыны болжануда, бұл органикалық еріткіштерді, графитті, металл фольгаларын және өтпелі металл оксидтерін қамтитын миллиондаған тонна аккумулятор қалдықтарының пайда болуына әкеледі. Мұндай қалдықтарды қауіпсіз әрі тиімді қайта өңдеу, бағалы материалдарды қалпына келтіру және экологиялық тәуекелдерді азайту үшін қажет.

Мақалада қуаты 10 кВт, жиілігі 30 кГц болатын, жаңартылып, жаңа су салқындатқыш индуктормен және графит тигельмен жабдықталған индукциялық пештің құрылымы егжей-тегжейлі сипатталған. Тигель қабырғасының қалыңдығын скин-қабат тереңдігін ескере отырып есептеу нәтижелері және температураға төзімді қоршау материалдарын таңдаудың негіздемесі келтірілген. Пиролиз және гидролиз өнімдерін, соның ішінде HF пен органикалық буларды

ұстауға және бейтараптандыруға арналған газ салқындатқышы мен дымқыл скрубберден тұратын газ тазарту жүйесі сипатталады. Реакциялық аймақтың герметикалығын қамтамасыз ету және инертті атмосфераны сақтау металдардың тотығуын және графит тигельдің бұзылуын болдырмау үшін аса маңызды екені атап өтіледі.

Эксперименттік бөлімде пирометриялық бақылаудың дәлдігін тексеру және 1500 °C температурада Fe_2O_3 темір оксидін тотықсыздандыру бойынша алдын ала тәжірибелер келтірілген. Металл темірдің түзілуі қондырғының дұрыс жұмыс істейтінін және тотықсыздану процестерінің тиімділігін дәлелдейді. Сондай-ақ, жабдықтың қауіпсіз жұмыс істеуін қамтамасыз ететін құрылымдық шешімдер, соның ішінде қайшы типті көтеру механизмі және эжекторлық ауа сорғысы газдары сипатталған.

Әзірленген қондырғы ЛИА-ны пирометаллургиялық қайта өңдеу процестерін зерттеуге, технологиялық режимдерді оңтайландыруға және аккумулятор қалдықтарын экологиялық қауіпсіз кәдеге жарату әдістерін әзірлеуге жарамдылығын көрсетті. Сонымен қатар, ол металдарды тиімді алу және қайта өңдеу кезіндегі экологиялық жүктемені азайтуға бағытталған іргелі және қолданбалы зерттеулерді жалғастыруға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: литий-ионды аккумуляторлар, пирометаллургиялық әдістер, пиролиз, гидролиз, жоғары температураны қайта өңдеу

©Чокин К.[1], Отунчи Е.[1], Кожахметова А.[2], Касенова А.[2], Шонғалова А.[1,3]*, 2026.

[1]Физико-технический институт, Satbayev University, Алматы, Казахстан;
[2]Казахский агротехнический исследовательский университет имени С. Сейфуллина;
[3]The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Соединенные Штаты Америки.
*E-mail: shongalova.aigul@gmail.com

РАЗРАБОТКА И ИСПЫТАНИЯ ЛАБОРАТОРНОЙ ПИРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКОЙ УСТАНОВКИ ДЛЯ ПЕРЕРАБОТКИ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Чокин Канат — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Алматы, Казахстан,
E-mail: k.chokin@satbayev.university, https://orcid.org/0000-0002-9516-5400;
Отунчи Еділ — магистр технических наук, инженер, Алматы, Казахстан,
E-mail: e.otunchi@satbayev.university, https://orcid.org/0009-0006-4361-8099;
Кожахметова Айгуль — кандидат юридических наук, ассоциированный профессор (доцент), Казахский агротехнический исследовательский университет имени С. Сейфуллина, Астана, Казахстан,
E-mail: a.kozhakhmetova@kazatu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-2813-1745;
Касенова Асия — кандидат экономических наук, ассоциированный профессор, Казахский агротехнический исследовательский университет имени С. Сейфуллина, Астана, Казахстан,
E-mail: as.kasenova@kazatu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-0853-6235;

Шоңғалова Айгуль — PhD, старший научный сотрудник ФТИ, Алматы, Казахстан,
E-mail: shongalova.aigul@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-7352-9007.

Аннотация. Разработка лабораторной пирометаллургической установки для переработки литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) представляет собой актуальное направление исследований, обусловленное стремительным ростом производства аккумуляторных систем и, как следствие, увеличением объемов отходов, содержащих ценные и одновременно опасные компоненты. В статье рассматриваются конструкция, принципы работы и результаты экспериментальной проверки созданной установки, предназначенной для моделирования высокотемпературных процессов термической переработки ЛИА. Актуальность исследования подтверждается глобальными тенденциями: по прогнозам, к 2030 году количество электромобилей достигнет 140 млн, что приведет к образованию миллионов тонн отработанных батарей, содержащих органические растворители, графит, металлические фольги и оксиды переходных металлов. Такие отходы требуют безопасной и эффективной переработки, позволяющей извлекать ценные материалы и минимизировать экологические риски. В статье подробно описана конструкция восстановленной индукционной печи мощностью 10 кВт и частотой 30 кГц, оснащенной новым водоохлаждаемым индуктором и графитовым тиглем. Представлены расчеты толщины тигля с учетом глубины скин-слоя, а также особенности выбора материалов для термостойкого окружения. Описана система газоочистки, включающая охладитель газов и мокрый скруббер, предназначенные для улавливания и нейтрализации продуктов пиролиза и гидролиза, включая HF и органические пары. Особое внимание уделено обеспечению герметичности реакционной зоны и поддержанию инертной атмосферы, что критически важно для предотвращения окисления металлов и разрушения графитового тигля. Экспериментальная часть включает тестирование точности пирометрического контроля и проведение предварительных опытов по восстановлению оксида железа Fe_2O_3 при 1500 °C. Образование металлических шариков железа подтверждает корректность работы установки и эффективность восстановительных процессов. Также описаны конструктивные решения, обеспечивающие безопасную эксплуатацию оборудования, включая подъемный механизм ножничного типа и эжекторный воздушный насос для создания разрежения и отвода газов. Созданная установка доказала свою работоспособность и пригодность для исследования пирометаллургических процессов переработки ЛИА, оптимизации технологических режимов и разработки экологически безопасных методов утилизации аккумуляторных отходов. Она открывает возможности для дальнейших фундаментальных и прикладных исследований, направленных на повышение эффективности извлечения металлов и снижение экологической нагрузки при переработке аккумуляторных батарей.

Ключевые слова: литий-ионные аккумуляторы, пирометаллургические методы, пиролиз, гидролиз, высокотемпературная переработка

Введение. В настоящее время изменение климата и злоупотребление природными ресурсами стали серьезными глобальными проблемами, которые нельзя игнорировать. Рост возобновляемой энергетики, электромобильного транспорта и портативных устройств привёл к стремительному увеличению производства литий-ионных аккумуляторов. Поскольку срок службы таких батарей обычно составляет 10–15 лет, в ближайшие годы ожидается значительный рост объёма отработанных ЛИА (Masias et.al., 2021) В будущем ожидается большой поток электромобилей с истекшим сроком службы (EOL): по прогнозам, к 2030 году 140 миллионов электромобилей будут находиться в эксплуатации по всему миру.

Во всём мире суммарный объём отходов в виде отработанных батарей достигает примерно 11 миллионов тонн (Thompson et.al., 2020). Если такие отработанные батареи не могут быть использованы повторно для хранения энергии второго срока службы, что приводит к задержке их утилизации, они фактически превращаются в опасные отходы, которые содержат легковоспламеняющиеся органические растворители, полимерные слои, графит, металлическую фольгу и оксиды переходных металлов, таких как Ni, Co, Mn, Fe, в дополнение к ионам лития (Meshram et.al., 2020). Хотя такой поток отработанных отходов может представлять серьезную проблему в области обращения с отходами, его можно превратить в хорошую возможность для вторичной переработки, что превратит отработанные отходы в ценный источник полезных материалов (Harper et.al., 2019). Существует множество движущих сил для вторичной переработки LIB, включая экологические, экономические и стратегические вопросы. Фактически, если предотвратить утилизацию опасных материалов, таких как легковоспламеняющиеся растворители электролита и канцерогенные металлы, такие как Ni и Co, можно также утилизировать материалы с высокой рыночной ценой, что делает истекшим сроком службы ЛИА особенно привлекательными с экономической точки зрения (An, 2019). Тем не менее, основная причина, стимулирующая переработку ЛИА, связана с сырьем, используемым в технологии ЛИА, среди которого Li, Co и натуральный графит, который включен в список важнейших сырьевых материалов на 2020 год (Beatriz et.al., 2018). Это означает, что эти материалы сочетают в себе высокую важность для экономики в плане технологического развития и повышенный риск поставок (Olivetti et.al., 2017). Однако извлечение таких ценных и критически важных материалов сопряжено с технологическими трудностями, поскольку ЛИА не стандартизированы ни по химическому составу катодов, ни по геометрическим формам и размерам, что приводит к чрезвычайно сложному набору материалов, которые сильно перемешаны друг с другом, что делает переработку ЛИА открытым процессом.

В настоящее время наиболее распространенным способом переработки аккумуляторных батарей являются процессы, основанные на пирометаллургии, которые заключаются в плавлении всей батареи при высоких температурах для получения сплава ценных металлов, таких как Ni, Co, Cu, который может быть дополнительно переработан в соли металлов высокой чистоты на

гидрометаллургических стадиях (Assefi et.al., 2020) однако литий попадает в шлак, который имеет малую экономическую ценность, так что литий не попадает обратно в аккумуляторную цепь. Метод вторичной переработки на основе гидрометаллургии является сравнительно новой стратегией переработки (хотя в некоторых случаях уже применяется в промышленности) и включает в себя выщелачивание, кристаллизацию, селективное осаждение и экстракцию растворителями для извлечения высококачественных однофазных солей металлов, особенно солей Co, Ni и Li. Следует отметить, что среди этих способов переработки в последнее время на исследовательском уровне изучаются “более экологичные” варианты некоторых операций.

Разработка лабораторной пирометеллургической установки. Пирометаллургические методы переработки ЛИА являются одними из наиболее перспективных направлений, поскольку обеспечивают простоту технологического процесса, возможность переработки смешанных отходов и высокую степень извлечения металлов в сплав. Однако промышленное оборудование для таких процессов дорогостоящее и требует высокой энергоёмкости. Поэтому создание лабораторной установки с управляемыми параметрами нагрева имеет важное значение для проведения исследовательских работ, моделирования термохимических процессов и отработки технологических режимов.

Пирометаллургическая обработка основана на высокотемпературном разложении органических составляющих и восстановлении металлических оксидов при воздействии интенсивного тепла.

Происходят различные химические реакции.

1. Разложение электролитной соли

$$LiPF_6 \rightarrow LiF + PF_5 \qquad (1)$$

Гидролиз PF_5 (в присутствии влаги) даёт фосфорсодержащие окислы и HF:

$$PF_5 + H_2O \rightarrow POF_3 + 2HF \qquad (2)$$

Образование HF – одна из ключевых экологических проблем при термической переработке ЛИА, требует применения щелочных скрубберов.

2. Пиролиз органических растворителей

Органические карбонаты (например, этиленкарбонат EC, диметилкарбонат и др.) при нагреве разлагаются с образованием CO, CO_2 и углеводородов:

$$(\text{органическая карбонатная молекула}) \xrightarrow{\Delta} \xrightarrow{\Delta} CO + CO_2 + \text{углеводороды} + \cdots \qquad (3)$$

Продукты пиролиза – VOC, CO, CO_2 и смолы – улавливаются системой газоочистки и конденсации.

CC BY NC

3. Окисление/сгорание углерода (анодный графит, восстановитель). При воздействии кислорода:

$$C + O_2 \rightarrow CO_2 \quad (4)$$

При частичном окислении (недостаток кислорода):

$$2C + O_2 \rightarrow 2CO \quad (5)$$

CO и CO_2 участвуют в восстановительных и окислительных балансах печи; CO может служить восстановителем оксидов.

4. Восстановление оксидов металлов углеродом

Для оксида кобальта:

$$CoO + C \rightarrow Co + CO \quad (6)$$

Для оксида никеля:

$$NiO + C \rightarrow Ni + CO \quad (7)$$

Для оксида железа

$$Fe_2O_3 + 3C \rightarrow 2Fe + 3CO \quad (8)$$

5. Литиевые соединения часто переходят в оксид/карбонат:

$$2Li + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow Li_2O \quad (9)$$

Далее при наличии CO_2 возможна карбонация:

$$Li_2O + CO_2 \rightarrow Li_2CO_3 \quad (10)$$

В пиросхемах литий обычно концентрируется в шлаке в виде Li_2O/Li_2CO_3 и затем извлекается гидрометаллургическими методами.

6. Обобщённые реакции образования силикатных/алюмосиликатных шлаков (пример для CaO и SiO_2):

$$CaO + SiO_2 \rightarrow CaSiO_3 \quad (11)$$

Состав шлака определяется оксидами присутствующих неметаллических компонентов и влиянием флюсов. Шлак связывает Li и другие неметаллы.

7. Побочные реакции фторсодержащих соединений. Гидролиз продуктов PF_5 и фторорганики даёт HF:

$$PF_5 + H_2O \rightarrow POF_3 + 2HF \quad (12)$$

HF коррозионно активен и требует нейтрализации щёлочными растворами в скрубберах.

Выше представлены упрощённые стехиометрические схемы основных стадий, В реальном процессе одновременно идут десятки параллельных и последовательных реакций, а продукты пиролиза/восстановления зависят от состава шихты, атмосферы, температуры и времени выдержки. В результате образуется металлический сплав (в основном Ni–Co–Cu–Fe) и шлак, содержащий литий и алюминий. Основное преимущество пирометаллургии —технологическая простота и универсальность по составу исходного сырья (Zhang et.al., 2018). При температурах 700–1200 °C происходит разложение катодных материалов выделение кислорода и восстановление металлов (Yuan et.al., 2023).

Индукционный нагрев применяется для быстрого и равномерного прогрева шихты. По данным (Bermúdez et.al., 2025), (Davids et.al., 2024) использование индукционной плавки в графитовом тигле обеспечивает точный контроль температуры, минимизацию контакта расплава с воздухом и низкий уровень загрязнения. Индукционный нагрев основан на принципе электромагнитной индукции: переменное магнитное поле создаёт вихревые токи в проводнике, которые нагревают материал. Основные преимущества:

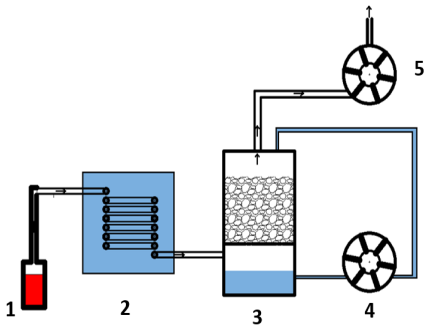
– высокая скорость нагрева и возможность тонкой настройки подводимой мощности;

– передача энергии к материалу осуществляется без прямого контакта;

– локализованный нагрев зоны обработки без использования внешних нагревательных элементов;

– возможность проведения процессов в контролируемой защитной атмосфере.

Ниже на рисунке 1 представлена схема изготовленной лабораторной пирометаллургической установки. Она состоит из следующих основных блоков.: индукционная печь с водяным охлаждением, нагревающая тигель 1, охладитель газов 2, мокрый скруббер 3, насосы для перекачки активной жидкости 4 и газов 5.



1 – графитовый тигель с образцом, 2 – охладитель газов, 3 – мокрый скруббер, 4 – насос для перекачки нейтрализующей жидкости, 5 – насос для откачки газов

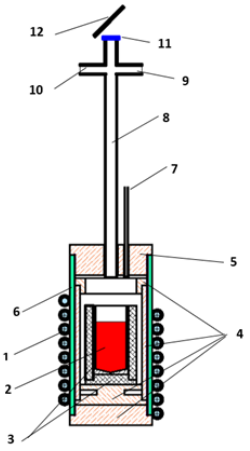
Рисунок 1 – Схема лабораторной установки пирометаллургической плавки ЛИА

CC BY NC

Процесс работы лабораторной установки: в индуктор печи помещается графитовый тигель в защитной оболочке 1. В тигле находится перерабатываемый материал. Тигель нагревается до температуры 1500-1600°С. Происходит реакция материала на температуру. В процессе этого выделяются различные газы, которые необходимо нейтрализовать и утилизировать (Metin et.al., 2025). Для этого они предварительно охлаждаются специальным устройством 2 и далее направляются в мокрый скруббер 3, где эти газы взаимодействуют с циркулирующим активным раствором и растворяются в нем. Раствор перекачивается химически стойким насосом 4. Откачка газов и все его движение по установке осуществляется насосом 5.

Ранее в Физико-техническом институте проводились работы по выплавке кремния методом алюмотермии в индукционных печах. Использовались большие печи с загрузкой более 30 кг. Для лабораторных работ нужны небольшие печи с загрузкой до 1 кг. В ходе поисковых мероприятий была обнаружена бывшая в эксплуатации индукционная печь мощностью 10 кВт и рабочей частотой 30 кГц, находившаяся в нерабочем состоянии. Диагностика показала выход из строя двух силовых полевых транзисторов, пробой двух конденсаторов, а также повреждение индуктора. После замены неисправных элементов силовой электроники и изготовления нового индуктора из медной трубки диаметром 10 мм установка была восстановлена. Проведённые тестовые испытания подтвердили её работоспособность и соответствие заявленным параметрам.

Для плавки ЛИА был изготовлен блок нагрева, один из вариантов которого показан на рисунке 2.



1-водоохлаждаемый индуктор, 2 – образец, 3 – графитовый тигель, 4 – элементы термостойкого окружения тигля, 5 – крышка, 6-кварцевый цилиндр, 7 – трубка для напуска инертных газов, 8 - трубка откачки газов, 9 – отвод для откачки газов, 10– отвод для подачи , 11 – стекло, 12- зеркало
Рисунок 2 – Блок нагрева индукционной печи

Водоохлаждаемый индуктор внутренним диаметром 85 мм и высотой 120мм изготовлен из медной трубки диаметром 10 мм. Он нагревает графитовый тигель.

При изготовлении тигля необходимо знать его толщину t, которую можно оценить по глубине скин-слоя δ. В данном случае при частоте 30 кГц.

$$\delta = \sqrt{\frac{2\rho}{\omega \mu_0 \mu_r}} \quad (13)$$

где ρ – удельное сопротивление (Ω·м); $\omega = 2\pi f$ – круговая частота (рад/с); $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$Гн/м – магнитная постоянная; μ_r – относительная магнитная проницаемость (для графита ≈1).

Скин-слой показывает глубину проникновения индукционно-индуцированных токов. При толщине стенки t значительно больше δ основная часть джоулева нагрева будет сосредоточена во внешнем слое толщиной ~δ. Расчеты показывают, что толщина скин-слоя при частоте 30 кГц для типичного графита равна 9-13мм при:

$$(\rho \sim 1 - 2\text{x}10^{-5}\ \Omega\text{м}) \quad (14)$$

Значит:

− тонкая стенка 3–6 мм будет прогреваться почти полностью, но может быть слабее механически и быстрее разрушаться при тепловых шоках;

− стенка ~9–15 мм окажется примерно в 1–1.5 скин-слоя — хорошие компромисс: большая часть нагрева близко к поверхности, но и достаточная прочность;

− толщина> 30 мм — токи в основном у поверхности, большая часть массы не участвует в нагреве, избыточный материал, ненужная теплоёмкость.

В распоряжении исследователей имелась графитовая трубка из старых запасов, диаметром 55 мм и толщиной стенки 10 мм. Проведённые расчёты показали, что данные геометрические параметры соответствуют требованиям, предъявляемым к заготовкам для изготовления тиглей, и обеспечивают их надлежащую термостойкость и механическую прочность. Из шамотного кирпича были сделаны элементы термостойкого окружения 4 и крышка 5. Для герметичности они были помещены в кварцевую трубку 6, которую обмотали тонким асбестовым шнуром, которую затем покрыли слоем высокотемпературного клея – жидкое стекло и замешанное в нем смесь высокотемпературной глины и тонкого порошка магнезии. Между графитовым тиглем и кварцем защитный слой из полосок шамота шириной 15–20 мм и толщиной 3 мм. Загрузка материала для плавки производится снятием крышки. Ниже, на рисунке 3, представлена фотография этой конструкции.

CC BY NC



1- крышка, 2 – кварцевая трубка, 3 – графитовый тигель
Рисунок 3 – Фотография изготовленного узла нагрева

Выбор графитового тигля обусловлен его высокой теплопроводностью, химической стойкостью и устойчивостью к температурным колебаниям. При частоте 30 кГц нагрев, в основном, сосредоточен в стенках тигля, что обеспечивает мягкий и равномерный прогрев шихты.

Для предотвращения окисления графита внутренняя камера должна быть герметичной. По данным (Wang et.al., 2022), утечка воздуха даже на уровне 1–2% приводит к потере до 15% массы тигля за один цикл. Поэтому эффективное уплотнение и газовая защита — ключевой элемент конструкции. Между крышкой и герметичным нагреваемым кварцевым стаканом предусмотрена асбестовая прокладка, а также организация поддув нейтральных газов (аргон, азот) в пространство нагрева.

Узел нагрева является важным элементом пирометрической установки. Необходимо выбрать лучшую конструкцию. Для этого был изготовлен второй вариант термостойкого стакана, который состоял из вырезанных из шамотного кирпича колец, которые склеивали отмеченным выше температурным клеем. Снаружи шамотный стакан обматывался тонким слоем стеклоткани, поверх которого наносился высокотемпературный клей. Ниже на рисунке 4 показана данная конструкция.



1- крышка, 2 – шамотный стакан, 3 – графитовый тигель
Рисунок 4 – Фотография изготовленного второго варианта узла нагрева

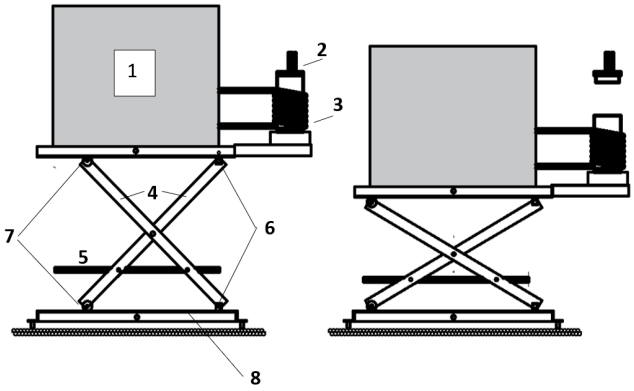
При переработке аккумуляторной массы особое внимание уделяется контролю атмосферы. Присутствие кислорода приводит к окислению восстановленных металлов, поэтому используется инертный газ (аргон, азот) или вакуум. В некоторых работах (Meng et.al., 2025) применяется восстановительная атмосфера CO/CO_2 для регулирования потенциала среды. Подача инертных газов производится через трубку 7 (рисунок 2). Откачка образовавшихся в процессе нагрева и плавки газов происходит через трубку 8 (рисунок 2), которая заканчивается тройником. Один отвод используется для вывода газов, через другой отвод можно подавать, например, кислород. Если в среде откачиваемых газов присутствуют атомы лития, то при взаимодействии их с кислородом образуются окислы, которые можно осадить и извлечь. В проведенных экспериментах этот отвод использовался для контроля давления в этой точке системы, регулируя скорости подачи инертных газов в реакционный объем и скорости откачки. Если это давление близко давлению окружающей атмосферы, то условия подсоса внешнего воздуха сводятся к минимуму. Третий отвод служит для контроля температуры. Он закрыт стеклом, а за ним установлено зеркало. С помощью оптического пирометра можно измерять температуру непосредственно в реакционной области. Известно, что это сделать термопарой при индукционном нагреве невозможно. На рисунке 5 показана фотография блок нагрева индукционной печи.



Рисунок 5 – Фотография блока нагрева индукционной печи

Температура выходящих газов может быть высокой. Поэтому эти газы транспортируются до охлаждающего устройства посредством металлических трубок (рисунок 5). В связи с этим отводящая трубка 7 фиксируется достаточно жестко. Снятие крышки 5 можно производить только путем опускания вниз кварцевого стакана со всей системой нагрева. Для этого было спроектировано подъемное устройство ножничного типа, которое перемещает стол с находящейся на нем индукционной печью строго вертикально. Схема представлена на рисунке 6.

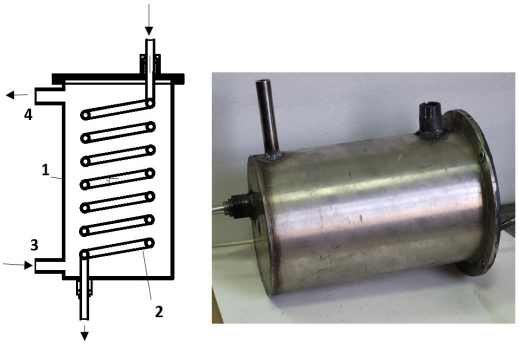
CC BY NC



1 – индукционная печь; 2 – крышка; 3 – нагревательный узел; 4 – ножничные рычаги; 5 – винт; 6 – неподвижные опоры с осью вращения; 7 – опорные катки; 8 – опорная рама
Рисунок 6 – Схема подъемного механизма ножничного типа для индукционной печи

Из рисунка 6 видно, что на опорной раме (8) установлены пары рычагов (4), посередине соединенные шарниром, которые служат ножками для расположенной сверху столешницы, с установленной на нее индукционной печи (1). С одной стороны, они крепятся к точкам вращения (6), с другой - оснащаются опорными роликами (7). При вращении винта 5 подвижные рычаги сходятся или расходятся. Соответственно индукционная печь поднимается, соединяя крышку 2 с нагревательным узлом 3, или опускается, разъединяя их. После того, как стол опустится, можно повернуть опорную плиту вместе с индукционной печью, а крышка остается на месте. Облегчается доступ к тиглю для загрузки или выгрузки материала.

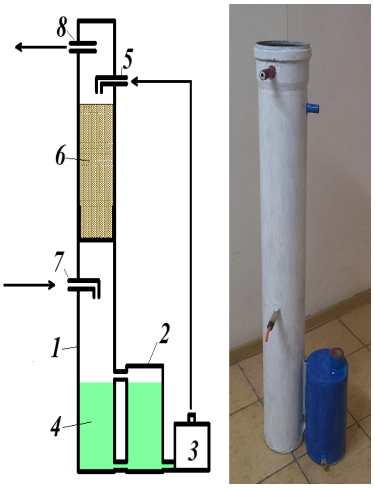
Охладитель газов. В процессе пирометаллургического передела ЛИА происходят реакции разложения и восстановления, сопровождаемые выделением вредных газов. Их необходимо удалять из объёма реакции и утилизировать. Температура этих газов может составлять 1500°С. Поэтому их предварительно нужно охлаждать. Для этого служит охладитель газов, показанный на рисунке 7.



1 – корпус, 2- медная трубка в форме спирали, 3- подача воды, 4 – слив воды
Рисунок 7 – Сборочный чертеж и фотография изготовленного охладителя газов

Охладитель газов (рисунок 7) состоит из медной трубки 12 мм, скрученной в форме спирали (2), помещенную в металлически корпус, в которой циркулирует холодная вода. Горячий газ, проходя через трубку, контактирует с ее поверхностью, охлаждаясь. Кольцевое движение газа улучшает его взаимодействие со стенкой трубки за счет центробежной силы.

Мокрый скруббер. Для поглощения вредных газов в лабораторной установке используется мокрый скруббер насадочного типа, показанный на рисунке 8. Он состоит из корпуса (1), дополнительного бака (2), насоса (3) для перекачки рабочего раствора (4), который подается в патрубок (5) и орошает наполнитель (6), входа (7) неочищенного газа и выход (8) очищенного газа.



1 – корпус скруббера; 2 – дополнительный бачок; 3 – насос; 4 – рабочий раствор; 5 – патрубок для подачи рабочего раствора; 6 – наполнитель; 7 – вход неочищенного газа; 8 – выход очищенного газа

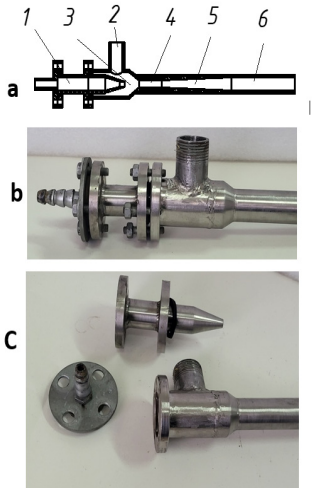
Рисунок 8 – Схема и изготовленный мокрый скруббер насадочного типа

В качестве насадки используются как крупные тела с определенной геометрией, так и насыпные массы, состоящие из мелких элементов. В нашем случае мы применили насадку из дробленного шамота. Наполнитель насыпают на решетку с мелкими отверстиями круглой формы или пересекающимися под прямым углом прутьями. В процессе работы рабочая жидкость разбрызгивается над наполнителем и далее стекает по телам насадки. Газ движется на встречу, взаимодействует с разветвленной поверхностью тел наполнителя, омытых рабочим раствором.

Рабочий раствор это, как правило, щёлочь 3–10% (NaOH или KOH), pH поддерживают около 9–11. Контакт с жидкой средой значительно ускоряет выделение примесей из газового потока. Многие вещества хорошо растворяются в воде или реагируют с активными добавками. Даже непродолжительный контакт с жидкостью приводит к образованию раствора или растворимых продуктов химической реакции. Так происходит очистка газа.

CC BY NC

Воздушный насос. Движение газа в установке от тигля до выхода из мокрого скруббера обусловлено разряжением, которое создает насос на конце цепочки аппаратов. Для лабораторной пирометаллургической установки был спроектирован и изготовлен струйный насос эжекторного типа, где нет движущихся частей. Он показан на рисунке 9. Сжатый воздух из институтской магистрали подается в эжекторное устройство (1), которое состоит из трубы с сужающимся соплом. Скорость воздуха в нем увеличивается и воздух поступает в смесительную камеру. Эжектор, работая по закону Бернулли, создаёт в сужающемся сечении пониженное давление, что вызывает подсос газа из скруббера через патрубок (2). В (3) два потока смешиваются и поступают в цилиндрическую трубку (4), которая переходит в диффузор (5) и далее в выходящую трубу (6).

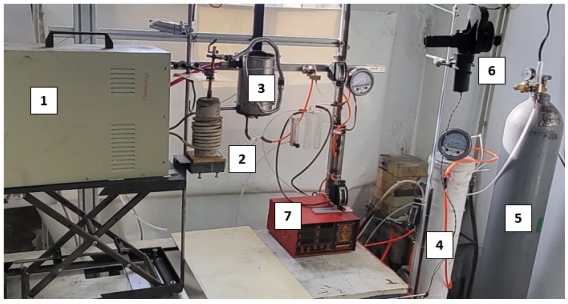


1 – эжектор; 2 – патрубок подачи газа и мокрого скруббера; 3 – смесительная камера; 4 – цилиндрическая трубка; 5 – диффузор; 6 – выходная труба
a) схема; b) фотографии изготовленного воздушного насоса в сборе; c) фотографии деталей воздушного насоса
Рисунок 9 – Схема, фотографии изготовленного воздушного насоса эжекторного типа в сборе и его деталей

Таким образом, эжектор передаёт энергию быстро движущегося первичного воздуха, поступающего из магистрали, всасываемому газу, который изначально имеет меньшую скорость. В количественном составе в выходящей трубе газа существенно меньше, чем воздуха. Важным преимуществом такого насоса для установки, в которой вырабатываются вредные газы в том, что если эти опасные для здоровья вещества не полностью поглощаются, то в этом насосе они смешиваются с воздухом и их концентрация на выходе устройства становиться ниже ПДК. Кроме того, выход насоса представляет собой достаточно тонкую трубу диаметром 21 мм. В наружной стенке лаборатории было просверлено отверстие такого диаметра и в нее ввели выходную трубу насоса. Таким путем все выходящие из установки газы, разбавленные до низкой концентрации, выпускаются наружу здания. Тем

самым обеспечивается безопасная среда внутри лаборатории. Скорость откачки или разряжение после мокрого скруббера легко регулируется подачей воздуха с магистрали. Разряжение может достигать -0,44 Бар.

В результате проведенных работ были изготовлены отдельные блоки лабораторной пирометаллургической установки и произведен ее монтаж. Собранная установка показана на рисунке 10.



1 – блок индукционного нагрева на регулируемом подъемнике; 2 – узел нагрева в индукторе; 3 – охладитель газов; 4 – мокрый скруббер; 5 – баллон с аргоном для напуска в область графитового тигля; 6 – пирометр; 7 – измеритель состава газов

Рисунок 10 – Фотография изготовленной лабораторной пирометаллургической установки

Отбор газов для анализа их компонентного состава с использованием газоанализатора (7) осуществлялся в точке после охладителя и до мокрого скруббера, что обеспечивало корректность измерений и предотвращало попадание аэрозольных примесей в измерительный тракт. После завершения сборки лабораторной установки были проведены её тестовые испытания при различных температурных режимах. В частности, была проверена точность пирометрического контроля температуры. В качестве эталонного материала использовались фрагменты листовой меди, температура плавления которой составляет 1085 °C. При нагреве тигля до 1100 °C по показаниям пирометра последующее вскрытие подтвердило плавление меди, что свидетельствует о корректности температурных измерений.

Были выполнены предварительные эксперименты по восстановлению оксида железа Fe_2O_3. В графитовый тигель загружались порошок оксида железа и кокс, после чего тигель нагревался до 1500°C. Выдержка при данной температуре в течение 30 минут обеспечила протекание восстановительных процессов. По результатам вскрытия тигля на его дне были обнаружены шарики чугуна, что подтверждает успешность восстановления и работоспособность установки в высокотемпературных условиях.

Заключение. Проведённая работа продемонстрировала успешную разработку и экспериментальную проверку лабораторной пирометаллургической установки, предназначенной для исследования высокотемпературных процессов переработки литий-ионных аккумуляторов. Созданная система, включающая

CC BY NC

индукционную печь мощностью 10 кВт, графитовый тигель, водоохлаждаемый индуктор, а также комплекс газоочистки с охладителем и мокрым скруббером, показала свою работоспособность и соответствие требованиям, предъявляемым к моделированию термохимических стадий переработки ЛИА. Проведённые тестовые испытания подтвердили точность температурного контроля и эффективность восстановительных процессов, что было продемонстрировано на примере восстановления оксида железа Fe_2O_3 при 1500°C.

Разработанная установка обеспечивает необходимые условия для безопасного проведения пирометаллургических экспериментов, включая поддержание инертной атмосферы, эффективное удаление и нейтрализацию газообразных продуктов пиролиза и гидролиза, а также защиту оборудования от коррозионно-активных соединений. Конструктивные решения, такие как применение графитового тигля, оптимизация толщины его стенок, использование эжекторного насоса и подъемного механизма, повышают надёжность и удобство эксплуатации установки.

Полученные результаты подтверждают, что предложенная лабораторная платформа является эффективным инструментом для изучения поведения материалов ЛИА при высокотемпературной обработке, оптимизации технологических режимов и оценки экологических аспектов пирометаллургической переработки. Установка открывает широкие возможности для дальнейших исследований, направленных на повышение степени извлечения ценных металлов, снижение образования вредных выбросов и разработку более устойчивых и экономически выгодных технологий утилизации аккумуляторных отходов.

Такой подход способствует формированию научной базы для создания промышленных решений нового поколения, ориентированных на экологическую безопасность и рациональное использование ресурсов в условиях растущего объёма отходов литий-ионных аккумуляторов.

References

An L. (2019). Recycling of spent lithium-ion batteries. Processing Methods and Environmental Impacts. DOI:10.1007/978-3-030-31834-5. (in Eng.).

Assefi M., Maroufi S., Yamauchi Y., & Sahajwalla V. (2020). Pyrometallurgical recycling of Li-ion, Ni–Cd and Ni–MH batteries: A minireview. Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry, 24. – P. 26-31. DOI: 10.1016/j.cogsc.2020.01.005 (in Eng.).

Beatriz V.L., Blengini G.A., Fabrice M., Cynthia L., Lucia M., Viorel N., & David P. (2018). Raw Materials Scoreboard. DOI: 10.2873/08258. (in Eng.).

Bermúdez A., Crego O., Ferrín J.L., García B., Gómez D., Martínez I., & Salgado P. (2025). Multiphysics simulation of slag melting in an induction furnace for sustainable silicon production. Applied Mathematical Modelling, 145. – P. 116107. DOI: 10.1016/j.apm.2025.116107 (in Eng.).

Davids M.W., Martin T.C., Fursikov P.V., Zhidkov M.V., Khodos I.I., Fashu S., & Lototskyy M.V. (2024). Effect of preparation routes on the performance of a multi-component AB2-type hydrogen storage alloy. Journal of Physics: Energy, 6(3). – P. 035005. DOI: 10.1088/2515-7655/ad5abe (in Eng.).

Harper G., Sommerville R., Kendrick E., Driscoll L., Slater P., Stolkin R., & Anderson P. (2019). Recycling lithium-ion batteries from electric vehicles. nature, 575(7781). – P. 75-86. DOI:10.1038/S41586-019-1682-5.

Masias A., Marcicki J., & Paxton W.A. (2021). Opportunities and challenges of lithium ion batteries in

automotive applications. ACS energy letters, 6(2). – P. 621-630. DOI: 10.1021/acsenergylett.0c02584 (in Eng.).

Meng W.U. (2025). Recycling technologies of spent lithium-ion batteries and future directions: A review. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 35(1). – P. 271-295. DOI:10.1016/S1003-6326(24)66679-3 (in Eng.).

Meshram P., Mishra A., & Sahu R. (2020). Environmental impact of spent lithium ion batteries and green recycling perspectives by organic acids–A review. Chemosphere, 242. – P. 125291. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2019.125291 (in Eng.).

Metin M., Ünal M., & Gören H.A. (2025). Effect of applied load on adhesive wear and corrosive wear behaviours of two aluminium bronze (Cu-Al-Fe) alloys. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science, 239(1). – P. 245-257. DOI: 10.1177/09544062241283 (in Eng.).

Olivetti E.A., Ceder G., Gaustad G.G., & Fu X. (2017). Lithium-ion battery supply chain considerations: analysis of potential bottlenecks in critical metals. Joule, 1(2). – P. 229-243. DOI:10.1016/j.joule.2017.08.019 (in Eng.).

Thompson D.L., Hartley J.M., Lambert S.M., Shiref M., Harper G.D., Kendrick E., & Abbott A.P. (2020). The importance of design in lithium ion battery recycling–a critical review. Green Chemistry, 22(22). – P. 7585-7603. DOI:10.1039/D0GC02745F. (in Eng.).

Wang J., Qi Z., Zhao Q., & Shih K. (2025). From Waste to Wealth: A Review of Eutectic Molten Salt Method for Direct Regeneration of Spent Lithium-Ion Battery. Advanced Science, 12(31), e04609. DOI: 10.1002/advs.202504609 (in Eng.).

Yuan Q., Zeng J., Sui Q., Wang Z., Xu S., Mao S., & Liu J. (2023). Thermodynamic and experimental analysis of lithium selectively recovery from spent lithium-ion batteries by in-situ carbothermal reduction. Journal of Environmental Chemical Engineering, 11(5). – P. 111029. DOI: 10.1016/j.jece.2023.111029 (in Eng.).

Zhang X., Li L., Fan E., Xue Q., Bian Y., Wu F., & Chen R. (2018). Toward sustainable and systematic recycling of spent rechargeable batteries. Chemical Society Reviews, 47(19). – P. 7239-7302. DOI: 10.1039/C8CS00297E (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 65–77

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.405

UDC: 543.3; 628.1
IRSTI: 87.51

©Issayeva A.[1*], Beisebayeva A.[1,2], Madybekova G.[3], Shynazbekova Sh.[3], Issa A.[4], 2026.
[1]Scientific and Production Enterprise «Antigen» LLP, Almaty region, Kazakhstan;
[2] Satbayev University, Almaty, Kazakhstan;
[3]South Kazakhstan Pedagogical University named after O. Zhanibekov,
Shymkent, Kazakhstan;
4 M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan.
E-mail: isa-asem@mail.ru

COMPARATIVE ANALYSIS OF PHYSICO-CHEMICAL CHARACTERISTICS OF DRINKING, SPRING AND NATURAL WATER IN THE SOUTH KAZAKHSTAN

Issayeva Assem — PhD, Scientific researcher, LLP "Scientific and Production Interprise Antigen", Almaty region, Kazakhstan,
E-mail: isa-asem@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-6727-0257;
Beisebayeva Aigul — Candidate of physical and mathematical sciences, Associate professor, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: a.s.beisebayeva@satbayev.university, https://orcid.org/0009-0004-6097-5384;
Madybekova Galiya — Candidate of chemical sciences, Professor, South Kazakhstan Pedagogical University named after O. Zhanibekov, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: galiya56@ list.ru, https://orcid.org/0000-0002-1970-8143;
Shynazbekova Sholpan — Candidate of chemical sciences, Associate professor, South Kazakhstan Pedagogical University named after O.Zhanibekov, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: shinazbekova59@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-6961-720X;
Issa Aziza — PhD, Associate professor, M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: isa.aziza@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0897-3846.

Abstract. At present, the requirements for the quality of drinking water sources have significantly increased due to the intensification of both natural and anthropogenic impact factors, including atmospheric precipitation, geological weathering, chemical pollutants, pathogenic microorganisms, agricultural activities, land-use changes, as well as domestic and industrial waste. These factors are capable of disturbing ecological balance through the contamination of air, soil, and water resources, ultimately leading to the deterioration of drinking water quality and posing a potential threat to ecosystems and public health. Industrial emissions, mining activities, and agricultural runoff contribute to the accumulation of harmful organic and inorganic substances in the environment, which may enter aquatic ecosystems and be incorporated into food chains.

The present study is aimed at assessing the quality and safety of drinking water based on a comparative analysis of the physicochemical characteristics of water obtained from various sources in the southern regions of Kazakhstan. The objects of the study included tap water from centralized water supply systems in the cities of Almaty and Shymkent, spring water, as well as natural water from open sources. Within the framework of the study, key physicochemical parameters were determined, including hydrogen ion concentration (pH), electrical conductivity, total mineralization, total hardness, permanganate oxidizability, as well as the concentrations of major cations (Ca^{2+}, Mg^{2+}, Na^{+}, K^{+}) and anions (HCO_3^-, SO_4^{2-}, Cl^-, NO_3^-, NO_2^-). The analysis was carried out using standardized spectrophotometric and titrimetric methods in accordance with the current GOST requirements.

The obtained results were compared with the sanitary-hygienic standards of the Republic of Kazakhstan in order to assess the suitability of the investigated water sources for drinking and domestic use. It was established that, in general, the studied water samples comply with the maximum permissible concentrations for most parameters. The identified minor variations in mineralization levels, total hardness, and silicon content reflect the geochemical features of groundwater formation.

Keywords: drinking water, comparative analysis, indicator of pollution, physico-chemical characteristics, pollution

Financing: *The work was carried out within the framework of the project of the Committee of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan under the project: AP261100197.*

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 65–77. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.405*

©Исаева А.Б.[1*], Бейсебаева А.С.[1,2], Мадыбекова Г.М.[3], Шиназбекова Ш.С.[3], Иса А.Б.[4], 2026.

[1]«Антиген ғылыми-өндірістік кәсіпорны» ЖШС, Алматы облысы, Қазақстан;
[2]Satbayev University, Алматы, Казахстан;
[3]Ө.Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті, Шымкент, Қазақстан;
[4]М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.
E-mail: isa-asem@mail.ru

ҚАЗАҚСТАННЫҢ ОҢТҮСТІГІНДЕГІ АУЫЗ СУ, ТАБИҒИ СУ ЖӘНЕ БҰЛАҚ СУЫНЫҢ ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫҚ СИПАТТАМАЛАРЫН САЛЫСТЫРМАЛЫ ТАЛДАУ

Исаева Асем — PhD, Ғылыми қызметкер, «Антиген» ғылыми-өндірістік кәсіпорны ЖШС, Алматы облысы, Қазақстан,

E-mail: isa-asem@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-6727-0257;
Бейсебаева Айгуль — Физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, Satbayev University, Алматы, Қазақстан,
E-mail: a.s.beisebayeva@satbayev.university, https://orcid.org/0009-0004-6097-5384;
Мәдібекова Ғалия — Химия ғылымдарының кандидаты, профессор, Ө.Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: galiya56@list.ru, https://orcid.org/0000-0002-1970-8143;
Шиназбекова Шолпан — Химия ғылымдарының кандидаты, доцент, Ө.Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: shinazbekova59@mail.ru. https://orcid.org/0000-0001-6961-720X;
Иса Азиза — PhD, доцент, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: isa.aziza@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0897-3846.

Аннотация. Қазіргі уақытта ауыз су көздерінің сапасына қойылатын талаптар табиғи және антропогендік әсер ету факторларының күшеюіне байланысты айтарлықтай артты. Оларға атмосфералық жауын-шашын, геологиялық үгілу процестері, химиялық ластағыштар, патогенді микроорганизмдер, ауыл шаруашылығы қызметі, жер пайдалану құрылымының өзгеруі, сондай-ақ тұрмыстық және өнеркәсіптік қалдықтар жатады. Аталған факторлар ауа, топырақ және су ресурстарының ластануы арқылы экологиялық тепе-теңдіктің бұзылуына алып келуі мүмкін, бұл өз кезегінде ауыз су сапасының төмендеуіне әкеліп, экожүйелер мен халық денсаулығына ықтимал қауіп төндіреді. Өнеркәсіптік шығарындылар, пайдалы қазбаларды өндіру және ауыл шаруашылығы ағын сулары қоршаған ортада зиянды органикалық және бейорганикалық заттардың жиналуына ықпал етеді, олар су экожүйелеріне түсіп, қоректік тізбектерге енуі мүмкін.

Бұл зерттеудің мақсаты – Қазақстанның оңтүстік өңірлеріндегі әртүрлі көздерден алынған судың физика-химиялық сипаттамаларын салыстырмалы талдау негізінде ауыз судың сапасы мен қауіпсіздігін бағалау болып табылады. Зерттеу нысандары ретінде Алматы және Шымкент қалаларының орталықтандырылған сумен жабдықтау жүйелерінен алынған ауыз су, бұлақ сулары, сондай-ақ ашық табиғи көздерден алынған су пайдаланылды. Жұмыс барысында негізгі физика-химиялық көрсеткіштер, атап айтқанда сутектік көрсеткіш (pH), электрөткізгіштік, жалпы минералдану, жалпы қаттылық, перманганаттық тотығу, сондай-ақ негізгі катиондар (Ca^{2+}, Mg^{2+}, Na^{+}, K^{+}) мен аниондардың (HCO_3^{-}, SO_4^{2-}, Cl^{-}, NO_3^{-}, NO_2^{-}) концентрациялары анықталды. Талдау қолданыстағы ГОСТ талаптарына сәйкес стандартталған спектрофотометриялық және титриметриялық әдістерді қолдану арқылы жүргізілді.

Алынған нәтижелер Қазақстан Республикасының санитарлық-гигиеналық нормативтерімен салыстырылып, зерттелген су көздерінің ауыз су және тұрмыстық мақсатта пайдалануға жарамдылығы бағаланды. Жалпы алғанда, зерттелген су үлгілері негізгі көрсеткіштер бойынша белгіленген шекті рұқсат етілген концентрацияларға сәйкес келетіні анықталды. Минералдану деңгейі, жалпы қаттылық және кремний мөлшеріндегі анықталған болмашы айырмашылықтар жер асты суларының қалыптасуының геохимиялық ерекшеліктерін көрсетеді.

Түйін сөздер: ауыз су, салыстырмалы талдау, ластану индикаторы, физика-химиялық сипаттамалары, ластану

©Исаева А.Б.[1*], Бейсебаева А.С.[1,2], Мадыбекова Г.М.[3], Шиназбекова Ш.С.[3], Иса А.Б.[4], 2026.

[1]ТОО «Научно-производственное предприятие Антиген»,
Алматинская область, Казахстан;
[2]Satbayev University, Алматы, Казахстан;
[3]Южно-Казахстанский государственный педагогический университет,
Шымкент, Казахстан;
[4]Южно-Казахстанский университет им. М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан.
E-mail: isa-asem@mail.ru

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПИТЬЕВОЙ, РОДНИКОВОЙ И ПРИРОДНОЙ ВОДЫ ЮГА КАЗАХСТАНА

Исаева Асем — PhD, научный сотрудник, ТОО Научно-производственное предприятие «Антиген», Алматинская область, Казахстан,
E-mail: isa-asem@mail.ru. https://orcid.org/0000-0001-6727-0257;
Бейсебаева Айгуль — кандидат физико-математических наук, Ассоциированный профессор, Satbayev University, Алматы, Казахстан,
E-mail: a.s.beisebayeva@satbayev.university, https://orcid.org/0009-0004-6097-5384;
Мадыбекова Галия — кандидат химических наук, профессор, ЮКПУ им.Ө.Жанібеков, Шымкент, Казахстан,
E-mail: galiya56@list.ru, https://orcid.org/0000-0002-1970-8143;
Шиназбекова Шолпан — кандидат химических наук, доцент, ЮКПУ им.Ө.Жанібеков, Шымкент, Казахстан
E-mail: shinazbekova59@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-6961-720X;
Иса Азиза — PhD, доцент, Южно-Казахстанский университет им. М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: isa.aziza@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0897-3846.

Аннотация. В настоящее время требования к качеству источников питьевой воды существенно возросли в связи с усилением как природных, так и антропогенных факторов воздействия, включая атмосферные осадки, геологическое выветривание, химическое загрязнение, патогенные микроорганизмы, сельскохозяйственную деятельность, изменения в землепользовании, а также бытовые и промышленные отходы. Указанные факторы способны нарушать экологическое равновесие вследствие загрязнения воздуха, почвы и водных ресурсов, что в конечном итоге приводит к ухудшению качества питьевой воды и представляет потенциальную угрозу для экосистем и здоровья населения. Промышленные выбросы, добыча полезных ископаемых и сельскохозяйственный сток способствуют накоплению вредных органических и неорганических веществ в окружающей среде, которые могут поступать в водные экосистемы и включаться в пищевые цепи. Настоящее исследование направлено на оценку качества и безопасности питьевой

воды на основе сравнительного анализа физико-химических характеристик воды, полученной из различных источников в южных регионах Казахстана. Объектами исследования являлись водопроводная вода из централизованных систем водоснабжения городов Алматы и Шымкент, родниковая вода, а также природная вода открытых источников. В рамках работы были определены ключевые физико-химические показатели, включая водородный показатель (pH), электропроводность, общую минерализацию, общую жесткость, перманганатную окисляемость, а также концентрации основных катионов (Ca2+, Mg2+, Na+, K+) и анионов (HCO3-, SO42-, Cl-, NO3-, NO2-). Анализ проводили с использованием стандартизированных спектрофотометрических и титриметрических методов в соответствии с действующими требованиями ГОСТ. Полученные результаты были сопоставлены с санитарно-гигиеническими нормативами Республики Казахстан с целью оценки пригодности исследуемых водных источников для питьевого и бытового использования. Установлено, что в целом исследованные образцы воды соответствуют установленным предельно допустимым концентрациям по большинству показателей. Выявленные незначительные различия в уровнях минерализации, жесткости и содержания кремния отражают геохимические особенности формирования подземных вод.

Ключевые слова: питьевая вода, сравнительный анализ, индикаторы загрязнения, физико-химические характеристики, загрязнение

Введение. Для обеспечения питьевых нужд активно применяются разнообразные источники воды, такие как бутилированная вода, водопроводная, вода из родников, артезианских скважин, а также очищенная с помощью фильтрационных станций (Carrard et al., 2019).

В рекомендациях Всемирной организации здравоохранения (ВОЗ) под питьевой водой понимается вода, предназначенная для бытового использования - питья, приготовления пищи и гигиенических процедур, и она является незаменимым ресурсом. Бутилированная вода, в свою очередь, представляет собой воду, расфасованную в бутылки или емкости, как правило, без добавок, за исключением разрешённых и безопасных антимикробных веществ (Drinking Water Quality Standards, 2025).

Различают несколько основные виды воды по источнику и назначению представленной в таблице 1.

Таблица 1 - Виды воды по источнику и назначению

Виды воды	**Происхождение**	**Назначение**	**Нуждается в очистке**
Природная вода	Естественное	Общее использование	Да
Родникова вода	Подземный источник	Питье и бытовое использование	Иногда
Питьевая вода	Очищенная вода для питья	Питье	Нет
Артезианская вода	Глубокий, подземный горизонт	Питье	Редко
Минеральная вода	Природное + минерализация	Питье, лечебные цели	Нет,

Дистиллированная вода	Искуственное очищенная	Лаборатории, техника	Нет
Бутилированная вода	Очищенная/минеральная в упаковке	Питье	Нет
Техническая вода	Различные источники	Промышленность/ технические нужды	Да
Грунтовая вода	Поверхностный подземный слой	Мониторинг, анализ	Да
Термальная вода	Геотермальный источник	Косметика, лечебные ванны	Иногда

Загрязнение водных ресурсов остаётся одной из важнейших глобальных проблем XXI века, требующей неотложного решения для обеспечения высокого качества воды и минимизации негативного влияния на здоровье человека и состояние экосистем. Рост промышленности, климатические изменения и урбанизация способствуют появлению разнообразных источников загрязнения (Zhartybayeva et al., 2023).

Список потенциальных загрязняющих веществ очень велик, включая:

- Пестициды, например, глифосат и атразин, Фармацевтические препараты, например, диклофенак, ибупрофен, антибиотики и гормоны,
- Разрешенные и запрещенные наркотики, например, кофеин, кокаин и амфетамины,
- Консерванты, такие как парабены и триклозан,
- Средства личной гигиены, например, солнцезащитные кремы и УФ-фильтры,
- Поверхностно-активные вещества, чистящие средства, промышленные составы и химикаты, например, бисфенол А, хлорированные растворители,
- Пищевые добавки и упаковка для пищевых продуктов, например, фталаты и пластификаторы,
- Полициклические ароматические углеводороды, полихлорированные дифенилы, галогенированные полициклические ароматические углеводороды, полихлорированный нафталин, диоксины, гексахлор-1,3-бутадиен, полигалогенированные карбазолы и устойчивые к воздействию окружающей среды свободные радикалы,
- Бромсодержащие антипирены, перфторированные соединения и перфторированные алкильные соединения, бромированные диоксины,
- Устойчивые к антибиотикам патогенные бактерии,
- И другие загрязняющие вещества, такие как алкилфенолы, тяжелые металлы, радионуклиды, редкоземельные элементы, наночастицы, микропластик, загрязнители помещений и патогенные микроорганизмы (Morin-Crini et al., 2022).

Загрязнение водных ресурсов формируется под влиянием комплекса факторов: индустриального развития, аграрной деятельности, природных процессов, а также недостатков в системе водоснабжения и очистке сточных вод. Крупнейший вклад вносят промышленные отрасли - от целлюлозно-бумажной и текстильной до пищевой и чёрной металлургии. В ходе технологических операций в окружающую среду могут поступать токсичные компоненты как

CC BY NC

органической, так и неорганической природы, включая растворители и летучие органические соединения. При отсутствии должной очистки их сброс в водные экосистемы неизбежно приводит к деградации качества воды (Chen et al., 2019). С ускорением урбанизации объем сточных вод промышленного производства постепенно увеличивается (Wu et al., 2020). Сельскохозяйственная деятельность приводит к загрязнению воды нитратами, фосфором, пестицидами, почвенными отложениями, солями и патогенами (Parris, 2011). Для удовлетворения потребностей сельскохозяйственного производства в воде привело к серьезному загрязнению сельскохозяйственных земель и пищевых продуктов, а также к загрязнению остатками пестицидов и тяжелыми металлами, угрожающему продовольствию. безопасность и здоровье человека (Lu et al., 2015). Пестициды оказывают неблагоприятное воздействие на здоровье через питьевую воду. Сравнивая использование пестицидов с данными исследования ожидаемой продолжительности жизни, было установлено, что увеличение использования пестицидов на 10% привело к увеличению индекса инвалидности по состоянию здоровья на 1% в возрасте старше 65 лет (Lai et al., 2017). Сооружения для водоснабжения и очистки сточных вод также являются важными факторами, влияющими на качество питьевой воды, особенно в развивающихся странах.

Употребление небезопасной воды может привести к серьёзным последствиям для здоровья. Отсутствие должного водоснабжения и санитарных условий способствует распространению таких заболеваний, как холера, трахома, гельминтозы. Кроме того, антисанитарные условия и загрязнённая вода могут вызывать желудочно-кишечные заболевания, нарушать усвоение питательных веществ и способствовать развитию недоедания, особенно у детей и людей с ослабленным иммунитетом (Pal et al., 2018).

На качество воды, поступающей в здание, могут влиять источник фекального загрязнения между трубами канализации и водопровода. Также к загрязнению может привести попадание патогенных микроорганизмов с мусорных свалок и септических систем, неправильная утилизация опасных бытовых отходов, утечка из подземных резервуаров, а также проникновение в грунтовые воды пестицидов и удобрений.

В последние годы значительное внимание уделяется исследованию экотоксикологического воздействия на разнообразные компоненты наземных и водных экосистем. Эти исследования направлены на выявление масштабов и механизмов влияния различных загрязнителей на биоту, а также на оценку их потенциальных рисков для устойчивости экосистем и здоровья человека (Agapkina et al., 2025).

Все эти факторы изменяют физико-химические и микробиологические характеристики воды, делая её небезопасной. Поэтому контроль качества питьевой воды играет ключевую роль в обеспечении здоровья населения. Оценка качества необходима не только для мониторинга состояния водных источников, но и для проверки эффективности очистных сооружений, с учётом физических, химических и биологических показателей, определяющих её пригодность к употреблению.

Материалы и методы исследования. Отбор проб проводился весной 2025 года из южных регионов Казахстана. Были исследованы четыре типа воды: питьевая вода из системы централизованного водоснабжения г. Алматы, питьевая вода из системы централизованного водоснабжения г. Шымкент, природная вода открытых источников и родниковая вода.

Пробоотбор осуществлялся в соответствии с требованиями ГОСТ 31861–2012 «Вода. Общие требования к отбору проб». Объём каждой пробы составлял 1500 мл. Пробы отбирались в предварительно промытые и ополоснутые исследуемой водой контейнеры, которые плотно закрывались крышкой.

Анализ проводился в аккредитованной химико-аналитической лаборатории с использованием стандартных методик:

– pH и электропроводность измеряли потенциометрическим методом (pH-метр/кондуктометр) согласно ГОСТ 33045–2014.

– Общая минерализация (сухой остаток) определялась гравиметрическим методом по ГОСТ 18164–72.

– Общая жесткость – комплексонометрическим методом с трилоном Б (ГОСТ 31954–2012).

– Окисляемость перманганатная - по ГОСТ 23268.12–91.

– Содержание нефтепродуктов, ПАВ и фенолов - спектрофотометрическим методом по ГОСТ 31859–2012, ГОСТ 31862–2012 и ГОСТ 18165–2014.

– Концентрации катионов (Ca^{2+}, Mg^{2+}, Na^{+}, K^{+}) и анионов (HCO_3^-, SO_4^{2-}, Cl^-, NO_3^-, NO_3^-) определяли титриметрическим и спектрофотометрическим методами.

– Кремний и бор определялись спектрофотометрически по методикам МВИ, утверждённым в Республике Казахстан.

Результаты и обсуждения. В результате проведённых физико-химических исследований проб воды различного происхождения была выполнена сравнительная оценка их качественных показателей. Результаты анализа приведены в таблице 2.

Таблица 2 - Результаты проведѐнного химического анализа проб из родниковой воды

Наименование химического вещества	**Единица измерения**	**Норматив**	**Питьевая вода алматы**	**Природная вода**	**Питьева вода шымкент**	**Родникова вода**
Обобщенные показатели						
Водородный показатель	единицы pH	в пределах 6-9	7,46	7,68	8.1	7,93
Общая минерализация Сухой остаток	мг/дм3	не более 1000 (1500)	576 396	577 372	343 214	491 312
Жесткость общая	ммоль/дм3	не более 7.0 (10)	6,60	6,9	3.80	4,80
Окисляемость перманганат.	мг кислорода/ дм3	не более 5,0	0,36	0,16	0.40	0,44
Нефтепродукты, суммарно	мг/дм3	не более 0.1	н.о. (0,005)	н.о. (0,005)	н.о. (0,005)	н.о. (0,005)

Поверхностро-активные вещества (ПАВ)	мг/дм3	не более 0,5	н.о.(0.05)	н.о. (0.05)	н.о.(0.05)	н.о. (0.05)
Фенольный индекс	мг/дм3	не более 0,25	н.о. (0,0001)	н.о. (0,0001)	н.о. (0,0001)	н.о. (0,0001)
Неорганические вещества						
Аммиак (по азоту)	мг/дм3	не более 2,0	н.о.(0,05)	н.о. (0,05)	н.о.(0,05)	н.о. (0,05)
Бор (B, суммарно)	мг/дм3	не более 0.5	0,04	н.о.(0,01)	н.о. (0.01)	0.04
Гидрокарбонаты (HCO_3^-)	мг/дм3	не нормируется	283,7	335,6	213.6	305,1
Железо (Fe, суммарно)	мг/дм3	не более 0.3 (1.0)	н.о.(0,05)	н.о. (0,05)	н.о. (0,05)	н.о.(0,05)
Калий (K^+)	мг/дм3	не нормируется	2,5	3,1	1.0	0,3
Карбонаты (CO_3^{2-})	мг/дм3	не нормируется	н.о.(6.0)	н.о. (6.0)	н.о. (6.0)	н.о. (6.0)
Кальций (Ca^{2+})	мг/дм3	не нормируется	91,1	77,1	48.0	62,1
Кремний (Si)	мг/дм3	не более 10	7,1	6,2	3.7	10,6
Магний (Mg^{2+})	мг/дм3	не нормируется	24,9	37,1	17.0	20,7
Натрий (Na^+)	мг/дм3	не более 200,0	35,3	24,1	16.4	29,8
Нитраты (по NO_3^-)	мг/дм3	не более 45	25.0	20,0	9.0	26,0
Нитриты (NO_2^-)	мг/дм3	не более 3,0	н.о (0.005)	н.о (0.005)	н.о (0.005)	н.о (0.005)
Сульфаты (SO_4^{2-})	мг/дм3	не более 500	80,3	56,8	22.2	25,9
Хлориды (Cl^-)	мг/дм3	не более 350	24,8	16,0	3,9	3,2

Согласно таблице 2, в соответствии с Приказом МЗ РК от 24.11.2022 г. № ҚР ДСМ-138, рег. в МЮ РК 25.11.2022 г. № 30713, индивидуальные предельно допустимые концентрации (ПДК) для ионов кальция (Ca^{2+}), магния (Mg^{2+}), гидрокарбонатов (HCO_3^-) и карбонатов (CO_3^{2-}) не установлены; их содержание нормируется косвенно через показатели общей жёсткости и щёлочности питьевой воды.

Сравнительный анализ показателей питьевой воды, природной воды и родниковой воды показал, что по большинству параметров все образцы соответствуют санитарно-гигиеническим нормативам, установленным для питьевой воды.

Отбор проб проводился в местах, не подверженных прямому влиянию промышленных выбросов, сельскохозяйственного стока и других источников загрязнения. Это подтверждается низкими концентрациями нефтепродуктов, поверхностно-активных веществ, фенолов, аммиака и нитритов - все эти показатели находятся на уровне, близком к пределу обнаружения.

Кислотно-щелочной баланс (pH) у всех образцов находится в пределах допустимых значений (6–9), при этом вода из Шымкента (8,1) и родниковая вода

(7,93) имеют более щелочной характер по сравнению с Алматинской (7,46) и природной (7,68) водой.

Общая минерализация и жесткость варьируют в зависимости от происхождения воды: наибольшие значения характерны для алматинской и природной воды, что связано с геохимическими особенностями подземных горизонтов. Наименьшая минерализация - у шымкентской воды (343 мг/дм³).

Содержание основных ионов (Ca^{2+}, Mg^{2+}, Na^{+}, HCO_3^{-}, SO_4^{2-}, Cl^{-}) соответствует гидрохимическому типу вод данного региона и не превышает санитарных норм. Выявленные различия в концентрациях кальция, магния и кремния отражают природные условия формирования каждого источника.

Проверка различий между источниками по каждому показателю показала, что значимые различия по pH, общей минерализации и жесткости обусловлены природными особенностями формирования вод. На рисунке 1 представлен сравнение показателей воды.

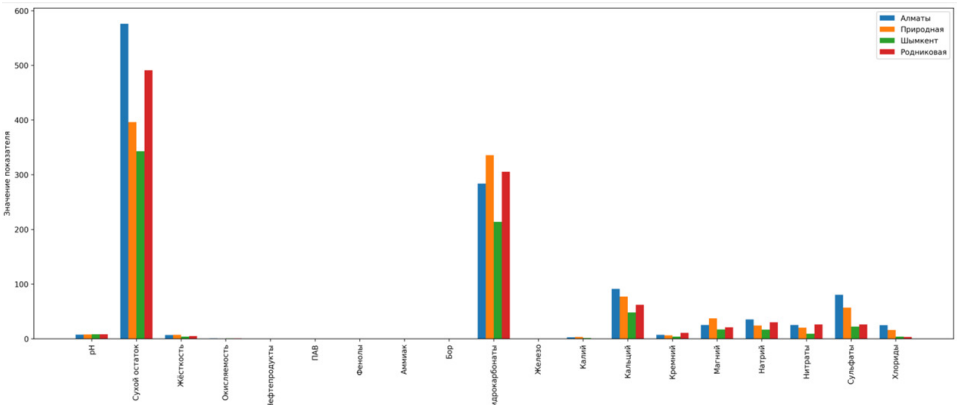


Рисунок 1 – Сравнение показателей воды

Анализ показал высокую положительную корреляцию между содержанием кальция и общей жесткостью ($r > 0,9$), а также между общей минерализацией и концентрацией гидрокарбонатов ($r > 0,8$), что соответствует общим гидрохимическим закономерностям для подземных и родниковых вод.

PCA-анализ позволил выделить два основных фактора, объясняющих большую часть вариации данных (рисунок 2):

PC1 связан с минерализацией, жесткостью и содержанием Ca^{2+}, Mg^{2+}, HCO_3^{-}.

PC2 в большей степени отражает различия по содержанию кремния и натрия.

CC BY NC

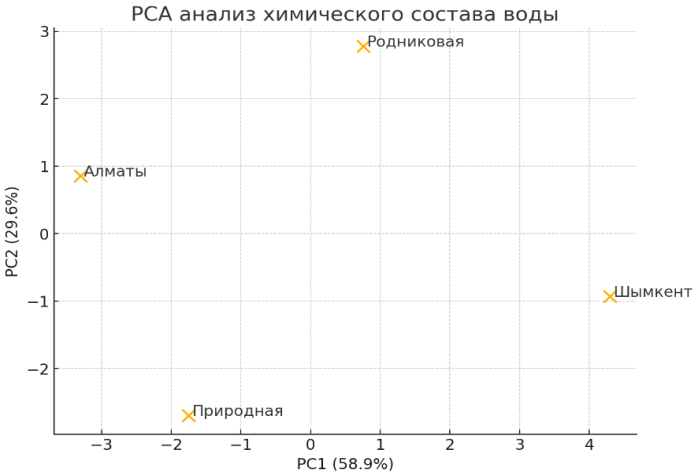


Рисунок 2 – PCA-анализ химического состава воды

Полученные результаты сравнительного анализа физико-химических характеристик питьевой, родниковой и природной воды южных регионов Казахстана свидетельствуют о том, что качество исследуемых водных источников в целом соответствует действующим санитарно-гигиеническим нормативам. Выявленные различия между образцами носят преимущественно природный характер и обусловлены геохимическими особенностями формирования вод, а не антропогенным воздействием.

В пробе родниковой воды зафиксировано содержание кремния 10,6 мг/дм^3, что незначительно превышает рекомендуемое нормативное значение (≤10 мг/дм^3). Данное превышение является минимальным и, вероятнее всего, связано с природными условиями формирования подземных вод при их взаимодействии с кремнийсодержащими горными породами. Установленная концентрация не представляет санитарно-гигиенической опасности, однако требует последующего мониторинга

Анализ основных показателей показал, что вариации значений pH, общей минерализации и жёсткости тесно связаны с минеральным составом водоносных горизонтов. Более высокие значения минерализации и жёсткости, характерные для питьевой воды Алматы и природной воды, могут быть обусловлены повышенным содержанием кальция и магния, что подтверждается результатами корреляционного анализа. В то же время вода из Шымкента характеризуется меньшей минерализацией и жёсткостью, что указывает на иные условия формирования источника.

Родниковая вода отличается относительно повышенным содержанием кремния, что типично для подземных вод, формирующихся при контакте с силикатными породами. Данный показатель, при отсутствии превышения нормативов, может рассматриваться как дополнительная характеристика природного происхождения воды. Низкие концентрации нефтепродуктов, поверхностно-активных веществ,

фенолов и соединений азота во всех образцах подтверждают отсутствие выраженного техногенного загрязнения в местах отбора проб.

Результаты PCA-анализа наглядно продемонстрировали группировку образцов воды в соответствии с их химическим профилем, что подтверждает информативность комплексного подхода к оценке качества воды. Таким образом, сочетание традиционного химического анализа с методами многомерной статистики позволяет более полно охарактеризовать различия между водными источниками и выявить ключевые факторы, определяющие их состав.

Заключение. Проведённое исследование позволило провести сравнительный анализ физико-химических показателей питьевой воды из централизованных систем водоснабжения, природной и родниковой воды в Южном Казахстане.

По большинству исследованных параметров все образцы соответствуют санитарно-гигиеническим нормативам, установленным для питьевой воды, что подтверждает их безопасность при употреблении. Низкие концентрации нефтепродуктов, ПАВ, фенолов, аммиака и нитритов свидетельствуют об отсутствии значимого антропогенного воздействия на исследуемые источники.

Анализ показал, что различия в составе воды определяются, главным образом, природными геохимическими условиями. Питьевая вода Алматы и природная вода схожи по минеральному составу, характеризуются повышенной жесткостью и минерализацией. Родниковая вода отличается более высоким содержанием кремния, а вода Шымкента - меньшей минерализацией и жесткостью.

Корреляционный анализ подтвердил связь между содержанием кальция и общей жесткостью, а также между общей минерализацией и концентрацией гидрокарбонатов. Результаты PCA и кластерного анализа наглядно продемонстрировали группировку образцов в соответствии с их химическим профилем.

Полученные данные могут быть использованы для экологического мониторинга и оценки качества водных ресурсов в регионе. В рамках настоящего исследования тяжёлые металлы и микробиологические показатели не определялись. Их анализ будет включён в последующие исследования с целью более комплексной оценки качества водных источников.

References

Agapkina G.I., Stolbova V.V., Shcheglov A.I., Lipatov D.N., Paramonova T.A., Manakhov D.V. (2025) Environmental toxicology as finterdisciplinary scientific direction: origins and contemporary experience (review). Lomonosov Soil Scoence Journal, 80. – P. 107-121. DOI: 10.55959/MSU0137-0944-17-2025-80-1-107-121 (in Eng).

Carrard N., Foster T., Willetts J. (2019) Groundwater as a Source of Drinking Water in Southeast Asia and the Pacific: A Multi-Country Review of Current Reliance and Resource Concerns. Water, 11, 8:1605. DOI: 10.3390/w11081605. (in Eng).

Chen B., Wang M., Duan M., Ma X., Hong J., Xie F., Zhang R., Li X. (2019) In search of key: Protecting human health and the ecosystem from water pollution in China. Journal of Cleaner Production, 228. – P. 101-111. DOI: 10.1016/j.jclepro.2019.04.228. (in Eng).

Lai W. (2017) Pesticide use and health outcomes: Evidence from agricultural water pollution in China. Journal of Environmental Economics and Management, 86. – P. 93-120. DOI: 10.1016/j.jeem.2017.05.006 (in Eng).

Lu Y., Song S., Wang R., Liu Z., Meng J., Sweetman A. J., Jenkins A., Ferrier R. C., Li H., Luo W., Wang T. (2015) Impacts of soil and water pollution on food safety and health risks in China. Environment International, 77. – P. 5–15. DOI: 10.1016/j.envint.2014.12.010 (in Eng).

Morin-Crini N., Lichtfouse E., Liu G., Balaram V., Ribeiro A. R. L., Lu Z., Stock F., Carmona E., Teixeira M. R., Picos-Corrales L. A., Moreno-Piraján J. C., Giraldo L., Li C., Pandey A., Hocquet D., Torri G., Crini G. (2022) Worldwide cases of water pollution by emerging contaminants: A review. Environmental Chemistry Letters, 20, 4. – P. 2311-2338. DOI: 10.1007/s10311-022-01447-4 (in Eng).

Pal M., Ayele Y., Hadush A., Panigrahi S., Jadhav V. (2018) Public Health Hazards Due to Unsafe Drinking Water. Journal of Public Health Research, 7. DOI: 10.4172/2167-7719.1000138 (in Eng).

Parris K. (2011) Impact of Agriculture on Water Pollution in OECD Countries: Recent Trends and Future Prospects. International Journal of Water Resources Development, 27, 1. – P. 33–52. DOI: 10.1080/07900627.2010.531898 (in Eng).

Wu H., Gai Z., Guo Y., Li Y., Hao Y., Lu Z.-N. (2020) Does environmental pollution inhibit urbanization in China? A new perspective through residents' medical and health costs. Environmental Research, 182. – P. 109128. DOI: 10.1016/j.envres.2020.109128 (in Eng).

Zhartybayeva M., Muntayev N., Tulegenova S., Oralbekova Z., Lamasheva Z., Iskakov K. (2023) Monitoring and Forecasting of Water Pollution by Heavy Metals. IEEE Access, 11. – P. 1593-1602. DOI: 10.1109/ACCESS.2022.3233298 (in Eng).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 78–88

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.406

UDC: 520.8
IRSTI: 41.51.41

©Kim V.Yu.*, Aimuratov Y.K., 2026.
Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan.
*E–mail: kim@fai.kz

SEARCH FOR TRANSIENT COSMIC EVENTS BY SCANNING THE SKY WITH WIDE–FIELD TELESCOPES

Kim Vitaliy — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,
E–mail: kim@fai.kz, https://orcid.org/0000-0003-1202-9751;
Aimuratov Yerlan – PhD, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,
E–mail: aimuratov@fai.kz, https://orcid.org/0000-0001-5717-6523.

Abstract. This article discusses an algorithm for step–by–step scanning of a given region of the sky using a wide–field optical telescope, taking into account the minimum permissible observation altitude above the horizon, the Earth's diurnal rotation, and the limited duration of the observing night. Unlike targeted observations, which focus on studying known astronomical objects, survey studies are aimed at systematic search and identification of non–stationary sources and processes, including optical transients, supernova explosions, asteroids, comets, space debris, and artificial Earth satellites. The proposed method, dubbed "Snake", ensures uniform coverage of a given region of the celestial sphere with a minimum number of idle telescope movements. The algorithm is based on sequentially traversing the region using right ascension and declination coordinates, alternating the direction of movement, and continuously monitoring the altitude of the center of the field of view above the horizon. To determine the starting position and scan boundaries, the relations of spherical astronomy, linking the hour angle, local stellar time, and the observatory's geographic coordinates are used. The article provides a detailed description of the algorithmic logic, including the selection of the starting point, calculation of successive coordinate steps, and the observation termination criterion. A detailed example of the application under on–site observing conditions at the Academician Omarov Assy-Turgen Observatory using wide–field optical systems is presented. It is demonstrated that the developed algorithm enables efficient organization of survey observations and automation of the sky scanning process with minimal computing resources. The method can be adapted to various optical instruments and used in automatic telescope control systems.

Keywords: sky scanning, observation planning, wide–field telescope, observatory, transients

Financing. *The work is carried out within the framework of the Project No. BR24992807 «Development of Kazakhstan digital environment for astronomical research of near and deep space objects within the international virtual observatory network" and No. BR24992759 Development of the concept for the first Kazakhstani orbital cislunar telescope – Phase I", financed by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan.*

For citations: *Kim V.Yu., Aimuratov Y.K. Search for transient cosmic events by scanning the sky with wide-field telescopes. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 78–88. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.406*

©Ким В.Ю.*, Аймуратов Е.К., 2026.

В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан.
* E–mail: kim@fai.kz

КЕҢ БҰРЫШТЫ ТЕЛЕСКОПТАРМЕН АСПАНДЫ СКАНЕРЛЕУ АРҚЫЛЫ ӨТПЕЛІ ҒАРЫШТЫҚ ОҚИҒАЛАРДЫ ІЗДЕУ

Ким Виталий — физика-математика ғылымдарының кандидаты, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,
E–mail: kim@fai.kz, https://orcid.org/0000-0003-1202-9751;
Аймуратов Ерлан — PhD, физика–математика ғылымдарының кандидаты, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,
E–mail: aimuratov@fai.kz, https://orcid.org/0000-0001-5717-6523.

Аннотация. Бұл мақалада кең бұрышты оптикалық телескопты пайдаланып аспанның берілген аймағын кезең–кезеңімен сканерлеу, оған қоса көкжиек үстіндегі ең төменгі рұқсат етілген бақылау биіктігін, Жердің тәуліктік айналуын және бақылау түнінің шектеулі ұзақтығын ескеріп отыратын алгоритмі талқыланады. Шолу зерттеулерінің белгілі астрономиялық нысандарды мақсатты зерттеуге бағытталған бақылаулардан айырмашылығы, оптикалық өтпелі процестерді, аса жаңа жұлдыздардың жарылыстарын, астероидтарды, кометаларды, ғарыш қоқыстарын және жасанды Жер серіктерін қоса алғанда, тұрақты емес көздер мен процестерді жүйелі түрде іздеуге және анықтауға бағытталған. «Жылан» деп аталатын ұсынылған әдіс аспан сферасының берілген аймағын телескоп бос қозғалыстарының минималды санымен біркелкі қамтуды қамтамасыз етеді. Алгоритм тура шарықтау және ауысу координаттарын пайдаланып, аймақты тізбектей кесіп өтуге, қозғалыс бағытын кезектестіруге және көкжиек үстіндегі көру өрісінің орталығының биіктігін үнемі бақылауға негізделген. Бастапқы позицияны және сканерлеу шекараларын анықтау үшін сағат бұрышын, жергілікті жұлдыздық уақытты және обсерваторияның географиялық координаттарын

байланыстыратын сфералық астрономияның қатынастары қолданылады. Мақалада алгоритм логикасының толық сипаттамасы, соның ішінде бастапқы нүктені таңдау, координата қадамдарының бірізділігін есептеу және бақылауды аяқтау критерийі берілген. Әдісті Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясының академигі Т.Б. Омаров атындағы Ассы–Түрген обсерваториясында кең бұрышты оптикалық жүйелерді қолдана отырып, нақты әлемдегі бақылау жағдайларында қолданудың егжей–тегжейлі мысалы келтірілген. Әзірленген алгоритмнің минималды есептеу ресурстарымен шолу бақылауларын тиімді ұйымдастыруға және аспанды сканерлеу процесін автоматтандыруға мүмкіндік беретіні көрсетілген. Әдісті әртүрлі оптикалық құралдарға бейімдеуге және автоматты телескопты басқару жүйелерінде қолдануға болады.

Түйін сөздер: аспанды сканерлеу, бақылауды жоспарлау, кең бұрышты телескоп, обсерватория, транзиенттер

©Ким В.Ю.*, Аймуратов Е.К., 2026.
Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан.
*E–mail: kim@fai.kz

ПОИСК ТРАНЗИЕНТНЫХ КОСМИЧЕСКИХ СОБЫТИЙ МЕТОДОМ СКАНИРОВАНИЯ НЕБА ШИРОКОУГОЛЬНЫМИ ТЕЛЕСКОПАМИ

Ким Виталий — кандидат физико-математических наук, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E–mail: kim@fai.kz, https://orcid.org/0000–0003-1202-9751;
Аймуратов Ерлан – PhD, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E–mail: aimuratov@fai.kz, https://orcid.org/0000-0001-5717-6523.

Аннотация. В статье рассматривается алгоритм пошагового сканирования заданной области неба с использованием широкоугольного оптического телескопа с учетом минимально допустимой высоты наблюдений над горизонтом, суточного вращения Земли и ограниченной продолжительности наблюдательной ночи. В отличие от целевых (таргетных) наблюдений, ориентированных на исследование заранее известных астрономических объектов, обзорные исследования направлены на систематический поиск и идентификацию нестационарных источников и процессов, включая оптические транзиенты, вспышки сверхновых, астероиды, кометы, космический мусор и искусственные спутники Земли. Предложенный в работе метод, получивший название «Змейка», обеспечивает равномерное покрытие заданной области небесной сферы при минимальном числе холостых перемещений телескопа. Алгоритм основан на последовательном обходе области по координатам прямого восхождения и склонения с чередованием направления движения и постоянным контролем высоты центра поля зрения над горизонтом. Для определения стартовой позиции и границ сканирования используются соотношения сферической астрономии, связывающие часовой угол, местное звездное время и географические координаты обсерватории. В статье приведено

подробное описание логики работы алгоритма, включая выбор начальной точки, расчет последовательных шагов по координатам и критерии завершения наблюдений. Представлен детальный пример применения метода для реальных условий наблюдений в обсерватории Ассы–Тургень имени академика НАН РК Т.Б. Омарова с использованием широкоугольных оптических систем. Показано, что разработанный алгоритм позволяет эффективно организовать обзорные наблюдения и автоматизировать процесс сканирования неба при минимальных требованиях к вычислительным ресурсам. Рассматриваемая методика может быть адаптирована для различных оптических инструментов и использована в системах автоматического управления телескопами.

Ключевые слова: сканирование неба, планирование наблюдений, широкоугольный телескоп, обсерватория, транзиенты

Введение. Систематический обзор (сканирование) неба является одной из важных задач современной наблюдательной астрономии (Ghosh, 2016). Это необходимо для поиска и мониторинга нестационарных объектов, таких как: вспышки сверхновых, идентификация астероидов, комет, космического мусора и спутников, а также источники, ассоциированные с гравитационно–волновыми событиями и гамма–всплесками (Dyer, 2024; Almualla, 2020; Bellm, 2019). В последние годы особую роль в таких задачах играют широкоугольные телескопы (Parazin, 2022), обладающие большим полем зрения и способные за ограниченное время охватывать значительные области небесной сферы.

В отличие от инструментов с малым полем зрения, широкоугольные телескопы предъявляют специфические требования к планированию наблюдений. С одной стороны, необходимо обеспечить равномерное и непрерывное покрытие заданной области неба с заданным перекрытием (нахлестом) кадров, достаточным для последующей фотометрической и астрометрической обработки данных. С другой стороны, наблюдения ограничены рядом факторов, связанных как с геометрией небесной сферы, суточным вращением Земли и с реальными условиями работы наземной обсерватории.

Мы разработали универсальный алгоритм “Змейка” для проведения обзорных наблюдений на широкоугольных оптических системах (ШОС), который был реализован в виде программного обеспечения трдля работы телескопов ШОС–40 и ШОС–70 в Ассы–Тургеньской обсерватории им. академика НАН РК Т. Омарова (Aimuratov, 2025). В статье рассматриваются основные принципы и логика, лежащие в основе разработанного алгоритма. Данный алгоритм может быть использован для планирования наблюдений любых оптических систем, предназначенных для сканирования неба в различных наземных обсерваториях.

Литературный обзор. Задача планирования систематических обзоров неба широко обсуждается в современной наблюдательной астрономии в связи с развитием широкоугольных телескопов и автоматических обзорных программ (Ofek, 2023; Naghib, 2019). В рамках таких проектов ключевыми требованиями являются равномерное покрытие заданной области небесной сферы, соблюдение

ограничений по высоте над горизонтом и времени наблюдений, а также минимизация времени вспомогательных перемещений телескопа.

В крупных обзорных проектах, таких как Zwicky Transient Facility (ZTF) (Parazin, 2022) и Rubin Observatory Legacy Survey of Space and Time (LSST) (Bellm, 2019), задачи планирования наблюдений решаются с использованием сложных алгоритмов, основанных на оптимизации времени наблюдений и перемещений телескопа. В этих работах расписание наблюдений формируется с учетом множества параметров, включая воздушную массу, лунные условия, приоритеты полей пр. Это обеспечивает высокую гибкость, но требует значительных вычислительных ресурсов и сложной программной реализации.

Схожие задачи возникают при планировании широкоугольных наблюдений для поиска оптических аналогов гравитационно–волновых событий (Ghosh, 2016). В этих работах широко используются алгоритмы тайлинга (tile algorithm) небесной сферы с последующим упорядочиванием тайлов таким образом, чтобы максимизировать покрытие вероятностной карты за ограниченное время наблюдений. Для решения данной задачи применяются специальные алгоритмы, минимизирующие угловые перебросы между соседними полями (Salmon, 2016). При этом особое внимание уделяется учету геометрических ограничений и минимизации холостых перемещений телескопа.

Наряду с указанными подходами в практике наблюдений продолжают использоваться более простые и наглядные схемы обхода области неба, такие как последовательное сканирование с чередованием направления движения (Naghib, 2019). Эти методы не обеспечивают глобальной оптимальности, однако отличаются высокой надежностью, детерминированностью и простотой интеграции в системы автоматического управления телескопами, что делает их особенно привлекательными для небольших и средних обсерваторий.

Предлагаемый в настоящей работе алгоритм сканирования типа “Змейка” относится к данному классу методов и ориентирован на практическое применение в условиях реальных наблюдений. В отличие от более сложных оптимизационных схем, он обеспечивает однозначное и воспроизводимое построение маршрута сканирования, учитывает ограничения по минимальной высоте над горизонтом и звездному времени, а также позволяет эффективно покрывать заданную область неба при минимальных требованиях к вычислительным ресурсам.

Материалы и методы. Суть алгоритма сканирования неба по методу “Змейка” заключается в следующем: от стартовой позиции телескоп совершает дискретные перемещения вверх вдоль дуги склонения до определенной максимальной величины, проводя на каждом шаге съемку участка неба. Достигнув максимального значения по склонению телескоп осуществляет движение по дуге суточной параллели и затем также дискретно перемещается по дуге склонения, но уже в направлении вниз до минимального значения склонения и т.д. Совокупность таких последовательных волнообразных или синусоидальных перемещений будет напоминать движение пресмыкающихся, в частности змей (см. рис. 1).

CC BY NC

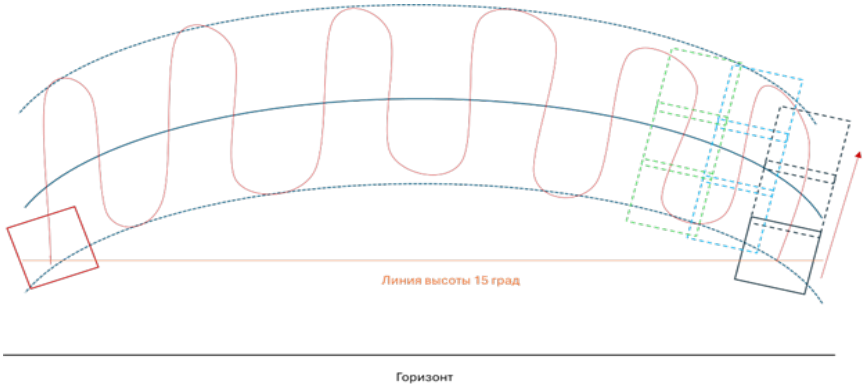


Рисунок 1 – Схематичная визуализация алгоритма Змейка. Синей сплошной линией обозначена линия небесного экватора. Пунктирные синие линии соответствуют суточным параллелям δ_{min} (нижняя пунктирная линия) и δ_{max} (верхняя пунктирная линия). Эти пунктирные линии соответствуют границам сканирования. Черный квадрат справа соответствует полю зрения для первого кадра (стартовой позиции). Красный квадрат слева - последний кадр в сканируемой области. Красная линия соответствует примерному обходу телескопом области неба.

Пусть имеется телескоп с полем зрения (полем кадра) W_x и W_y по оси X и Y соответственно, размещенный на поверхности Земли с географическими координатами λ и φ. Для определенной даты с помощью данного телескопа необходимо провести сканирование области неба, ограниченной по высоте над горизонтом h_{min}, в диапазоне склонений δ_{min} δ_{max}. На первом этапе необходимо найти экваториальные координаты (α и δ_{min}) входной точки наблюдений (стартовой позиции). Вторая координата (минимальное склонение, δ_{min}) задается пользователем. Например, для сканирования на ШОС–40 в обсерватории Ассы–Тургень по умолчанию задается δ_{min} = - 20, δ_{max} = 20 градусов и h_{min} = 15 градусов. Поэтому остается вычислить только прямое восхождение (α) для входной точки (Duffett–Smith, 2011; Meeus, 1998).

$$t_{min} = \arccos\left(\frac{\sin(h_{min}) - \sin(\delta_{min}) \times \sin(\varphi)}{\cos(\delta_{min}) \times \cos(\varphi)}\right) \quad (1)$$

$$t_{max} = 360 - \arccos\left(\frac{\sin(h_{min}) - \sin(\delta_{min}) \times \sin(\varphi)}{\cos(\delta_{min}) \times \cos(\varphi)}\right) \quad (2)$$

Известно, что координата α связана со локальным звездным временем LST и часовым углом t соотношением: α = LST - t. Для этого шага по формулам 1 и 2 в градусной необходимо предварительно оценить предельные часовые углы (t), выраженные в градусной мере, которые будут служить определенными маркерами для дальнейших оценок пределов наблюдений, а затем, вычислив локальное звездное время начала наблюдений, получаем α стартовой позиции (Kim, 2023). Таким образом, помимо нахождения входной точки, мы получили границы участка неба (t_{min}, t_{max}, δ_{min}, δ_{max}) для последующего сканирования.

После наведения телескопа на стартовую позицию осуществляется съемка

первых кадров из обзора участка неба с заданной экспозицией. Дальнейшие перемещения вдоль дуги склонения до предельного значения δ_{max} будут осуществляться в направлении вверх (в сторону увеличения δ).

Для вычисления последующих шагов вертикальных перемещений от стартовой позиции необходимо знать угловые размеры поля единичного кадра W_x и W_y, а также размеры нахлеста кадров при сканировании ΔW_x и ΔW_y. Съемка внахлест (с перекрытиями соседних кадров) необходима для полного покрытия участка неба без пропусков на граничных участках между кадрами. Например, для ШОС–40 имеются следующие угловые значения: $W_x = 3.5$ и $W_y = 2.5$ в градусах, в качестве нахлеста приняты параметры $\Delta W_x = 0.875$ и $\Delta W_y = 0.25$ град. При вертикальном перемещении в интервале от δ_{min} к δ_{max} координата склонения (δ) следующего шага вычисляется по следующей формуле:

$$\delta = \delta + W_y - \Delta W_y \qquad (3)$$

В формулах 3, 5 и 6 значения α и δ в правой части уравнений соответствуют предыдущему их значению (либо стартовой позиции), а в левой части представлены их новые присваиваемые значения. Важно отметить, что при вертикальных перемещениях величина прямого восхождения (α) остается одинаковым для всего прохода. При оценке каждого последующего вертикального шага по δ программа должна осуществлять проверку, чтобы текущее значение склонения находилось в диапазоне $\delta_{min} \le \delta \le \delta_{max}$. Если расчетная координата склонения последующего шага превосходит максимальный предел, то следующее смещение телескопа должно происходить вдоль суточной параллели (поворот “Змейки” вдоль суточной параллели, смещение по координате α).

Для расчета смещения по координате α предварительно оцениваем часовой угол данного смещения:

$$t = LST - (\alpha + W_x - \Delta W_x) \qquad (4)$$

Это необходимо для проверки условия $t_{min} \le t \le t_{max}$ при котором центр поля зрения телескопа находится в пределах сканируемой области по часовому углу. В случае, если это условие не выполняется, то процесс сканирования участка неба считается выполненным, и программа должна завершить работу. В случае если значение t удовлетворяет условию, то координата прямого восхождения смещения α вычисляется следующим образом:

$$\alpha = \alpha + W_x - \Delta W_x \qquad (5)$$

При выполнении перемещения вдоль суточной параллели значение склонения δ остается таким же, как на предыдущем шаге. Здесь важно отметить, что после перемещения по координате α на следующем шаге меняется направление сканирования по координтае δ в противоположную сторону от предыдущей

CC BY NC

иттерации (проходки). То есть, если расчетная величина δ превосходит верхний предел $\delta_{max,}$ то последующий проход сканирования по δ будет осуществляться по направлению к $\delta_{min.}$ При этом координата δ последующего шага оценивается по формуле:

$$\delta = \delta - W_y + \Delta W_y \qquad (6)$$

Таким образом, смещение по δ при движении вверх (от δ_{min} к δ_{max}) должно оцениваться по формуле 3, а в обратном направлении (от δ_{max} к δ_{min}) – по формуле 6. Перемещения вдоль суточной параллели осуществляются только в одном направлении и соответствуют уравнению 5.

Результаты и обсуждение. Рассмотренный алгоритм был реализован на языке программирования PHP для отладки и моделирования, а затем на языке C# для создания программного обеспечения по управлению широкоугольным телескопом ШОС–40 Ассы–Тургеньской обсерватории. В режиме отладки оценка времени осуществляется за счет суммирования времени экспозиции на каждом шаге с прибавлением ко времени начала наблюдения. В этом режиме не учитывается время, затрачиваемое на перемещение телескопа между точками наблюдений, считывание кадров и пр. В случае реальных наблюдений перед каждым последующим перемещением телескопа вдоль суточной параллели программа должна учитывать текущее время для точной оценки часового угла смещения (Формула 4). Также на каждом шаге необходимо контролировать высоту (в угловой мере) центра поля зрения телескопа над горизонтом для избежания попадания в зону ниже предела h_{min}.

Если принять параметры обсерватории Ассы–Тургень ($\phi = 43.22, \lambda = 77.87$ град), телескопа ШОС–40 ($W_x = 3.5$ и $W_y = 2.5$ град), параметры перекрытия кадров ($\Delta W_x = 0.875$ и $\Delta W_y = 0.25$ град), время единичной экспозиции 5 сек и количество кадров на каждый шаг как 3, то для даты наблюдений 22.03.2024 получаются следующие координаты точек обхода (см. Таблицу 1 и Рисунок 2):

Таблица 1 – Примерный результат работы алгоритма на дату 22.03.2025 для Ассы–Тургеньской обсерватории. Первые 20 и последние 3 шага с их значениями координат для наведения телескопа.

Проход	Серия кадров (шаги)	α (град)	δ (град)
1	1	75.5187	-20
1	2	75.5187	-17.75
1	3	75.5187	-15.5
1	4	75.5187	-13.25
1	5	75.5187	-11
1	6	75.5187	-8.75
1	7	75.5187	-6.5
1	8	75.5187	-4.25
1	9	75.5187	-2

1	10	75.5187	0.25
1	11	75.5187	2.5
1	12	75.5187	4.75
1	13	75.5187	7
1	14	75.5187	9.25
1	15	75.5187	11.5
1	16	75.5187	13.75
1	17	75.5187	16
1	18	75.5187	18.25
1	19	78.1437	18.25
2	20	78.1437	16
...	...	...	...
57	968	222.5187	13.75
57	969	222.5187	16
57	970	222.5187	18.25

В Таблице 1 приведены только начальные и конечные данные координат перемещений, ввиду значительного объема. В качестве стартового времени для этой даты принято время окончания астрономических сумерек T_{start} = 14:44 (UTC) по всемирному времени. На рисунке 1 приведена визуализация данной таблицы в полном объеме данных. Оценочное время полного сканирования участка неба соответствует ~ 4 ч 25 мин. За этот промежуток телескоп осуществляет 970 перемещений (шагов), что соответствует 57 вертикальным проходам.

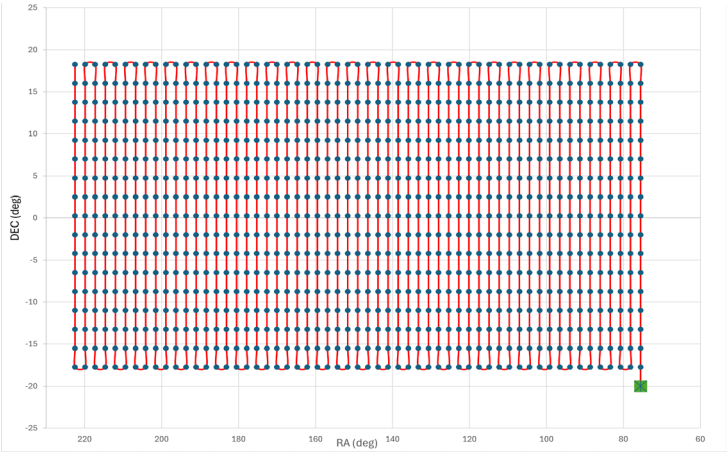


Рисунок 2 – Визуализация обхода участка неба методом “Змейка” для даты 22.03.2024 (согласно Таблице 1). Ось абсцисс соответствует координатам прямого восхождения (α) в градусах, ось ординат соответствует склонению (δ). Зеленый квадрат соответствует стартовой позиции (начало сканирования), синие точки соответствуют последовательным шагам съемки неба, красная линия визуализирует траекторию перемещения телескопа в течение наблюдательной ночи.

CC BY NC

Заключение. Разработанный алгоритм сканирования неба отличается относительной простотой для воспроизведения на любом современном языке программирования, что позволяет адаптировать его для большинства астрономических широкоугольных оптических систем с целью автоматизации наблюдательного процесса. Другим важным преимуществом метода является обзор интересуемой области небесной сферы без потерь данных между граничными участками отдельных кадров, что позволяет создать полную карту исследуемой области без наличия “слепых” зон. Работа телескопа по заданному алгоритму подразумевает минимальные перемещения, что позволяет оптимизировать время, затрачиваемое на перенаведение между шагами. Представленный алгоритма “Змейка” реализован в виде програмного блока для авторматизированных наблюдений на широкоугольной оптической системы ШОС–40 в Ассы–Тургеньской обсерватории, благодаря которому осуществляется регулярный обзорный мониторинг неба для поиска космических транзиентных событий (Aimuratov, 2025). Предложенная методика может быть использована для планирования обзорных наблюдений на любых иных обсерваториях, а также для разработки собственных программных продуктов для автоматизации телескопов.

References

Aimuratov Y. et.al. (2025) The Astronomical Hub: A Unified Ecosystem for Modern Astronomical Research. Galaxies. – Vol. 13. – № 5. Art. no. 99. DOI:10.3390/galaxies13050099 (in Eng.)

Almualla M., Coughlin M.W., Anand S., Alqassimi K., Guessoum N., Singer L.P. (2020) Dynamic scheduling: target of opportunity observations of gravitational wave events. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – Vol. 495. – № 4. OUP. – P. 4366–4371. DOI:10.1093/mnras/staa1498 (in Eng.)

Bellm E.C. et.al (2019) The Zwicky Transient Facility: System Overview, Performance, and First Results. Publications of the Astronomical Society of the Pacific. – Vol. 131. – № 995, IOP. – P. 018002. DOI:10.1088/1538–3873/aaecbe (in Eng.)

Duffett–Smith P., Zwart J. (2011) Practical Astronomy with your Calculator or Spreadsheet. Fourth edition, Cambridge University Press, United Kingdom. ISBN 978–0-521-14654-8 (in Eng.)

Dyer M. J. (2024) The Gravitational–wave Optical Transient Observer (GOTO). Ground–based and Airborne Telescopes X. – Vol. 13094. Art. no. 130941X. DOI:10.1117/12.3018305 (in Eng.)

Gupte N., Bartos I. (2020) Optimal gravitational–wave follow–up tiling strategies using a genetic algorithm. Physical Review D. – Vol. 101. № 12. Art. no. 123008. APS, 2020. DOI:10.1103/PhysRevD.101.123008 (in Eng.)

Ghosh S., Bloemen S., Nelemans G., Groot P. J., Price, L. R. (2016) Tiling strategies for optical follow–up of gravitational–wave triggers by telescopes with a wide field of view. Astronomy and Astrophysics. – Vol. 592. Art. no. A82. EDP. DOI:10.1051/0004-6361/201527712 (in Eng.)

Kim V., Izmailova I. (2023) Astronomical observation planner. Proceedings of the Institute for systems analysis of RAS. – Vol. 73. № 1. – P. 134–139. DOI:10.14357/20790279230115 (in Eng.)

Meeus J. (1998) Astronomical algorithms. Second edition. Richmond: Willmann–Bell, USA. ISBN: 0943396611 (in Eng.)

Naghib E., Yoachim P., Vanderbei R.J., Connolly A.J., Jones R.L. (2019) A Framework for Telescope Schedulers: With Applications to the Large Synoptic Survey Telescope. The Astronomical Journal. – Vol. 157. № 4. Art. no. 151, IOP. DOI:10.3847/1538-3881/aafece (in Eng.)

Ofek E.O. (2023) The Large Array Survey Telescope–Pipeline. I. Basic Image Reduction and Visit Coaddition. Publications of the Astronomical Society of the Pacific. – Vol. 135. – № 1054. Art. no. 124502, IOP. DOI:10.1088/1538-3873/ad0977 (in Eng.)

Parazin B., Coughlin M.W., Singer L.P., Gupta V., Anand S. (2022) Foraging with MUSHROOMS: A Mixed–integer Linear Programming Scheduler for Multimessenger Target of Opportunity Searches with the

Zwicky Transient Facility. The Astrophysical Journal. – Vol. 935. № 2. Art. no. 87. IOP, DOI:10.3847/1538-4357/ac7fa2 (in Eng.)

Salmon L., Hanlon, L., Jeffrey R. M., Martin–Carrillo A. (2020) Web application for galaxy–targeted follow–up of electromagnetic counterparts to gravitational wave sources. Astronomy and Astrophysics. Vol. 634. Art. no. A32, EDP, 2020. DOI:10.1051/0004-6361/201936573 (in Eng.)

CC BY NC

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 89–104

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.407

UDC: 538.94
IRSTI: 29.17.21

©Koshtybayev T.B.[1], Tatenov A.M.[1*], Aliyeva M.E.[2], Tugelbaeva G.T.[1], Zhanaliyeva G.Zh.[1], 2026.
[1]Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan;
[2]Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan.
[*]E-mail: a.tatenov1@gmail.com

STUDY OF THE ELECTROMAGNETIC FIELD BASED ON THERMODYNAMICS PRINCIPLES

Koshtybayev Talgat — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: koshtybayev70@mail.ru, https://orcid.org/0009-0004-7344-6801;
Tatenov Adambek — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: a.tatenov1@gmail.com, https://orcid.org/0000–0003–4767–5788;
Aliyeva Moldir — Master of sciences, Senior lecturer, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: moldir-2008@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0440-6211;
Tugelbaeva Gulnazia — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: tugelbaevagul5@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-0245-7584;
Zhanaliyeva Gulzhaina — Master of Pedagogical Sciences, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com, https://orcid.org/0009–0008–4554–7604.

Abstract. Analyzing the possibilities and disadvantages of Maxwell's equations for the electromagnetic field with respect to energy, the range of these equations has been expanded through research based on thermodynamic principles. According to the idea of applying the equivalence principle for heat and work to nonequilibrium systems, energy transformations in a closed current-carrying system have been theoretically investigated using an energy-dynamic approach called the power theory of real processes. From this point of view, which does not require reasons for changing the parameters characterizing the system, the conversion of all types of energy into useful energy during non-stationary processes is proved. In the section "research methods" of the article, the possibilities and relevance of energy dynamics are comprehensively disclosed and the conditions of its correlation with the topic of the article are analyzed.

Without the help of a single electromagnetic field equation using energy dynamics, Maxwell's electrodynamics was supplemented by six different works performed by charge and current in a current-carrying system. In order to reveal the thermodynamic properties of the electromagnetic field, the energy accumulated in a single volume of a stationary system in external electric and magnetic fields was considered through energy-dynamic relations. When the energies of the electric and magnetic fields are converted into each other, a balance is restored between the energy power, which does not change the energy and entropy of the system. Using this circumstance, the expressions of electromotive and magnetomotive forces are derived. In theoretical studies, Joule losses under electrical conductivity conditions were not taken into account, while it was assumed that the balance between capacities was performed for all individual parts of the system. Without these conditions, the transition to differential equations would not have been possible. In contrast to Maxwell's equations, the resulting equations, as in the main equation of energy dynamics, provide for the full derivatives of vector quantities with respect to time.

Keywords: electromagnetic field, energy dynamics, Maxwell's equations, current-carrying system, electric and magnetic energy, heat and work, conservation law, conduction current, charge

For citations: Koshtybayev T.B., Tatenov A.M., Aliyeva M.E., Tugelbaeva G.T., Zhanaliyeva G.Zh. Study of the Electromagnetic Field Based on Thermodynamics Principles. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 89–104. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.407

©Коштыбаев Т.Б.[1], Татенов А.М.[1]*, Алиева М.Е.[2], Тугелбаева Г.Т.[1], Жаналиева Г.Ж.[1], 2026.

[1]Қазақ ұлттық педагогикалық қыздар университеті, Алматы, Қазақстан;
[2]Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.
*E-mail: a.tatenov1@gmail.com

ЭЛЕКТРОМАГНИТТІК ӨРІСТІ ТЕРМОДИНАМИКАЛЫҚ БАСТАМАЛАР ТҰРҒЫСЫНДА ЗЕРТТЕУ

Қоштыбаев Талғат — физика–математика ғылымдарының кандидаты, доцент, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: koshtybayev70@mail.ru, https://orcid.org/0009-0004-7344-6801;
Татенов Адамбек — физика–математика ғылымдарының кандидаты, доцент, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: a.tatenov1@gmail.com, https://orcid.org/0000–0003–4767–5788;
Алиева Мөлдір — жаратылыстану ғылымдарының магистрі, аға оқытушы, Абай атындағы Казақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: moldir-2008@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0440-6211;
Тугелбаева Гүлназия — химия ғылымдарының кандидаты, доцент, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: tugelbaevagul5@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-0245-7584;

Жаналиева Гулжайна — педагогика ғылымдарының магистрі, оқытушы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com, https://orcid.org/0009–0008–4554–7604.

Аннотация. Максвеллдің электромагниттік өріске арналған теңдеулерінің мүмкіндіктері мен энергияға қатысты кемшілік тұстарына талдау жасай отырып, бұл теңдеулердің ауқымы термодинамикалық бастамаларға негізделеген зерттеулер арқылы кеңейтілді. Жылу мен жұмысқа арналған эквиваленттілік принципін тепе–теңсіздік жүйелерге қолдану идеясына сәйкес нақтылы процестердің қуаттылық теориясы деп аталатын энергодинамикалық көзқарас арқылы ток тасымалданатын тұйық жүйедегі энергия түрленулері теориялық тұрғыда зерттелді. Жүйені сипаттайтын параметрлердің өзгеру себептерін қажет етпейтін бұл көзқарас бойынша стационарлы емес процестер кезіндегі энергияның барлық түрінің пайдалы энергияға түрленуі дәлелденді. Мақаланың зерттеу әдістері бөлімінде энергодинамиканың мүмкіндіктері мен өзектілігі жан–жақты ашылып көрсетілді және оның мақала тақырыбына қатыстылық шарттары сараланды. Энергодинамиканы қолданып электромагниттік өрістің бірде бір теңдеуінің көмегенсіз Максвеллдің электродинамикасы тогы бар жүйедегі заряд пен токтың атқаратын алты түрлі жұмыстарымен толықтырылды. Электромагниттік өрістің термодинамикалық қасиеттерін ашу мақсатында сыртқы электр және магнит өрістеріндегі қозғалмай тұрған жүйенің бірлік көлемінде жинақталған энергия энергодинамикалық қатынас арқылы қарастырылды. Электр және магнит өрістерінің энергиялары бір–біріне түрленген кезде жүйенің энергиясы мен энтропиясын өзгертпейтін энергия қуаттарының арасында баланс бойынша электр қозғаушы күш пен магниттік қозғаушы күштердің өрнектері шығарылып көрсетілді. Теориялық зерттеулер кезінде электрөткізгіштік жағдайындағы джоульдік шығындар ескерілген жоқ, сонымен бірге қуаттар арасындағы баланс жүйенің барлық жекелеген бөліктері үшін орындалады деп есептелді. Аталған шарттарсыз дифференциалдық түрдегі теңдеулерге өту мүмкін болмай қалар еді. Энергодинамиканың негізгі теңдеуіндегі секілді алынған теңдеулердің Максвелл теңдеулерінен айырмашылығы бұларда векторлық шамалардың уақыт бойынша толық туындылары қарастырылған.

Түйін сөздер: электромагниттік өріс, энергодинамика, Максвелл теңдеулері, ток тасымалданатын жүйе, электр және магниттік энергия, жылу және жұмыс, сақталу заңы, өткізгіштік ток, заряд

©Коштыбаев Т.Б.[1], Татенов А.М.[1]*, Алиева М.Е.[2], Тугелбаева Г.Т.[1], Жаналиева Г.Ж.[1], 2026.
[1]Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан;
[2]Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан.
*E-mail: a.tatenov1@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ОСНОВЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРИНЦИПОВ

Коштыбаев Талгат — кандидат физико–математических наук, доцент, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: koshtybayev70@mail.ru, https://orcid.org/0009-0004-7344-6801;
Татенов Адамбек — кандидат физико–математических наук, доцент, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: a.tatenov1@gmail.com, https://orcid.org/0000–0003–4767–5788;
Алиева Молдир — магистр естественных наук, старший преподаватель, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: moldir-2008@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0440-6211;
Тугелбаева Гүлназия — кандидат химических наук, доцент, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: tugelbaevagul5@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-0245-7584;
Жаналиева Гулжайна — магистр педагогических наук, преподаватель, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com, https://orcid.org/0009–0008–4554–7604.

Аннотация. Анализируя возможности и ограничения уравнений Максвелла для описания электромагнитного поля с точки зрения энергетических процессов, авторы расширяют область их интерпретации за счет исследований, основанных на термодинамических принципах. Исходя из идеи применения принципа эквивалентности тепла и работы к неравновесным системам, преобразования энергии в замкнутой токонесущей системе были теоретически исследованы с использованием энергодинамического подхода, известного как теория мощности реальных процессов. С этих позиций, не требующих установления причин изменения параметров, характеризующих систему, показана возможность преобразования различных видов энергии в полезную энергию при нестационарных процессах. В разделе «Методы исследования» всесторонне раскрываются возможности и актуальность энергодинамики, а также анализируются условия ее соотнесения с тематикой статьи. Без привлечения уравнений электромагнитного поля и с использованием аппарата энергодинамики классическая электродинамика Максвелла была дополнена шестью видами работы, совершаемыми зарядом и током в токонесущей системе. С целью выявления термодинамических свойств электромагнитного поля энергия, накопленная в единичном объеме неподвижной системы во внешних электрическом и магнитном полях, рассматривалась на основе энергодинамических соотношений. Показано,

что при взаимном преобразовании энергий электрического и магнитного полей между соответствующими мощностями устанавливается баланс, не изменяющий полную энергию и энтропию системы. На основе этого выведены выражения для электродвижущей и магнитодвижущей сил. В теоретическом анализе джоулевы потери в условиях электропроводности не учитывались; при этом предполагалось, что баланс мощностей выполняется для всех отдельных частей системы. Без указанных допущений переход к уравнениям в дифференциальной форме был бы невозможен. В отличие от уравнений Максвелла, в полученных уравнениях, подобно основному уравнению энергодинамики, предусмотрены полные производные векторных величин по времени.

Ключевые слова: электромагнитное поле, энергодинамика, уравнения Максвелла, токонесущая система, электрическая и магнитная энергия, тепло и работа, закон сохранения, ток проводимости, заряд

Кіріспе. Максвеллдің электромагнетизм үшін жазылған теңдеулерінің қорытылып шығарылуы кезінде кейбір теориялық заңдылықтар мен математикалық түрлендірулерге қатысты төмендегідей жағдайлардың орын алғандығына тоқталып өтпекпіз:

– электр зарядына арналған Гаусс заңы, токтардан пайда болатын магнит өрісіне арналған Ампер заңы мен Фарадейдің электромагниттік индукция заңы біртұтас математикалық теңдеулер жүйесіне біріктірілген болатын;

– электр және магнит өрістерінің өзгерістерін байланыстыратын, электромагниттік толқын мен жарық жылдамдығын болжай алатын ығысу тогы атты ұғым енгізілген еді;

– зарядтың симметриялылық және сақталу заңдары негізге алынған болатын.

Максвелл теңдеулерінде электродинамиканың барлық түсініктері қамтылған және оларды негізгі деп саналатын принциптерді (бастамаларды) қолдана отырып қорытып шығаруға болмайды деген пікір қалыптасып қалғандығын атап өтуіміз керек. Алайда, бұл теңдеулер қайтымсыз процестердің термодинамикасын энергияны пайдалы бағытқа түрлендіретін процестердің термодинамикасына айналдыратын энергодинамиканың салдары екендігін дәлелдеуге болады. Басқаша айтсақ, Максвелл теңдеулерін электрлік және магниттік тұйық контурлардағы энергия түрленулерін сипаттаушы аппарат ретінде қолдану тиімді.

Максвелл құбылыстарды көрнекілік модельдер арқылы зерттеуден бас тартып, оларды математикалық тұрғыда қарастыруды ұсынды. Оның жасаған теориясында өрістер материялық ортаның қасиеттерін иеленді де, материяны өріс пен затқа ретінде қарау мүмкіндігі пайда болды (Ландау et.al., 2012:242; Muhammad Abdullah and others 2025). Максвелл теңдеулерінің шешімдері–электромагниттік толқын, ал электромагниттік толқынның электрлік ($\vec{E}$) және магниттік ($\vec{H}$) құраушылары өзара синфазалы түрде тербелетіндігін М. Фарадей тәжірибе жүзіндегі анықтаған болатын. Бірақ, оның бұл жаңалығы электромагниттік өріс энергиясының $W = \frac{\varepsilon_0 \vec{E}^2}{2} + \frac{\mu_0 \vec{H}^2}{2}$ түрдегі сақталу заңына қайшы келді, себебі

электромагниттік өріс өзін пайда етуші көзбен энергия алмасқанда ғана мұндай синфазалы тербелісті жүзеге асыруға болады. Ал, Максвелл көзден жырақта орналасқан жерлерде де өрістің өмір сүре алатындығын және ол абсолют бос кеңістікте де толқын түрінде тарала алатындығын постулат түрінде көрсетті. Электромагниттік өріс теориясы электромагнетизмді жарықпен ұштастыра білді, бұл М. Фарадейдің өмір бойғы арманы еді. Десек те, Максвелл теңдеулері мен постулаттарына негізделеген электромагнетизм теориясы мынадай мәселелерге (сұрақтарға) қанағаттанарлық жауаптар таба алмады:

– электр заряды деген не және оның тарту, тебу күштерінің табиғаты қандай?

– ығысу тогының өткізгіштік токтан физикалық тұрғыдағы айырмашылықтары қандай?

– Максвеллдің дәуірінде электродинамикалық энергия магниттік энергия деп аталған болса, ал 1820 жылы Ампер заттағы молекулалық энергиялардың болатындығын дәлелдеген болса, онда құйынды электр өрісінің табиғатын қалай түсіндіруге болады?

Максвелл теориясында көптеген құбылыстар мағыналары осы кезге дейін толықтай ашылмаған *векторлық магниттік потенциал* мен *ығысу тогы* арқылы түсіндірілді. Бұл теорияда магнит өрісі жұмыс атқармайды, себебі өріс күштері токқа нормаль бойымен бағытталған. Сонымен бірге, Максвелл теориясы Ньютонның 3–ші заңына қайшы, өйткені теорияда қиылысатын токтардың да өзара әсерлесулері ескерілген. Максвелл ұсынған электромагниттік өрістің толқындық теңдеулері Галилей түрлендірулерімен сәйкес келмейді, осы себептен Ньютон механикасынан түбегейлі бас тартып, кванттық механика мен салыстырмалылық теориясына ауысуға тура келді. Соңғы екі теорияны біріктіру бағытындағы зерттеулер сәтсіз аяқталып жатқандығы белгілі. Бұл жағдайды тұтастай теориялық физиканың дамуындағы тоқырау десек те болады.

Жылу мен жұмысқа арналған эквиваленттілік принципін тепе–теңсіздік жүйелерге қолданатын болсақ, онда біз өзара әсерлесетін және салыстырмалы түрдегі қозғалыстар жасайтын денелер күйлерінің функциясы болып табылатын толық энергияның сақталу заңын алатын боламыз. Мұндай тұйық жүйенің барлық түрдегі энергияларына бір сөзбен ішкі энергия деп қарауға болады. Бұл жағдай энергияны сыртқы және ішкі деп бөлуге болмайтындығын растайды. Энергодинамика тұрғысынан қарағанда жүйенің энергиясы деген тұтас бір жалғыз ғана ұғым болуы тиіс, мұның қасында толық, сыртқы, ішкі, меншікті энергия дегендер артық (қажетсіз) болып қалады. Энергодинамикаға нақтылы процестердің қуаттылық теориясы деп қарауға болады (гректің enérgeia–әсер; dynamicos–күш) және ол–нақтылы, стационарлы емес (динамикалық) жүйелердегі барлық түрдегі энергияның берілуі мен түрленуіне қатысты табиғи және технологиялық процестерді біртұтас теория шеңберінде қарастыратын классикалық термодинамиканың ұлғайған бейнесі. Сондықтан да, оны қайтымды және қайтымсыз процестерге қолдана беруге болады және ол жүйені сипаттайтын параметрлердің өзгеру себептерін қажет етпейді (Sindelka M. et.al., 2010:180; Barbas A., et.al., 2015:192).

Мақалада энергияның тасымалдану және түрлену теорияларының бірлестігі түріндегі энергодинамика принциптерінің электродинамикалық құбылыстарға қатысты тұстары бағаланды. Энергодинамиканың классикалық термодинамика, электродинамика және т.с.с алдыңғы кезеңдерде өмір сүрген басқа да теориялардан басты артықшылықтары мыналар:

– энергодинамика электродинамиканың негізгі заңдары мен теңдеулерін дедуктивті жолмен шығарып бере алады;

– энергодинамика классикалық термодинамикадағы паралогизмдер мен шектеулерді жояды;

– энергодинамика жалпылама координаталар мен күштер арқылы кез–келген жүйелер мен электромагниттік өрістерге арналған энергияның тасымалдану принциптерін жасап бере алады.

– энергодинамика электр және магнит өрістерін энергия мен импульстің сақталу заңдары бойынша байланыстыра отырып Максвеллдің электродинамикасына альтернативті көзқарастармен қарайды;

– энергодинамикада күштер жүйе энергиясынан жалпылымы координаталар бойынша алынған туындығы тең деп есептеледі, бұл жағдай электромагниттік әсерлесулерді қайтымсыз процестердің термодинамикасы шеңберінде қарастыруға мүмкіндік береді;

– энергодинамикада термодинамиканыны электромагниттік өрістері бар жүйелерге экстрополяциялауға қатысты туындаған мәселелер энергия мен импульстің сақталу заңдары аясында түбегейлі шешіледі;

– энергодинамика жағдайында электродинамиканы дербес жағдай деп қарастыруға болады.

– бастапқыда жылулық машиналарға ғана арналған термодинамикамен салыстырғанда энергодинамика энергияның барлық түрлеріне бірыңғай математикалық аппарат қолданады.

– классикалық термодинамика тек тепе–теңділік күйлермен ғана жұмыс жасайды, ал энергодинамика болса потенциалдар градиентін жүйенің басты қозғаушы күштері деп санай отырып тепе–теңсіз процестерді тікелей сипаттап бере алады;

– энергодинамикада бір–біріне алыстау сипаттағы көптеген шамалардың орнына экстенсивті параметр (заряд) мен оған сәйкес келетін интенсивті параметр (потенциал) енгізілген, бұл барлық түрдегі энергияның таралуын біртұтас ағындық логика арқылы іске асырады.

– дәстүрлі теорияларда көптеген процестер скаляр түрде сипатталады, ал энергодинамикада энергияның көлемдерде таралуы кезінде кеңістіктік бағдар ескеріледі. Бұл жағдай нақты техникалық қондырғыларды модельдеу үшін маңызды шарт болып табылады.

Энергодинамика кеңістікті біртексіз орталардағы энергияның түрленулерін энергияның сақталу заңы тұрғысында зерттеуге негізделген немесе стационарлы емес процестер кезіндегі энергияның барлық түрінің пайдалы энергияға түрленуін қарастырады. Олай болса, оны электромагниттік құбылыстар кезіндегі

энергияның түрленуін сандық және сапалық тұрғыда сипаттау мақсатында да пайдалансақ болады.

Ұсынылып отырған осы мақалада Максвелл теңдеулерін тепе–теңсіздік процестер термодинамикасының принциптері негізінде жаза отырып, электр және магнит энергияларының бір–біріне айналуы (түрленуі) энергодинамикалық әдіс бойынша түсіндірілетін болады.

Зерттеу материалдары. Энергодинамиканың зерттеу материалдарына теориялық негіздемелер, яғни термодинамика бастамалары, энергияның сақталу және айналы заңдары, материяның макроскоптық қасиеттері және энергия көздері туралы мәліметтер, энергияны түрлендіру мен таратудың қазіргі заманғы әдістері жатады. Энергодинамиканы электродинамикада қолдану энергияны түрлендіру, тарату және сақтау (токтың жұмысы, қуат, электромагниттік өріс) мен олардың электрлік және магниттік құбылыстармен байланыстары, электромагниттік сәулелерді шығару мен олардың затпен әсерлесулеріне қатысты теориялық зерттеулерді қамтиды. Бұл жерде, негізгі материалдарға Пойнтинг теоремасы, Джоуль–Ленц заңы, электромагниттік индукция мен қайтымсыз процестердің термодинамикасы жатады.

Зерттеу әдістері. Осыған дейін күйлердің тізбектелген өзгерісі болып келген «процесс» ұғымына ендігі жерде зерттеу нысанының макроскоптық қасиеттерінің кез–келген кеңістікті–уақытты өзгерістері деп қарауымызға тура келеді. Осылайша «процесс» ұғымына жүйедегі әрқилы әсерлесулердің кеңістіктегі тасымалымен байланысты болатын күй өзгерістері қатысады. Олай болса, стационарлық процесс деп зерттеу нысанымен бірге қозғалатын санақ жүйесіндегі күйлердің тізбектелген өзгерістерін айтуға болады. Нақтылы процестерге көшкен кезде термодинамиканың зерттеу нысанының өзгерістерін ескерген жөн. Классикалық термодинамика температура, қысым, химиялық және электрлік потенциалдары секілді параметрлері жүйенің барлық нүктелерінде бірмәнді болатын ішкі тепе–теңділікті (кеңістікті біртекті) жүйелерді қарастырумен ғана шектеледі (Sachhin S. M. and others 2025). Мұндай параметрлердің өзгерістерінің нәтижесінде термодинамиканың теңдеулері теңсіздіктерге айналып жатады. Энергодинамикада зерттеу нысаны ретінде кеңістікті біртексіз жүйелер алынған және олардың өлшемі (көлемі) ондағы біртексіздіктің ауқымына байланысты, сондықтан да энергодинамика наноәлем мен мегаәлем аралығындағы материялық нысандарды қарастыруға қауқарлы. Мұндай зерттеу нысандары ретінде әсерлесуші денелердің тұйықталған жүйелері мен кеңістіктік біртексіз жүйелерді қарастыра аламыз. Жаратылыстың заманауи бет–бейнесі міне осындай. Классикалық термодинамикадағы қоршаған ортаны қосқандағы ұлғайған жүйе дегеніміз энергодинамикада зерттелініп жатқан жүйенің бір бөлігі ғана болып табылады, яғни энергодинамика әсерлесуші денелер мен бөлшектерді біртұтас тепе–теңсіз нысан түрінде қарастырады. Осы тұрғыдан алғанда оның зерттеу әдістері механика, гидродинамика және электродинамика секілді өрістік теорияларға қайшы келеді. Өзіміз білетіндей, аталған теориялар жеке–даралық пен тепе–теңділік болжамдар бойынша жүйені шексіз тепе–тең элементтер жиынына бөліп тастайды да,

жүйенің қасиеттерін осы бөліктердің қасиеттерін жинақтау (интегралдау) арқылы анықтайды. Бірақ, бұл тәсіл барлық жағдайда оң нәтиже бере бермейді. Оңтайлы нәтижелерге энергодинамикада қосымша параметрлер енгізу, материяның өрістік және корпускулалық пішіндерінің кеңістіктік біртексіздігін ескеру арқылы және макрожүйелерді термодинамикалық бастамалар мен статистикалық әдістер арқылы зерттеу бойынша қол жеткізуге болады.

Нәтижелер. *Тогы бар жүйедегі электростатикалық және электродинамикалық жұмыстар.* Әдетте, Лоренц күші токқа перпендикуляр болғандықтан, магнит өрісі жұмыс атқармайды деп есептейміз. Алайда, электромагниттік күштердің айналдырушы моменттері ескерілмегендіктен, аталған пікір қате болып табылады. Керісінше, әрбір энергия тасымалдағыш үш түрлі элементар жұмыстарды атқара алады. Тогы бар жүйеде мұндай энергия тасығыштарға 6 түрлі жұмыс атқаратын заряд (q) пен токты ($\vec{j}_e$) жатқызамыз. Жүйе энергиясының W_e электрлік құраушысы тек q заряд арқылы ғана емес, сонымен бірге дипольдік $\vec{D}$ момент пен электрлік $\vec{\varphi}_e$ векторлық потенциалдырмен де сипатталады, яғни $W_e = W_e\left(q, \vec{D}, \vec{\varphi}_e\right)$. Оның толық дифференциалы

$$dW_e = \varphi dq + \vec{E} d\vec{D} + \vec{M}_e d\vec{\varphi}_e \qquad (1)$$

Мұндағы $\varphi = \frac{\partial W_e}{\partial q}$ –скаляр (электрлік) потенциал; $\vec{E} = \frac{\partial W_e}{\partial \vec{D}}$ және $\vec{M}_e = \frac{\partial W_e}{\partial \vec{\varphi}_e}$ –электростатикалық өрістің кернеулігі мен оның моменті, соңғысы дипольдерді өріс бағытында ұстау қызметін атқарады. Осы өрнекке сәйкес, тогы бар жүйе үш түрлі dA_{e_1} элементар жұмыстарды атқара алады. Оның біріншісі dA_{e_1} , ол жүйенің потенциалы φ–ге тең аймағына бір аймағына q зарядты енгізу жұмысы деп аталады: $dA_{e_1} = \varphi dq$. (1)–теңдіктің оң жағындағы екінші мүше жүйедегі зарядтың таралып орналасуы кезінде бір жерде артық зарядтың пайда болып, ал бір жерлерде зарядтың жетіспеуі салдарынан пайда болатын полярлану жұмысы немесе потенциалы φ–ге тең біртексіз өрістегі q зарядтың орын ауыстыруы кезінде атқарылатын жұмыс болып табылады: $dA_{e_2} = \vec{E} d\vec{D} = -q d\varphi$. Конденсаторлар мен аккумуляторларды зарядтау процесі кезінде осындай жұмыс атқарылады және осы кезде пайда болған токтың әсерін ескермесе де болады. (1)–теңдіктегі үшінші мүше тосын күштердің атқаратын жұмысын (магниттелу жұмысы) білдіреді: $dA_{e_3} = \vec{M}_e d\vec{\varphi}_e$. Мұндай жұмыс айналмалы электростатикалық генераторларда немесе айналмалы электр өрісі бар электростатикалық қозғалтқыштарда атқарылады (Petrov . al., 2010: 25; Markel V., al., 2012:95).

Енді, зарядтардың реттелген қозалысына негізделген жүйені қарастырамыз, егер де жүйедегі $\vec{j}_e = q\vec{\upsilon}_e$ токтың $\vec{\lambda}_e = \frac{d\vec{j}_e}{dV}$ тығыздығы әрбір қимада немесе жүйенің барлық көлемінде біркелкі таралмаған болса, онда бұл жағдайда да $\vec{Z}_\upsilon$

таралу моменті пайда болады және $\nabla \vec{Z}_{\upsilon} = \vec{\lambda}_j$. Бұл жағдай магнит өрісінің де көзі болатындығын білдіреді, яғни электр өрісі еркін немес байланысқан зарядтардан пайда болса, ал кез–келген тұйықталған немесе тұйықталмаған токтар магнит өрісінің көзі болып табылады. Молекулалық токтар құйынды магнит өрісінің көзі ретінде қарастырылады.

Жүйе энергиясының W_i магниттік құраушысы да (1) секілді тек $\vec{j}_e = q\vec{\upsilon}_e$ токпен ғана емес, сонымен бірге өзара тәуелсіз қосымша параметрлер мен де сипатталатын болады. Оның толық дифференциалы $dW_i = \vec{\psi}_i\, d\vec{j}_e + \vec{F}_i\, d\vec{r}_i + \vec{M}_i\, d\vec{\varphi}_i$. Мұндағы $\vec{\psi}_i$ –векторлық магниттік потенциал; $\vec{F}_i$ –бойлық магнит өрісінің әсері; $\vec{M}_i$ –құйынды магнит өрісінің айналдырушы моменті. Олай болса, тогы бар электродинамикалық (магниттік) энерегиясы бар жүйеде де үш түрлі жұмыс атқарылады екен. Оның біріншісі жүйедегі токтың пайда болуымен байланысты: $dA_{m_1} = \vec{\upsilon}_e d\vec{j}_e$. Ал екіншісі токтың жүйе көлемінде қайта таралуымен (магниттік полярлануға) байланысты және оны табиғаты магниттік болып келген $\vec{F}_i = Q\vec{X}_m$ әсерлер атқарады: $dA_{m_2} = \vec{H}d\vec{B}$, мұндағы $\vec{X}_m = \left(\nabla \vec{\upsilon}_e\right)^2$. Үшінші жұмысты Лоренц күшінің $\vec{M}_i$ моменті атқарады: $dA_{m_3} = \vec{M}\ d\vec{\varphi}$. Байқап отырғанымыздай, энергодинамика Максвеллдің электродинамикасын электромагниттік өрістің бірде бір теңдеуінің көмегенсіз алты жұмыспен толықтырып отыр (Макаров. 2022:102).

Электромагниттік өрістің термодинамикалық қасиеттері. Сыртқы электр ($\vec{E}$) және магнит ($\vec{H}$) өрістерінде қозғалмай тұрған жүйенің бірлік көлемінде жинақталған U энергияны электр ($\vec{D}$) және магнит ($\vec{B}$) инукциясы векторларына тәуелді функция түрінде қарастырсақ болады, яғни $U = U\left(\vec{D}\left(\vec{E}\right), \vec{B}\left(\vec{H}\right)\right)$. Осы аталған шамалардың арасындағы байланыстарды анықтайтын энергодинамикалық қатынастың түрі мынадай болады:

$$dU = \vec{E}d\vec{D} + \vec{H}d\vec{B} \qquad (2)$$

Оң жақтағы бірінші мүше ((1)–гі екінші мүше) $dA_{e_2} = \vec{E}d\vec{D}$ $qd\varphi$ –полярлану жұмысы, ал екінші мүше $dA_m = \vec{H}d\vec{B}$ –магниттелу жұмысы. Жүйеде қуаттары

$$P_m = \frac{\vec{u}\ \vec{}}{dt}, \quad P_m = \frac{\vec{u}\ \vec{}}{dt} \qquad (3)$$

қатынастар бойынша анықталатын электр және магнит өрістерінің энергиялары өзара түрленген кездегі жүйенің энергиясы мен энтропиясын өзгермейтін болса, онда энергия қуаттарының арасында $P_e = -P_m$ түрдегі тепе–теңділігі орнайтын болады. Бұл жағдайдың математикалық берілісі төмендегідей:

$$\vec{E}\frac{d\vec{D}}{dt} = -\vec{H}\frac{d\vec{B}}{dt} \qquad (4)$$

Әртүрлі S_e қимадан құралған ұзындығы L_e тұйық электрлік контур мен біртексіз S_m қимадан тұратын ұзындығы L_m тұйық магнитті өткізгіштен тұратын жүйе үшін (3)–теңдік интегралдық түрде жазылатын болады:

$$P_e = \vec{E}\frac{d\vec{D}}{dt}dV_e, \qquad P_m = \int \vec{H}\frac{d\vec{B}}{dt}dV_m \qquad (5)$$

Мұндағы $dV_{ù} = dL\ dS$ және $dV_{ù} = dL\ dS$ – көлем элементтері; dL , dL_m және dS_m, dS_m – электрлік контур мен магниттік өткізгіштің ұзындықтары мен қималарының векторлық элементтері (энергодинамика элементтері). Осы параметрлер арқылы (5)–ті қайта жазып өтейік:

$$P_m = \int \vec{H}d\vec{L}_m \int \frac{d\vec{B}}{dt}d\vec{S}_m = \varepsilon_m J_m \qquad (6)$$

$$P_m = \int \vec{H}d\vec{L}_m \int \frac{d\vec{B}}{dt}d\vec{S}_m = \varepsilon_m J_m \qquad (7)$$

Бұл өрнектерде

$$\grave{u}_m = \int \frac{d\vec{B}}{dt}\ \vec{}_m, \qquad \grave{u}_m = \int \frac{d\vec{B}}{dt}\ \vec{}_m \qquad (8)$$

электр және магнит ығысулардың толық ағыны (контур мен өткізгіш қималарын тесіп өтетін күш сызықтарының саны), ал

$$\varepsilon_e = \int \vec{\grave{u}}\ \vec{}_e\ , \quad \varepsilon_m = \int \vec{\grave{u}}\ \vec{}_m$$

Жоғарыда келтірілген (6)–(8) өрнектер өте аз көлемдердегі өтіп жатқан процестердің жүйеге қатысты жиынтық үлесін анықтау мақсатындағы интегралдық бейнеде берілуі деп қабылдау керек. $\vec{E}$ және $\vec{H}$ векторларының контур мен өткізгішті бойлай жасайтын циркуляциялары бойынша анықталатын электр қозғаушы күш (ЭҚҚ) пен магнит қозғаушы күш (МҚҚ). (8)–ді басқаша жазамыз:

$$J_e = Y_{ee}\varepsilon_e + Y_{em}\varepsilon_m\ , \qquad (9)$$

$$J_m = Y_{me}\varepsilon_e + Y_{mm}\varepsilon_m \qquad (10)$$

Бұл өрнектердегі $Y_{ee}\varepsilon_e$ және $Y_{mm}\varepsilon_m$ диагоналды мүшелер өткізігіштік ток ($I_e = Y_{ee}\varepsilon_e$) пен оның әзірге беймәлім ұқсастығы болып табылатын магниттік токты ($I_m = Y_{mm}\varepsilon_m$) сипаттайды. Ал,

$Y_{em}\varepsilon_m$ және $Y_{me}\varepsilon_e$ мүшелер электр энергиясының магниттік энергияға және керісінше айналуларды (түрленулерді) сипаттайды. Олай болса, осы айтылған жағдайларды ескере отырып, (6) мен (7) теңдіктерді қарапайым түрлерге келтіруге болады:

$$\frac{J_e}{\varepsilon_m} = -\frac{J_m}{\varepsilon_e} \qquad (11)$$

Осы қатынасты (9) және (10)–мен салыстырсақ, онда (11)-дің сол жақ бөлігі Y_{em} коэффициентін, ал оң жақ бөлігі Y_{me} коэффициентін анықтап береді, яғни

$$Y_{em} = -Y_{me} \qquad (12)$$

Бұл коэффициенттердің шамасы мен өлшемдері бірліктер жүйесін таңдап алуға байланысты. СИ жүйесінде $Y_{em} = -Y_{me} = 1$, сондықтан да (12)–нің орнына төмендегі теңдіктер қолданылатын болады:

$$\varepsilon_e = -\int \frac{d\vec{B}}{dt} d\vec{S}_m \,, \qquad (13)$$

$$\varepsilon_m = \int \frac{d\vec{D}}{dt} d\vec{S}_e \qquad (14)$$

(13)–өрнек Фарадей заңына сәйкес келеді: ЭҚҚ магниттік ағынға шама жағынан тең де, бағыт жағынан қарама–қарсы. (13) пен (14)–ті түрлендіріп жазайық:

$$\int rot\vec{E} d\vec{S}_m = -\int \frac{d\vec{B}}{dt} d\vec{S}_m$$

$$\int rot\vec{H} d\vec{S}_e = \int \frac{d\vec{D}}{dt} d\vec{S}_e$$

Бұл өрнектердің дифференциалдық формасы

CC BY NC

$$rot\vec{E} = -\frac{d\vec{B}}{dt} \qquad (15)$$

$$rot\vec{H} = \frac{d\vec{D}}{dt} \qquad (16)$$

Бұл теңдеулердің Максвелл теңдеулерінен айырмашылығы бұларда векторлық шамалардың уақыт бойынша толық туындылары қарастырылған және энергодинамиканың (2)–түрдегі негізгі теңдеуінде де солай. Шын мәнісінде, Максвеллдің өзі де алғашында ЭҚК–ті магнит ағынының (Φ) уақыт бойынша

$\frac{d\Phi}{dt}$ толық дифференциалы түрінде анықтаған болатын. Егер, жүйеде полярлану және магниттелу процестері жоқ деп санайтын болсақ, онда (15) және (16) теңдеулер мынадай түрлерде жазылады:

$$\frac{d\vec{B}}{dt} = \frac{\partial\vec{B}}{\partial t}, \quad \frac{d\vec{D}}{dt} = \frac{\partial\vec{D}}{\partial t} + \vec{J}_e$$

Мұндағы $\vec{J}_e = \rho_e\vec{\upsilon}_e$ – еркін зарядтардың тасымалына негізделген өткзгіш токтың тығыздығы. Магниттік зарядтардың болмайтынын ескерсек, онда Максвелл теңдеулері мынадай болып жазылады:

$$rot\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}, \quad rot\vec{H} = \vec{J}_e + \frac{\partial\vec{D}}{\partial t}, \quad div\vec{D} = \rho_e, \quad div\vec{B} = 0$$

(13) және (14) теңдеулерге сәйкес, ЭҚК пен МҚҚ тұйық электрлік және магниттік тізбектер үшін ғана дұрыс болып табылады, олай болса, Максвелл теңдеулері тұйықталмаған токтар мен ток элементтері үшін орындалмайды. Бұны Максвеллдің өзі айтып кеткен болатын. Сонымен бірге, (13) пен (14) көрсетілген электр және магнит инцкцияларының ағындары біртекті сипат алады, олай болса қуаттар арасындағы баланс жүйенің әрбір жекелеген аймақтарында сақталатын болады.

Талқылау. Мақалада жүргізілген барлық теориялық есептеулер кезінде жүйедегі процестер қайтымды деп алынды және де бұл жағдайға Максвелл теңдеулерінде қосымша диссипативтік мүшелердің жоқты дәлел бола алады. Шынында да, (13) пен (14) өрнектеріндегі ЭҚҚ пен МҚҚ электр және магниттік индукциялардың ғана өзгерістерінен пайда болмайды, сонымен бірге оларға энергия тасымалдағыштар (электрлік және магниттік зарядтар) ағынының болу да себеп бола алады. Бұл жерде ағындардың пайда болу жағдайлары маңызды емес: ағындар жүйедегі зарядтардың қайта таралуынан пайда болды ма, жоқ әлде олар

жүйенің өзіндік қозғалыстарының салдары ма, бәрібір. Бір ғана жағдай ақиқат: $\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$ ағыны өзгермейтін жерлерде ЭҚК пайда болады да, өзгеретін жерлерде пайда болмайды. Бұл жағдай (13)–(16) қатынастармен расталған. Шындығында, ағындар мен инукция векторларының өзгерістері толық дифференциалдар арқылы көрсетілуі энергодинамикалық көзқарасқа сәйкес бүкіл тұйық жүйе ауқымындағы процестердің қамтылатындығын айғақтайды. Максвелл теңдеулерінің термодинамикалық тұрғыдағы маңыздылығы да дәл осы тәсіл бойынша анық байқалады.

Қорытынды. Максвелл теңдеулері тепе–теңсіздік процестер термодинамикасының принциптеріне сәйкес электр және магнит энергияларының бір–біріне айналуы (түрленуі) сипатында қарастырылда. Энергияның сақталу заңын ток тасымалданатын жүйедегі әсерлердің атқаратын жұмыстары, түрленетін энергиялардың қуаттарының өзара балансы арқылы өрнектелді. ЭҚК пен МҚҚ пайда болу жығдайлары интегралдық және дифференциалдық өрнектер мен энергодинамикалық әдіс бойынша зерттелді. Теориялық зерттеулеріміз кезінде электрөткізгіштік жағдайындағы джоульдік шығындар ескерілген жоқ, сонымен бірге қуаттар арасындағы баланс жүйенің барлық жекелеген бөліктері үшін орындалады деген болжам жасалды, онсыз дифференциалдық түрдегі теңдеулерге өту мүмкін болмай қалар еді.

Осы келтірілген теориялық нәтижелер мен принциптердің өндірістік, инженерлік және басқа да салалардағы қолданысына тоқталып өтейік. Энергодинамиканы еркіндік дәрежелері шектелмеген жүйелердегі тасымалдану процестеріне және жылулық, мехнаикалық, электрлік, химиялық энергиялардың өзара түрленуіне талдаулар (бағалаулар) жасайтын жалпылама теория ретінде қолдануға болады. Ол теормодинамикалық тәсілдер арқылы жылулық емес машиналардағы процестерді модельдік көзқарастар мен статистикалық болжамдарды қажет етпей–ақ қарастыруға (сипаттауға) қауқарлы. Оны сонымен бірге техникалық термодинамика мен машина жасауда жылулық қозғалтқыштардың, салқындатқыш және энергия түрленіргіш қондырғылардың тиімділігіне баға беру үшін қолдануға болады. Материал тану саласында фазалық өтулер мен химиялық реакциялар кезіндегі процестерді зерттеуде, заттың ішкі құрылымының өзгеру себептерін анықтау барысында кеңінен қолданса болады.

Мақаланың мазмұны мен ондағы нәтижелер теориялық сипатта болғандықтан, оларды эксперименттік тұрғыда тексеру (сынақтау) мүмкіндіктерін алдағы (келешектегі) зерттеулеріміздің еншісіне қалдырып отырмыз десек те болады. Себебі, аталған жұмысты іске асыру үшін теориялық нәтижелерге сәйкес келетін тәжірибелік және сандық модельдер мен арнайы бағдарламалар жасау керек болады. Бұл тез арада іске аспасы анық. Сондықтан, аталған мәселе кезең–кезеңмен шешіліп, олардың нәтижелері осы секілді мақала түрінде жарияланатын болады деп сендіреміз. Бұл жұмыстар мақала тақырыбының ауқымын кеңейтіп қана қоймастан, ондағы нәтижелердің физикалық маңыздылығын айқындап беретіндігі ақиқат.

CC BY NC

References

Barbas A., Velarde P. (2015) Development of a Godunov Method for Maxwell's Equations with Adaptive Mesh Refinement. Journal of Computational Physics. – Vol. 300. – P. 188-201. DOI: 10.1016/j.jcp.2015.07.048 (in Eng.)

De Grot S. Mazur P. (1964) Neravnovesnaja termodinamika [Nonequilibrium thermodynamics]. – Moscow: Mir. (in Russ.)

Fushich V. I., Nikitin A.G. (1983) Simmetrija uravnenija Maksvella [The symmetry of Maxwell's equation]. – Kiev: Naukova dumka 200. (in Russ.)

Godunov S.K. (2013) O vkljuchenii uravnenij Maksvella v sistemy reljativistski invariantnyh uravnenij [On the inclusion of Maxwell's equations in systems of relativistically invariant equations]. Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics, 53 (8). – P. 1356–1359. DOI:https://doi.org/10.7868/S0044466913080073 (in Russ.)

Joao V. Vidal, Pedro M. R. Carneiro, Marco P. Soares dos Santos. (2024) A complete physical 3D model from first principles of vibrational-powered electromagnetic generators. Applied Energy. – Volume 357: 122387. https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2023.122387 (in Eng.)

Kuznecov A.V. (2023) Termodinamika [Thermodynamics]. Yekaterinburg: Publishing House of the Ural University 196. (in Russ.)

Landau L.D., Lifshic E.M. (2012) Teoreticheskaja fizika. V 10 t. T. 2. Teorija polja [Theoretical physics. In 10 vols. Vol. 2. Field theory]. – Moscow: Fizmatlit 536. (in Russ.)

Makarov A.M., Luneva L.A., Makarov K.A. (2014) O strukture sistemy uravnenij klassicheskoj jelektrodinamiki [On the structure of the system of equations of classical electrodynamics]. Bulletin of the Bauman Moscow State Technical University. Ser. Natural sciences, 3. – P. 39-52. (in Russ.)

Makarov P.A., Ustjugov V.A., Shheglov V.I. (2022) Modelirovanie rasprostranenija jelektromagnitnyh voln v magnitno-neodnorodnyh sredah [Modeling of electromagnetic wave propagation in magnetically inhomogeneous media]. Proceedings of the Komi Scientific Center of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences. The series «Physico-mathematical sciences», 57 (5). – P. 100–105. (in Russ.)

Markel V., Schotland J.C. (2012) Homogenization of Maxwell's Equations in Periodic Composites: Boundary Effects and Dispersion Relation. Phys. Rev. E. – Vol. 85: 066603-1–066603-23. DOI: 10.1103/PhysRevE.85.066603 (in Eng.)

Mastrjukov A.F. (2020) Raznostnaja shema dlja odnomernyh uravnenij Maksvella [Difference scheme for one-dimensional Maxwell's equations]. Siberian Journal. calculation. Mathematics. RAS. Siberian Branch. Novosibirsk 23 (1). – P. 69-82. (in Russ.)

Muhammad Abdullah, Khurram Saleem Alimgeer, Ghulam Hafeez, Baheej Alghamdi, Ahmed S. Alsafran, Muhammad Zeeshan Babar. (2025) Electromagnetic wave propagation algorithm: A novel electromagnetic wave propagation-inspired optimizer for engineering applications. Ain Shams Engineering Journal. – Volume 16, Issue 11. – P. 103615. https://doi.org/10.1016/j.asej.2025.103615 (in Eng.)

Mustafizur Rahman, Md Israfil Hossain Rimon, Zahid Hasan, Md. Shah Oliullah, S. M. Fazle Rabbi, Md Hosne Mobarak, Nayem Hossain. (2025) Nanotechnology and thermodynamics: a comprehensive review // Nanomaterials and Energy. – Volume 14, Issue 2. – P. 109-134. https://doi.org/10.1680/jnaen.24.00093 (in Eng.)

Nugaev R.M. (2014) Genezis jelektrodinamiki Maksvella: interteoreticheskij kontekst [The Genesis of Maxwell's Electrodynamics: an Intertheoretical context]. Philosophy of Science 61 (2). – P. 66–80. (in Russ.)

Petrov E. Yu., Kudrin A. V. (2010) Exact Axisymmetric Solution of the Maxwell Equations in a Nonlinear Nondispersive Medium. Phys. Rev. Lett. – Vol. 104. – P. 190404. DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.190404 (in Eng.)

Sachhin S.M., Mahabaleshwar U.S., Swaminathan N., David Laroze, Liliana Pedraja-Rejas. (2025) An effect of waste discharge concentration and electromagnetic field on chemically reactive Bingham fluid flow with the analysis entropy generation and mass transfer. Hybrid Advances. – Vol. – P. 100344. https://doi.org/10.1016/j.hybadv.2024.100344 (in Eng.)

Sindelka M. (2010) Derivation of Coupled Maxwell – Schredinger Equations Describe Matter-laser Interaction from First Principles of Quantum Electrodynamics. Phys. Rev. A. – Vol. 81. – P. 033833. (in Eng.)

Voroncov A.S., Kozlov V.I., Markov M.B. (2005) Ob uravnenijah Maksvella v sobstvennom vremeni [On Maxwell's equations in proper time]. Preprint of the IPM named after M.V. Keldysh. (in Russ.)

Zajko Ju. N. (2010) Tochnye reshenija uravnenij Maksvella-Jejnshtejna [Exact solutions of Maxwell-Einstein equations]. Proceedings of the Saratov University. Series: Physics, 10 (1). – P. 50-58. DOI:https://doi.org/10.18500/1817-3020-2010-10-1-50-58. (in Russ.)

CC BY NC

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 105–118

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.408

UDC: 533.1
IRSTI: 29.17.15

©Mukamedenkyzy V.[1], Akberdiyev B.[2], 2026.
[1]Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;
[2]Abay Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: bekzhan_akberdiev@mail.ru

NUMERICAL INVESTIGATION OF THE EFFECT OF INCLINATION ANGLE ON THE STABILITY OF MECHANICAL EQUILIBRIUM IN Ar–N_2 BINARY GAS MIXTURES

Mukamedenkyzy Venera — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associated Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: mukameden@inbox.ru, https://orcid.org/0000-0003-3921-2812;
Akberdiyev Bekzhan — PhD student, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: bekzhan_akberdiev@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-2108-9556.

Abstract. This work presents a numerical study of the influence of the diffusion channel inclination angle on the stability of mechanical equilibrium and mass transfer in a binary Ar–N_2 gas mixture under gravity. Isothermal mixing in a two-flask apparatus is considered, where the loss of mechanical equilibrium results from unstable concentration-induced density stratification during mutual diffusion of components with different molecular weights. The resulting concentration-driven gravitational convection strongly affects both the rate and structure of mass transfer.

The aim of the study is to determine how the channel inclination angle influences diffusion–convective regimes under fixed thermobaric conditions. Numerical simulations were performed in ANSYS Fluent using a three-dimensional formulation with species transport equations and the k–ω turbulence model. The geometry and boundary conditions correspond to laboratory experimental conditions. Calculations were conducted for inclination angles of 0°, 10°, 20°, and 30°, with analysis of concentration fields, velocity distributions, and integral mixing characteristics.

The results show that increasing the inclination angle leads to a gradual weakening of concentration-driven convection due to the reduction of the gravitational acceleration component along the channel axis. This is reflected in lower convective intensity, reduced argon transfer to the lower flask, and smoother temporal concentration variations. At 30°, the system approaches a diffusion-dominated regime. The findings agree with the theoretical dependence of the critical Rayleigh number on cosφ and

reproduce experimental trends, confirming the validity of the numerical model and the applicability of the CFD approach for stability analysis in binary gas mixtures.

Keywords: binary gas mixtures, mechanical equilibrium, inclination angle, diffusion–convection transport, numerical modeling

For citations: *Mukamedenkyzy V., Akberdiyev B. Numerical Investigation of the Effect of Inclination Angle on the Stability of Mechanical Equilibrium in Ar–N_2 Binary Gas Mixtures. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 105–118. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.408*

©Мукамеденкызы В.[1], Ақбердиев Б.[2], 2026.
[1]Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;
[2]Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.
E-mail: bekzhan_akberdiev@mail.ru

Ar–N_2 БИНАРЛЫ ГАЗ ҚОСПАЛАРЫНДАҒЫ МЕХАНИКАЛЫҚ ТЕПЕ-ТЕҢДІК ТҰРАҚТЫЛЫҒЫНА ҚИҒАШ БҰРЫШТЫҢ ӘСЕРІН САНДЫҚ ЗЕРТТЕУ

Мукамеденқызы Венера — физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: mukameden@inbox.ru, https://orcid.org/0000-0003-3921-2812;
Ақбердиев Бекжан — PhD докторант, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: bekzhan_akberdiev@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-2108-9556.

Аннотация. Бұл жұмыс гравитациялық өрістегі екікомпонентті Ar–N_2 газ қоспасында диффузиялық арнаның қисаю бұрышының механикалық тепе-теңдік тұрақтылығы мен масса алмасу сипатына әсерін сандық зерттеуге арналған. Бұл жұмыс екі колбалы аппараттағы газдардың изотермиялық араласуын қарастырады, онда молекулалық массалары әртүрлі компоненттердің өзара диффузиясы кезінде тығыздықтың тұрақсыз концентрациялық стратификациясының пайда болуы механикалық тепе-теңдіктің бұзылуына әкеледі. Нәтижесінде пайда болатын концентрацияға негізделген гравитациялық конвекция масса алмасу жылдамдығы мен құрылымына елеулі әсер етеді, сондықтан оның қарқынын анықтайтын факторларды талдау маңызды.

Зерттеудің негізгі мақсаты – берілген термобариялық жағдайларда диффузия-конвективті масса алмасу режимдерінің қалыптасуы мен дамуында каналдың қисаю бұрышының рөлін анықтау. Сандық модельдеу ANSYS Fluent бағдарламалық пакетінде үшөлшемді кеңістікте компонент тасымалдау теңдеулері мен k–ω турбуленттік моделі қолданылып жүргізілді. Құрылғының геометриялық конфигурациясы мен шекаралық шарттары зертханалық тәжірибе жағдайларына сәйкес келеді. Есептеулер 0°, 10°, 20° және 30° еңкіш бұрыштары үшін жүргізіліп, концентрация өрістерінің уақыттық динамикасы, ағын жылдамдықтары және интегралды араласу сипаттамалары талданды.

CC BY NC

Еңіс бұрышының ұлғаюы еркін түсу үдеуінің арнаның осіне проекциясының азаюына байланысты концентрациялық гравитациялық конвекцияның біртіндеп әлсіреуіне әкеп соғатыны анықталды. Бұл конвекциялық ағындардың қарқындылығының төмендеуімен, төменгі колбаға өткен аргонның молярлық үлесінің азаюымен және концентрация өзгерістерінің уақыттық динамикасының тегістелуімен көрініс табады. 30° бұрышта жүйе диффузия басым режимге өтуге бейімділікті көрсетеді. Алынған нәтижелер критикалық Рейлей санының φ косинусына тәуелділігінің теориялық заңдылығына сәйкес келеді және белгілі эксперименттік үлгілерді қайталай отырып, сандық модельдің дұрыстығын және екікомпонентті газ қоспаларындағы механикалық тепе-теңдіктің тұрақтылығын талдауда CFD тәсілінің қолданылу мүмкіндігін растайды.

Түйін сөздер: бинарлы газ қоспалары, механикалық тепе-теңдік, көлбеу бұрыш, диффузия-конвективті тасымалдау, сандық модельдеу

©Мукамеденкызы В.[1], Акбердиев Б.[2], 2026.
[1]Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;
[2]Казахский Национальный педагогический университет имени Абая,
Алматы, Казахстан.
e-mail: bekzhan_akberdiev@mail.ru

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УГЛА НАКЛОНА НА УСТОЙЧИВОСТЬ МЕХАНИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ В БИНАРНОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ Ar–N_2

Мукамеденкызы Венера — кандидат физико-математических наук, ассоцированный профессор, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: mukameden@inbox.ru, https://orcid.org/0000-0003-3921-2812;
Ақбердиев Бекжан — PhD докторант, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: bekzhan_akberdiev@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-2108-9556.

Аннотация. Работа посвящена численному исследованию влияния угла наклона диффузионного канала на устойчивость механического равновесия и характер массопереноса в бинарной газовой смеси Ar–N_2 в гравитационном поле. Рассматривается изотермическое смешение газов в двухколбовом аппарате, при котором потеря механического равновесия обусловлена формированием неустойчивой концентрационной стратификации плотности в процессе взаимной диффузии компонентов с различными молекулярными массами. Возникающая при этом концентрационная гравитационная конвекция существенно влияет на скорость и структуру массопереноса, что обусловливает актуальность анализа факторов, определяющих ее интенсивность. Основной целью исследования является установление роли угла наклона канала в формировании и эволюции диффузионно-конвективных режимов массопереноса при фиксированных термобарических условиях. Численное моделирование выполнено в программном

комплексе ANSYS Fluent в трехмерной постановке с использованием уравнений переноса компонентов и модели турбулентности k–ω. Геометрическая конфигурация аппарата и граничные условия соответствуют условиям лабораторного эксперимента. Расчеты проведены для углов наклона 0°, 10°, 20° и 30° с анализом временной динамики концентрационных полей, скоростей течения и интегральных характеристик смешения. Установлено, что увеличение угла наклона приводит к последовательному ослаблению концентрационной гравитационной конвекции вследствие уменьшения проекции ускорения свободного падения на ось канала. Это проявляется в снижении интенсивности конвективных течений, уменьшении мольной доли аргона, перешедшего в нижнюю колбу, и сглаживании временной динамики концентрационных изменений. При угле 30° система демонстрирует тенденцию к переходу в диффузионно-доминируемый режим. Полученные результаты согласуются с теоретической зависимостью критического числа Рэлея от cos φ и воспроизводят известные экспериментальные закономерности, подтверждая корректность численной модели и применимость CFD-подхода для анализа устойчивости механического равновесия в бинарных газовых смесях.

Ключевые слова: бинарные газовые смеси, механическое равновесие, угол наклона, диффузионно-конвективный перенос, численное моделирование

Introduction. Due to that mass transfer mechanisms in these systems control the dynamic properties of stratified media, studying binary gas mixtures is vital in both theoretical and applied hydrodynamics. These mixtures play a key role in many technological and physical processes. For areas like astrophysics, climatology, aerodynamics, and chemical and energy technologies, understanding mass transfer in binary gas mixtures is essential (Kossov and Altenbach, 2023; Mialdun et al., 2019; Fedorenko et al., 2024; Kossov et al., 2022).

Under gravitational field conditions, even in the absence of a temperature gradient, isothermal mutual diffusion of gases with different molecular weights can lead to the formation of concentration stratification of density (Valiati et al., 2021; Ankusheva et al., 2010). Such stratification can cause the loss of mechanical equilibrium stability of the system and initiate a transition from the diffusion mode of mass transfer to the mode of concentration gravitational convection. The development of instability is greatly affected by the orientation of the diffusion channel relative to gravity. Changing the inclination angle impacts the effective convection driving force because it alters how free-fall acceleration projects along the channel (Liyanage et al., 2024; Banerjee et al., 2020; Kossov et al., 2023).

The formation of complex convective regimes in binary gas systems is associated with the heterogeneity of concentration fields and changes in gravitational conditions when the channel inclination angle varies. In an inclined configuration, the critical stability conditions are modified, which is reflected in changes in the effective Rayleigh number and the transition boundary between diffusion and convective regimes. Thus, the angle of inclination acts as an external control parameter that can both enhance and

suppress the development of concentration-driven gravitational convection (Kosov et al., 2020; Qiu et al., 2025; Dilman et al., 2015).

Despite the existence of experimental studies devoted to the influence of channel orientation on the stability of mechanical equilibrium, the quantitative description of this effect using modern numerical methods remains limited (Kossov et al., 2025; Qui et al., 2025). Modern computational approaches allow for detailed analysis of the structure of flows and concentration fields, but require comparison with reliable experimental data (Kossov et al., 2023).

The aim of this work is to analyze the structure of concentration fields in a binary argon-nitrogen gas mixture at different angles of inclination of the diffusion channel, as well as to develop and verify a numerical model of mass transfer that takes into account the parametric dependence of the mechanical equilibrium boundary on the angle of inclination. Particular attention is paid to determining the critical values of dimensionless parameters characterizing the transition from the diffusion mode of mass transfer to the mode of concentration gravitational convection. The study is conducted within the framework of hydrodynamic stability theory using numerical simulation methods in the ANSYS Fluent software package (Kosov et al., 2025; Qui et al., 2025; Mukamedenkyzy 2025; Zhakebayev et al., 2022). The obtained calculation results are compared with known experimental data and demonstrate satisfactory agreement.

Materials and methods. The experimental results obtained in (Kulzhanov 2002) for a binary Ar–N_2 gas mixture at a pressure of 0.584 MPa and a temperature of 298 K using a two-flask method, the diagram of which is shown in Fig. 1, were used as initial data. The diffusion apparatus consisted of two flasks of equal volume $V_u=V_l=69.5$ cm³, connected by a cylindrical diffusion channel with a diameter of d=4 mm and a length of L=70 mm. The duration of one experiment was 17 min.

Unlike previous studies, this work focuses on analyzing the effect of the angle of inclination of the diffusion channel relative to the vertical on the nature of mass transfer and the stability of the mechanical equilibrium of the system. In numerical calculations, the geometry of the installation remained unchanged, while the orientation of the channel in the gravitational field was varied, which made it possible to vary the projection of the acceleration of free fall along its axis.

The ANSYS Fluent software package provides the ability to perform three-dimensional modeling of diffusion channels of arbitrary geometry (Kulzhanov 2002), including taking into account the spatial orientation of the system relative to the gravity vector, as well as visualization of the evolution of concentration and velocity fields over time. This allows for a detailed analysis of the effect of the angle of inclination on the development of concentration gravitational convection and the transition between diffusion and convective mass transfer modes.

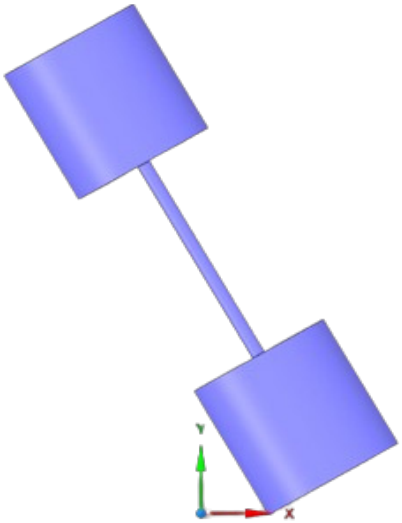


Figure 1 – Three-dimensional model of the diffusion cell and the calculated simulation area inclined at 30º

To model a binary gas mixture, a mixed-method approach was used to create a mesh for discretizing the computational domain. The unstructured triangular mesh represented the cylindrical parts of the installation, and the structured square mesh represented the diffusion channel. This type of mesh adequately represents the geometric features of each area of the installation. Since the characteristic cell size was 1 mm, it creates a correctly represented model geometry and allows for stable convergence of the numerical solution (Ansys, 2025). The total number of elements in the calculation domain is about 425,000. This amount of resolution should provide a reliable representation of mass transfer and mixing phenomena in a binary gas system. The use of triangular and square meshes offers an optimal balance between accuracy and efficiency. The triangular cells in the cylindrical section accurately represent curved surfaces, while the structured mesh in the diffusion channel significantly reduces computation costs. Both of these aspects follow current guidelines for creating computational meshes to simulate processes in binary gas mixtures, where the choice of element type and size balances the complexity of the geometry with the needed accuracy (Kutkan et al. 2021).

Mass transfer modeling in the Ar-N_2 system was done under initial conditions. In this setup, argon sits in the upper flask and nitrogen in the lower one (Kulzhanov, 2002). This arrangement, caused by the difference in molecular weights of the gases, creates a clear gravitational separation of the mixture's density. This allows for the study of how mechanical equilibrium can be disrupted. Within the framework of mathematical modeling, the assumption was made that the physicochemical characteristics of the gas environment are constant. The numerical values of the corresponding parameters were obtained from the built-in database of substances in the ANSYS Fluent software package.

Since the apparatus is modeled as a closed system, impermeability conditions are set at all its boundaries. This type of boundary conditions mathematically excludes

CC BY NC

the possibility of any mass transfer through the control surface, thereby ensuring the isolation of the system from the external environment in terms of material components. To maintain a constant temperature during the mixing process, suitable thermal boundary conditions were applied. The apparatus was designed with a solid wall made of structural stainless steel. Its thermal and strength properties were sourced from the ANSYS Fluent materials library (Ansys, 2025; Kutkan et al., 2021; Slavinskaya et al., 2023).

Convective flows driven by mechanical equilibrium instability show complex changes during the initial stage. The evolution of convective flows includes a sequence of stages: linear growth of small convective perturbations, nonlinear interaction of instability modes, transition to a turbulent regime with the formation of multiscale vortex structures, and other specific features determined by the parameters of the system (Kulzhanov, 2002). To analyze partial flows in media with convective flows of variable intensity, it is advisable to use the k-ω turbulence model (Kutkan et al., 2021; Slavinskaya et al., 2023; Nouhaila et al., 2024) which allows adequate description of mass transfer processes in a wide range. The initial and boundary conditions were set as follows: at the initial moment of time, the upper and lower chambers of the diffusion apparatus contained different binary gas mixtures. The molar fractions of the components were determined using the patch method for the corresponding grid zones.

In ANSYS Fluent, binary gas mixtures are simulated using component transport equations (mass fractions Y_1 and Y_2) and equations of motion. Mass transfer is described by convective-diffusion equations taking into account molecular and turbulent diffusion, and the density of the mixture is calculated according to the selected state model. The formulas include the transport equation for mass fraction (Ansys, 2025):

$$\frac{\partial(\rho Y_1)}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{u}Y_1) = \nabla\left(\rho D_{eff}\nabla Y_1\right) + S_1$$
$$\frac{\partial(\rho Y_2)}{\partial t} + \nabla(\rho\vec{u}Y_2) = \nabla\left(\rho D_{eff}\ \nabla Y_2\ \right) + S_2 \quad (1)$$

where D_{eff} is effective diffusion, S_1 and S_2 are generalized source terms that account for possible mass sources or sinks of components. In the context of the problem under consideration, there are no additional mass sources.

The standard k–ω model is based on a system of semi-empirical transport equations, including equations for turbulent kinetic energy k and its specific dissipation rate ω, where ω is interpreted as the ratio of the turbulent energy dissipation rate ε to k (Ansys, 2025).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\vec{u}k) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_k\frac{\partial k}{\partial x_j}\right) + G_k - Y_k + S_k + G_k$$
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\vec{u}\omega) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_\omega\frac{\partial \omega}{\partial x_j}\right) + G_\omega - Y_\omega + S_\omega + G_\omega \quad (2)$$

G_k – describes the generation of kinetic energy of turbulence caused by mean velocity gradients; ρ – density of the medium; $\vec{u} = (u_x, u_y, u_z)$ – velocity vector; G_ω – characterizes the generation of specific dissipation rate ω. In the presented system of equations, Γ_k and Γ_ω characterize the effective turbulent diffusion for k and ω, respectively; Y_k and Y_ω are dissipation terms; S_k and S_ω are user source terms, which are assumed to be zero in this work (Qui, et al., 2025). The indices *i*, *j* imply summation over the coordinates (i, j=1,2,3).

The effective diffusion coefficients for the k–ω model are given by the formulas

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}$$
$$\Gamma_\omega = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \quad (3)$$

Prandtl turbulence numbers σ_k and σω determine the efficiency of diffusion transfer of turbulent kinetic energy and the rate of its dissipation. Within the framework of the model used, constant values $\sigma_k = \sigma_\omega = 2$ are assumed. Molecular viscosity μ is supplemented by turbulent viscosity μ_t, which is a function of k and ω:

$$\mu_t = \alpha^* \frac{\rho k}{\omega} \quad (4)$$

where α* is a coefficient that dampens turbulent viscosity and has a constant value of α*=1 (Ansys, 2025).

Diffusion fluxes J_1 and J_2 for substances 1 and 2, respectively, are calculated using the following formulas:

$$\vec{J_1} = -\left(\rho D_{12} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right)\nabla Y_1$$
$$\vec{J_2} = -\left(\rho D_{12} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right)\nabla Y_2 \quad (5)$$

In the presented model: μ_t is the turbulent viscosity; Sc_t is the turbulent Schmidt number, defined as $Sc_t = \mu_t/(\rho D_t)$; the standard value of Sc_t is taken to be 0.7. D_{12} is the binary diffusion coefficient; T is the temperature.

The binary diffusion coefficient D_{12} is determined within the framework of the Chapman-Enskog kinetic theory (Ansys, 2025) by the formula:

$$D_{12} = 0.00186 \frac{\left[T^3\left(\frac{1}{M_{W,1}} + \frac{1}{M_{W,2}}\right)\right]^{\frac{1}{2}}}{p_{abs}\sigma_{12}^2 \Omega_D} \quad (6)$$

where M_w is the molar mass (g/mol), T is the temperature (K), p_{abs} is the absolute pressure (atm), Ω_D is the dimensionless diffusion collision integral, which quantitatively characterizes the intensity of molecular interactions in the system.

CC BY NC

An approach based on the pressure method was used for all calculation models. For spatial discretization of computational fluid dynamics equations, the schemes listed in Table 1 were used, which were tested and validated in (Kossov et al., 2025; Mukamedenkyzy, 2025).

Table 1. Solution methods

Quantity	**Discretization**
Gradient	Least Square Cell Based
Pressure	PRESTO!
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Specific Dissipation Rate	Second Order Upwind
Pseudo Time Method	Off
Transient Formulation	Second Order Implicit

The parameters listed characterize the configuration of the numerical solution in the ANSYS Fluent environment, detailing the methods used to discretize the basic equations, approximation schemes, and computational algorithms involved in the modeling process. The selected and tested combination of discretization schemes guarantees an optimal balance between the accuracy of the numerical solution and computational efficiency, which is particularly critical for problems with the combined influence of convective and diffusion processes, and makes it the preferred choice for this class of problems (Ansys, 2025; Abd Halim et al., 2018).

Results and discussions. Results and discussions. Numerical simulations of the dynamics of a binary gas mixture were performed using Ansys Fluent 2025 R2. The numerical experiments were conducted on a Lenovo LOQ 15IAX9 platform equipped with an Intel Core I5-12450HX processor, 16 GB of RAM, and an NVIDIA GeForce RTX 3050 GPU. Each simulation required between 120 and 180 minutes, depending on the complexity of the scenario and the convergence rate.

Figure 2 shows the dependence of the α parameter on temperature for the Ar–N2 binary gas system at a fixed pressure of P=0.584 MPa and a mixing time of τ=17 min. The parameter α is introduced as the ratio of the molar fraction of the component obtained in the experiment to the corresponding value calculated under the assumption of pure diffusion mass transfer based on the Stefan–Maxwell equations. Thus, α is an integral characteristic that allows quantitative assessment of the deviation of the actual mass transfer process from the diffusion regime.

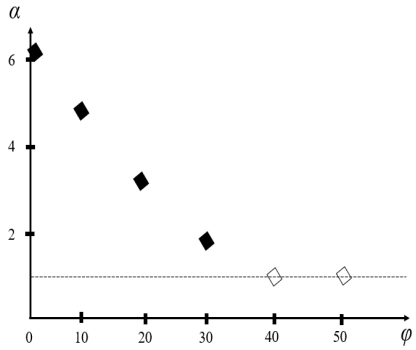


Figure 2 - Dependence of parameter α on temperature for the Ar – N2 system at P = 0.584 MPa, τ = 17 min: ■, □ - experimental data (Kulzhanov, 2002); dotted line - calculation assuming diffusion

Figure 2 shows the experimental dependence of the parameter α on the angle of inclination of the diffusion channel for the Ar–N_2 system at a pressure of P=0.584 MPa and a temperature of T=298 K. The parameter α characterizes the deviation of actual mass transfer from the diffusion regime and allows quantitative estimation of the contribution of concentration-driven gravitational convection. When the channel is in a vertical position (φ=0∘), the maximum value of α is observed, which corresponds to the intensive development of mechanical equilibrium instability and the formation of convective currents.

With an increase in the angle of inclination, the experimental values of α decrease monotonically, which indicates a consistent suppression of the convective transport mechanism. At φ≈30∘, the system approaches the transition boundary to the diffusion regime, and a further increase in the angle leads to an almost complete coincidence of the experimental data with the calculation assuming pure diffusion.

Table 2. Dependence of the diffusion of gas from one flask to another on the angle of inclination of the diffusion cell

Angle of inclination	Ar	N_2
0	0.1367	0.1354
10	0.1055	0.0965
20	0.0738	0.0698
30	0.0401	0.0477

The table shows the results of numerical modeling of the molar fraction of argon that has passed into the opposite flask at angles of inclination of 0°, 10°, 20°, and 30°. The calculated values demonstrate a steady tendency toward a decrease in substance transfer with an increase in φ. Thus, when moving from a vertical position to an angle of 30°, the molar fraction decreases more than threefold. This quantitatively confirms the decrease in the intensity of concentration gravitational convection with a decrease in the effective projection of free-fall acceleration along the channel axis.

The physical mechanism of the observed phenomenon is associated with a change in the component of gravity responsible for the development of density instability. Changing

CC BY NC

the angle of inclination of the channel affects $g_{eff} = g\cos(\varphi)$, where g_{eff} represents the effective free fall (gravity) of the fluid inside the channel. As the angle of inclination, φ, increases the effective Rayleigh number decreases proportionately to the value of cos(φ), which means the system is moved away from the critical stability state. The effective Rayleigh number decreases through the angle range tested, moving from a convective to molecular regime as the system is diminished in Rayleigh number. The numerical results demonstrate good qualitative agreement with the experimental dependence α(φ). Although the experimental graph is presented without exact numerical values, the nature of the decrease and the position of the critical region are reproduced correctly. This confirms the adequacy of the chosen mathematical model and the correctness of the gravitational vector assignment when modeling an inclined configuration.

Additional analysis of the temporal dynamics of concentrations in the upper and lower flasks shows that as the angle of inclination increases, the amplitude of the initial non-stationary oscillation's characteristic of the stage of convective structure formation decreases. At small angles, a pronounced nonlinear growth of concentration perturbations is observed, while at φ=30∘, the temporal dependencies become smoothed and close to diffusion evolution. This indicates the suppression of vortex structures and a decrease in the intensity of exchange between the flasks. Thus, the angle of inclination of the diffusion channel acts as an effective control parameter for the stability of the mechanical equilibrium of a binary gas mixture. The results obtained confirm the theoretical dependence of the critical Rayleigh number on cosφ and demonstrate that even relatively small deviations from the vertical significantly affect the nature of mass transfer.

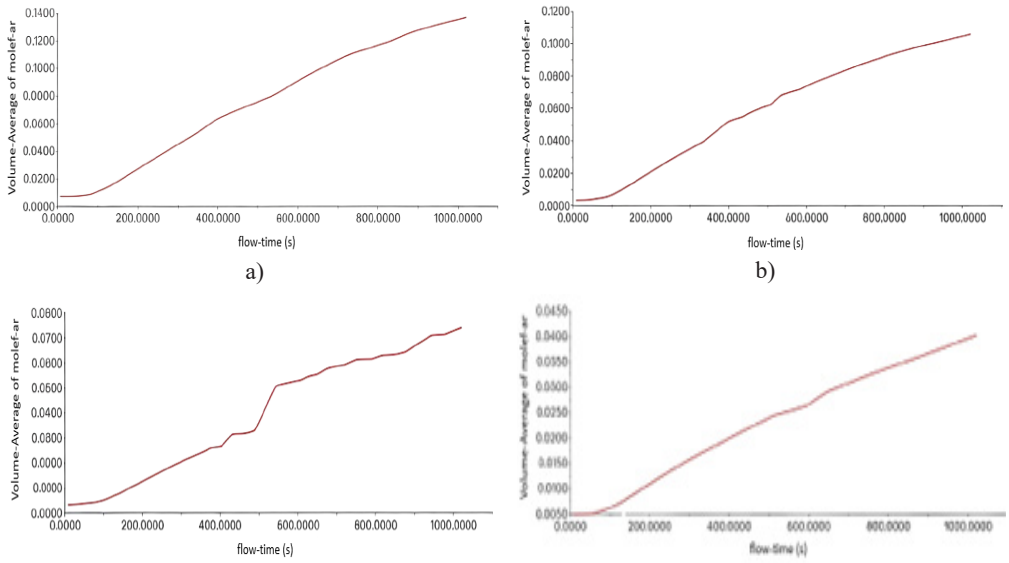


Figure 3 – Dependence of the change in argon concentration in the lower flask on time at different angles of inclination for the system Ar-N_2 at p=0.584 MPa and T=298 K: a) φ=0º; b) φ=10º; c) φ=20º; d) φ=30º

Figure 3 demonstrates that the temporal evolution of argon concentration in the lower flask depends systematically and monotonically on the inclination angle of the diffusion channel. As the inclination increases, the concentration-time curves indicate a progressive reduction in both the rate and total amount of mass transfer from the lower to the upper flask. Configurations closer to the vertical orientation display more pronounced initial concentration increases with evident nonlinear acceleration, attributable to buoyant convective movements combined with molecular diffusion. With increasing inclination angle, the concentration profiles become smoother, indicating a transition from convection-driven to diffusion-dominated mass transfer, as reflected by the increasingly flat slopes of the curves. The decreasing slope signifies a reduction in the effective gravitational force component along the channel axis, thereby diminishing the mechanism responsible for concentrated convection. Additionally, the cumulative concentration change over a given period decreases with increasing angle, confirming that mixing efficiency declines as the inclination increases. The absence of distinct accelerative mixing stages at larger angles suggests that vortex structures are significantly attenuated or insufficiently developed. These results confirm that even moderate deviations from vertical orientation substantially affect mixing kinetics and stabilize the mechanical equilibrium of the binary gas system, consistent with the theoretical cosφ dependence of the effective Rayleigh parameter.

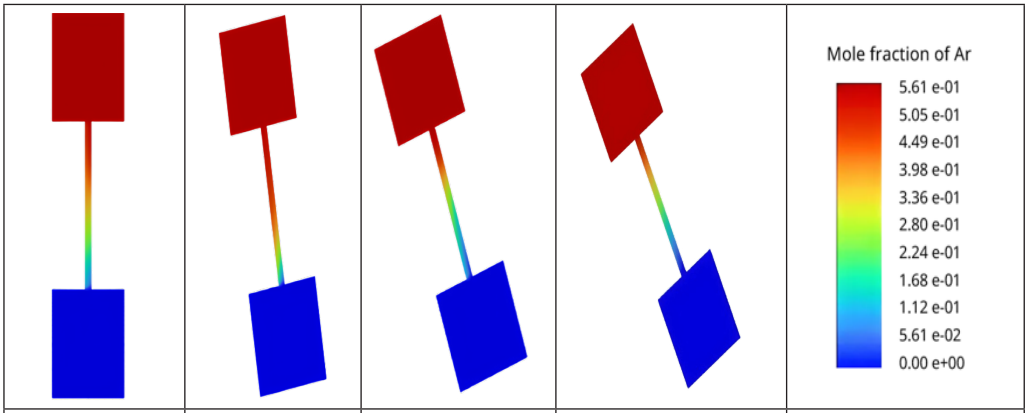


Figure 4 – Convective structures formed in the diffusion channel for the system Ar-N_2 at p=0.584 MPa, T=298 K at the moment t=120 s depending on the channel inclination: a) φ=0º; b) φ=10º; c) φ=20º; d) φ=30º; e) concentration scale for cases (a), (b), (c) and (d) describing numerical values of colors

Figure 4(a–d) illustrates that the inclination angle of the diffusion channel significantly influences the spatial structure of the concentration field. In the vertical position (φ = 0°), gravity aligns with the channel axis, promoting the formation of convective patterns within the diffusion zone. As the inclination increases to φ = 10–20°, the symmetry of the concentration field is gradually restored and convective disturbances weaken. At φ = 30°, the concentration profile becomes notably more uniform along the channel, indicating suppression of large-scale convection. This stabilizing effect results from a

reduction in the effective gravitational component along the density gradient, which diminishes buoyancy-driven flow. The numerical results confirm that increasing channel inclination enhances the stability of mechanical equilibrium in the Ar-N_2 system under the examined thermobaric conditions.

Conclusion. Conclusion. This study investigates the influence of diffusion channel inclination on the stability of mechanical equilibrium and mass transfer in an isothermal Ar-N_2 gas mixture under gravity. Transient three-dimensional simulations in ANSYS Fluent were conducted for inclination angles of 0°, 10°, 20°, and 30°. The findings demonstrate that inclination angle is a key parameter governing the interplay between diffusion and convection, with gravitational convection driven by concentration gradients diminishing as the effective vertical gravity component decreases. Quantitatively, the molar fraction of argon transferred decreases by more than threefold as the channel is tilted from vertical to 30°, indicating a substantial reduction in convective mass transfer. This observation aligns with the theoretical criterion that the effective Rayleigh number is proportional to the cosine of the inclination angle. As inclination increases, the system transitions toward a diffusion-dominated regime, and concentration fields become progressively smoother, reflecting reduced convection. Comparison with experimental data shows that the instability parameter decreases monotonically with increasing inclination. The numerical model accurately represents the system's physical processes and may assist in defining stability limits for inclined diffusion channels. Overall, the results confirm that channel orientation significantly affects mass transfer in binary gases and may serve as a passive means to control concentration-driven convection in practical applications.

References

Abd Halim M.A., Nik Mohd N.A.R., Mohd Nasir M.N., & Dahalan M.N. (2018). The evaluation of k-ε and k-ω turbulence models in modelling flows and performance of S-shaped diffuser. International Journal of Automotive and Mechanical Engineering, 15. – P. 5171-5177. https://doi.org/10.15282/ijame.15.2.2018.2.0399 (in Eng.).

Ankusheva N.V., Kossov V.N., & Seleznev V.D. (2010). Effect of diffusion channel inclination on stability of mechanical equilibrium in isothermal binary gas mixtures. Journal of Applied Mechanics and Technical Physics, 51. – P. 62-64. https://doi.org/10.1007/s10808-010-0009-y (in Eng.).

Banerjee A. (2020). Rayleigh–Taylor instability: A status review of experimental designs and measurement diagnostics. Journal of Fluids Engineering, 142(12). – P. 1–18. https://doi.org/10.1115/1.4048349 (in Eng.).

Dil'man V.V., & Lotkhov V.A. (2015). Molecular turbulent evaporation in a gravitational field. Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 49(1). – P. 102–106. https://doi.org/10.1134/S0040579515010017 (in Eng.).

Fedorenko O., & Poyarkov I. (2024). Instability of mechanical equilibrium in non-ideal gas mixtures. Recent Contributions to Physics, 90(3). – P. 116-124. https://doi.org/10.26577/RCPh.2024v90i3-014 (in Eng.).

Kosov V., Fedorenko O.V., Asembaeva M.K., & Mukamedenkyzy V. (2020). Changing diffusion–convection modes in ternary mixtures with a diluent gas. Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 54(2). – P. 289-296. https://doi.org/10.1134/S0040579520020086 (in Eng.).

Kossov V., Altenbach H. (2023). Diffusion mechanisms of convective instability in liquid and gas mixtures. ZAMM – Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 103, e202300801. https://doi.org/10.1002/zamm.202300801 (in Eng.).

Kossov V., Fedorenko O., Zhakebayev D., Mukamedenkyzy V., & Kulzhanov D. (2022). Convective

mass transfer of a binary gas mixture in an inclined channel. ZAMM – Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 102, e201900197. https://doi.org/10.1002/zamm.201900197 (in Eng.).

Kossov V.N., Krasikov S.A., Belov S.M., Fedorenko O.V., & Zhaneli M. (2023). Comparative study of evolution of structured flows at boundary of the regime change "diffusion — concentration convection" in isothermal multicomponent mixing in gases by techniques of visual and numerical analysis. Bulletin of the Karaganda University. Physics Series, 109(1). – P. 49-58. https://doi.org/10.31489/2023ph1/49-58 (in Eng.).

Kossov V.N., Mukamedenkyzy V., Tolepbergen A., & Altenbach H. (2025). Peculiarities of combined mixing caused by instability of mechanical equilibrium of isothermal ternary gas mixture at diffusion. International Journal of Chemical Engineering, 1, 9643371. https://doi.org/10.1155/ijce/9643371 (in Eng.).

Kulzhanov D.U. (2002). Stability of mechanical equilibrium in binary gas mixtures at different temperatures. Recent Contributions to Physics, 2. – P. 115-118. (in Eng.).

Kutkan H., & Guerrero J. (2021). Turbulent premixed flame modeling using the algebraic flame surface wrinkling model: A comparative study between OpenFOAM and ANSYS Fluent. Fluids, 6. – P. 462. https://doi.org/10.3390/fluids6120462 (in Eng.).

Liyanage R. (2024). Direct comparison of density-driven convective mixing in a three-dimensional porous medium. Physical Review Fluids, 9, 043802. https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.9.043802 (in Eng.).

Mialdun A., Bataller H., Bou-Ali M.M., Braibanti M., Croccolo F., Errarte A., Ezquerro J.M., Fernández J.J., Gaponenko Y., García-Fernández L., Rodríguez J., & Shevtsova V. (2019). Preliminary analysis of diffusion coefficient measurements in ternary mixtures (DCMIX4) experiment on board the International Space Station. The European Physical Journal E, 42. – P. 87. https://doi.org/10.1140/epje/i2019-11851-6 (in Eng.).

Mukamedenkyzy V., & Tolepbergen A.G. (2025). Some features of Rayleigh–Taylor convection in the mixing of ideal gas mixtures. Recent Contributions to Physics, 92(1). – P. 110-119. https://doi.org/10.26577/RCPh202592112 (in Eng.).

Nouhaila O., Hassane M., Scutaru M.L., & Jelenschi L. (2024). On the accuracy of turbulence model simulations of the exhaust manifold. Applied Sciences, 14. – P. 5262. https://doi.org/10.3390/app14125262 (in Eng.).

Qiu T., Li C., Zhang Y., & Ge W. (2025). HS-PPM simulation for diffusion coefficients of binary and multicomponent gas mixtures. AIChE Journal, 71(9), e18891. https://doi.org/10.1002/aic.18891 (in Eng.).

Slavinskaya N., & Haidn O. (2023). Direct numerical simulation of spray and dispersion of liquid fuel droplets. Recent Contributions to Physics, 84(1). – P. 72-80. https://doi.org/10.26577/RCPh.2023.v84.i1.09 (in Eng.).

User's ANSYS Fluent Guide. (2025). Release 2025. ANSYS Inc. https://www.ansys.com/ (in Eng.).

Zhakebayev D.B., Fedorenko O.V., Kossov V.N., Mukamedenkyzy V., & Karuna O.L. (2022). Simulation of concentration convection in an inclined channel. Heat Transfer Research, 53(15). – P. 39-52. https://doi.org/10.1615/HeatTransRes.2022043133 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 119–135

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.409

UDC: 536.6
IRSTI: 29.19.09

©Myasnikova L.N., Uzakbaeva S.S., Shanina Z.K., Bekeshev A.Z.*, 2026.
K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan.
E-mail: amirbek2401@gmail.com

KINETIC PROPERTIES OF HIGH-DENSITY POLYETHYLENE FILLED WITH CHROMIUM SPINEL POWDER

Myasnikova Lyudmila — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,
E-mail: myasnikova_ln@zhubanov.edu.kz, https://orcid.org/0000-0003-3326-7206;
Uzakbaeva Sanimai — Master student, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,
E-mail: u.sanimai03@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-4075-691X;
Shanina Zamzagul — Master's degree, Senior Lecturer, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,
E-mail: zshanina@zhubanov.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6394-4821;
Bekeshev Amirbek — Candidate of physical and mathematical sciences, associated professor, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,
E-mail: amirbek2401@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-7038-4631.

Abstract. This paper presents the results of predicting the kinetic properties of composite materials based on high-density polyethylene containing metallurgical waste in the form of chromium spinel powder (HDPE/10%, 20%, 30% CSP) using the Netzsch Kinetics Neo software. Thermogravimetric analysis (TGA) data were used as the initial input. It was established that the reaction occurring during TGA follows a simple first-order (Fn) reaction model. The activation energies of the samples were determined based on the TGA data.

Modeling of isothermal curves, isothermal lifetime curves, and dynamic curves was performed, allowing prediction of several kinetic parameters. In dynamic mode, the system behavior characteristics under conditions simulating a fire scenario were obtained and compared at different heating rates.

The change in thermal stability depending on CSP concentration is non-monotonic. For the sample containing 10% filler, a significant decrease in residual mass at a given temperature and a shift of intensive degradation toward lower temperatures were observed. Increasing the filler concentration to 20% results in higher residual mass compared to the neat sample, indicating a stabilizing effect and the formation of a protective layer. For the samples containing 20% and 30% filler, the differences in

residual mass are insignificant, suggesting that the limiting filler concentration has been reached.

According to lifetime modeling results, compared to the neat polymer, the materials containing CSP demonstrate improved thermal stability with increasing filler content, with the most pronounced positive effect observed for the 20% filled sample.

In dynamic mode, increasing filler concentration leads to higher temperature and longer time required to reach a decomposition degree of 0.7. At low heating rates, the dependence of temperature and time to reach a 0.7 decomposition level on concentration is weak.

The obtained results provide opportunities for the development of new fire-resistant materials with controllable functional properties.

Keywords: high-density polyethylene, chromium spinel powder, thermogravimetric analysis, Netzsch Kinetics Neo, activation energy, isothermal lifetime

Acknowledgments: *The study was supported by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan under project IRN BR24992882 "Development of New Technologies for Processing Industrial Waste to Improve the Environmental Situation in the Region".*

For citations: *Myasnikova L.N., Uzakbaeva S.S., Shanina Z.K., Bekeshev A.Z. Kinetic Properties of High-Density Polyethylene Filled with Chromium Spinel Powder. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 119–135. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.409*

©Мясникова Л.Н., Узакбаева С.С., Шанина З.К., Бекешев А.З.*, 2026.
Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан.
E-mail: amirbek2401@gmail.com

ХРОМ-ШПИНЕЛЬДІ ҰНТАҚ ҚОСЫЛҒАН ЖОҒАРЫ ТЫҒЫЗДЫҚТЫ ПОЛИЭТИЛЕННІҢ КИНЕТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

Мясникова Людмила — физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,
E-mail: myasnikova_ln@zhubanov.edu.kz, https://orcid.org/0000-0003-3326-7206;
Ұзақбаева Сәнімай — магистрант, Қ.Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,
E-mail: u.sanimai03@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-4075-691X;
Шанина Замзагул — магистр, аға оқытушы, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,
E-mail: zshanina@zhubanov.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6394-4821;
Бекешев Амирбек — физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,
E-mail: amirbek2401@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-7038-4631.

Аннотация. Бұл мақалада жоғары тығыздықтағы полиэтиленге металлургиялық қалдықтар – хром-шпинельді ұнтақ (ХШҰ) қосылған композитті

CC BY NC

материалдардың (HDPE/10%, 20%, 30% ХШҰ) кинетикалық қасиеттерін Netzsch Kinetics Neo бағдарламасы арқылы болжау нәтижелері ұсынылған, ол үшін бастапқы дерек ретінде термогравиметриялық анализ (ТГА) мәліметтері пайдаланылды. ТГА кезінде болатын реакция қарапайым 1ші ретті F_n реакциясына сәйкес келеді. ТГА деректері бойынша үлгілердің активациялық энергиялары анықталды. Netzsch Kinetics Neo бағдарламасында изотермиялық қисықтар бойынша, изотермиялық қызмет ету уақыты қисықтары және динамикалық қисықтар арқылы бірнеше кинетикалық қасиеттеріне болжам жасалды. Әсіресе, динамикалық режим кезінде әртүрлі қыздыру жылдамдығын бекіте отырып, өрт кезіндегі жүйе сипаттамалары алынып, салыстырылды.

ХШҰ концентрациясына байланысты термиялық тұрақтылықтың өзгеруі монотонды емес. 10% ХШҰ қосылған үлгінің қалдық массасы аталған температурада айтарлықтай төмендеп, қарқынды деградация төменгі температураларға ауысады. Ал толтырғыш концентрациясын 20% дейін арттырғанда, керісінше, үлгінің қалдық массасы таза үлгіге қарағанда артады, бұл толтырғыштың тұрақтандыру әсерін және қорғаныш қабатының түзілуін көрсетеді. 20% және 30% ХШҰ қосылған үлгілерінде қалған массадағы айырмашылықтар айтарлықтай емес, бұл толтырғыштың шекті концентрациясына жеткенін білдіреді.

Қызмет ету уақытын модельдеу нәтижелеріне сәйкес, таза үлгімен салыстырғанда ХШҰ қосылған материал концентрация артқан сайын термиялық тұрақтылығын арттырады, айтарлықтай маңызды оң өзгерістер 20 пайыздық үлгіде көрінеді.

Динамикалық режимде ХШҰ концентрациясы артқан сайын ыдыраудың 0,7 деңгейінен бастап, ыдырау температурасы, уақыты артады. Төмен қыздыру жылдамдықтарында 0,7 ыдырау деңгейіне дейін уақыт, температураның концентрацияға тәуелділігі аса байқалмайды.

Зерттеу нәтижелері басқарылатын функционалды қасиеттерге ие жаңа өртке төзімді материалдарды алуға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: жоғары тығыздықты полиэтилен, хром-шпинелді ұнтақ, термогравиметриялық анализ, Netzsch Kinetics Neo, активация энергиясы, изотермиялық қызмет ету уақыты

©Мясникова Л.Н., Узакбаева С.С., Шанина З.К., Бекешев А.З.*, 2026.
Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова,
Актобе, Казахстан.
E-mail: amirbek2401@gmail.com

КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОПЛОТНОГО ПОЛИЭТИЛЕНА С ДОБАВЛЕНИЕМ ХРОМ-ШПИНЕЛЬНОГО ПОРОШКА

Мясникова Людмила — кандидат физико-математических наук, доцент, Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: myasnikova_ln@zhubanov.edu.kz, https://orcid.org/0000-0003-3326-7206;

Узакбаева Санимай — Магистрант, Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: u.sanimai03@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-4075-691X;
Шанина Замзагул — магистр, старший преподаватель, Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: zshanina@zhubanov.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6394-4821;
Бекешев Амирбек — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: amirbek2401@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-7038-4631.

Аннотация. В статье представлены результаты прогнозирования кинетических свойств композитных материалов на основе высокоплотного полиэтилена с добавлением металлургических отходов - хромшпинельного порошка (HDPE/10 %, 20 %, 30 % ХШП) - с использованием программы Netzsch Kinetics Neo. В качестве исходных данных использованы результаты термогравиметрического анализа (ТГА). Установлено, что реакция, протекающая при ТГА, соответствует простой реакции первого порядка (Fn). На основе данных ТГА определены значения энергии активации образцов. Выполнено моделирование изотермических кривых, кривых срока службы в изотермическом режиме, а также динамических кривых, что позволило спрогнозировать ряд кинетических параметров. В динамическом режиме при различных скоростях нагрева получены и сопоставлены характеристики поведения системы в условиях, моделирующих пожарную ситуацию. Изменение термической стабильности в зависимости от концентрации ХШП носит немонотонный характер. Для образца с 10 % наполнителя наблюдается существенное снижение остаточной массы при заданной температуре и смещение интенсивной деградации в область более низких температур. При увеличении концентрации до 20 % остаточная масса возрастает по сравнению с чистым образцом, что свидетельствует о стабилизирующем эффекте наполнителя и формировании защитного слоя. Для образцов с 20 % и 30 % наполнителя различия в остаточной массе незначительны, что указывает на достижение предельной концентрации наполнителя. Согласно результатам моделирования срока службы, по сравнению с чистым образцом материалы с добавлением ХШП демонстрируют повышение термической устойчивости с ростом концентрации наполнителя, при этом наиболее выраженный положительный эффект наблюдается для образца с 20 % ХШП. В динамическом режиме с увеличением концентрации наполнителя возрастают температура и время достижения степени разложения 0,7. При низких скоростях нагрева зависимость температуры и времени достижения степени разложения 0,7 от концентрации выражена слабо. Полученные результаты открывают возможности для разработки новых огнестойких материалов с управляемыми функциональными свойствами.

Ключевые слова: высокоплотный полиэтилен, хром-шпинельный порошок, термогравиметрический анализ, Netzsch Kinetics Neo, энергия активации, изотермическое время жизни

CC BY NC

Кіріспе. Жоғары тығыздықтағы полиэтилен (HDPE) - термопласттардың бір түрі, жоғары беріктікке және тығыздыққа ие материал. Бұл материалда тізбектері аз таралғандықтан, молекулалар бір біріне жақын орналасқан соң, жоғары берікті болып есептелінеді. Өзінің химиялық заттарды, ылғалды өткізбеу қасиетіне қарай, түрлі құбырлар, ыдыстар және қаптамалар жасауға қолданылады. Осы механикалық және қолайлы химиялық қасиеттеріне қарай, одан жасалған әрбір зат ұзақ уақыт қызмет етеді. Сонымен қатар HDPE салыстырмалы түрде жеңіл және бағасы арзан, бұл оны кең таралған материалға айналдырады. Тамақ өнеркәсібінде де жоғары тығыздықтағы полиэтилен салыстырмалы түрде қауіпсіз материал болып есептелінеді және қайта өңдеуге келеді (Marcel et al., 2023; Menzel et al., 2022).

Жоғары тығыздықтағы полиэтиленге минералды және функционалды модификаторларды қосу бұл оның эксплуатациялық қасиеттерін мақсатты түрде өзгертудің тиімді әдістерінің бірі болып келеді. Өте жақсы химиялық, механикалық қасиеттеріне орай, оның да кейбір кемшіліктері бар. Мысалы, термиялық тұрақтылығы шектелген және термоқышқылдану деструкцияға ие болып келеді. Органикалық емес толтырғыштарды қосу материалдың термиялық тұрақтылығын, ыдырау үрдістерін тежеуге, және осы үрдісттерге қатысты кинетиканы өзгертуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, модификаторлар полимерлік матрицаның беріктігін арттырып, композиттердің барьерлік қасиеттерін арттыруға мүмкіндік береді. Кейбір жағдайларда мин.ерал толтырғыштар жылытқан кезде қорғаушы қабат жасақтап, масса жоғалтуын және жылу шығаруын бәсеңдетеді. Сондықтан, модификаторларды қолдану басқарылатын термофизикалық және термиялық сипаттамалары бар полиэтилендік композиттерді жасақтауға мүмкіндік береді (Gao et al., 2022; Kukaleva et al., 2004; Runzhou et al., 2013).

Соның ішінде қайта өңдеу үрдістерінің ең пайдалысы – ол әртүрлі қалдықтарды, әсіресе металлургиялық өндірістердің қалдықтарын полимерлерді модификациялауға пайдалану (Huziazmetova et al., 2024). Зерттеуде біз хром-шпинелді ұнтақты (ХШҰ) HDPE модификациялауға пайдаландық.

ХШҰ бұл металлургиялық үрдістің қалдығы болып келеді және термиялық тұрақты, химиялық инертті материал. Металлургиялық өндірісте металлдарды балқытқан кезде жоғары температуралы хром және алюмин.ий оксидтерінің реакциясы кезінде пайда болады немесе балқытпаларда қорғайтын пленка ретінде пайда болады. Қалдықтар кезінде оларға әртүрлі бөгде шаң тозаңдар қосылады. Дегенмен, бұл қосылыстарға қарамай, ұнтақ өз қасиеттерін жоймайды. Өзінің жоғары балқу температурасына, механикалық беріктігіне сәйкес, ол көптеген кермикалық композицияларында, өртке төзімді материалдарда және функционалды беттерде қолданады (Roger et al., 2022; Shtyka et al., 2021).

Осы күнге дейін осы ұнтақты полимерлерге модификатор ретінде пайдаланған зерттеулер жеткіліксіз. Жоғары тығыздықтағы полиэтилен өзінің функционалды қасиеттеріне қарай және хром шпинелдік ұнтақтың термиялық тұрақтылығы бір композит болғанда басқарылатын физика химиялық қасиеттерге ие болады, сондықтан да осы мақалада әртүрлі концентрациядағы ХШҰ қосылған жоғары

тығыздықтағы полиэтиленнің кинетикалық қасиеттерін анықтау болашақта құрылыс, өртке төзімді материалдар индустриясында пайдаланатын жаңа материалдарға серпіліс беруі мүмкін.

Мақаламызда негізгі нәтижелерді кинетикалық болжау әдісімен алынды. Бұл әдіс арқылы полиэтиленнің күрделі ыдырау жолын модельдеуге болады. Жалпы реакция кинетикасын модельдеу активация энергияларын, Аррениус коэффициенттерін, реакция түрін анықтап, изотермиялық, динамикалық, адиабатты режимдер кезінде қызмет ету уақытын, деградация сипаттамаларын анықтауға мүмкіндік береді (Sobek et al., 2020). Соның ішінде біз қолданған бағдарлама - Netzsch Kinetics Neo, дифференциалды сканерлеуші калориметрия, термогравиметриялық анализ (ТГА) деректеріне негізделіп кинетикалық модельдер құрастыруға мүмкіндік береді. Kinetics Neo бағдарламада модельдеу арқылы тек зерттеушілік аспектілерді шешумен қатар, практикалық қолдану сұрақтарын да қарастыруға болады. Хартер өз жұмысында жоғары тығыздықтағы полиэтиленнің кристалдану деректерін пайдаланып, инжекциялық қалыптау параметрлерін оңтайландыруға пайдаланған (Harter et al., 2022; Manic et al., 2020). Пател жоғары және төмен тығыздықтағы полиэтиленнің кристалдану кинетикасын зерттеу арқылы әртүрлі жағдайдардағы кинетикалық сипаттамаларды өзгеруін тіркеп, практикалық ұсыныстар жасақтаған (Patel et al., 2012).

Мақалада жоғары HDPE 10%, 20%, 30% ХШҰ қосылған композитті материалдардың ТГА деректерін қолдана отырып кинетикалық модельдеу нәтижелері келтірілген.

Материалдар және әдістер. Композит матрицасы ретінде «Лукойл» мұнай компаниясы шығарған жоғары тығыздықтағы полиэтилен (HDPE, 277-73 маркасы) пайдаланылды (Мәскеу, Ресей). Техногендік қалдық толтырғыш (Хром шпинелді ұнтақ) ретінде Ақтөбе ферроқорытпа зауытының газ тазарту жүйесінен жиналған шаң қолданылды (Ақтөбе, Қазақстан).

Рентген флуоресцентті анализ S6 Jaguar (Bruker) приборында зерттелген ХШҰ химиялық құрамы 1-кестеде пайыздық үлеспен көрсетілген:

1-кесте. ХШҰ-ның химиялық құрамы (%)

Cr_2O_3	CaO	MgO	SiO_2	Al_2O_3	Na_2O	Fe_2O_3	ZnO	NiO	SO_3	Cl	Sc_2O_3	K_2O	т.б
29.09	25.43	15.45	8.88	1.81	1.74	6.93	0.98	0.17	1.50	1.03	0.15	2.24	4,6

HDPE композиттері бірдей технологиялық процедуралар негізінде 10%, 20%, 30% толтырғыш қосылып, біркелкі дайындалды. HDPE гранулаларын ХШҰ ұнтағымен электрлеу үшін кофемолкада 3 мин.утқа өңделді. Толтырғыштарды полимерлі матрицаға ыстық балқыма экструзиясы (hot-melt extrusion) әдісімен енгізу арқылы үлгілер алынды. Экструзия екі шнекті экструдерде (Micro 5 cc Twin Screw Compounder, Xplore, Нидерланды) жүргізілді. Өңдеу температурасы құрамына байланысты өзгертіліп, таза HDPE үшін 180°C, HDPE/10% ХШҰүшін 210°C, HDPE/20% ХШҰүшін 220°C, ал HDPE/30%ХШҰүшін 230°C болды. Экструдер роторының айналу жылдамдығы 50 айн/мин. (rpm) болды.

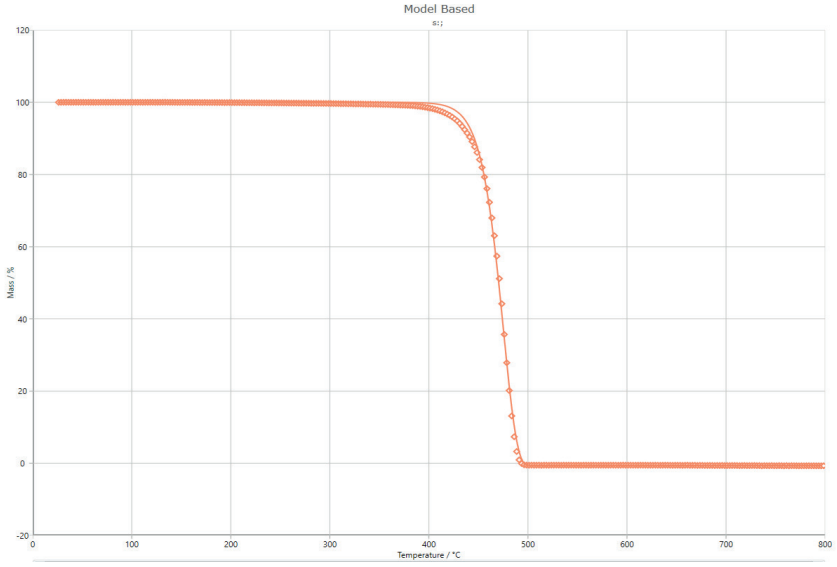
CC BY NC

Экструзиядан кейін алынған жіпше гранулаларға (түйіршіктерге) айналдырылды. Одан кейін үлгілер қысыммен құю (injection molding) әдісі арқылы дайындалды. Қысыммен қалыптау машинасында (Injection molding 5.5 cc, Xplore, Нидерланды) қалыптың температурасы 30°C, инжектор температурасы таза HDPE үшін 180°C, HDPE/10%ХШҰүшін 210°C, HDPE/20%ХШҰүшін 220°C, ал HDPE/30%ХШҰүшін 230°C, ал қысым 8 бар деңгейінде орнатылды.

Термогравиметриялық анализ TG 209 F1 Libra NETZSCH (Германия) приборында бөлме температурасынан 800 градусқа дейін 40 мл/мин. инертті азот газының ағынында динамикалық қыздырылды. Қыздыру жылдамдығы 10 К/мин..

Кинетикалық талдау NETZSCH Kinetics-Neo (Германия) бағдарламасында жүргізілді.

Нәтижелер және талқылау**.** Термогравиметриялық анализ құрылғысы арқылы негізгі 3 үлгінің нәтижесі алынды. Келесі суретте таза үлгінің нәтижесі келтірілген.



1-сурет. HDPE ТГА қисығы

Мұнда Х осі бойынша температура, ал У осі бойынша үлгінің массасының өзгеруі көрсетілген. Үлгінің күрт массасының жоғалуы 400 градустан басталып 496 градусқа дейін жалғасады. Реакция қарапайым 1-ші ретті Fn реакциясына сәйкес келеді.

1. F_n — an n-is order reaction, where the reaction rate is proportional to the degree of conversion.

Реакция келесі формулаға сәйкес келеді

$$d\alpha/dt = k\cdot(1-\alpha)^1$$

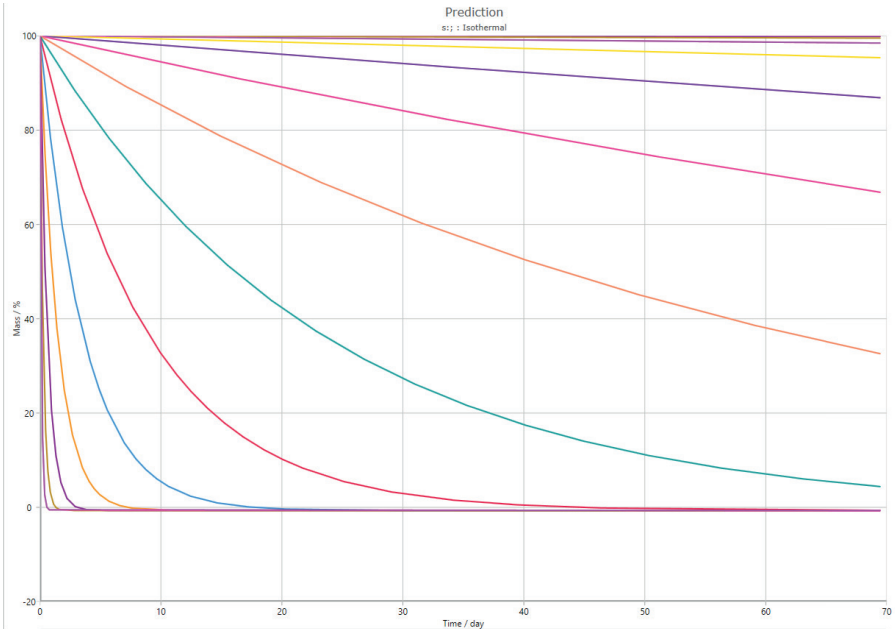
мұнда α бұл ыдырау деңгейі, k – жылдамдық тұрақтысы.

HDPE 10%, 20%,30% үлгілерінің ТГА пішіні бірінші ретті реакцияға сәйкес келеді.

Модельдеудің нәтижесі бойынша таза үлгінің реакциясының активациялық энергиясы 312 кДж/моль, ал 10% үлгінде – 321 кДж/моль. Реакция типіне негізделе отырып, осы үлгінің кинетикалық қасиеттерін болжауға мүмкіндік туды. 20% ХШҰ құрамына ие үлгінің реакциясының активациялық энергиясы 336 кДж/моль, ал 30% үлгінде – 337 кДж/мольге тең. Активациялық энергия мықты коваленттік байланыстардың үзілуіне, кейінгі ыдырауына және ұшқыш көмірсутектердің бөлінуіне сәйкес келеді.

Изотермиялық қисықтар арқылы болжау. 2-суретте таза полиэтиленнің болжамдық изотермиялық қисықтары көрсетілген. Қалған үлгілердің де қисықтарының пішіндері бірдей, параметрлері әртүрлі.

X осінде – полиэтиленнің қалған массасы, Y осінде – қыздыру уақыты көрсетілген. Әр түрлі қисықтар әр түрлі температураларда жүргізілген ТГА қисықтарын білдіреді. Болжамдағы уақыт аралығы шамамен 2 айды құрады, қарастырылған температуралар 410 °C-қа дейінгі диапазонда болды.



2-сурет. HDPE изотермиялық қисықтары

Таза үлгінің изотермиялық қисықтары массаның 5%-ға дейінгі жоғалуы 310 °C температурада басталатынын көрсетті. Әр түрлі температураларда 70 күн ішінде қалған массалар келесідей: 320 °C – 86%, 330 °C – 66%, 340 °C – 32%, 350 °C – 4%. 360 °C-тен бастап толық масса жоғалуы байқалады: 360 °C – 42 күн, 370 °C – 17 күн, 380 °C – 7 күн, 390 °C – 2 күн. ХШҰ концентрациясының 10%-дан 20%-ға дейін артуы үлгінің қалған массасының температура өскен сайын едәуір

жоғарылауына әкеледі. 20% және 30% үлгілердің нәтижелері салыстырмалы, қалған масса артқанымен елеулі өзгерістер тіркелмеген.

Моделдеу нәтижелеріне сүйенсек, 10% үлгінде елеулі масса жоғалуы 300 °C температурада басталады, ал екі ай ішінде үлгінің 10% массасы жоғалады. Температура мен қалған масса арасындағы байланыс келесідей: 310 °C – 76%, 320 °C – 43%, 330 °C – 9%. 340 °C-та негізгі массаның жоғалуы 50 күн ішінде жүреді, 350 °C – 20 күн, 360 °C – 9 күн, 370 °C – 3 күн.

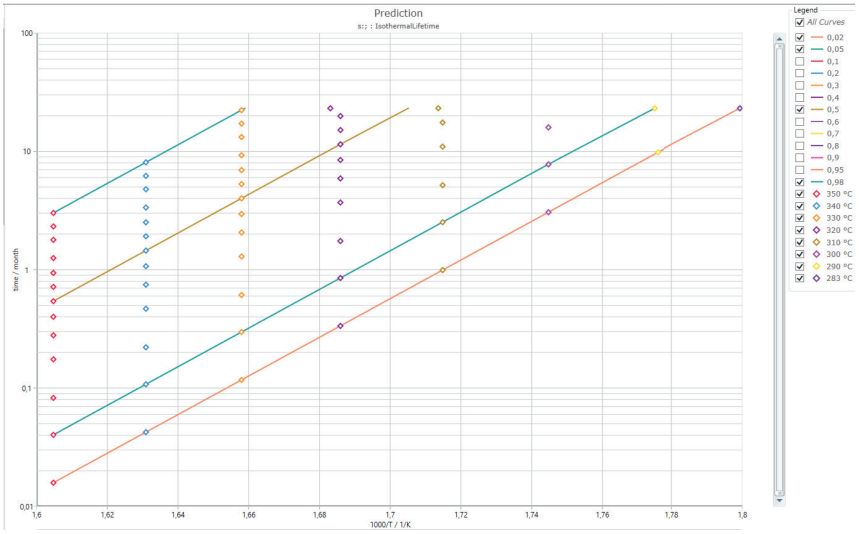
20% үлгісінде елеулі масса жоғалуы 320 °C температурада басталады, ал екі ай ішінде үлгінің 7% массасы жоғалады. Температура мен қалған масса арасындағы байланыс келесідей: 330 °C – 82%, 340 °C – 57%, 350 °C – 25%. 360 °C-та негізгі массаның жоғалуы 2 ай ішінде жүреді, 370 °C – 24 күн, 380 °C – 10 күн, 390 °C – 2 күн.

30% үлгінде елеулі масса жоғалуы да 320 °C-та басталады, ал екі ай ішінде үлгінің 6% массасы жоғалады. Температура мен қалған масса арасындағы байланыс: 330 °C – 83%, 340 °C – 59%, 350 °C – 30%. 360 °C-та негізгі масса жоғалуы 62 күн, 370 °C – 24 күн, 380 °C – 10 күн, 390 °C – 3,5 күн.

Изотермиялық қисықтарды талдауда ХШҰ концентрациясына байланысты термиялық тұрақтылықтың өзгеруі монотонды емес. Мысалы, 10% ХШҰ кезінде үлгінің қалған массасы аталған температурада айтарлықтай төмендеп, қарқынды деградация төменгі температураларға ауысады. Бұл толтырғыш бетінің каталитикалық әсерімен байланысты болуы мүмкін; 10% ХШҰ полимерлік матрицаның тұтастығын бұзады. Ал толтырғыш концентрациясын 20% дейін арттырғанда, керісінше, үлгінің қалған массасы таза үлгіге қарағанда артады, бұл толтырғыштың тұрақтандыру әсерін және қорғаныш қабатының түзілуін көрсетеді. 20% және 30% ХШҰүлгілерінде қалған массадағы айырмашылықтар айтарлықтай емес, бұл толтырғыштың шекті концентрациясына жеткенін білдіреді.

Изотермиялық қызмет ету уақыты. NETZSCH Kinetics Neo бағдарламалық қамтамасыз етуін қолдану арқылы әзірленген кинетикалық модель негізінде материалдың қызмет ету мерзіміне изотермиялық модельдеу жүргізілді. Модельдеу 10 °C–тан 400 °C–қа дейінгі әртүрлі температураларда, α = 0,02-ден 0,98-ге дейінгі түрлену дәрежелері үшін орындалды (3-сурет). Мұнда α = 0,02 материалдың ыдырауының басталуын, α = 0,05 функционалдық қасиеттерінің жоғалуын, ал α=0,5 материалдың жартысының, 0,98 – толық ыдырауын білдіреді.

Келесі суретте таза толтырғышсыз үлгінің қызмет ету уақытының қисықтары көрсетілген.



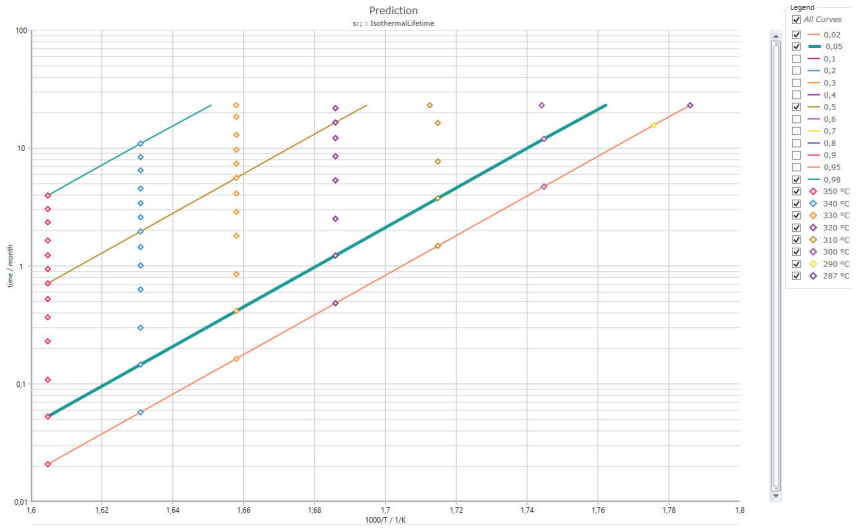
3-сурет. Таза полиэтиленнің кинетикалық қызмет ету уақыты қисықтары

Таза үлгіде бастапқы 283 градуста бастапқы ыдырау 2 жылға жуық уақытта, 290 – 9 ай, 300 – 3 ай, 310 – 1 айға жетер жетпес уақытта, 320-9 күнде, 330 – 3 күн, 340 – 1 күн, 350 – 11 сағатта.

Функционалдық қасиеттерін жоғалту уақытына келетін болсақ, онда сәйкесінше 290 – 2 жыл, 300 – 7,7 ай, 310 – 2,5 ай, 320 – 25 күн, 330 – 9 күн, 340 -3 күн және 350 – 1,2 күн.

Таза үлгіде жартылай ыдырау 320 градуста 1 жылға жуық уақытта, 330 – 4 ай, 340 – 1,5 ай және 350 – 15 күнде.

Толық ыдырау 330 градуста 22 айда, 340 – 8 айда, 350 – 3 айда жүреді.



4-сурет. HDPE/10%ХШҰ кинетикалық қызмет ету уақыты қисықтары

CC BY NC

Мұнда α=0,02 материалдың ыдырауының басталуын,α = 0,05 функционалдық қасиеттерінің жоғалуын, ал α=0,5 материалдың жартысының, 0,98 – толық ыдырауын білдіреді.

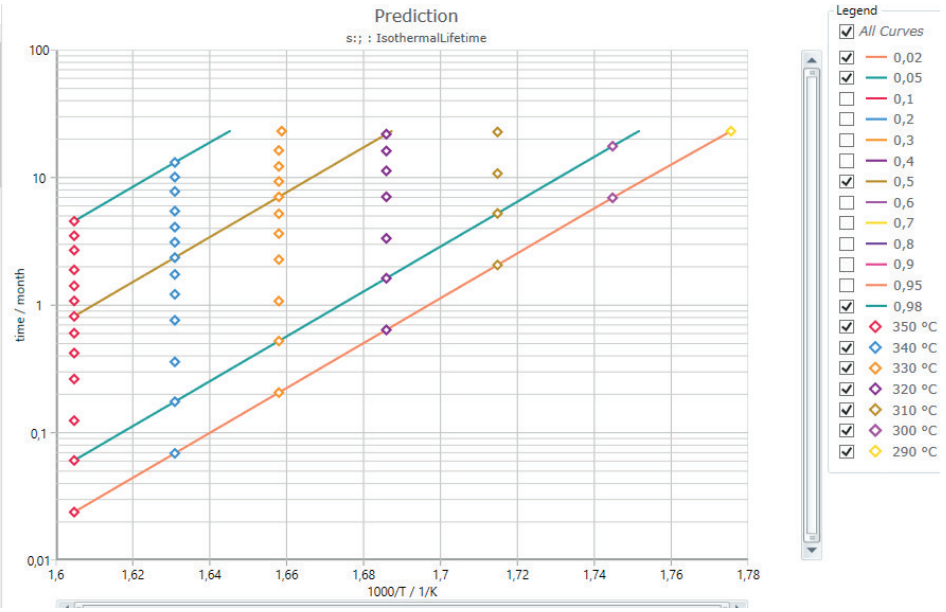
4-суреттен көріп тұрғандай, материалдың ыдырауы 270 градус температуралардың маңынан басталады, 287 градуста 2 жылға жуық мерзімде, 290 – 15 айда, 300 – 4,7 айда, 310 – 1,5 айда, 320 – жарты айда, 340-2күнге жуық мерзімде, 350 – 15 сағатта материалдың бастапқы ыдырауы басталады.

Функционалдық қасиеттерінің жоғалуы 300 градуста 1 жылда, 310 градуста – 3 айда, 320 – 35 күнде, 330-13 күнде, 340-4 күнде және 350 – 1,5 күнде орын алады.

Материалдың жартысының ыдырау мерзімін анықтайтын болсақ: 320 градус – 16 айда, 330 – 5,6 айда, 340-2 айда, 350 – 20 күн.

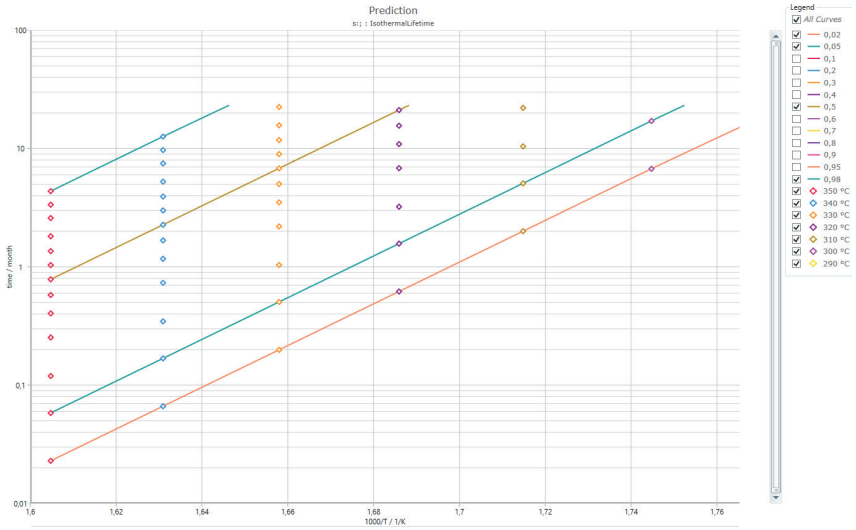
340 градуста үлгі 11 айда, 350 градуста – 4 айда толық ыдырауға ұшырайды.

Келесі суретте HDPE/20%ХШҰ пайыз үлгінің изотермиялық қызмет ету уақыты қисықтары көрсетілген.



5-сурет. HDPE/20%ХШҰ кинетикалық қызмет ету уақыты қисықтары

Ыдырау басталатын уақыт: 300 градуста – 7 ай, 310 – 2 ай, 320 -20 күнге жуық. 330 – 15 күн, 340 – 7 күн, 350 – 17 сағат. Қасиеттерін жоғалту: 300 градуста – 17 ай, 310 – 5 ай, 320 -1,5 ай. 330 – 15 күн, 340 – 5 күн, 350 – 2 күн. Жартылай ыдырау периоды: 320 -22 ай. 330 – 7 ай, 340 – 2 ай, 350 – 24 күн. Толық ыдырау 340 градуста 1 жылға жуық мерзімде, 350 – 4,5 айда орын алады.



6-сурет. HDPE/30%ХШҰ кинетикалық қызмет ету уақыты қисықтары

Ыдырау басталатын уақыт: 300 градуста – 6,7 ай, 310 – 2 ай, 320 -20 күнге жуық. 330 – 6 күн, 340 – 2 күн, 350 – 16 сағат.

Қасиеттерін жоғалту: 300 градуста – 17 ай, 310 – 5 ай, 320 -1,5 ай. 330 – 15 күн, 340 – 5 күн, 350 – 2 күн. Жартылай ыдырау периоды: 320 -21 ай. 330 – 6,8 ай, 340 – 2,2 ай, 350 – 23 күн.

Толық ыдырау 340 градуста 1 жылға жуық мерзімде, 350 – 4,3 айда орын алады.

20 пайыз ХШҰ және 10 пайыз ХШҰайтарлықтай айырмашылық байқалмайды.

HDPE/10%ХШҰ үлгімен HDPE/20%ХШҰ үлгісінің қызмет ету уақыттарын салыстыру кестесін келтірейік.

2-к*есте*. HDPE/10%ХШҰ үлгімен HDPE/20%ХШҰ үлгісінің қызмет ету уақыттарын салыстыру кестесі

Пайыз	0,02		0,05		0,5		0,98	
Таза	300	3 ай	300	7,7 ай	300		300	
	310	1 ай	310	2,5 ай	310		310	
	320	9 күн	320	25 күн	320	1 жыл	320	
	330	3 күн	330	9 күн	330	4 ай	330	22 ай
	340	1 күн	340	3 күн	340	1,5 ай	340	8 ай
	350	11 сағат	350	1,2	350	15 күн	350	3 ай
10%	300	4,7 ай	300	1 жыл	300	-	300	
	310	1,5 ай	310	3 ай	310	-	310	
	320	0,5 ай	320	35 күн	320	16 ай	320	
	330		330	13 күн	330	5,6 ай	330	
	340	2 күн	340	4 күн	340	2 ай	340	11 ай
	350	15 сағат	350	1,5 күн	350	20 күн	350	4 ай

CC BY NC

20%	300	6,7 ай	300	17 ай	300		300	
	310	2 ай	310	5 ай	310		310	
	320	20 күн	320	1,5 ай	320	21 ай	320	
	330	6 күн	330	15 күн	330	6,8 ай	330	
	340	2 күн	340	5 күн	340	2,2 ай	340	1 жыл
	350	16 сағат	350	2 күн	350	23 күн	350	4,3 ай

Кестеде әртүрлі тепмператураларда 0,02, 0,05, 0,5, 0,98 ыдырау деңгейлеріне дейін қызмет ету уақыттары көрсетілген. Толтырылмаған ұяшықтар сәйкес температурада берілген ыдырау деңгейіне дейін жетпейтінін білдіреді.

Кестеде көрініп тұрғандай, таза үлгімен салыстырғанда ХШҰ қосылған материал концентрация артқан сайын термиялық тұрақтылығын арттырады, айтарлықтай маңызды оң өзгерістер 20 пайыздық үлгіде көрінеді. Бағдарлама модельдеуі нәтижесі бойынша әрі қарай концентрацияны арттыру қомақты өзгерістерге әкелмейді.

Динамиканы модельдеу нәтижелері. *Зерттелетін үлгілердің температура біртіндеп өзгеріп отырған кезде әртүрлі жылдамдықтардағы сипаттамаларын алдық. Бірінші жоғары жылдамдықтарды қолдандық – 100 К/мин.*, 200 К/*мин*., 400 К/*мин. Мұндай үлкен жылдамдықтар жану үрдістеріне тән болып келеді.*

3-кесте. Жоғары жылдамдықтардағы үлгі сипаттамалары

Үлгі	*Ыдырау басталу температурасы* ^0C			*Үлгі массасының 50% жоғалту температурасы*			*Толық ыдырау уақыты* (*мин*..)		
	100 K/ min	200 K/min	400 K/min	100 K/min	200 K/min	400 K/ min	100 K/min	200 K/ min	400 K/ min
таза	443	451	461	504	514	525	0,9	0,53	0,29
10%	438	451	462	502	513	524	5,33	2,7	1,39
20%	439	452	463	500	510	520			
30%	460	464	471	501	511	521			

Кестеден көрініп тұрғандай, әртүрлі үлгілерде ХШҰ концентрациясына байланысты барлығына бірдей заңдылық байқалып тұрған жоқ. Дегенмен, 30 пайыздық үлгіде бастапқы ыдырау температурасы таза, 10%, 20% үлгімен салыстырғанда біршама жоғары. Толық ыдырау уақытына келетін болсақ, таза үлгімен 10 пайыздық үлгіні салыстырғанда, соңғысының ыдырау уақыты 5 есе көп. ХШҰ концентрациясы 20% және 30% термопластта толық ыдырау бағдарлама бойынша тіркелген жоқ, біріншісінде қалдық масса – 13%, екіншісінде – 20%.

Жоғары температураларда реакциялар өз кинетикасымен жүреді, стандартты модельдерге бағынбай кететінін көрсетіп тұр. Барлық үлгілер экстремалды жағдайда критикалық температураға біруақытта жетеді.

Әртүрлі жылыту жылдамдықтарын салыстыру мақсатында сипаттамаларды 5 К/мин., 10

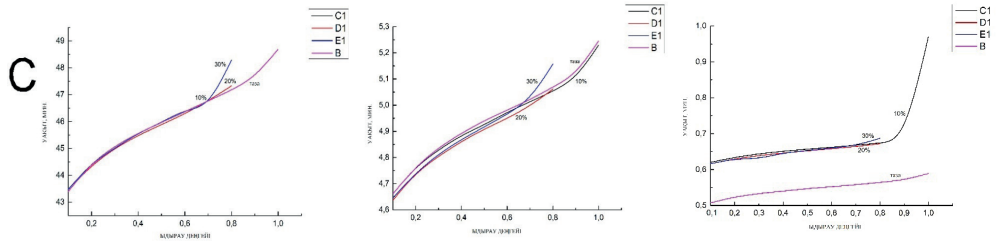
К/*мин.*, 20 К/*мин. кезінде модельдеу жасадық.*

4-кесте. Төмен жылдамдықтардағы үлгілердің сипаттамалары

Үлгі	*Ыдырау басталу температурасы* ^0C			*Үлгі массасының 50% жоғалту температурасы*			*Толық ыдырау уақыты (мин..)*		
	5 К/*мин.*	10 К/*мин.*	20 К/ *мин.*	5 К/*мин.*	10 К/*мин.*	20 К/*мин.*	5 К/*мин.*	10 К/ *мин.*	20 К/ *мин.*
таза	403	416	420	460	469	480	18	9	4
10%	405	417	421	460	469	480	18	9	5
20%	407	418	422	460	468	478	16	9	5
30%	403	415	420	460	469	479	16	9	5

Мұнда да, ХШҰ концентрациясы тек ыдырау басталу температурасына әсер ететіні байқалып тұр, ХШҰ қосылуы ыдырау температурасын жоғарлатады.

*Үлгінің әртүрлі ХШҰ концентрациясында ыдырау деңгейлерінің қандай уақытқа және температураға сәйкес келетінін салыстыру мақсатында изоконверсиялық қисықтарды құрастырдық (*7-сурет).

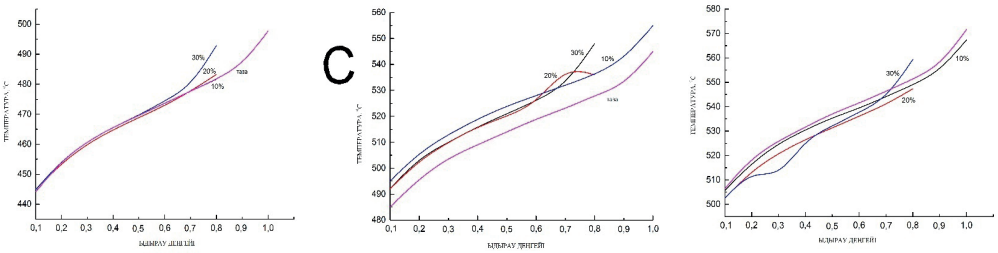


7-сурет. Уақытқа қатысты изоконверсиялық қисықтар
а) 10 К/мин. ә)100 К/мин. б)800 К/мин.

Суреттен көрініп тұрғандай 10 К/мин. жылыту жылдамдығында ыдырау уақыты 43 минуттан 49 минутқа дейін жалғасады. ХШҰ қоспасы бар үлгілердегі ыдырау уақытынның тежелуі тек 0,7 деңгейінен ғана біліне бастайды. Бұл айырмашылық әсіресе 30% үлгіде қатты байқалады: 0,8 деңгейде бұл үлгінің ыдырауы таза үлгімен салыстырғанда 1 мин.уттан астам уақытқа кешігеді. Бұл жылдамдық өрт қаупі басталған жағдайға сәйкес келеді.

Жыламдық 100 К/мин. артқан кезде кіші ыдырау деңгейлерінде уақытта аса айырмашылық білінбейді, 0,7 деңгейден бастап 30% үлгі 2 минутқа дейін айырмашылық көрсетеді, экстремалды жағдайда, әсіресе өрт кезінде бұл айтарлықтай рөл атқарады.

Ал 800 К/мин. жылдамдықта ХШҰ қоспасы материалдың ыдырауына қатты әсерін тигізеді, бұл жылдамдық өрт кезіндегі алаудың орталығында температура өсуіне сәйкес келеді. Мұнда 10 % үлгінің толық ыдырау уақыты 30 секундқа дейін тежеледі. 20% және 30% үлгі толық ыдырауға ұшырамайды, біріншісінің максималды деңгей -0,8, екіншісі – 0,87.



а) ә) б)

8-сурет. Температураға қатысты изоконверсиялық қисықтар
а) 10 К/мин. ә)100 К/мин. б)800 К/мин.

10 К/*мин. жылдамдықта ыдырау температуралары 444тен басталып ыдырау деңгей 0,6-0,7 жеткен кезде концентрацияға қатысты артып келеді. Бұл қосылған ұнтақтың әсерін білдіреді. Жылдамдық 100 К/мин.*, 800 К/*мин. артқан кезде кинетика заңдылығы өзгере бастайды: 100 К/мин. – ұнтақ қосылған үлгілер таза үлгіге қарағанда ыдырау температуралары жоғарырақ болады, бірақ ол концентрацияға пропорционал емес. Мысалы, бұл жылдамдықта төмен ыдырау деңгейлерінде 10 пайыздық полиэтиленнің температурасы жоғары, 20 және 30 пайыз үлгілердікі төмендеу. 800 К/мин. жылдамдыққа келетін болсақ, төмен ыдырау деңгейлерінде концентрацияға пропорционал болып деградация температуралары төмендеп келеді.*

Жалпы, барлық графиктерден байқалған дұрыс кинетика уақытқа қатысты да, температураға қатысты да тек ыдыраудың жоғары деңгейлерінен басталады, яғни, концентрация артқан сайын 0,7 деңнейінен бастап, ыдырау температурасы, уақыты артады. Төмен қыздыру жылдамдықтарында 0,7 ыдырау деңгейіне дейін уақыт, температураның концентрацияға тәуелділігі аса байқалмайды. Жоғары жылдамдықтарда айырмашылық біліне бастайды, бірақ ыдыраудың жоғары деңгейлерінде заңдылық айқын болып келеді.

Қорытынды**.** Жоғары тығыздықтағы полиэтиленге әртүрлі толтырғыштарды қосу полимердің кристалдану кинетикасына және динамикалық механикалық қасиеттеріне әсер етеді, бұл оның өңдеушілігі мен қолдану салалары үшін маңызды. Сондықтан да, мақаладағы үлгілерге әртүрлі эксплуатация жағдайларында қызмет ету мерзімі және термиялық қасиеттері саласында зерттеулер жүргізу өте маңызды.

ТГА кезінде болатын реакция қарапайым 1ші ретті F_n реакциясына сәйкес келеді.

Таза үлгінің осы реакциясының активациялық энергиясы 312 кДж/моль, ал 10% үлгіде – 321 кДж/моль. 20% ХШҰ құрамына ие үлгінің реакциясының активациялық энергиясы 336 кДж/моль, ал 30% үлгінде – 337 кДж/мольге тең.

ТГА нәтижелерін қолданып, бағдарламада изотермиялық қисықтар бойынша, изотермиялық қызмет ету уақыты қисықтары және динамикалық қисықтар арқылы бірнеше кинетикалық қасиеттеріне болжам жасалды. Әсіресе, динамикалық

режим кезінде әртүрлі қыздыру жылдамдығын бекіте отырып, өрт кезіндегі жүйе сипаттамаларын алып, салыстыруға мүмкіндік береді.

ХШҰ концентрациясына байланысты термиялық тұрақтылықтың өзгеруі монотонды емес. 10% ХШҰ қосылған үлгінің қалған массасы аталған температурада айтарлықтай төмендеп, қарқынды деградация төменгі температураларға ауысады. Ал толтырғыш концентрациясын 20% дейін арттырғанда, керісінше, үлгінің қалған массасы таза үлгіге қарағанда артады, бұл толтырғыштың тұрақтандыру әсерін және қорғаныш қабатының түзілуін көрсетеді. 20% және 30% ХШҰ қосылған үлгілерінде қалған массадағы айырмашылықтар айтарлықтай емес, бұл толтырғыштың шекті концентрациясына жеткенін білдіреді.

Қызмет ету уақытын модельдеу нәтижелеріне сүйенсек, таза үлгімен салыстырғанда ХШҰ қосылған материал концентрация артқан сайын термиялық тұрақтылығын арттырады, айтарлықтай маңызды оң өзгерістер 20 пайыздық үлгіде көрінеді. Бағдарлама модельдеуі нәтижесі бойынша әрі қарай концентрацияны арттыру қызмет ету уақытына қомақты өзгерістерге әкелмейді.

Динамикалық режимде кинетикалық қасиеттерді модельдеу өртке төзімді материалдарды жасақтауға көмегін береді, себебі мұнда қыздырудың әртүрлі жылдамдығын бағдарламада қойып, материалдың деградациясының уақытын және температурасын анықтауға мүмкіндік береді. *Дұрыс кинетика уақытқа қатысты да, температураға қатысты да тек ыдыраудың жоғары деңгейлерінен басталады, яғни, концентрация артқан сайын 0,7 деңгейінен бастап, ыдырау температурасы, уақыты артады. Төмен қыздыру жылдамдықтарында 0,7 ыдырау деңгейіне дейін уақыт, температураның концентрацияға тәуелділігі аса байқалмайды. Жоғары жылдамдықтарда айырмашылық біліне бастайды, бірақ ыдыраудың жоғары деңгейлерінде заңдылық айқын болып келеді.*

References

Eck, Marcel, Simon Timm Schwab, Taylor Frederick Nelson, Katrin Wurst, Steffen Iberl, David Schleheck, Christoph Link, Glauco Battagliarin and Stefan Mecking (2022) Biodegradable High-Density Polyethylene-like Material. Angewandte Chemie International Edition. https://doi.org/10.1002/ange.202213438 (in Eng.)

Gao, Wei, Yufeng Li, Jitao Zhao, Zhe Zhang and Weiwei Tang (2022) Influence of surface modification of zinc oxide on physical properties of high-density polyethylene. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 653:130000. (in Eng.)

Harter Alexander G., Thomas M. Klapötke, Jasmin T. Lechner and Jörg Stierstorfer (2022) Kinetic Predictions Concerning the Long-Term Stability of TKX-50 and Other Common Explosives Using the NETZSCH Kinetics Neo Software. Propellants, Explosives, Pyrotechnics, 47. e202200031. (in Eng.)

Huang, Runzhou, Xinwu Xu, Sunyoung Lee, Yang Zhang, Birm-June Kim and Qinglin Wu (2013) High Density Polyethylene Composites Reinforced with Hybrid Inorganic Fillers: Morphology, Mechanical and Thermal Expansion Performance. Materials, 6(9). – P. 4122–4138. (in Eng.)

Huziazmetova A., Abdrakhmanova L., Nizamov R., and others (2024) Napolnenie polivinilkhloridnoy smesi polimerov vspuchennym perlitovym peskom [Incorporation of expanded perlite sand as a filler into a polyvinyl chloride (PVC) polymer blend]. News of the Kazan State University of Architecture and Engineering. – 3(69). – P. 6-14. DOI: 10.48612/NewsKSUAE/69.1 (in Russian)

Kukaleva N., G.P. Simon and E. Kosior (2004) Modification of recycled high-density polyethylene by low-density and linear-low-density polyethylenes. Polymer Engineering & Science. https://doi.org/10.1002/pen.10002. (in Eng.)

Manić N, Janković B. and Dodevski V. (2020) Model-free and model-based kinetic analysis of Poplar fluff (Populus alba) pyrolysis process under dynamic conditions. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 143. – P. 3419-3438. (in Eng.)

Menzel, Teresa, Nora Meides, Anika Mauel, Ulrich Mansfeld, Winfried Kretschmer, Meike Kuhn, Eva M. Herzig, Volker Altstädt, Peter Strohriegl, Jürgen Senker and Holger Ruckdäschel (2022) Degradation of low-density polyethylene to nanoplastic particles by accelerated weathering. Science of The Total Environment, 826:154035. (in Eng.)

Patel, R. M. (2012) Crystallization kinetics modeling of high density and linear low density polyethylene resins. Journal of Applied Polymer Science, 124(2). – P. 1542-1552. (in Eng.)

Roger S.L., Wan Kamis W.Z., Isa N., Ali Bashah N.A., & Inderan V. (2022). Synthesis and characterizations of chromium-aluminium mixed oxides catalysts to produce FAME. ESTEEM Academic Journal, 18(Sept). – P. 120-128. https://uppp.uitm.edu.my/ (in Eng.)

Shtyka O., Maniukiewicz W., Ciesielski R., & Kedziora A. (2021). The Formation of Cr-Al Spinel under a Reductive Atmosphere. Materials, 14(12). – P. 3218. https://doi.org/10.3390/ma14123218

Sobek S., Werle S. (2020) Kinetic modelling of waste wood devolatilization during pyrolysis based on thermogravimetric data and solar pyrolysis reactor performance. Fuel, 261: 116459. DOI: 10.1016/j.fuel.2019.116459 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 136–148

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.410

UDC: 544.22; 538.9; 621.383.51
IRSTI: 29.19.23; 31.15.13

©Nurbayev B.M.[1], Dmitriyeva E.A.[1], Kemelbekova A.E.[1,2]*, 2026.
[1]Institute of Physics and Technology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan;
[2]The Pennsylvania State University, State College, United States of America.
[*]E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university

THE ROLE OF LOW-DIMENSIONAL LAYERED STRUCTURES IN ENHANCING THE STABILITY OF TIN-BASED PEROVSKITE MATERIALS

Nurbayev Bedelbek — PhD candidate, IPT engineer, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: bedel.armia.99@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-3059-6349;
Dmitriyeva Elena — Candidate of Phys.-Math. Sc., professor, leading researcher, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: dmitriyeva2017@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-1280-2559;
Kemelbekova Ainagul — PhD, IPT senior researcher, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university, https://orcid.org/0000-0003-4813-8490.

Abstract. In recent years, perovskite materials have attracted significant attention due to their outstanding performance in photovoltaic devices. A particularly important direction is the development of lead-free alternatives, among which tin-based perovskites demonstrate high efficiency. However, their low stability and strong susceptibility to degradation under exposure to oxygen, moisture, and light remain major challenges. Consequently, researchers are actively exploring low-dimensional layered structures capable of substantially enhancing the stability of these materials.

Layered perovskites consist of alternating organic and inorganic layers, forming 2D quantum wells, 1D rods, or 0D quantum dots depending on their chemical composition. Their key advantage lies in the broad flexibility of structural design, which opens extensive opportunities for creating new architectures and tailoring material properties. The article provides a detailed discussion of the main types of structural distortions - in-plane, out-of-plane, and octahedral all of which have a pronounced impact on the electronic and optical characteristics of these systems.

Special attention is given to the band structure, density of states, and effective masses of charge carriers. It is shown that reducing dimensionality leads to band-gap widening, enhanced quantum and dielectric confinement, and an increase in exciton binding energy. These effects give rise to the strongly excitonic nature of optical transitions in 2D tin-based perovskites. The discussion also covers photoluminescence features,

including the emergence of “dark” exciton states and the influence of defects formed during degradation.

Overall, the study highlights that low-dimensional layered structures represent a highly promising strategy for improving the stability of tin-based perovskites. Control over structural parameters, along with the selection of organic cations, halides, and dopants, enables targeted tuning of their electronic and optical properties. The aim of this work is to provide a comprehensive analysis of the structural, electronic, and optical properties of low-dimensional tin-based layered perovskites, including their structural distortions, band structure, and excitonic behavior. The findings may serve as a foundation for the development of stable and high-efficiency photovoltaic devices.

Keywords: perovskites, tin, low-dimensional materials, 3D perovskite, photovoltaic device

Financing. *This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP23485698 “Investigation of tin-based perovskites on flexible substrates”).*

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 136–148. DOI:https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.410*

©Нұрбаев Б.М.[1], Дмитриева Е.А.[1], Кемелбекова А.Е.[*1,2], 2026.
[1]Физика-техникалық институты, Satbayev University, Алматы, Қазақстан;
[2] The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Америка Құрама Штаттары.
[*]E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university

ҚАЛАЙЫ НЕГІЗІНДЕГІ ПЕРОВСКИТТІ МАТЕРИАЛДАРДЫҢ ТҰРАҚТЫЛЫҒЫН АРТТЫРУДАҒЫ ТӨМЕНӨЛШЕМДІ ҚАБАТТЫ ҚҰРЫЛЫМДАРДЫҢ РӨЛІ

Нұрбаев Беделбек — PhD докторант, ФТИ инженері, Алматы, Қазақстан,
E-mail: bedel.armia.99@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-3059-6349;
Дмитриева Елена — физика-математика ғылымдарының кандидаты, профессор, жетекші ғылыми қызметкер, Алматы, Қазақстан,
E-mail: dmitriyeva2017@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-1280-2559;
Кемелбекова Айнагуль — PhD, ФТИ аға ғылыми қызметкер, Алматы, Қазақстан,
E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university, https://orcid.org/0000-0003-4813-8490.

Аннотация. Соңғы жылдары перовскит негізіндегі материалдар фотоэлектрлік құрылғылардағы ерекше сипаттамаларына байланысты айтарлықтай назар аударып отыр. Қорғасынсыз баламалардың дамуы ерекше қызығушылық тудырады, олардың арасында қалайы перовскиттері жоғары тиімділікті көрсетеді. Дегенмен, олардың төмен тұрақтылығы және оттегі, ылғал және жарық әсерінен

деградацияға бейімділігі негізгі мәселе болып қала береді. Осыған байланысты зерттеушілер материалдардың тұрақтылығын едәуір арттыра алатын төмен өлшемді қабатты құрылымдарды белсенді түрде зерттеліп жатыр.

Қабатты перовскиттер химиялық құрамына байланысты 2D кванттық шұңқырларды, 1D стерженьдерді немесе 0D кванттық нүктелерді құрайтын ауыспалы органикалық және бейорганикалық қабаттардан тұрады. Олардың маңызды артықшылығы — жаңа құрылымдар құруға және қасиеттерін басқаруға кең мүмкіндіктер ашады. Мақалада электронды және оптикалық сипаттамаларға айтарлықтай әсер ететін құрылымдық бұрмаланулардың түрлері — жазықтық ішінде, жазықтықтан тыс және октаэдрлік түрлері қарастырылады.

Мақалада аймақтық құрылымға, күй тығыздығына және заряд тасымалдаушылардың тиімді массаларына ерекше назар аударылады. Өлшемнің төмендеуі диапазонның кеңеюіне, кванттық және диэлектрлік шунттаудың жоғарылауына және экситондардың байланыс энергиясының жоғарылауына әкелетіні көрсетілген. Бұл әсерлер 2D қалайы перовскиттеріндегі оптикалық ауысулардың айқын экситондық сипатын анықтайды. Фотолюминесценцияның ерекшеліктері, соның ішінде «қараңғы» экситондық күйлердің пайда болуы және деградация процесінде пайда болатын ақаулардың әсері де талқыланады.

Жұмыс төмен өлшемді қабатты құрылымдар қалайы перовскиттерінің тұрақтылығын арттырудың перспективалық бағыты екенін көрсетеді. Құрылымдық параметрлерді басқару, органикалық катиондарды, галогенидтерді және легирлеуші элементтерді таңдау электронды және оптикалық қасиеттерді мақсатты түрде реттеуге мүмкіндік береді. Осы мақаланың мақсаты — қалайы негізіндегі төменөлшемді қабатты перовскиттердің құрылымдық, электрондық және оптикалық қасиеттерін кешенді түрде талдау, олардың бұрмалану ерекшеліктерін, зоналық құрылымын және экситондық табиғатын сипаттау. Бұл зерттеу нәтижелері болашақта тұрақты әрі тиімді фотоэлектрлік құрылғыларды әзірлеуге негіз бола алады.

Түйін сөздер: перовскиттер, қалайы, төменөлшемді материалдар, 3D-перовскит, фотоэлектрлік құрылғы

©Нурбаев Б.М.[1], Дмитриева Е.А.[1], Кемелбекова А.Е.[*1,2], 2026.
[1]Физико-технический институт, Satbayev University, Алматы, Казахстан;
[2] The Pennsylvania State University, Стейт колледж,
Соединенные Штаты Америки.
[*]E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university

РОЛЬ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР В ПОВЫШЕНИИ СТАБИЛЬНОСТИ ПЕРОВСКИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ОЛОВА

Нурбаев Беделбек — PhD докторант, инженер ФТИ, Алматы, Казахстан,
E-mail: bedel.armia.99@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-3059-6349;

Дмитриева Елена — кандидат физико-математических наук, профессор, ведующий научный сотрудник, Алматы, Казахстан,
E-mail: dmitriyeva2017@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-1280-2559;
Кемелбекова Айнагуль — PhD, старший научный сотрудник ФТИ, Алматы, Казахстан,
E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university, https://orcid.org/0000-0003-4813-8490.

Аннотация. В последние годы перовскитные материалы привлекают значительное внимание благодаря своим выдающимся характеристикам в фотоэлектрических устройствах. Особый интерес вызывает разработка бессвинцовых альтернатив, среди которых оловянные перовскиты демонстрируют высокую эффективность. Однако ключевой проблемой остается их низкая стабильность и склонность к деградации под воздействием кислорода, влаги и света. В связи с этим исследователи активно изучают низкоразмерные слоистые структуры, способные существенно повысить устойчивость таких материалов. Слоистые перовскиты состоят из чередующихся органических и неорганических слоев, формируя 2D-квантовые ямы, 1D-стержни или 0D-квантовые точки в зависимости от химического состава. Их важное преимущество заключается в широких возможностях создания новых структур и управления их свойствами. В статье подробно рассматриваются типы структурных искажений - внутриплоскостные, внеплоскостные и октаэдрические, - которые существенно влияют на электронные и оптические характеристики. Особое внимание уделено зонной структуре, плотности состояний и эффективным массам носителей заряда. Показано, что уменьшение размерности приводит к расширению запрещенной зоны, усилению квантового и диэлектрического ограничения, а также к увеличению энергии связи экситонов. Эти эффекты определяют ярко выраженную экситонную природу оптических переходов в 2D-оловянных перовскитах. Обсуждаются также особенности фотолюминесценции, включая появление «темных» экситонных состояний и влияние дефектов, возникающих в процессе деградации. В работе подчеркивается, что низкоразмерные слоистые структуры являются перспективным направлением повышения стабильности оловянных перовскитов. Управление структурными параметрами, выбор органических катионов, галогенидов и легирующих элементов позволяют целенаправленно регулировать электронные и оптические свойства материалов. Цель статьи заключается в комплексном анализе структурных, электронных и оптических свойств низкоразмерных слоистых перовскитов на основе олова, включая особенности их структурных искажений, зонной структуры и экситонной природы. Полученные результаты могут служить основой для разработки стабильных и высокоэффективных фотоэлектрических устройств.

Ключевые слова: перовскиты, олово, низкоразмерные материалы, 3D-перовскит, фотоэлектрическое устройство

Кіріспе. Соңғы жылдары перовскиттік материалдар фотоэлектрлік құрылғыларда жоғары тиімділікке қол жеткізуімен ғылым мен технологияда ерекше қызығушылық тудырып отыр. Әсіресе, құрамына қорғасын қосылмай,

балама материал ретінде қалайы негізіндегі перовскиттерді зерттеу өзекті бағытқа айналды. Қалайы негізіндегі перовскиттік күн элементтерінің тиімділігі 14%-дан асып, оларды болашағы зор материалдар қатарына қосты. Алайда, қалайы негізіндегі материалдардың тұрақсыздығы мен деградацияға бейімділігі практикалық қолдануды шектейді.

Бұл мәселені шешудің жолдарының бірі – төменөлшемді қабатты перовскиттерді пайдалану. Мұндай құрылымдар бейорганикалық және органикалық қабаттардан тұрады және олардың химиялық құрамына байланысты әртүрлі кванттық жүйелерді түзе алады. Қабатты перовскиттердің ең басты артықшылығы – олардың құрамы 3D-перовскиттердегі сияқты А орнындағы катион өлшемімен шектеліп қоймайды, сондықтан жаңа композициялар мен құрылымдардың кең мүмкіндіктер әлеуетін ашады.

Осы жұмыстың мақсаты – қалайы негізіндегі төменөлшемді қабатты перовскиттердің құрылымдық, электрондық және оптикалық қасиеттерін кешенді түрде талдау, олардың бұрмалану ерекшеліктерін, зоналық құрылымын және экситондық табиғатын сипаттау болып табылады. Бұл зерттеу нәтижелері болашақта тұрақты әрі тиімді фотоэлектрлік құрылғыларды әзірлеуге негіз бола алады.

Қалайы негізіндегі перовскиттік күн элементтерінің тиімділігін үздіксіз ғылыми зерттеулердің нәтижесінде 14%-дан жоғары деңгейге жетіп, оларды әлеуетті «қорғасынсыз» материалдардың қатарына қосты. Дегенмен, тиімділіктің артуына қарамастан, қалайы негізіндегі құрылғылар деградацияға бейім болып қала береді. Жоғары температура мен ылғалдылық жағдайларында тұрақтылықты арттыру мақсатында төменөлшемді қабатты перовскиттерге, қорғасын және қалайы негізіндегі жүйелерде де, айрықша назар аударылуда.

Бұл қабатты құрылымдарда бейорганикалық және органикалық қабаттар тізбекті орналасады және олардың химиялық құрамына байланысты табиғи түрде 2D кванттық шұңқырлар, 1D кванттық стерженьдер немесе 0D кванттық нүктелерді түзе алады. Қабатты перовскиттердің құрамы 3D-перовскит құрылымындағыдай А орнындағы катион өлшемімен шектелмейді, сондықтан жаңа композициялар мен құрылымдардың шексіз пайда болуына жол ашылады.

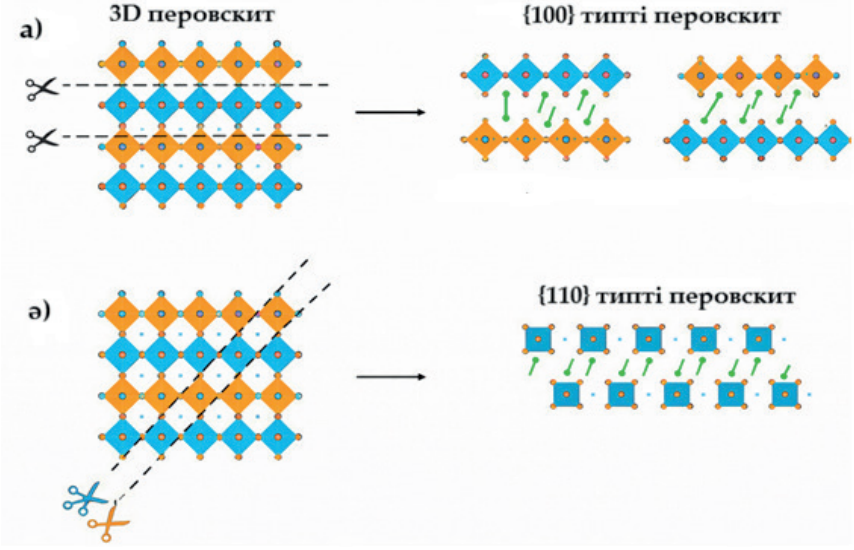
Әдебиетке шолу**.** Перовскиттің ABX_3 құрылымдық типі үшөлшемді (3D) тордың тұрақтылығын қамтамасыз ету үшін А орнындағы катионның иондық радиусына қатаң талаптар қойылады. Егер бұл талаптардың сақталмауы орын алса және орнына ірі органикалық катион енгізілсе, бастапқы 3D-перовскит құрылымы төмен өлшемді жүйелерге ыдырайды.

Қабатты (2D) перовскитті материалдарды бастапқы үшөлшемді құрылымды белгілі бір кристаллографиялық бағыттар бойынша ойша кесу арқылы сипаттауға болады. Мұндай қабатты жүйелер перовскитке ұқсас блоктардың арасына органикалық катиондарды енгізу арқылы түзіледі. Бұл катиондар бірвалентті (A′) немесе еківалентті (A″) болуы мүмкін.

Мысалы, келесі 1 суретте қабатты перовскиттердің екі негізгі типінің – (100) және (110) бағытындағы құрылымдардың – сызбанұсқалық бейнесі көрсетілген.

CC BY NC

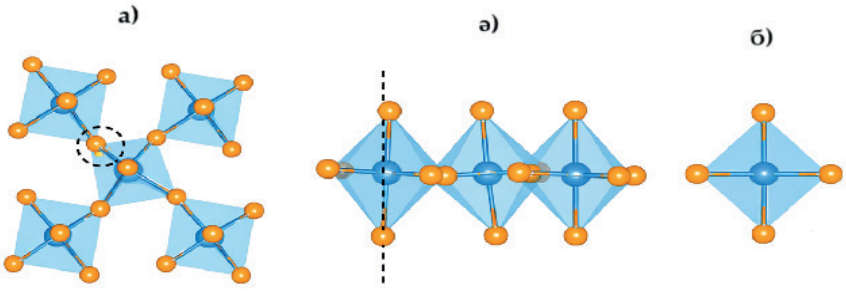
Бұл типтер органикалық катиондардың енгізілу ерекшеліктеріне және қабаттардың бағытталуына байланысты ажыратылады.



Сурет 1 - Үшөлшемді (3D) бастапқы құрылымды блокты а) 100) және ә) (110) жазықтықтары бойынша кесу нәтижесінде төменөлшемді перовскиттер алынады: сәйкесінше 2D-кванттық шұңқырлар және 1D-кванттық стерженьдер.
(100) типіндегі перовскиттер әдетте Дайон–Якобсон (DJ) фазасы немесе Раддлсден–Поппер (RP) фазасы түрлеріне жіктеледі.

Төменөлшемді перовскиттің (100) типі әдетте ең жиі кездеседі, ал (110) типті перовскиті тек бірнеше қосылыстар ғана түзеді. Әртүрлі құрылымдардың типтері жүйелердің құрылымдық параметрлеріне қол жеткізу үшін Марченко және әріптестерінің деректер қорында сипатталған (Marchenko et.al., 2020).

Қабатты перовскиттер 3D-аналогымен салыстырғанда, жиі идеалды перовскиттік байланыстан ауытқиды, мұнда органикалық катиондар қабаттарға белгілі бір бұрмаланулар енгізеді. Үш түрлі бұрмалану типін анықтаймыз, олар келесі 2 – суретте көрсетілген.



Сурет 2 – Қабатты перовскиттер келесі үш түрлі бұрмалануды көрсете алады: а) жазықтықтағы бұрмалану (in-plane), ә) жазықтықтан тыс бұрмалану (out-of-plane distortion) және б) октаэдрлік бұрмалану.

Жазықтықтағы бұрмалану Sn–X–Sn байланыс бұрышын идеалды 180° мәнінен азайтады. Жазықтықтан тыс бұрмалану октаэдрлердің еңкеюіне алып келеді, ал октаэдрлік бұрмалану бейорганикалық торлардың октаэдрлік геометриясынан ауытқуымен түсіндіріледі.

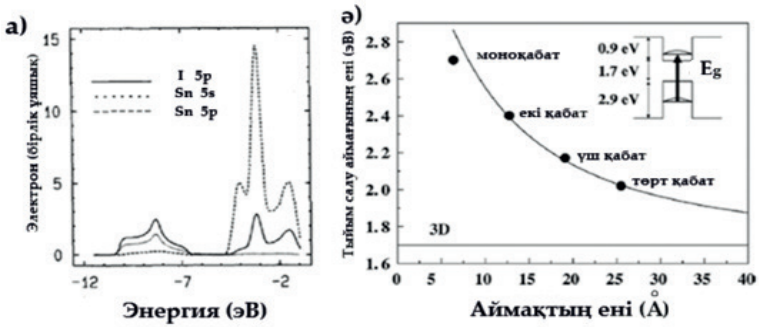
Жазықтықтағы бұрмалану октаэдрлер арасындағы бұрыш (Sn–X–Sn бұрышы) идеалды 180°-тан аз болған жағдайда байқалады (2 а-сурет). Жазықтықтан тыс бұрмалану 2 ә-суретте көрсетілген және ол октаэдрлердің жазықтықтан тыс еңкеюімен сипатталады. Жекелеген октаэдрлер де бұрмалануға ұшырауы мүмкін, бұл әдетте Sn–X байланыс ұзындықтарының немесе X–Sn–X байланыс бұрыштарының өзгеруіне алып келеді (2 б-сурет).

Нәтижелер мен талқылау. *Электрондық және оптикалық қасиеттер.* Қабатты перовскиттер төменөлшемді бейорганикалық құрылымдар тізбегінен тұрады, осыған байланысты олардың электрондық және оптикалық қасиеттері айтарлықтай өзгереді. Алғашқыда Sn негізіндегі қабатты перовскиттер төменгі n мәндерінде жартылай өткізгіштік сипатқа ие, ал үлкен n мәндерінде металлдық қасиеттерге жақындайды деп есептелген (Papavassiliou et.al., 1994). Бұл үрдіс үлкен n мәндерінде тор бұрмалануының төмендеуімен және идеалды кубтық перовскит құрылымына жақындауымен корреляцияланған (Mitzi, 1996). Такахаши және әріптестері p-типті лезден легирлеу қабатты перовскиттердің жоғары өткізгіштігін туындататынын болжады (Takahashi et.al., 2007). Өткізгіштіктің одан әрі артуы құрылымға Sn^{4+} иондарын жасанды енгізу арқылы жүзеге асырылып, олардың гипотезасын растады. Қазіргі таңда қалайы негізіндегі перовскиттердің металлдық қасиеттері p-типті легирлеумен түсіндіріледі, алайда тор бұрмалануы электрондық және оптикалық қасиеттердің басым бөлігін айқындауды жалғастыруда.

Зоналық құрылым, күй тығыздығы және тиімді массалар. Органикалық катиондардың HOMO–LUMO саңылауы бейорганикалық октаэдрлік құрылымның тыйым салынған аймағына қарағанда әлдеқайда үлкен болғандықтан, төменөлшемді қабатты перовскиттердің аймақ шекарасына жақын электрондық қасиеттері негізінен қалайы және галогенид орбиталдарынан тұрады. Аймақтық құрылымдар мен күй тығыздығын (DOS) есептеу үшін тек SnI_4^{2-} иондық қабаттарын қарастырған және кеңейтілген Хюккельдің байланыс әдісін қолданған. Бұл есептеулер төменөлшемді құрылымдардың негізгі ерекшеліктерін анықтады: тікелей тыйым салынған аймақ, кеңейтілген аймақмсаңылауы және өткізгіштік жолағының тарылуы (Katan et.al., 2019).

Келесі 3 а-суретте осы есептеулер нәтижесінде алынған DOS көрсетілген: валенттік аймақтың максимумы (VBM) негізінен Sn 5s және I 5p кері байланыс орбиталдарынан тұрады, ал өткізгіштік аймақтың минимумы (CBM) негізінен Sn 5p және I 5p кері байланыс орбиталдарынан құралған. Аймақ шекараларының құрамы құрылымның тыйым салынған аймаққа әсерін түсінуге мүмкіндік береді, бұл (100) типті перовскиттер үшін Кнутсон және әріптестерімен зерттелген (Knutson et.al., 2005). Жазықтықтағы бұрмалану тыйым салынған аймақтың ұлғаюына жазықтықтан тыс бұрмалануға қарағанда анағұрлым күшті әсер ететіні байқалады. Пентандиаммоний (PeDA) және iPy органикалық

катиондары қолданылған зерттеу $(iPy)_2SnI_4$ қосылысының кең тыйым салынған аймағы жазықтықтан тыс бұрмалану азайғанына қарамастан, үлкен октаэдрлік бұрмаланумен түсіндірілетінін көрсетті, (Stoumpos et.al., 2017).



Сурет 3 – а) SnI_4^{2-} иондық қабаттарын ғана ескеретін DOS, кеңейтілген Хюккельдің байланыс әдісі арқылы есептелген. ә) Қабатты перовскиттің қалыңдығына тәуелді тыйым салынған аймақтың ені, мұнда тұтас сызық тиімді масса жуықтауы негізінде есептелген мәнді көрсетеді. Моноқабат үшін бұл жуықтау бұзылады.

Бұл есептеулер супертор әсерін асыра бағалайды: мини-аймақтардың түзілуі болжанғанымен, кеңінен қолданылатын органикалық катиондарда ол әлі тәжірибелік түрде расталмаған (Even et.al., 2014). Танако және әріптестері алған нәтижелер 3 ә – суретте көрсетілген, олар тиімді масса жуықтауы моноқабат (n = 1) үшін тыйым салынған аймақтың енін қайта шығара алмайтынын айқын көрсетеді (Tanaka et.al., 2003). Сондықтан, осы әдістермен алынған экситон байланыс энергиясының есептеулері нақты емес (Ma et.al., 2016).

Моноқабатты перовскиттер үшін тиімді масса жуықтауы жұмыс істемейтіндіктен, дәлірек сипаттау үшін DFT әдістерін қолдану қажет. DFT құрылымдық оптимизацияларын жүзеге асыру мұқият тексерілуі тиіс, себебі жазықтық ішіндегі және сыртындағы қосымша бұрмаланулар электрондық құрылымға айтарлықтай әсер етуі мүмкін. Екіншіден, тиімді массаларды сенімді бағалау теория деңгейіне тәуелді, ол релятивистік және көпбөлшекті эффектілерді енгізуді талап етеді. Көптеген қабатты перовскиттер үшін мұндай теориялық деңгей есептеу тұрғысынан тым күрделі болып табылады.

Бағалаудың болмауы $(BA)_2SnI_4$ қосылысы үшін электрон мен кемтіктің тиімді массаларының әртүрлі мәндерінің хабарлануына алып келеді: олар сәйкесінше 0,29/0,37 m_e (HSE + SOC) және 0,33/0,21 m_e (HSE) болып есептелген (Dyksik et.al.,2020). Тәжірибелік түрде анықталған $(PEA)_2SnI_4$ қосылысының келтірілген тиімді массалары $FASnI_3$-ке қарағанда төмен мәндер көрсеткен, бұл жүйедегі кванттық шектеуді ескергенде қарама-қарсы нәтиже болып табылады (Liang et.al., 1998). PBE деңгейіндегі DFT жолақ құрылымы есептеулері қалайы бромидінің 0D және 2D қабатты перовскиттері үшін өлшемділіктің азаюы дисперсияны төмендетіп, тыйым салынған аймақтың енін арттыратынын көрсетті (Straus et.al., 2018). 0D жүйелері жолақ құрылымы есептеулері құрылымдық тұрғыдан

оқшауланған октаэдрлердің электрондық тұрғыдан да ажыратылғанын көрсетті. 2D жағдайында Г–μ бағытындағы дисперсияның болмауы жазықтықтан тыс бағытқа сәйкес келеді және {100} типті перовскиттердің 2D электрондық табиғатын растайды. Бұл есептеулер тәжірибелік бақылауларды қуаттайды, яғни көршілес бейорганикалық қабаттар арасында ешқандай өзара әрекеттесу байқалмаған (Zhou et.al., 2017). 0D құрылымының CBM құрамына органикалық катионның үлесі кіргенімен, оптикалық қасиеттер әлі де бейорганикалық октаэдрлермен айқындалады: тетік Sn–Br экваторлық жазықтығында, ал электрон Sn–Br апикальдық байланыстарында локализацияланған.

Оптикалық қасиеттер.{100} типті перовскиттер үшін: Қалайы негізіндегі қабатты перовскиттердің өлшемдік әмбебаптығы олардың оптикалық қасиеттерін ерекше қызықты етеді. {100} типті перовскиттерді жиі идеалды 2D-жүйелер деп атайды, олар бөлме температурасында табиғатынан экситондық сипатқа ие болып табылады. Олардың экситондық табиғатын түсіну үшін кванттық шектеу мен диэлектрлік шектеу әсерлерін қарастыру қажет.

Кванттық шектеу әсері ірі органикалық катиондар арасында орналасқан бейорганикалық қабаттардың өлшемдерінің азаюына байланысты болып табылады. Бұл электрондық тыйым салынған аймақтың кеңеюіне және экситон байланыс энергиясының (E_b) артуына алып келеді. Бұл екі әсер тыйым салынған аймаққа қарама-қарсы ықпал етсе де, соңғы нәтиже төмен өлшемді перовскиттер үшін оптикалық тыйым салынған аймақтың кеңеюі болып табылады. Идеалды 2D жүйеде Eb_2D мәні 3D жүйедегі E_b-ге қарағанда төрт еселенуі тиіс деп күтіледі, себебі заряд тасымалдаушылар арасындағы кулондық әрекеттесу күшейеді (Zhou et.al.,2018). Алайда бейорганикалық және органикалық қабаттардың диэлектрлік өтімділіктеріндегі үлкен айырмашылық эксперименттік E_b мәнінің төрт еседен де жоғары болуына алып келеді. Бұл құбылыс диэлектрлік шектеу немесе бейненің заряд әсері деп аталады. Қарапайым тілмен айтқанда, органикалық қабаттардың төмен диэлектрлік өтімділігі заряд тасымалдаушыларды әлсіз бейімдейді, нәтижесінде E_b артады.

Қабат санының (n) әсері: Бейорганикалық қабаттар саны кванттық шектеуді анықтайды, сондықтан n мәнін өзгерту арқылы оптикалық тыйым салынған аймақты реттеуге болады. $(BA)_2(MA)_{n-1}Sn_nI3_{n+1}$ сериясында n = 5-тен n = 1-ге дейінгі шектеудің артуы жұтылу шегін 1,37 эВ-тан 1,83 эВ-қа жылжытады (Folpini et.al., 2020). Егер, n = 1 жағдайындағы айқын экситондық шың {100} типті перовскиттердің экситондық табиғатын айқын көрсетеді.

Бейорганикалық қабаттардың бұрмалануы оптикалық тыйым салынған зонаға электрондық зонадағыдай әсер етеді. Бұл әсер E_b-ге ықпал етпейтіндей көрінгенімен, толық зерттелмеген. Дегенмен, оптикалық және электрондық аймақтардағы ұқсас үрдістер E_b мәнінің айтарлықтай өзгермейтінін болжайды. Бұл тұжырым қосымша зерттеуді қажет етеді, себебі жүздеген мэВ деңгейіндегі үлкен E_b фотоэлектрлік құрылғылардың өнімділігін төмендетуі мүмкін. Оптикалық тыйым салынған аймағы төмен құрылғылар үшін бейорганикалық қабат бұрмалануы төмен материалдарды таңдау қажет, мысалы бензимидазолий

және бензодиимидазолий, олардың оптикалық тыйым салу аймақтарының ені 1,81 және 1,79 эВ-ке тең болып табылады (Gao et.al., 2020).

Галогенид пен катион таңдау: 3D перовскиттерге ұқсас, йодты бромға алмастыру оптикалық зонаны жоғары энергияға жылжытады. Сонымен қатар органикалық катионды таңдау да тыйым салынған зонаға әсер етеді, бұл кең диапазонда реттеу мүмкіндігін береді.

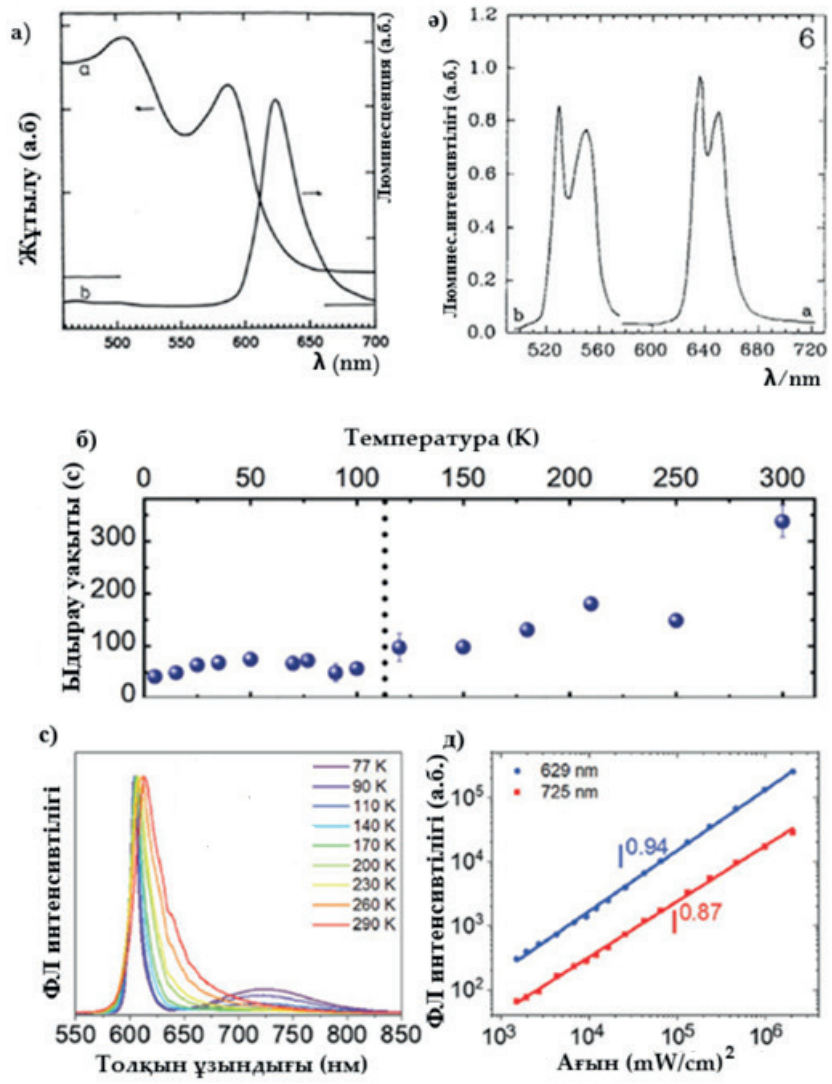
Легирлеу стратегиялары: Оптикалық қасиеттерді реттеудің қосымша тәсілі – гомовалентті немесе гетеровалентті иондармен легирлеу. Мысалы, $(PEA)_2SnBr_4$ қосылысының Bi^{3+} ионымен легирленуі фотолюминесценцияның (ФЛ) аздап көк аймағына ығысуына және төмен энергетикалық шеткі сәулеленудің азаюына алып келді. Mn^{2+} ионымен легирленген октиламмоний қалайы бромиді таза материалдағы ФЛ-ны қызыл аймаққа ығыстырып, қызғылт-қызыл жарық шығарды. Дегенмен, легирлеу PLQY (Photoluminescence Quantum Yield) мәнін төмендететіндіктен, басқа легирлеуші қоспаларды зерттеу қажеттігі артады.

Келесі 4а – суретте $(PEA)_2SnI_4$ қосылысының жұтылуы мен люминесценциясы көрсетілген. Люминесценция аз Стокс ығысуымен және тар сызықтық енімен сипатталады. Спектр формасын мұқият қарастыру асимметриялық сәулелenуді көрсетеді, ол ұзын толқындарға дейін созылып, ≈650 нм аймағында иық түзеді. Кейінгі зерттеуде үлгі бірнеше күн ауада сақталып, 80 К температурада өлшенгенде бұл иық айқын көрініп, оның интенсивтілігі артқаны байқалған (4 ә сурет). Бұл құбылыс үлгінің деградациясы нәтижесінде пайда болған ақаулардың төмен энергиялы сәулеленуге жауапты екенін көрсетеді. Sn негізіндегі перовскиттердің жарық, оттегі және ылғал әсеріне өте тұрақсыз екені белгілі. Ұқсас құбылыс бутиламмоний қолданылған жүйелерде де байқалған, бұл {100} типті барлық перовскиттер үшін деградация механизмінің ұқсас екенін меңзейді.

Фолпини және әріптестері 2020 жылы $(PEA)_2SnI_4$ қосылысында жарық экситон күйінен шамамен 10 мэВ төмен орналасқан меншікті «қараңғы» экситон күйін анықтады (Folpini et.al., 2020), (Liu et.al., 2019). Бұл меншікті қасиет жарық экситон күйінің релаксация динамикасы үшін маңызды салдарға ие екені анықталды. Мысалы, температура төмендеген сайын ФЛ өшу уақытының артуы күтіледі. Алайда авторлар 4 б – суретте көрсетілгендей, бөлме температурасынан 100 К-ге дейін төмендеткенде ФЛ өмір сүру уақытының қысқаруын байқады. Бұл ерекше мінез-құлықты қараңғы күйдің рекомбинация жылдамдығы жарық күйіне қарағанда әлдеқайда баяу екенін ескергенде түсіндіруге болады. Бөлме температурасында төменгі энергиялы қараңғы күйдегі экситондар термиялық түрде жарық күйіне активтенеді, бұл сәулелік рекомбинацияны баяулатады және нәтижесінде ФЛ-дің ұзақ өмір сүру уақытына әкеледі. Бұл қасиет материалдағы сәулелену процестерін терең түсінудің маңыздылығын айқындайды, әсіресе $(PEA)_2SnI_4$ 630 нм толқын ұзындығында жарық шығаратын құрылғыларда EQE 0,72% көрсеткен (Smith et.al., 2018).

Соңғы зерттеулерде 2-(4-стильбенил) этанаммоний қалайы иодидінде тар экситондық эмиссиямен қатар ұзын толқындарда кең сәулелену жолағы анықталды (4 с -сурет). Төмен температурада кең эмиссияның артуы оны

автолокализацияланған экситондарға жатқызуға мүмкіндік берді, бұл қорғасын негізіндегі перовскиттерде байқалған үрдіске сәйкес келеді. Келесі 4д-суретте тар және кең эмиссия қуатының тәуелділігі көрсетілген. Авторлардың автолокализацияланған экситондық сәулелену туралы тұжырымынан бөлек, кең эмиссия қуатының бірліктен әлдеқайда төмен болуы оның ақаулармен байланысты сәулелену болуы мүмкін екенін де көрсетеді.



Сурет 4 – а) PEA_2SnI_4 қосылысының бөлме температурасындағы жұтылу және фотолюминесценция (ФЛ) спектрлері. Тар сызықтық ені 650 нм аймағындағы иықпен сипатталады. ә) $(PEA)_2SnI_4$ және $(PEA)_2PbI_4$ қосылыстарының ФЛ спектрлері 80 К температурада, бірнеше күн ауада сақталғаннан кейін. б) $(PEA)_2SnI_4$ қосылысының ФЛ өшу уақыты температура төмендегенде. с,д) Стильбен туындысының {100} типті перовскитіндегі ФЛ: температура төмендегендегі спектр (с) және екі сәулелену жолағының қуатқа тәуелділігі (д).

CC BY NC

Бұл сыртқы табиғаттағы ФЛ <100> типті қорғасын иодиді перовскиттерінде де байқалған. <100> типті қорғасын перовскиттері биэкситондық сәулелену және «ыстық» экситондық сәулелену сияқты ерекше қасиеттерді көрсетті. Қалайы және қорғасын негізіндегі қосылыстардың оптикалық қасиеттеріндегі ұқсастық қалайы негізіндегі жүйелерде әлі ашылмаған, одан да қызықты қасиеттердің бар екенін меңзеуі мүмкін. Бұл өз кезегінде қорғасын негізіндегі перовскиттерді тереңірек түсінуге жол ашады.

Қорытынды. Қалайы негізіндегі перовскиттер қорғасынсыз балама ретінде жоғары тиімділік көрсеткенімен, олардың тұрақсыздығы мен тез деградацияға ұшырауы практикалық қолданылуын шектейді. Осы жұмыста төменөлшемді қабатты құрылымдарды енгізу арқылы материалдардың құрылымдық, электрондық және оптикалық қасиеттерін басқару мүмкіндігі жан-жақты талданды. Қабатты перовскиттерде органикалық және бейорганикалық қабаттардың кезектесуі кванттық және диэлектрлік шектеу әсерлерін күшейтіп, тыйым салынған аймақтың енін, экситон байланыс энергиясын және тасымалдаушылар динамикасын реттеуге жағдай жасайды.

Талданған нәтижелер тұрақты әрі жоғары тиімді фотоэлектрлік және жарық шығаратын құрылғыларды әзірлеуге теориялық және практикалық негіз қалайды.

References

Dyksik M., Duim H., Zhu X., Yang Z., Gen M., Kohama Y., & Plochocka P. (2020). Broad tunability of carrier effective masses in two-dimensional halide perovskites. ACS Energy Letters, 5(11). – P. 3609-3616. DOI: 10.1021/acsenergylett.0c01758 (in Eng.).

Even J., Pedesseau L., & Katan C. (2014). Understanding quantum confinement of charge carriers in layered 2D hybrid perovskites. ChemPhysChem, 15(17). – P. 3733-3741. DOI: 10.1002/cphc.201402428 (in Eng.).

Folpini G., Cortecchia D., Petrozza A., & Kandada A.R.S. (2020). The role of a dark exciton reservoir in the luminescence efficiency of two-dimensional tin iodide perovskites. Journal of Materials Chemistry C, 8(31). – P. 10889-10896. DOI: 10.1039/D0TC01218A (in Eng.).

Gao C., Jiang Y., Sun C., Han J., He T., Huang Y., & Liang H. (2020). Multifunctional naphthol sulfonic salt incorporated in lead-free 2D tin halide perovskite for red light-emitting diodes. Acs Photonics, 7(8). – P. 1915-1922. DOI: 10.1021/acsphotonics.0c00497 (in Eng.).

Katan C., Mercier N., & Even J. (2019). Quantum and dielectric confinement effects in lower-dimensional hybrid perovskite semiconductors. Chemical reviews, 119(5). – P. 3140-3192. DOI: 10.1021/acs.chemrev.8b00417 (in Eng.).

Knutson J.L., Martin J.D., & Mitzi D.B. (2005). Tuning the band gap in hybrid tin iodide perovskite semiconductors using structural templating. Inorganic chemistry, 44(13). – P. 4699-4705. DOI: 10.1021/ic050244q (in Eng.).

Liang K., Mitzi D.B., & Prikas M.T. (1998). Synthesis and characterization of organic− inorganic perovskite thin films prepared using a versatile two-step dipping technique. Chemistry of materials, 10(1). – P. 403-411. DOI: 10.1021/cm970568f (in Eng.).

Liu K., Wang W., Guo P., Ye J., Wang Y., Li P., & Xie S. (2019). Replicating the defect structures on ultrathin Rh nanowires with Pt to achieve superior electrocatalytic activity toward ethanol oxidation. Advanced Functional Materials, 29(2). – P. 1806300. DOI: 10.1002/adfm.201806300 (in Eng.).

Ma L., Dai J., & Zeng X.C. (2016). Two-dimensional single-layer organic-inorganic hybrid perovskite semiconductors. Advanced Energy Materials.DOI: 10.1002/aenm.201601731 (in Eng.).

Marchenko E.I., Fateev S.A., Petrov A.A., Korolev V.V., Mitrofanov A., Petrov A.V., Tarasov A.B. (2020). Database of two-dimensional hybrid perovskite materials: open-access collection of crystal

structures, band gaps, and atomic partial charges predicted by machine learning. Chemistry of materials, 32(17). – P. 7383-7388. DOI:10.1021/acs.chemmater. 0c02290 (in Eng.).

Mitzi D.B. (1996). Synthesis, crystal structure, and optical and thermal properties of ($C_4H_9NH_3$) 2MI4 (M= Ge, Sn, Pb). Chemistry of materials, 8(3). – P. 791-800. DOI: 10.1021/cm9505097 (in Eng.).

Papavassiliou G.C., Koutselas I.B., Lagouvardos D.J., Kapoutsis J., Terzis A., & Papaioannou G.J. (1994). Optical and related properties of some natural three and lower dimensional semiconductor systems. Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology. Section A. Molecular Crystals and Liquid Crystals, 253(1). – P. 103-112. DOI:10.1080/10587259408055249 (in Eng.).

Smith M.D., & Karunadasa H.I. (2018). White-light emission from layered halide perovskites. Accounts of chemical research, 51(3). – P. 619-627. DOI: 10.1021/acs.accounts.7b00433 (in Eng.).

Stoumpos C.C., Mao L., Malliakas C.D., & Kanatzidis M.G. (2017). Structure–band gap relationships in hexagonal polytypes and low-dimensional structures of hybrid tin iodide perovskites. Inorganic chemistry, 56(1). – P. 56-73. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.6b02764 (in Eng.).

Straus D.B., & Kagan C.R. (2018). Electrons, excitons, and phonons in two-dimensional hybrid perovskites: connecting structural, optical, and electronic properties. The journal of physical chemistry letters, 9(6). – P. 1434-1447. DOI: 10.1021/acs.jpclett.8b00201 (in Eng.).

Takahashi Y., Obara R., Nakagawa K., Nakano M., Tokita, J.Y., & Inabe, T. (2007). Tunable charge transport in soluble organic–inorganic hybrid semiconductors. Chemistry of Materials, 19(25). – P. 6312-6316. DOI:10.1021/cm702405c (in Eng.).

Tanaka K., & Kondo T. (2003). Bandgap and exciton binding energies in lead-iodide-based natural quantum-well crystals. Science and Technology of Advanced Materials, 4(6). – P. 599-604. DOI: 10.1016/j.stam.2003.09.019 (in Eng.).

Zhou C., Lin H., Shi H., Tian Y., Pak C., Shatruk M., & Ma B. (2018). A zero-dimensional organic seesaw-shaped tin bromide with highly efficient strongly stokes-shifted deep-red emission. Angewandte Chemie, 130(4). – P. 1033-1036. DOI: 10.1002/ange.201710383 (in Eng.).

Zhou C., Tian Y., Yuan Z., Lin H., Chen B., Clark R., & Ma B. (2017). Highly efficient broadband yellow phosphor based on zero-dimensional tin mixed-halide perovskite. ACS applied materials & interfaces, 9(51). – P. 44579-44583. DOI: 10.1021/acsami.7b12862 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 149–164

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.411

UDC: 666.56
IRSTI: 29.19.09

©Sattinova Z.*[1], Ermakhanova F.[1], Assilbekov B.[2], Taimuratova L.[3], 2026.
[1]L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;
[2]Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan;
[3]Yessenov University, Aktau, Kazakhstan.
E-mail: lidiya.taimuratova@yu.edu.kz

INFLUENCE OF VARIOUS COOLING CONDITIONS AND HEAT TRANSFER COEFFICIENTS ON SOLIDIFICATION DURING THE FORMATION OF BERYLLIUM CERAMIC PRODUCTS

Sattinova Zamira — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associated Professor, Gumilev Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: sattinova.kz@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2990-6581;
Yermakhanova Fatima — Candidate of Technical Sciences, Associated Professor, Gumilev Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: yermakhanova_fr@enu.kz, https://orcid.org/0000-0001-7002-1606;
Assilbekov Bakytzhan — PhD, Acting Vice-Rector for Science and Innovations Employment, Mukhtar Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: assilbekov.b@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-0368-0131;
Taimuratova, Lidiya — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associated Professor, Yessenov University, Aktau, Kazakhstan,
E-mail: lidiya.taimuratova@yu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-1692-4350.

Abstract. The article presents the results of a parametric study of the solidification process of a thermoplastic beryllium oxide (BeO) suspension in the cavity of a ring mold. The primary aim of the study is to ensure uniform structure formation in cast products and to address the issue of preventing technological defects. To this end, the spatial-phase characteristics of beryllium oxide suspensions were comprehensively analyzed, and their dependence on casting properties, phase composition, rheological characteristics, and technological parameters was scientifically assessed. It was shown that the solidification process of cast products is determined by a complex set of hydrodynamic, thermal, and crystallization phenomena that develop during solidification. It was established that these phenomena directly depend on the suspension flow rate, temperature regime, ratio of liquid to solid phases, particle distribution, and the intensity of heat removal from the mold. The mathematical models presented in this work provide a practical and experimental scientific tool to predict the non-

uniform distribution of suspension structure and physico-mechanical properties across the cross-section of castings. It was determined that during solidification, the heat removal rate from the normal state depends on the suspension flow rate, the thermal conductivity of the mold material, and the temperature field characterized by the width of the transition zone. The solidification process of the suspension mass was evaluated through the analysis of heat flux distribution, viscosity changes, and density variations along the concentric channel. Hydrodynamic and heat transfer modeling results, carried out considering the crystallization of the thermoplastic beryllium oxide suspension, showed good agreement with experimental data. The obtained results enable efficient control of the casting process, reduce energy consumption, and consequently produce homogeneous, high-quality castings in terms of texture.

Keywords. Beryllium oxide, continuous casting, Bingham liquid, rheological parameters, heat transfer, solidification

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 149–164. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.411*

©Саттинова З.[1], Ермаханова Ф.[1], Асылбеков Б.[2], Таймуратова Л.[3], 2026.
[1]Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Казахстан;
[2]Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан;
[3]Есенов университеті, Ақтау, Қазақстан.
E-mail: lidiya.taimuratova@yu.edu.kz

БЕРИЛЛИЙ КЕРАМИКАЛЫҚ БҰЙЫМДАРЫН ҚАЛЫПТАСТЫРУ КЕЗІНДЕ ӘР ТҮРЛІ САЛҚЫНДАТУ ЖАҒДАЙЛАРЫ МЕН ЖЫЛУ БЕРУ КОЭФФИЦИЕНТТЕРІНІҢ ҚАТАЮҒА ӘСЕРІ

Саттинова Замира — физика және математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: sattinova.kz@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2990-6581;
Ермаханова Фатима — техника ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: yermakhanova_fr@enu.kz, https://orcid.org/0000-0001-7002-1606;
Асылбеков Бақытжан — PhD, ғылым жұмыс және инновациялар жөніндегі проректоры м.а., Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: assilbekov.b@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-0368-0131;
Таймуратова Лидия — физика және математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Есенов университеті, Ақтау, Қазақстан,
E-mail: lidiya.taimuratova@yu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-1692-4350.

Аннотация. Мақалада сақиналы қалыптау қуысында бериллий оксидінің (BeO) термопластикалық суспензиясының қатаю процесін параметрлік зерттеу

нәтижелері баяндалған. Зерттеудің негізгі мақсаты – құйма бұйымдарда құрылымның біркелкі қалыптасуын қамтамасыз ету және технологиялық ақаулардың алдын алу мәселесін шешу болып табылады. Осы мақсатта бериллий оксиді суспензиясының кеңістіктік-фазалық сипаттамалары жан-жақты қарастырылып, олардың құю қасиеттеріне, фазалық құрамына, реологиялық сипаттамасына және технологиялық параметрлерге тәуелділігі ғылыми тұрғыдан бағаланды. Құйма өнімдердің қатаю процесі қатаю кезінде дамитын гидродинамикалық, термиялық және кристалдану құбылыстарының күрделі жиынтығымен анықталатыны көрсетілді. Бұл құбылыстар суспензияның қозғалу жылдамдығына, температуралық режимге, сұйық және қатты фазалардың арақатынасына, бөлшектердің таралуына, сондай-ақ қалыптан жылуды әкету интенсивтілігіне тікелей байланысты екені айқындалды. Жұмыста ұсынылған математикалық модельдер құймалардың көлденең қимасы бойынша суспензия құрылымы мен физика-механикалық қасиеттерінің біркелкі емес таралуын болжауға нақты тәжірибелік және қолданбалы ғылыми мүмкіндік береді. Қатаю кезеңінде қалыпты жағдайдан жылуды кетіру жылдамдығы суспензия қозғалысының жылдамдығына, қалып материалының жылу өткізгіштігіне және өтпелі аймақтың енімен сипатталатын температуралық өріске тәуелді екені анықталды. Суспензия массасының қатаю процесі жылу ағынының таралуын, тұтқырлық өзгерісін және концентрлік арна бойындағы тығыздықтың өзгеруін талдау арқылы бағаланды. Бериллий оксиді термопластикалық суспензиясының кристалдануын ескере отырып, жүргізілген гидродинамика мен жылу алмасуды модельдеу нәтижелері эксперименттік деректермен жақсы сәйкестік көрсетті. Алынған нәтижелер құю процесін тиімді басқаруға, энергия шығынын азайтуға және нәтижесінде біркелкі құрылымды, жоғары сапалы құймалар алуға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: Бериллий оксиді, үздіксіз құю, Бингем сұйықтығы, реологиялық параметрлер, жылу беру, қатаю

©Саттинова З.[1], Ермаханова Ф.[1], Асылбеков Б.[2], Таймуратова Л.[3], 2026.
[1]Евразийский национальный университет имени Гумилева, Астана, Казахстан;
[2]Университет Сатпаева, Алматы, Казахстан;
[3]Южно-Казахстанский университет имени Ауезова, Шымкент, Казахстан;
[4] Университет Есенова, Актау, Казахстан.

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЙ ОХЛАЖДЕНИЯ И КОЭФФИЦИЕНТОВ ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ НА ЗАТВЕРДЕВАНИЕ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ БЕРИЛЛИЕВЫХ КЕРАМИЧЕСКИХ ИЗДЕЛИЙ

Саттинова Замира — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Евразийский национальный университет имени Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: sattinova.kz@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2990-6581;
Ермаханова Фатима — Кандидат технических наук, ассоциированный профессор, Евразийский национальный университет имени Гумилева, Астана, Казахстан,

E-mail: yermakhanova_fr@enu.kz, https://orcid.org/0000-0001-7002-1606;
Асылбеков Бақытжан — Ph.D, и.о. проректора по науке и инновациям, Южно-Казахстанский университет имени Ауезова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: assilbekov.b@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-0368-0131;
Таймуратова Лидия — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Университет Есенова, Актау, Казахстан,
E-mail: lidiya.taimuratova@yu.edu.kz, https://orcid.org/ 0000-0002-1692-4350.

Аннотация. В статье представлены результаты параметрического исследования процесса затвердевания термопластичной суспензии оксида бериллия (BeO) в полости кольцевой формы. Основной целью исследования является обеспечение равномерного формирования структуры в литых изделиях и предотвращение технологических дефектов. Для достижения этой цели были всесторонне рассмотрены пространственно-фазовые характеристики суспензий оксида бериллия, а также дана научная оценка их зависимости от литейных свойств, фазового состава, реологических характеристик и технологических параметров. Показано, что процесс затвердевания литых изделий определяется сложным комплексом гидродинамических, тепловых и кристаллизационных явлений, развивающихся в ходе затвердевания. Установлено, что эти явления напрямую зависят от скорости движения суспензии, температурного режима, соотношения жидкой и твердой фаз, распределения частиц, а также интенсивности отвода тепла из формы. Представленные в работе математические модели обеспечивают возможность прогнозирования неравномерности распределения структуры суспензии и физико-механических свойств по поперечному сечению отливок, что имеет как экспериментальное, так и прикладное значение. Установлено, что в период затвердевания скорость отвода тепла из расплава зависит от скорости движения суспензии, теплопроводности материала пресс-формы и температурного поля, характеризуемого шириной переходной зоны. Процесс затвердевания суспензионной массы оценивали путем анализа распределения теплового потока, изменения вязкости и плотности вдоль концентрического канала. Результаты гидродинамического моделирования и моделирования теплообмена, выполненные с учетом кристаллизации термопластичной суспензии оксида бериллия, показали хорошее согласование с экспериментальными данными. Полученные результаты позволяют эффективно управлять процессом литья, снижать энергозатраты и, как следствие, получать высококачественные отливки с однородной структурой.

Ключевые слова: Оксид бериллия, непрерывная разливка, жидкость Бингема, реологические параметры, теплопередача, затвердевание

Introduction. Products made of thermoplastic beryllium oxide slip have become widely used in various industries over the past decades, primarily as a thermal insulation material for equipment operating at high temperatures (Walsh, 2020). Using the hot casting method in an industrial injection molding plant with preset dimensions, ceramic products of a predetermined shape with an adjustable density can be obtained

(Wei, et al., 2019), the high thermal conductivity of beryllium oxide during casting in the temperature range of 40-55°C causes difficulty in controlling structure formation (Shakhov, 2008). The mechanism of solidification, as well as the mechanical behavior of the casting mass during the casting process, the rheological and thermophysical properties of a thermoplastic beryllium oxide slip due to exposure to ultrasound are poorly understood. The experimental study of physical-chemical properties and phase transformation, while taking into account all factors affecting the quality of products in the continuous casting process, is laborious. Therefore, an effective way to control the physical processes occurring during the formation of products with specified properties and shapes is to model the process and determine its main characteristics. The main purpose of the article is to determine the influence of cooling and heat transfer conditions on the solidification of the slip, while the rheological properties of the thermoplastic slip during its flow are an important factor. According to experimental data (Zhapbasbayev, et al., 2016), the Bingham-Papanastasiou model with a control parameter is used to validate experimental curves and describe the behavior of a viscoplastic slip before and after yield strength and viscosity during ultrasonic treatment (Papanastasiou, et al., 1997), (Jabbari, et al., 2016), (Mehmood, et al., 2020). The high thermal conductivity of beryllium oxide has a significant effect on the increase in the volume of the liquid phase and the rheology of the viscoplastic slip during preparation and molding (Shakhov, et al., 2008). The thermal conductivity of beryllium oxide with a relative density of 99% is 220-230 (W/m*S) at a temperature of 100□ (Walsh, 2020). However, with an increase in shrinkage friability to 5-10% and zonal liquation, the thermal conductivity of ceramics at low temperatures decreases by 10-13%. As the temperature increases, the thermal conductivity decreases and reaches a value of 15.4 W/m×From (Shakhov, et al., 2008). Therefore, when considering the object under study, factors such as the dependence of thermophysical properties on temperature, phase transformations of liquid suspensions into a solid state, heat of crystallization, and a sharp change in temperature boundary conditions on cooling circuits should be taken into account. As mentioned in other articles on MIM technology, increasing the volume of the liquid phase to impart the necessary casting properties to the slip does not allow achieving the desired effect, since during firing an «additional» amount of binder leads to the appearance of structural defects and deformations of products. (Sattinova, et al., 2022). When forming products in the forming cavity, it is of great importance to control the cooling of the slip mass, since the solidification process inside the mass depends on the temperature distribution (Zhao-Hui, al., 2021). Also, the change in the temperature field during the cooling process depends on the heat release in the phase transition region and the determination of boundary conditions. Experimentally determined temperatures of the liquidus and solidus of the slip make it possible to identify the nature of the phase distribution at different stages of crystallization, calculate the rate of solid phase separation necessary for studying thermal processes and analyzing the formation of shrinkage defects (Zhapbasbayev, et al., 2016), (Weiß, et al., 2019).

The comparative analysis of the rheological and thermal characteristics of the slip in the range of phase transformations, combined with experimental data, allows us to

identify a detailed method of physico-chemical analysis of the solidification of the slip depending on the cooling rate and the change in the position of the crystallization interval of the slip in the forming cavity of the casting installation.

Materials and methods. Rheological characteristics of the thermoplastic slip. Thermoplastic slips based on beryllium oxide (BeO) with a binder content of 9.5, 10.7 and 11.7% were used to produce ceramic products. The molding compound, a thermoplastic slip, is a highly viscous suspension in which one of the phases is a solid – beryllium oxide powder, and the second is a liquid - organic binder. The organic binder includes three components: paraffin, beeswax, and oleic acid in a ratio of (82; 15 and 3%) (Sattinova, et al., 2022).

The slip mass is characterized by a certain ratio of the concentration of solid C_v, liquid C_w phases, the critical concentration of the solid phase in the cv_crit system, the proportion of kinetically free C_V and kinetically bound C_W liquids. The critical concentration of [Cv]_crit is considered an important criterion for objectively characterizing the state of a slip when determining its properties and structure (Shakhov and Bitsoev, 1999). (Shakhov, et al., 2002), (Pivinskii, et al., 1983). Its proportion in the slurry is equal to the relative density of the solid phase in the sediment obtained after 60 minutes of centrifugation at a temperature of 90 ° C.:

For the BeO slip, the technologically permissible concentration of the solid phase is 75-78% (Shakhov, Bitsoev, 1999). (Sattinova, et al., 2024). High-quality molding of ceramic products with homogeneous properties is achieved by increasing the fluidity of the slip due to intensive ultrasonic treatment with a frequency of 16-18 kHz. As a result, the technological properties increase and at the same time the slip changes its structure under the influence of the forces of molecular attraction, forming conglomerates of particles (Fig.1). An increase in the fluidity of the suspension is accompanied by a decrease in the thickness of the solvated shell and an increase for ligament (Kiiko V.S., et al., 2015). The amount of kinetically bound ligament in a slip with different volume concentrations is Cw_f2=0.252. Improving the fluidity of the slip leads to a decrease in viscosity, which is one of the main indicators of the relationship between the concentration of the slip and its rheological properties (Shakhov and Bitsoev, 1999).

The rheological parameters of the slip, such as yield strength, plastic viscosity and shear rate, were determined experimentally in the studied temperature range of 80-40°C in the production conditions of ceramic products of Keramika LLP (Shakhov, Bitsoev, 1999). Along with rheological properties, thermal conductivity, heat capacity and heat of melting are the main elements for calculating technical parameters and play an important role in the manufacture of products by injection molding (Dvinskikh, et al., 1976). Based on experimental data, empirical dependences of the rheological and thermophysical properties of a thermoplastic slip on temperature have been established, which make it possible to describe the movement and heat exchange during the molding of beryllium ceramics, taking into account changes in its state of aggregation (Sattinova , et al., 2022). In scientific literature, data on the thermophysical properties of a dispersed system are limited, and they theoretically confirm that mechanical

CC BY NC

damage to the structure of a dispersed system does not affect the thermophysical properties, i.e., the value of heat capacity c_p and thermal conductivity λ (Makurin , et al., 2006). To confirm which, graphs of changes in thermal conductivity are given before (1) and after (2) ultrasonic treatment with the action of a slip (BeO batch No. 3) in the temperature range of 20-80 °C (Fig.1).

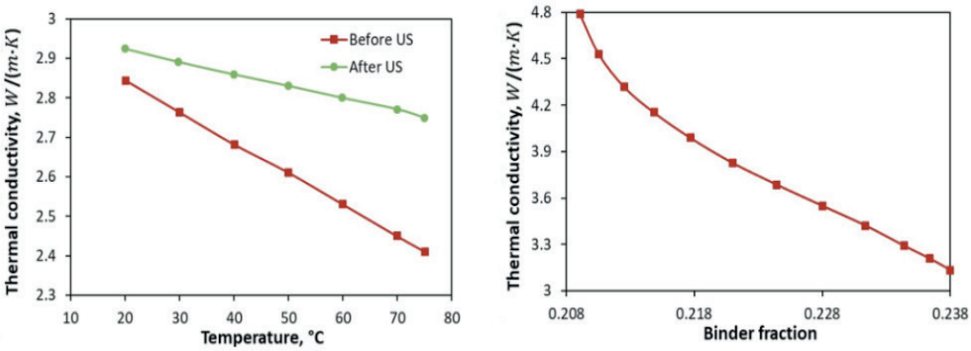


Figure 1- Thermal conductivity of the slurry versus liquid phase concentration (a) and thermoplastic slurry before/after ultrasonic treatment (b)

The effect of ultrasonic vibrations on the thermophysical properties of a dispersed system is related to the anisotropy of thermal conductivity, i.e., the direction of heat flow. This means that heat transfer is mainly due to a molecular mechanism, unlike momentum transfer, where deformations of the structural framework are of decisive importance (Makurin, et al., 2006).

A comparison of the high thermal conductivity of pure beryllium oxide with the low thermal conductivity of the binder indicates that when considering a thermoplastic slip as a structured dispersed system, its thermal conductivity depends primarily on the thermal conductivity of the binder, especially free, undissolved, since the particles of the dispersed phase practically do not interact with each other. They are in contact with each other and cannot significantly affect the thermal conductivity of the system. This phenomenon is noticeable when considering the dependence of thermal conductivity on the volume fraction of the bundle content in the slips (Fig.1).

The specific heat capacity of beryllium oxide has been widely studied experimentally and theoretically (Dong Hou, et al., 2022); Yamamoto, et al., 2021). The heat capacity of the beryllium oxide slip increases naturally with increasing temperature and binder content. The graphs show that the heat capacity of the slip depends only on the density and does not depend on the viscosity and shear stress (Fig.2).

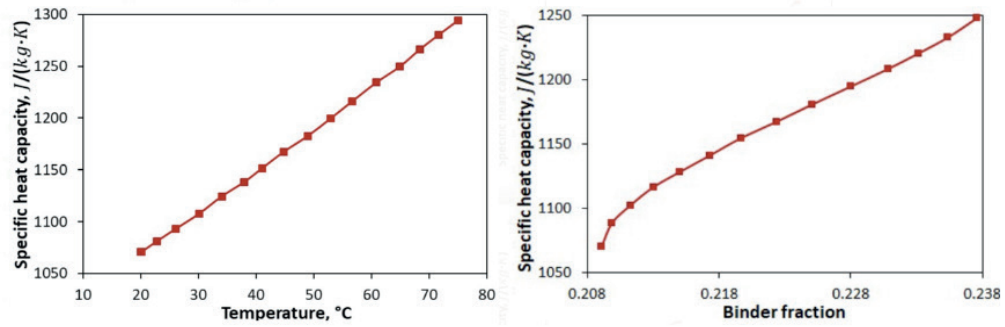


Figure 2- Heat capacity versus liquid phase concentration (a) и temperature slurry (b)

The melting heat of the slip strongly depends on the structure of the dispersed system (Theodore, et al., 2011). In the structure of the slip on the surface of solid particles, some physical properties of adsorbed liquid molecules change significantly, in particular, the melting point and density increase

During the melting process, the solvated bond in the slip will not significantly change its structure. This is equivalent to the absence of the latent heat of melting of the solvated bond, i.e. the heat spent on the destruction of the structure to change the state of aggregation at the melting temperatures of the free bond.

Flow of beryllium oxide (BeO) slurry considered between two concentric cylinders with the length of 108 mm as shown in Fig. 3(a). This approach considers damping source in the Navier-Stokes equation to force calculated velocity to equal zero when BeO slurry becomes fully solid. Damping coefficient is introduced similar with the permeability of porous medium, which depends on BeO slurry liquid fraction. As BeO slurry enters the cavity between concentric cylinders, it begins to be cooled by external circulating water in three cooling zones with the lengths of L_1=22, L_2=45 and L_3=41 mm, respectively, and cooling temperature of T_1=73^{0}C, T_2=59^{0}C and T_3=45^{0}C mm, respectively (see Fig. 3(b)). Outer radius of inner cylinder, inner radius of outer cylinder and outer radius of outer cylinder is r_1=20, r_2=25 and r_3=26, and r_3=26 mm, respectively. The thickness of outer cylinders (crystallizer) wall is mm. the material of inner and outer cylinders is made from steel of grade 12X18H10T. Inner radius of water circulation zones is r_w=36 mm. The model equations are derived under the following assumptions that BeO slurry:

- Flow is laminar due to the low casting velocity.
- Flow is steady-state
- Behaves as Bingham liquid
- Flow is axisymmetric
- Thermophysical and rheology properties are functions of temperature.

CC BY NC

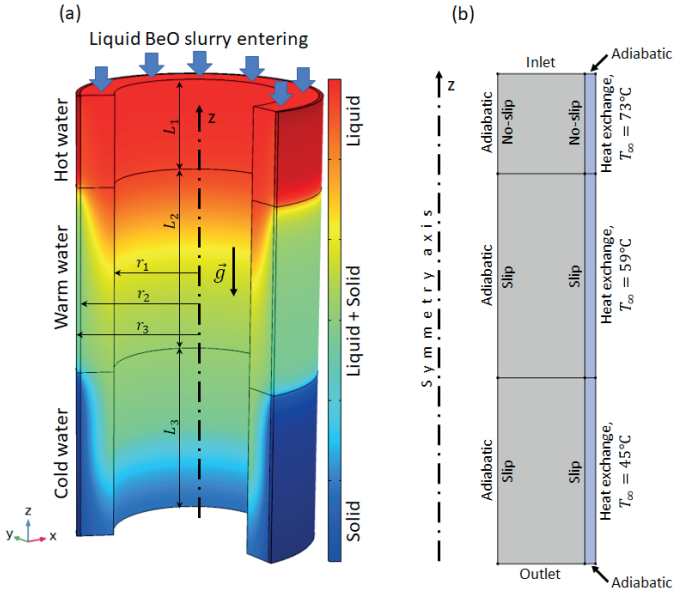


Figure 3- (a) 3D schematic of BeO slurry flow and solidification and (b) 2D domain with an imposed boundary conditions

Under the above assumptions flow equation for BeO slurry, energy equation for BeO slurry and crystallizer are described as following.

Fluid flow equations

$$\rho(\vec{u}\cdot\nabla)u = \nabla\cdot(-pI+K)+\rho\vec{g}-A(\vec{u}-\vec{u}_{cast}) \quad (1)$$

$$\nabla\cdot(\rho\vec{u}) = 0 \quad (2)$$

where $\vec{u}$ is the BeO slurry velocity (m/s), ρ is the BeO slurry density (kg/m3), $K=\mu_{app}(\nabla\vec{u}+(\nabla\vec{u})^T)-\frac{2}{3}\mu_{app}(\nabla\cdot\vec{u})I$ and I denote the viscous stress and identity tensor, respectively, p is the pressure (Pa), μ_{app} is the apparent dynamic viscosity (Pa·s), $\vec{u}_{cast}=(0,u_{cast})$ is the casting velocity.

Energy equation for BeO slurry

$$\rho C_{p,app}\vec{u}\cdot\nabla T = \nabla\cdot(\lambda\nabla T) \quad (3)$$

where $C_{p,app}=C_p+L_H D(T)$ is the apparent specific heat capacity $(J/(kg\cdot K))$, C_p, and $L_H = 7800J/kg$ are specific heat capacity $(J/(kg\cdot K))$ and latent heat of solidification, respectively, T is temperature (K), λ, is thermal conductivity $(W/(m\cdot K))$ and

$$D(T) = \frac{2}{\Delta T\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{2(T-T_m)}{\Delta T}\right)^2}$$

where $\Delta T = T_l - T_s = 2\ (K)$ denotes transition zone temperature range (K), $T_m = 59°C$ is the crystallization temperature (K), $T_l = T_m + \Delta T$ and $T_s = T_m - \Delta T$ are liquidus and solidus temperatures (K), respectively.

Energy equation for the crystallizer

$$\rho_s C_{p,s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_s \nabla T_s) \qquad (14)$$

where $\rho_s = 7900\ kg/m^3$, $C_{p,s} = 500\ J/(kg \cdot K)$ and $k_s = 15\ W/(m \cdot K)$ and [14].

Boundary conditions. Hot BeO slurry enters the cavity between two concentric cylinders (gray domain in Fig. 3(b)) at a constant casting velocity $u_{cast} = 20mm/min$ and temperature $T_{cast} = 75°C$. The surface of the mandrel is assumed to be adiabatic and partly no-slip (Fig. 3(a)). BeO slurry leaves the cavity with uniform outlet pressure and zero gradient of temperature. On the inner surface of the crystallizer there is conjugate condition between energy equations for the BeO slurry and crystallizer. On this surface, no-slip and slip conditions are applied to the momentum conservation equation. Slip condition allows the movement of the thermoplastic slurry near the wall when it starts to be cooled. COMSOL Multiphysics software automatically calculates slip velocity based on the yield stress value and velocity profile at the wall. Convective heat transfer occurs between the outer surface of the crystallizer and the cooling water. Adiabatic boundary condition is imposed to the energy equation for the crystallizer at the top and bottom surfaces of the crystallizer.

Convective heat transfer coefficient h_i on each part of outer boundary with height L_i is calculated from the Nusselt number using Churchill and Bernstein correlation for the external forced convection which is valid for $RePr \gtrsim 0.2$.

$$Nu = \frac{2r_3 h}{\lambda_w} = 0.3 + \frac{0.62Re^{1/2}Pr^{1/3}}{\left[1 + \left(\frac{0.4}{Pr}\right)^{2/3}\right]^{1/4}} \left[1 + \left(\frac{Re}{282000}\right)^{5/8}\right]^{4/5}$$

where $Re = \frac{2r_3 Q_w}{\nu_w (r_w - r_3) L}$ and $Pr = \frac{\mu_w c_{p,w}}{\lambda_w}$ are Reynolds and Prandtl numbers, respectively, r_w is the inner radius of cooling zone, Q_w is the flow rate of circulating water in the cooling zone, $\mu_w, c_{p,w}$ and λ_w are dynamic viscosity $(Pa \cdot s)$, specific heat capacity $\left(J/(kg \cdot K)\right)$ and thermal conductivity $\left(W/(m \cdot K)\right)$ of circulating water.

CC BY NC

Results and discussion. Isothermal temperature distribution lines at different casting speeds are shown in Fig.5. The correspondences of the above-shown phase transition intervals (liquidus isotherm AB-54^{0}C, solidus isotherm CD-45^{0}C) established experimentally are confirmed by temperature profiles that coincide with the intverals along the length of the annular cavity. For example, at u=20 mm/min and u=100 mm/min, the phase transition temperatures correspond to the following channel length ranges H=0.008-0.010 and H=0.011-0.015, respectively (Fig.4).

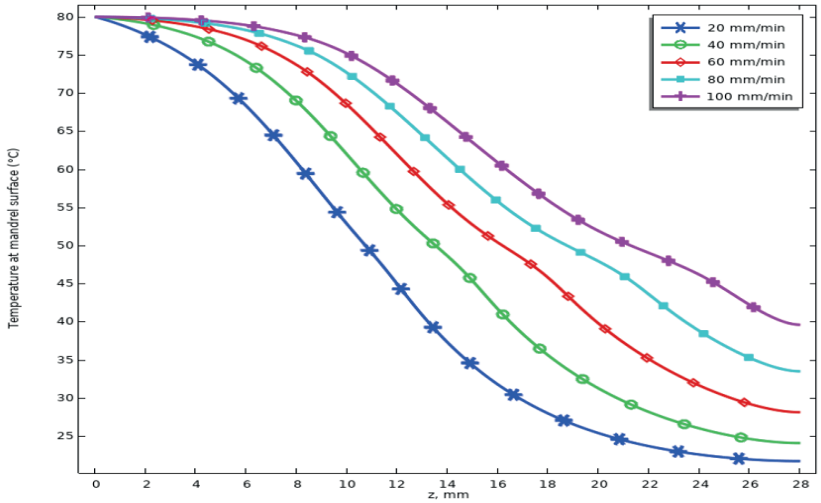


Figure 4- Casting velocity effect.

Estimates of the effect of cooling conditions on the hardening process of beryllium ceramics are achieved by a detailed study of the profiles of casting speed, shear rate and temperature along the annular cavity. The evolutions of the transient temperature contours at different casting speeds are presented (Fig.5, 6). From the graphs shown, it can be seen that with increasing casting speed, the solidification front becomes steeper starting at u=70 mm/min. The zones of liquid, viscoplastic, and solid-plastic slips are represented by red, green, and blue colors, and it can be seen that the red area increases in proportion to the increase in casting speed. The reason for this phenomenon is that as the casting speed increases, more slip mass enters the annular cavity, which in turn increases the flow of thermal convection. Another reason for such phenomena is that as the casting speed increases, the residence time of the liquid slip decreases, and the heat generated also decreases. In all the figures below, the isotherm of the parabolic liquidus changes to an almost horizontal front in the central zone of the cavity. In this part, the conductive mode of heat transfer mainly operates, which, in turn, leads to an increase in the horizontal length of the solidus isotherm. In the phase transition interval, the process proceeds at negligible speeds. According to the phase rule and experimental data, the casting system, i.e. the solid and liquid phases are in an equilibrium state at a temperature of T = 59 ° C, the zone of which is represented by a bright blue area.

At the end of the thermal circuit, it is observed that the sliding effect has a strong

effect on the velocity profiles of the cold circuit. The change in the direction of velocity in the transition interval from the warm contour (green) to the cold contour (blue) occurs due to the force of viscous friction associated with an increase in the casting speed from u=40 mm/min to u=100 mm/min, which leads to uneven cooling and zonal liquation. The dynamics of solidification of a thermoplastic slip depending on the casting speed shows when, at a casting speed below u=30 mm/min, the temperature pressure gradient effectively affects the heat transfer coefficient, similar to the effect of the flow velocity gradient on the sliding coefficient. The intensity of free convection, which occurs in the presence of a temperature gradient in the flow, leads to a significant increase in heat transfer from the non-isothermal surface, i.e. from the slip to the coolant.

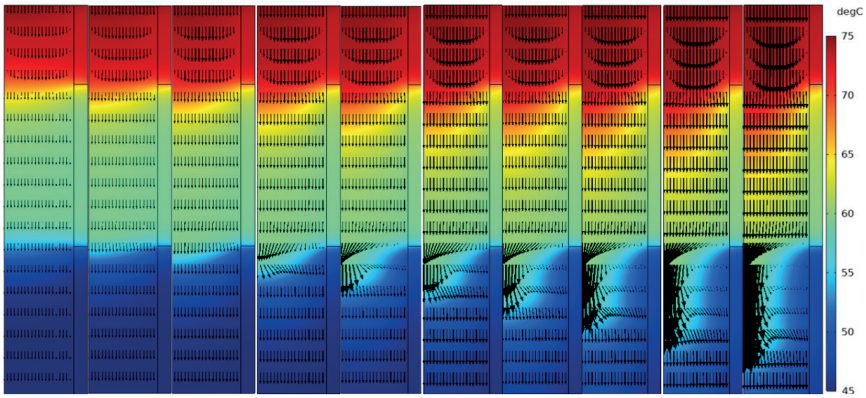


Figure 5- Temperature distribution in $BeO\&$ crystallizer domain for $\frac{D2}{D1} = 1.25$ and casting velocity of 10-100 mm/min

Graphical dependences show that with increasing velocity, the depth of the viscoplastic core zone stretches, forming a curved contour upon contact with the cooling wall.

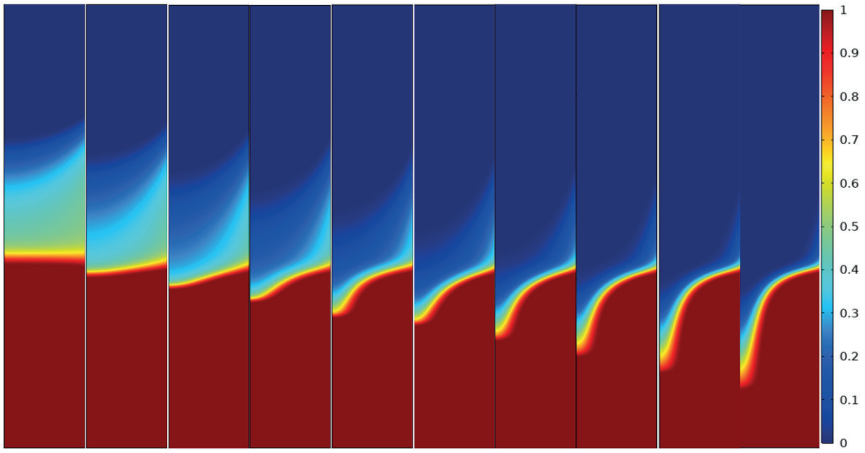


Figure 6- Solid phase fraction for and casting velocity of 10-100 mm/min

CC BY NC

In Fig.7 shows the change in heat flow on the inner (discontinuous lines) and outer (solid lines) walls of the mold along the length of the annular cavity at D_2/D_1=1.25 and different casting speeds. Obviously, the heat flux density does not change significantly along the length of the hot circuit. This is because the temperature of the coolant T_0=73°C is almost equal to the initial temperature T_0=75°C of the slip. At a distance of z=22 mm, a warm circuit begins, the coolant temperature will become T_0=59°C and the heat exchange on the inner wall will increase sharply to q_(u=10) =5089; q_(u=30) =8832; q_(u=50) =11458; q_(u=70) =13368; [q]_(u=100) =15525 W⁄m^2.

The temperature gradient, having reached its maximum, begins to decrease sharply due to the alignment of the temperature plot near the wall. At a distance of z = 67 mm, a cold contour is marked, where the temperature of the coolant is T_0 = 45°C. A decrease in the temperature of the slip to the crystallization temperature causes the solidification of the slip mass.

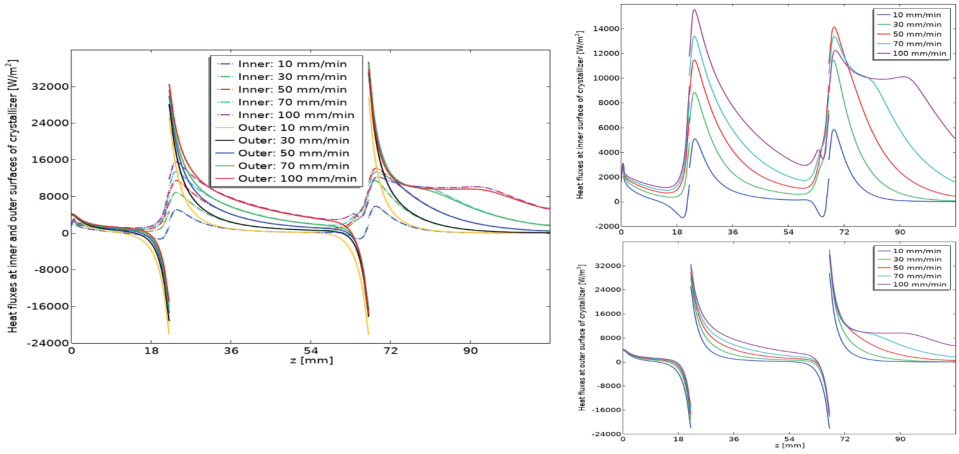


Figure 7- The change in heat flow on the inner (discontinuous lines) and outer (solid lines) walls of the mold along the length of the annular cavity at $D_2/D_1 = 1.25$

The effect of the circulating water layer on the gradual cooling of the slip during product molding is very important, since to calculate the total heat transfer coefficient, it is necessary to determine the coefficients of convective heat transfer. In this case, the hot slide transfers its heat to the inner wall of the die due to internal convection, then it is transferred to the outer wall of the die, only then it enters the cooling water. It is considered that there is no thermal contact layer with a certain thermal resistance between the slip, the inner wall, the outer wall and the water. The influence of the Bi criterion, which characterizes the boundary conditions on the inner wall along the three contours of the annular forming cavity, is shown (Fig.8). Changes in the velocity and temperature profiles determine the patterns of changes in the Bi criterion.

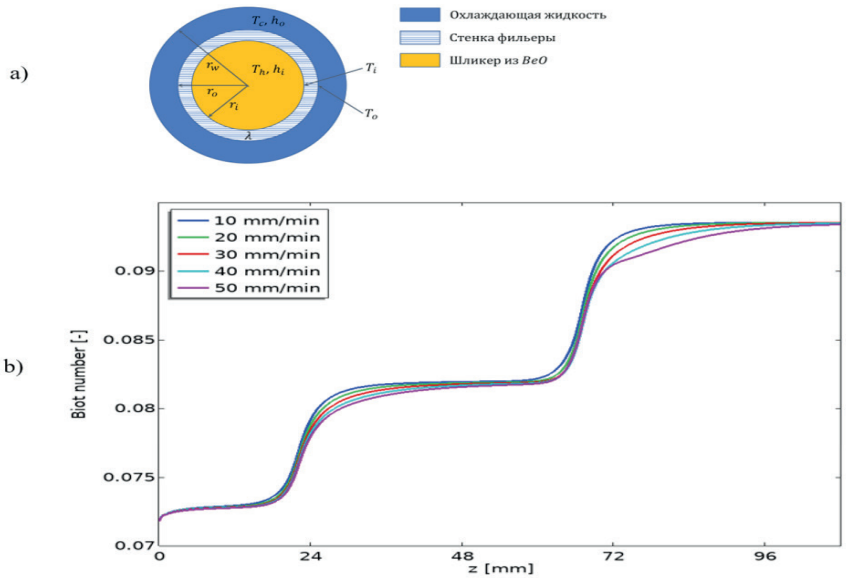


Figure 8- a) the scheme of heat transfer from the slip to the cooling water; b) the effect of the Bi criterion on the inner surface of the annular cavity along three contours.

When the slip moves along the annular channel, an increase in the Bi criterion leads to a decrease in the intensity of heat exchange, and a decrease leads to an increase in the intensity of heat exchange (Fig.8).

The coefficient of external convective heat transfer is calculated from the condition of the cooling water flow through the outer casing of the die, which is the external flow for the die. To explain this, we will use the well-known empirical Nusselt formulas for cooling a cylinder with an external stream of water.

Conclusions. Simulation of the solidification process of beryllium oxide ceramic articles with regard to phase transitions and optimization of casting technology have been performed using COMSOL Multiphysics software. The goal was to improve the quality of products by determining the optimal geometric and technological parameters of the casting process. To obtain articles with uniform properties, the space-phase characteristics of the thermoplastic beryllium oxide slurry are studied in detail, which make it possible to reasonably assess their effects on the property and composition of the casting. Prior to performing numerical calculations of the beryllium ceramic solidification process model in a concentric cylinder with three cooling circuits, the results of the rheological and hydrodynamic model with experimental data have been validated.

Based on the results of the study of the influence of the optimal control parameters of the solidification process on the homogeneity of the product, the following conclusions can be drawn:

- mathematical models of non-isothermal flow and heat exchange taking into account

the phase transformation, as well as the results of calculations of the solidification of the slurry depending on the cooling rate and the change in the position of the crystallization interval of the slurry in the concentric cylinder;

- distribution of heat flows on the inner, outer walls and changes in the density of the slurry along the length of the concentric cylinder at different casting speeds are installed;

The numerical results carried out show adequate agreement with the available experimental data. The results obtained in the work and the quantitative values given for the different casting parameters can be useful in the production process in evaluating possible solidification conditions to obtain castings of higher quality.

References

Bergman T.L., Lavine A.S., Incropera F.P., De Witt D.P. Fundamentals of Heat and Mass Transfer, 7th ed., John Wiley & Sons, Inc. (2011) (in Eng.).

Dong Hou M., Wen Zhou X., Liu B. Beryllium oxide utilized in nuclear reactors: Part I: Application history, thermal properties, mechanical properties, corrosion behavior and fabrication methods, Nucl. Eng. Technol. 54 (2022) 4393–4411. DOI:10.1016/j.net.2022.07.017 (in Eng.).

Dvinskikh Y.V., Popil'skii R.Y., Kostin L.I. The thermophysical properties of thermoplastic cast slips of some highly refractory oxides, Refractories *(*1979) 37–40 (in Eng.).

Jabbari M., Bulatova R., Tok A.I.Y., Bahl C.R.H., Mitsoulis E., Hattel J.H. Ceramic tape casting: A review of current methods and trends with emphasis on rheological behaviour and flow analysis, Mater. Sci. Eng. B 212 (2016) 39–61. DOI: 10.1016/j.mseb.2016.07.011 (in Eng.).

Kiiko V.S., Vaispapir V.Y. Thermal Conductivity and Prospects for Application of BeO Ceramic in Electronics*,* Glas. Ceram. 71 (2015) 387–391. DOI:10.1007/s10717-015-9694-6 (in Eng.).

Makurin Y.N., Shein I.R., Gorbunova M.A., Kiiko V.S., Ivanovskii A.L. First-principle quantum-chemical calculations of several thermomechanical parameters of beryllium ceramics, Refract. Ind. Ceram. 47 (2006) 310–313. DOI:10.1007/s11148-006-0115-9 (in Eng.).

Mehmood A., Khan W.A., Mahmood R., Rehman K.U. Finite element analysis on bingham-papanastasiou viscoplastic flow in a channel with circular/square obstacles: A comparative benchmarking, *Processes* 8 (2020). DOI:10.3390/pr8070779 (in Eng.).

Papanastasiou T.C., Boudouvis A.G. Flows of viscoplastic materials: Models and computations, Comput. Struct. 64 (1997) 677–694. DOI:10.1016/S0045-7949(96)00167-8 (in Eng.).

Pivinskii Y.E. Volume phase characteristics and their effect on the properties of suspensions and ceramic casting systems, Chem. Lerr. 12 (1983) 321–324 (in Eng.).

Sattinova Z., Assilbekov B., Bekenov T., Ramazanova G. Computational investigation of the parameters on the solidification of thermoplastic beryllium oxide slurry in a cylindrical shell, Ceramics 7(3) (2024) 906–925 (in Eng.).

Sattinova Z.K., Bekenov T.N., Assilbekov B.K., Ramazanova G.I., Zhapbasbayev U.K., Nussupbek Z.T. Mathematical modeling of the rheological behavior of thermoplastic slurry in the molding process of beryllium ceramics, Ceram. *Int.* 48 (2022) 31102–31110. DOI: 10.1016/j.ceramint.2022.07.178 (in Eng.).

Shakhov S. Use of ultrasound in order to intensify molding of high-temperature thermocouple sheaths, Refract. Ind. Ceram*.* 49 (2008) 261–263. DOI:10.1007/s11148-008-9074-7 (in Eng.).

Shakhov S.A. Rheological characteristics of thermoplastic disperse systems treated with ultrasound, Glas. Ceram. 59 (2002) 194–198 (in Eng.).

Shakhov S.A., Gagarin A.E. Rheological characteristics of thermoplastic disperse systems treated with ultrasound, Glas. Ceram. 65 (2008) 122–124. DOI:10.1007/s10717-008-9030-5 (in Eng.).

Walsh K.A. Beryllium Chemistry and Processing (2020). DOI: 10.31399/asm.tb.bcp.9781627082983 (in Eng.).

Wei J., Zhou W., Zhou W., Shen P., Ren S., Hu A. Modified Embedded Atom Method Potential for

Modeling the Thermodynamic Properties of High Thermal Conductivity Beryllium Oxide, ACS Omega 4 (2019) 6339–6346. DOI:10.1021/acsomega.9b00174 (in Eng.).

Weiß M., Maurath J., Willenbacher N., Koos E. Shrinkage and dimensional accuracy of porous ceramics derived from capillary suspensions, *J.* Eur. Ceram. Soc. 39 (2019) 1887–1892. DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2019.01.011 (in Eng.).

Yamamoto T., Komarov S.V. Influence of ultrasound irradiation on transient solidification characteristics in DC casting process: Numerical simulation and experimental verification, J. Mater. Process. Technol. 294 (2021) 117116. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2021.117116 (in Eng.).

Zhapbasbayev U., Ramazanova G., Kenzhaliev B., Sattinova Z., Shakhov S. Experimental and calculated data of the beryllium oxide slurry solidification, Appl. Therm. Eng. 96 (2016) 593–599. DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2015.11.114 (in Eng.).

Zhao-Hui R., Xiu-Yan G., Yuan Y., He-Ping T. Determining the heat transfer coefficient during the continuous casting process using stochastic particle swarm optimization, Case Stud. Therm. Eng. 28 (2021) 101439. DOI: 10.1016/j.csite.2021.101439 (in Eng.).

CC BY NC

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 165–178

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.412

UD***C***: 523.62-726; 523.62-65; 523.62
IRSTI: 41.21.25; 89.15.35; 89.51.33

©Shestakova L.I., Serebryanskiy A.V., Spassyuk R.R.*, Omarov Ch.T., 2026.
Fesenkov Astrophysical Institute LLP, Almaty, Kazakhstan.
*E-mail: spassyuk@fai.kz

SEARCH FOR GAS OF COMET-METEOR ORIGIN IN THE INNER SOLAR SYSTEM: CAII ION EMISSION

Shestakova Lyubov — PhD, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: shest1952@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2223-5332;
Serebryanskiy Alexander — PhD, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: aserebryanskiy@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-4313-7416;
Spassyuk Ruslan — Junior researcher, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: spassyuk@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-7780-2533;
Omarov Chingis — PhD, Professor, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: chingis.omarov@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-1672-894X.

Abstract. Interplanetary dust of asteroidal and cometary origin gradually drifts toward the Sun under the drag produced by solar radiation and the solar wind. Upon reaching the sublimation zone, the dust evaporates and breaks down into atoms, which are then ionized and may subsequently be carried away by the solar wind. Some atoms and singly charged ions experience resonant-line radiation pressure that significantly exceeds the gravitational pull of the Sun. Elements of this kind can be accelerated by radiation pressure to high velocities, provided that their lifetime before the next ionization event is sufficiently long. Gas clouds formed by the disintegration of compact objects such as comets or meteoroid streams in the vicinity of the Sun may be separated by radiation pressure into several clouds with homogeneous chemical composition and travel outward as far as Earth's orbit. Previous calculations have shown that a number of atoms and singly charged ions can attain high velocities within their lifetime before further ionization. Solar radiation acts most efficiently on the singly ionized species of magnesium and calcium. Earlier studies demonstrated that emission in the H and K lines of CaII can be detected during solar eclipses using highly sensitive, high spectral resolution instruments. Such unique observations have been accomplished only twice, in the works of Gulyaev and Shcheglov during the solar eclipses of 26 February 1998 and 11 August 1999. The difficulty of these observations is compounded by the short duration of eclipses and the presence of atmospheric disturbances. Observations made outside Earth's atmosphere using orbital instruments are free from such limitations.

Given the presence of inhomogeneities and density enhancements in the form of meteoroid streams within the inner Solar System, the likelihood of detecting clouds containing distinct groups of atoms or ions increases.

Keywords: dust, gas, meteoroid streams, resonance emission, calcium atoms and ions

Funding. *The work is carried out within the framework of the Project No. BR24992759 Development of the concept for the first Kazakhstani orbital cislunar telescope - Phase I", financed by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan.*

For citations: *Shestakova L.I., Serebryanskiy A.V., Spassyuk R.R., Omarov Ch.T. Search for Gas of Comet-Meteor Origin in the Inner Solar System: CaII Ion Emission. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 165–178. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.412*

©Шестакова Л.И., Серебрянский А.В., Спасюк Р.Р.*, Омаров Ш.Т., 2026.

«В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты» ЖШС,
Алматы, Қазақстан.
*E-mail: spassyuk@fai.kz

КҮН ЖҮЙЕСІНІҢ ІШКІ АЙМАҒЫНДАҒЫ КОМЕТА-МЕТЕОРЛЫҚ ТЕКТЕГІ ГАЗДЫ ІЗДЕУ: CAII ИОНДАРЫНЫҢ ЖАРҚЫРАУЫ

Шестакова Любовь — PhD, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: shest1952@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2223-5332;
Серебрянский Александр — PhD, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: aserebryanskiy@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-4313-7416;
Спасюк Руслан — Кіші ғылыми қызметкер, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: spassyuk@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-7780-2533;
Омаров Шыңғыс — PhD, профессор, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: chingis.omarov@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-1672-894X.

Аннотация. Астероидтық және кометалық шығу текті планетааралық шаң Күн сәулеленуі мен күн желі әсерінен болатын тежелулердің ықпалымен біртіндеп Күнге жақындайды. Сублимация аймағына жеткен кезде шаң буланып, атомдарға ыдырайды, олар кейін иондалып, әрі қарай күн желімен ілесіп әкетілуі мүмкін. Кейбір атомдар мен алғашқы иондар резонанстық сызықтардағы сәулелік қысымды сезінеді, ол Күннің тартылыс күшінен едәуір асып түседі. Мұндай элементтер, егер келесі иондалуға дейінгі өмір сүру уақыты жеткілікті ұзақ болса, сәулелік қысым әсерінен жоғары жылдамдықтарға дейін үдетілуі мүмкін. Күнге жақын маңда ықшам нысандардың кометалардың немесе метеор ағындарының

ыдырауы нәтижесінде түзілген газ бұлттары сәулелік қысым әсерінен химиялық құрамы біртекті бірнеше бұлтқа бөлініп, Жер орбитасына дейін жете алады. Бұрын жүргізілген есептеулер келесі иондалуға дейінгі өмір сүру уақыты ішінде жоғары жылдамдықтарға жете алатын бірқатар атомдар мен алғашқы иондардың бар екенін көрсетті. Күн радиациясының әсері Mg және Ca элементтерінің бірінші иондарына ең тиімді түрде әсер етеді. Бұрын жасалған зерттеулер CaII-дің H және K сызықтарының сәуле шығаруын жоғары сезімталдыққа және жоғары спектралдық айырымдылыққа ие аспаптарды пайдалана отырып, күн тұтылулары кезінде тіркеуге болатынын көрсетті. Мұндай бірегей зерттеулер бар болғаны екі рет Гуляев пен Щегловтың еңбектерінде 1998 жылғы 26 ақпандағы және 1999 жылғы 11 тамыздағы күн тұтылулары кезінде жүзеге асырылды. Мұндай зерттеулердің күрделілігі тұтылулардың қысқа мерзімділігімен және атмосфералық кедергілердің болуымен күшейе түседі. Жер атмосферасынан тыс, орбиталық аппараттардың көмегімен жүргізілетін бақылауларда мұндай шектеулер жоқ. Ішкі Күн жүйесінде метеор ағындары түріндегі біртектес еместіктер мен тығыздалулардың болуын ескерсек, жекелеген атомдар немесе иондар топтарын қамтитын бұлттарды анықтау ықтималдығы арта түседі.

Түйін сөздер: шаң, газ, метеорлық ағындар, резонанстық жарқырау, Ca атомдары мен иондары

©Шестакова Л.И., Серебрянский А.В., Спасюк Р.Р.*, Омаров Ш.Т., 2026.
ТОО «Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова»,
Алматы, Казахстан.
*E-mail: spassyuk@fai.kz

ПОИСК ГАЗА КОМЕТНО-МЕТЕОРНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ ВО ВНУТРЕННЕЙ ОБЛАСТИ СОЛНЕЧНОЙ СИСТЕМЫ: СВЕЧЕНИЕ ИОНОВ CAII

Шестакова Любовь — PhD, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан, E-mail: shest1952@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2223-5332;
Серебрянский Александр — PhD, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E-mail: aserebryanskiy@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-4313-7416;
Спасюк Руслан — Младший научный сотрудник, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E-mail: spassyuk@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-7780-2533;
Омаров Чингис — PhD, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E-mail: chingis.omarov@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-1672-894X.

Аннотация. Межпланетная пыль астероидного и кометного происхождения постепенно приближается к Солнцу под действием торможения солнечным излучением и солнечным ветром. При достижении области сублимации пылевые частицы испаряются и распадаются на атомы, которые затем ионизуются и далее могут увлекаться солнечным ветром. Некоторые атомы и однократно ионизованные ионы испытывают действие светового давления в резонансных

линиях, значительно превышающего силу солнечного тяготения. Такие элементы могут разгоняться световым давлением до больших скоростей, если время их жизни до следующей ионизации достаточно велико. Облака газа, образовавшиеся в результате распада вблизи Солнца компактных объектов - комет или метеорных потоков, — могут под действием светового давления разделяться на несколько облаков с однородным химическим составом и достигать орбиты Земли. Выполненные ранее расчеты показали, что существует ряд атомов и однократно ионизованных ионов, способных достичь высоких скоростей за время своего существования до следующей ионизации. Наиболее эффективно солнечная радиация воздействует на однократно ионизованные ионы Mg и Ca. Ранее проведенные исследования показали, что регистрация свечения линий H и K Ca II возможна во время солнечных затмений с использованием высокочувствительных приборов, обладающих высоким спектральным разрешением. Такие уникальные исследования были реализованы лишь дважды - в работах Гуляева и Щеглова во время солнечных затмений 26 февраля 1998 года и 11 августа 1999 года. Трудность подобных исследований усугубляется кратковременностью затмений и наличием атмосферных помех. Наблюдения за пределами земной атмосферы с помощью орбитальных аппаратов таких ограничений не имеют. С учетом наличия во внутренней Солнечной системе неоднородностей и уплотнений в виде метеорных потоков возрастает вероятность обнаружения облаков, содержащих отдельные группы атомов или ионов.

Ключевые слова: пыль, газ, метеорные потоки, резонансное свечение, атомы и ионы Ca

Introduction. The behavior of interplanetary dust is governed by the Poynting-Robertson drag effect, whose action leads to the fact that dust particles initially moving on circular orbits begin to approach the Sun along a spiral. It is obvious that the dust reaches the sublimation region, where it is heated to high temperatures and evaporates. For a long time, experimental investigation of this region was not carried out, since the near-solar region is a rather difficult object for observations. Attention was first drawn to the dust sublimation region near the Sun after the reports by (Peterson et al., 1967; MacQueen et al., 1968) on the detection of local maxima of dust thermal emission at a wavelength of 2.2 at heliocentric distances of 3.5, 4.0, 8.7, and 9.2 $R_\odot$ near the ecliptic plane, symmetrically with respect to the Sun.

In the review by (Mann et al., 2004), an extensive list of infrared (IR) observations of the F-corona is presented, including both indications of the presence of thermal emission and its absence. IR observations revealed no signs of thermal radiation at distances up to 15 $R_\odot$ during the solar eclipses of 1980 and 1991. At the same time, during the eclipse of 11 June 1983 an intense maximum of IR emission was detected to the west of the Sun, with a complete absence of thermal emission on the eastern side. Apparently, we are dealing with non-stationary dust formations clouds in the near-solar region.

It is obvious that dust in the sublimation region evaporates and is converted into a gas whose temperature is several orders of magnitude lower than the temperature of the

CC BY NC

surrounding gas of the solar corona. The atoms of the resulting gas will actively interact with solar radiation and coronal particles. The relaxation time of atoms and primary ions with the coronal gas due to collisions is sufficiently large at distances from $4R_{\odot}$ to $10R_{\odot}$ compared with their lifetime, which is determined by ionization under the action of the Sun's ultraviolet (UV) radiation.

As for secondary ions, their lifetime until the next ionization may exceed the relaxation time with the coronal gas, and if these ions have not left the near-solar region, then they mix with the corona. Further ionization then proceeds mainly due to collisions with coronal particles, since the potential of each subsequent ionization increases to such an extent that the probability of ionization by radiation becomes much smaller because of the lack of high-energy quanta in the solar emission spectrum.

The process of transformation of cold gas into typically coronal gas can be considered complete after the onset of ionization equilibrium, which, under solar coronal conditions, occurs at high stages of ionization. Evidence for the presence in the near-solar region of gas with low degrees of ionization, not typical of the solar corona, can be regarded as consequences of the injection into the near-solar region of interplanetary material in the form of a flux of meteoroids, comets, or zodiacal dust.

What are the specific characteristics of the interaction between neutral atoms (and primary ions) and solar radiation prior to further ionization? Firstly, many neutral atoms possess resonance lines corresponding to transitions from the ground state in spectral regions near the peak of solar radiation. Certain atomic transitions may have significant oscillator strengths, experiencing radiation pressure in resonance lines that exceeds the Sun's gravitational pull. This allows specific atoms to exit the circumsolar region and accelerate to high velocities, potentially reaching solar escape velocity. Since the lifetime of primary ions significantly exceeds that of neutral atoms, the highest velocities are attained by elements that exhibit high radiation pressure in both their neutral and singly ionized states.

The first estimates of the intensity of resonance emission of some atoms and primary ions near the dust sublimation region were made in (Shestakova et al., 1990). That work concluded that Mg and Ca ions can reach the highest velocities, whose lifetimes allow them to accelerate to high speeds. It is precisely these elements that, after the first ionization, can exhibit the maximum intensity of resonance emission, which can be detected in observations during total solar eclipses or by means of space experiments.

The best candidates for such experiments are the resonance emissions of MgII. The cosmic abundance of Mg exceeds that of Ca by approximately an order of magnitude, and the estimated emission intensity also exceeds the intensity of the CaII K line by roughly an order of magnitude. Unfortunately, the resonance lines of MgI and MgII lie in the near-ultraviolet region, with vacuum wavelengths of about 2853Å and 2796Å, respectively. Such observations require more complex instrumentation than observations of lines in the optical range.

Of all atoms and ions having spectral emission lines in the optical range, the most effective may be the detection of the emission of calcium ions. The lifetime of these ions until the next ionization exceeds the lifetime of neutral calcium atoms by three orders

of magnitude and is almost four orders of magnitude greater than the lifetime of sodium atoms.

(Gulyaev and Shcheglov, 1999) were the first to confidently register the resonance emission of CaII during the eclipse of 26 February 1998 in Guadeloupe using a Fabry-Perot etalon (FPE) at several sections of the interferogram to the west of the Sun in the heliocentric distance interval from $5R_{\odot}$ to $20R_{\odot}$. The emission intensity in the CaII K line observed at the center of the terrestrial-sky absorption line during the eclipse turned out to be approximately equal to the intensity of the continuous spectrum in the interval between the lines. In total, nine emission features were recorded in the spectrum. One emission feature proved to be unshifted; two others showed negative velocities of -160 and -168 km/sec. For the remaining six emission features, the shifts of the K line were in the range 2.2-3.7Å, which corresponds to a radial velocity from 170 to 280 km/sec with a probable error of ±20 km/sec. The derived velocities for these emission features turned out to be higher than the Keplerian velocities of circular orbital motion for the distances of the region considered, despite the fact that radial velocities were observed, i.e., projections of the spatial velocities onto the line of sight. Naturally, the true spatial velocities may be much larger.

In (Shestakova et al., 2004), an attempt was made to model the orbit of the parent body using emission details (features) of Ca-ion emission obtained from the observations of (Gulyaev and Shcheglov et al., 2001) during the eclipse of 26 February 1998. The simultaneously observed extended emission region cannot be interpreted as the passage of a single parent body. The most probable source of the appearance of cold gas in the outer solar corona may be explained by a scenario in which streams of meteoroids or remnants of comets, moving on elongated orbits, penetrate into the near-solar region. Ca ion particles leaving the parent orbit at each moment of time form an isochrone. All the observed emission is contained within an isochrone of $25 \cdot 10^3$ seconds. During this time, near perihelion the meteor stream (parent bodies) manages to traverse more than 180° in the plane of the sky. Applying the model to the observed results, taking into account the emission configuration and the observed radial velocities, made it possible to estimate the parameters of a parabolic orbit of the parent bodies with a perihelion distance of about $2R_{\square}$. The stream of bodies crossed the ecliptic almost at a right angle from south to north, extending along the orbit near perihelion by almost 180°. The total mass of the dispersed material, assuming a chemical composition of CI-type chondrites, is $M_{CI} = 1 \times 10^{11}$ g. For a porous comet-type body with an average abundance for the Solar System, the mass estimate is $M_{com} = 2.6 \times 10^{13}$ g, which is equivalent to a body of radius 0.22 km at a density of 0.6 g/cm^3.

In (Shestakova et al., 2004; 2013), calculations were performed of the acceleration of calcium ions by radiation pressure upon detachment from different points along the orbit from a parent body moving on a parabolic orbit with a perihelion distance $q = 2R_{\square}$. It was shown that atoms attain the highest velocities when they detach from the parent body at perihelion. The farther from the Sun the detachment of an atom occurs, the lower its terminal velocity.

Detailed calculations of the acceleration of CaII ions were carried out in (Shestakova

et al., 2013), where an attempt was made to construct a numerical model of the motion of calcium ions after detachment from parent bodies comets, dust grains, or meteoroids following their approach to the Sun.

In the present work, an attempt is made to construct a model of the motion of Ca ions after detachment from the parent body at various distances from the Sun. The influence of radiation pressure, gravity, and magnetic drift in the Sun's radial magnetic field is taken into account. Radiation pressure on calcium ions in the H and K resonance lines of CaII in the solar spectrum is the dominant factor in the dynamics of the ions, which accelerate as they move away from the Sun. The dynamical model makes it possible to estimate the range of distances at which the disintegration of parent bodies and the formation of gas clouds may occur, and to assess the consistency of the proposed acceleration mechanism with the observed velocities (Gulyaev and Shcheglov 1999). Despite the crudeness of the model, one can note its good agreement with the observations.

Method and model. According to the estimates of (Shestakova et al., 1990), the lifetime of a neutral calcium atom is short. At a distance of $6R_{\odot}$ from the center of the Sun, it will be ionized within 160 s. The lifetime of the first calcium ion before the next ionization at the same distance from the Sun is already three orders of magnitude larger: 1.5×10^5 s. Owing to the short lifetime of the calcium atom in the solar radiation field, we do not assume the formation of calcium ions by any other mechanisms, but take into account only ionization by solar radiation. Thus, the motion of the neutral atom is excluded from consideration, and we will immediately calculate the motion of the ion after detachment from the parent body. To construct a dynamical model of the motion of CaII ions in the observed region near the Sun, we will rely on the following assumptions:

- 1) Ca atoms are produced as a result of the disintegration of small bodies of the Solar System or of interstellar bodies moving along Keplerian orbits. The origin (interstellar or interplanetary) of the parent body from which the cloud of the observed cold gas formed is of no fundamental importance; therefore, we do not distinguish between interstellar and interplanetary origins of the parent bodies.
- 2) We neglect the influence of the corona and mixing with it, since the relaxation time of the first Ca ion with the corona at a distance of $6R_{\odot}$, according to the theory (Alfven and Feltkhammar, 1967), exceeds by more than an order of magnitude the lifetime of this ion until the next ionization by the Sun's UV radiation. As the relaxation time, we adopt the slowing-down time of calcium ions on protons, which, according to (Alfven and Feltkhammar, 1967), is determined from the relation:

$$\frac{m_i^2 v_i v_T^2}{4\pi \cdot e_i^2 e_p^2 (1+m_i/m_p) n_p \ln\Lambda \cdot f(v/v_T)} \qquad (1)$$

where $v_T = (2kT_p / m_p)^{0.5}$ and for $v = v_T$, $f(v/v_T) = 0.43$. Λ - Debye shielding radius. This quantity , according to (1), is, by our estimates, 1.5×10^5 s, by more than an order of magnitude. Thus, consideration of the processes of interaction of

calcium ions with the coronal material is meaningful only after their transition to the next ionization stage, in which emission in the CaII K line is absent.

- 3) The possible contribution of cyclotron rotation to the observed velocities is not yet taken into account. This contribution may be significant near the starting positions and decreases as the ion moves away from the Sun.

We represent the trajectory of the parent body by the classical equation of elliptical motion:

$$r = \frac{p}{1 + e\cos\varphi} \tag{2}$$

for which the conservation-of-angular-momentum equation, or the areal law $r^2\dot{\varphi} = \sqrt{\mu \cdot p}$, is also valid. At the moment of detachment of the ion from the parent body, its radial and tangential velocities will be equal to:

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{\mu}{p}}e\sin\varphi, \quad r\dot{\varphi} = \sqrt{\frac{\mu}{p}}(1 + e\cos\varphi) \tag{3}$$

Let an ion be separated from its parent body at some location I^1 on the line SI (see Figure 1). The force acting within the ionic radius the vector can be represented as several forces:

$$m\ddot{r} = F_K + F_H + F_g + F_M \tag{4}$$

Where $\ddot{r}$ is the radial acceleration, m is the mass of the Ca, F_K. F_H are the radiation-pressure forces in the CaII K and H resonance lines, F_g is the gravitational force. F_M is the force due to the action of the magnetic field, considered in the first-order approximation, i.e., averaged over one Larmor period. In the Sun's radial field, the action of this force will manifest as a gradient drift toward a weaker field (magnetic mirror acceleration), i.e., away from the Sun. In this case, the entire Equation (3) will be the equation of motion of the guiding center about which the particle undergoes cyclotron rotation. A complete derivation of the general equation of motion is presented in (Shestakova et al., 2013) and the Equation (4) of motion is transformed to a form convenient for numerical solution:

$$\ddot{r} = (0.14782 I_K h_K + 0.078506 I_H h_H + 0.27394 \cdot 10^5 (J \cdot r_{st}/r - 1))/(r/r_{sol})^2 \text{ cm/sec}^2, \tag{5}$$

where $J = (r\dot{\varphi})^2/(r\dot{\varphi})_o^2$ accounts for the difference between the velocity of the parent body and circular Keplerian motion, and is specified by the initial conditions. In all cases considered, for $e \leq 1$, the quantity satisfies $0 < J \leq 2$. The resulting Equation (5)

CC BY NC

is used futher for calculations of the ion motion, averaged over the Larmor period, after detachment from the parent body.

Many attempts have been made to explain the spatial distribution of dust in the vicinity of the Sun, the orbital distribution of dust particles, the temperature profile, and the boundary of the dust-free zone, where dust completely sublimates and turns into gas (Mann et al., 1996). However, most of these attempts do not have a solid observational basis, because successful observations of the dust corona, which are carried out under conditions of total solar eclipses, are very rare. The question of the location of the boundary of the dust-free zone still remains open.

We pay special attention to the choice of the starting distance of the ions, since the starting distance is not merely a model parameter, but precisely the distance at which the boundary of the dust-free zone or the orbit of the parent body may be located.

The starting distance at which melting of chondritic material begins appears natural. The difficulty is that this material is a mixture of various minerals: olivine, pyroxene, plagioclase, and various impurities. Olivine and pyroxene together constitute three quarters of the mass of meteoritic material (Krinov et al., 1955). Olivine consists of a mixture of forsterite (Mg_2SiO_4) and fayalite (Fe_2SiO_4). Pyroxene consists of a mixture of $MgSiO_3$ and $FeSiO_3$ (Mg-pyroxene and Fe-pyroxene). Plagioclase contains high concentrations of impurities of Al, Ca, and Na.

The most fusible substance among those listed above is Fe-bearing olivine and pyroxene, whose melting temperatures are approximately the same and amount to about 1370 K (Krinov et al., 1955). In the blackbody approximation, bodies at a distance of $9R_\odot$ from the center of the Sun will have such a temperature. The refractory mineral forsterite (Mg_2SiO_4) melts at 2160 K (Krinov et al., 1955), which coincides with the blackbody temperature at a distance of $3.6R_\odot$. Even closer to the Sun, particles of oxides may approach: alumina (Al_2O_3) and a variety of calcium silicate orthosilicate whose melting temperatures are close to 2300 K and 2400 K, respectively, as well as graphite, whose melting temperature is significantly higher. Near $6R_\odot$ particles of the aluminosilicate mullite and plagioclase, which melt at 2100 K (Krinov et al., 1955), and siliceous glass (SiO_2), whose melting temperature is close to 2000 K, also evaporate. Mg-pyroxene and pure iron melt at $5R_\odot$.

The distance deserves $9R_\odot$ special attention, since about 40% of meteoritic material melts there. This distance we will take as the basis in our calculations. One should also not forget that Ca ions can reach inner regions of the corona down to $(3\text{-}4)R_\odot$ together with refractory particles of Mg-olivine and plagioclase, which together can constitute up to 35% of meteoritic material. According to our estimates, at distances smaller than $3R_\odot$ the relaxation time of a Ca ion with the corona is shorter than the lifetime of the ion until the next ionization by the Sun's UV radiation; therefore, ions penetrating into the inner regions of the corona remain in the corona.

Results. Numerical calculations were carried out using equation (5) for various initial conditions.

a) Start from a circular orbit, J = 1, $\dot{r} = 0$, $R_{start} = 5R_\odot$

b) Start from a parabolic orbit at perihelion, $\phi = 0$, $\dot{r} = 0$, $r\dot{\varphi} = 2\sqrt{\mu / p}$, где p= 2r, J = 2, $R_{start} = 9R_{\odot}$

c) Start from a parabolic orbit at quadrature, $\phi = -90^0$, $\dot{r} = -\sqrt{\mu / p}$, $r\dot{\varphi} = \sqrt{\mu / p}$, $p = r$

In all three cases, variants with other starting distances were also computed. The results of the calculations for ion starts at distances of 9 and 15 solar radii are presented in Figures 1 and 2.

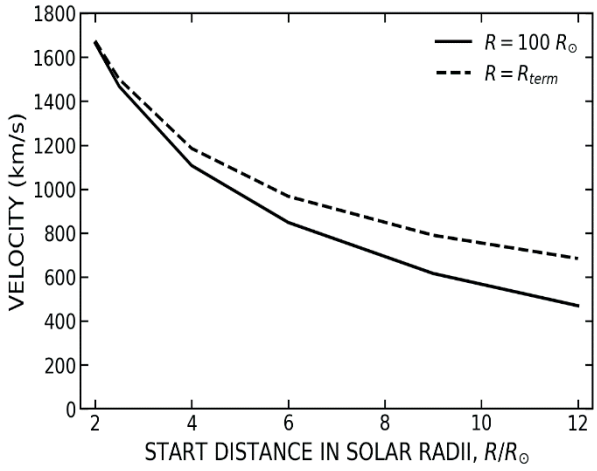


Figure 1. Radial velocities of calcium ions calculated for various initial distances at a heliocentric distance of $100R_{\odot}$, and the terminal velocity at infinity - R_{term}.

Figure 2 presents the results of calculations of the radial velocities at a distance of 100 solar radii and the terminal velocities at infinity.

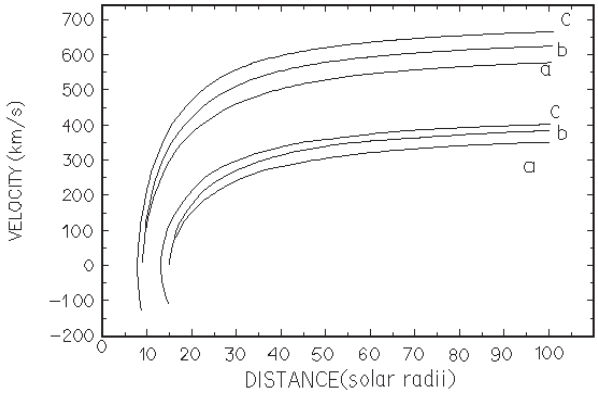


Figure 2. Velocity of Ca-ions versus distance from the Sun after leaving the parent body. Initial orbits of parent bodies: a) Start from a circular orbit; b) start from a parabolic orbit in perihelion; c) start from a parabolic orbit in quadrature. The upper three curves - start from 9 $R_{\odot}$ the lower ones- start from 15 $R_{\odot}$.

Figure 3 shows the radial velocities developed by Ca ions when they start from different points of the orbits at distances of 9 $R_\odot$ and 15$R_\odot$. The dynamical analysis shows that ions leaving the orbit of a parent body that penetrates into the near-solar region to distances smaller than 15$R_\odot$ can be accelerated to the observed velocities under the action of the forces considered. Thus, the scenario we propose does not contradict the observational results.

In (Gulyaev and Shcheglov, 2001), a second attempt at similar observations with a Fabry-Perot etalon in inclined beams, carried out during the total solar eclipse of 11 August 1999 in Bulgaria, is also described. The results of this observation differ in that strong emission was detected at the centers of the lines with zero Doppler shift. This phenomenon is explained by its temporal coincidence with the maximum of the Perseid meteor stream, which in itself may be of interest as a method for estimating the influx of meteoric material to Earth. Against such a background of powerful emissions, it was difficult to isolate fragments formed in the sublimation region. Nevertheless, three such fragments were identified near an elongation of 20$R_\odot$ exhibiting very high radial velocities of about 500 km/sec. The registered fragments were more compact than in the first experiment, and the corresponding radial velocities had different signs: -420 km/sec (19$R_\odot$), +490 km/sec (21$R_\odot$) and 830 km/sec (24$R_\odot$). Thus, in the vicinity of the Sun one can observe the motion of low-ionization Ca ions with radial velocities of different signs and magnitudes close to 1000 km/sec, which does not contradict the model calculations presented in Figures 2 and 3.

The most probable scenario can be considered one in which streams of meteoroids or remnants of comets, moving on elongated orbits, penetrate into the near-solar region. The closer to the Sun the detachment of particles from the parent body occurs, the higher the velocities to which the ions can be accelerated (Figs. 1 and 2).

The best option for extending such studies would be observations outside Earth's atmosphere, which would allow the spectral investigations to be extended into the ultraviolet region.

Possibilities of space observations of resonant luminescence in the H and K lines of CaII.

1) History of the Search. Prior to the successful interferometric observations by Gulyaev and Shcheglov, several attempts were made to detect Ca ion resonance emission in the solar F-corona. In July 1990, Aimanova and Shestakova utilized the Nikolsky coronagraph (Almaty) in an attempt to detect CaII H and K line emissions using a spectrograph with a dispersion of approximately 0.3 Å/mm. A series of consecutive images of the daytime sky at distances from 3 to 9 $R_\odot$ west of the Sun along the diurnal parallel (at 0.5 $R_\odot$ intervals) evealed a faint emission band in the CaII K line at 6 $R_\odot$. Due to time constraints related to an expedition for the total solar eclipse of July 22, 1990, these results could not be verified and remained unpublished.

Subsequently, several more attempts were made to detect the resonance emission of the Ca ion during total solar eclipses. Observations on 22 July 1990 were carried out by A. M. Sredinin according to the program of L. I. Shestakova in Siberia, the settlement of Markovo. An interference filter placed in front of the camera was centered on the CaII

K line and had a width $\delta\lambda_{0.5}$ Å 100 Å. The structural features of the outer corona were best seen in the image obtained with an exposure of 30 s, in which the sky background already had a significant density. The central part of the frame out to 6 $R_\odot$ was strongly overexposed and was burdened by distortions associated with the displacement of the Sun during the exposure, which was made without clock drive. Outside this near-Sun region, after contact copying onto Mikrat-200 film, the sky background was practically eliminated and unusual structures were revealed in the region of the Sun's southern pole: two quasi-radial streams resembling in shape dipole field lines symmetrically curved in opposite directions from the pole. The width of the structures was 3-4 $R_\odot$ and their extent reached 15 $R_\odot$ from the Sun. Owing to the unreliability of the photometry of the original negative, the results also remained unpublished.

The first attempt at interferometric observations without feeding optics, using the setup of P.V. Shcheglov containing a Fabry-Perot etalon in inclined beams, was made on 11 July 1991 in Mexico by A.K. Aimanov, L.I. Shestakova. It turned out that the image with the longest exposure contained emission rings covering the entire field of view, about 30 degrees. After analysis, it was found that the emission rings belonged to mercury, which was established with complete certainty, since a mercury lamp was used as the comparison source. Apparently, at the observing site (La Paz, Mexico) advertising lighting automatically switched on as darkness fell during the total phase of the eclipse; therefore, the sky spectrum contained strong mercury lines.

Simultaneous observations in Mexico using a coronagraph (Aimanov et al., 1995) equipped with an FPE in the exit pupil allowed for radial velocity measurements of dust in the inner corona up to 6 $R_\odot$. Velocities were estimated via CaII absorption lines; no emission was detected. The interference filter (IF) used was centered at λ3947Å with a half-width of $\delta\lambda_{1/2}$ = 50Å to encompass both H and K lines. The mercury line at λ3906Å did not interfere as it fell outside the filter's passband.

Subsequently, observations by R.A. Gulyaev were carried out on the wide-angle interferometric setup of P.V. Shcheglov with a Fabry-Pérot etalon in inclined beams, whose sensitivity increased from eclipse to eclipse and whose observations ultimately led to success. Interferometric observations on 9 March 1997 in Chita Oblast, performed by R.A. Gulyaev on Shcheglov's setup, showed a high sensitivity level that made it possible to record the sky background at the time of the eclipse, since the entire image was covered by rings of the CaII H and K absorption lines present in the sky spectrum. However, emission was also not detected.

Only during the eclipse of 26 February 1998 in Guadeloupe did interferometric observations of the corona in the CaII H and K lines (Gulyaev and Shcheglov, 2001) show the presence of Ca-ion emission in several regions of the interferogram to the west of the Sun. Compared with 1997, the instrument sensitivity increased by a factor of 40. In the image, the sky absorption lines at the time of the eclipse were clearly visible across the entire field of view. The emission intensity in the CaII K line, observed at the center of the absorption line, turned out to be approximately equal to the intensity of the continuous spectrum in the interval between the lines. As a result, the estimate of the intensity of the continuous spectrum obtained from the image near the CaII H

CC BY NC

and K lines is B = 8.8×10^{-3} erg/(cm^2 s sr Å). This means that, for observations with an instrumental profile of width about 1 Å, the intensity of the observed emission falls within the range of the predicted estimates made in (Shestakova et al., 1990). According to that work, the estimated emission intensity for resonance emission in the CaII K line at a distance of 6 $R_\odot$ is $1.6 \times (10^{-2} - 10^{-3})$ erg/(cm^2 s sr).

2) Device selection. Taking into account the results of unsuccessful and successful observational attempts, one can select the following relatively simple instrument configuration: a small-aperture camera with a filter and a wide field of view of 10° - 20°, without feeding optics 10° field of view corresponds to 40 $R_\odot$.

In front of the camera lens with an f-number from 1:1 to 1:1.5 and a diameter of 50 ± 5 mm an interference filter (IF) fully covering the light beam is mounted. In the focal plane of the lens, a detector array sensitive in the wavelength range 3900 - 4000Å is installed.

The maximum transmission of the IF, λ_{max} = 3952Å ± 2Å, is oriented toward the mean position between the CaII H and K lines, whose vacuum wavelengths are 3969.591 Å and 3934.777 Å, respectively. The IF half-width is $\delta\lambda_{1/2}$ = (52-54) Å. The filter transmits both CaII H and K resonance lines, taking into account a Doppler shift of of *±600 km/sec* for $\delta\lambda_{1/2}$ =52Å. A Doppler shift of 1 Å in this region corresponds to a velocity of 76 km/sec. The shape of the filter transmission profile should be close to rectangular.

The main difficulty in conducting observations is shielding the camera from direct sunlight. The localization of the observing region is to the north, east, south, and west of the Sun. The edge of the field of view is oriented at a distance of 4 $R_\odot$ = 1° from the edge of the solar disk (5$R_\odot$ from the center of the Sun). In one observing set, four frames are obtained from all four sides of the Sun. The north-south directions must also be monitored, since outflows from the poles (jets) are also possible.

Testing the camera and selecting the exposure can be carried out under terrestrial conditions at an observatory. The terrestrial sky at full Moon should provide an optimal signal level on the CCD array. The sky glow at full Moon is slightly weaker than the sky during a solar eclipse. The emissions observed in Gulyaev's experiment were comparable in intensity to portions of the continuous sky spectrum during eclipses. According to (Makarova et al., 1994), the brightness of the Sun in the selected spectral interval is about $B_\odot \approx 2.8 \times 10^7$ J/(sec m^2 m sr). An estimate of the sky brightness at the time of an eclipse, according to (Kimura and Mann, 1998) and (Shestakova and Demchenko, 2010), is $(1\text{-}3)\times10^{-9}$ $B_\odot$. As a result, the instrument sensitivity should be no worse than $(2 - 6) \times 10^{-2}$ J/(sec m^2 m sr). The daytime sky at zenith will also make it possible to select the exposure, taking into account that the sky during a solar eclipse is 5000-10000 times fainter than the daytime sky, as was measured during our observations of solar eclipses.

3) Expected Observational Results

Within the field of view, the appearance of emission spots of different sizes is expected, indicating the presence of regions of increased concentration of calcium ions that appeared after the disintegration and dispersion of denser bodies of comet-asteroid composition.

4) Future Research Directions

Possible continuation of the research: scanning the region of the inner Solar System using a telescope with a long-slit spectrograph to measure the radial velocities of emission clouds, in order to investigate the dynamics of these objects and study the sources of their occurrence.

References

Aimanov A.K., Aimanova G.K., & Shestakova L.I. (1995) Radial velocities in the F-corona on July 11, 1991. Astronomy Letters, 21(2). – P. 196-198. NASA ADS: https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1995AstL...21..196A (in Eng.).

Gulyaev R.A., & Shcheglov P.V. (1999a) Emission formations in the F-corona [Emissionnye obrazovaniya v F-korone]. Doklady RAN, 366(2). – P. 199-201. (in Rus.).

Gulyaev R.A., & Shcheglov P.V. (1999b) Interferometric observations of emission features in the F-corona. Contributions of the Astronomical Observatory Skalnaté Pleso, 28(3). – P. 237-242. NASA ADS: https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1999CoSka..28..237G (in Eng.).

Gulyaev R.A., & Shcheglov P.V. (1999c) Interferometric observations of the S-corona [Interferometricheskie nablyudeniya S-korony]. Izvestiya RAN, Seriya Fizicheskaya, 63(11). – P. 2186-2190. (in Rus.).

Gulyaev R.A., & Shcheglov P.V. (1999d) Emission structures in the F-corona. Doklady Physics, 44(5). – P. 309-311. (in Eng.).

Gulyaev R.A., & Shcheglov P.V. (1999e) Interferometric observations of the S-corona. Izvestiya RAN, Seriya Fizicheskaya, 63(11). – P. 2186-2190. (in Eng.).

Gulyaev R.A., & Shcheglov P.V. (1999f) Emission formations in the F-corona. Reports of the Academy of Sciences, 366(2). – P. 199-201. NASA ADS: https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1999DokPh..44..309G (in Eng.).

Gulyaev R.A., & Shcheglov P.V. (2001) Nablyudeniya rezonansnogo svecheniya atomov v oblastyakh sublimatsii tverdogo veshchestva v blizhnem okolosolnechnom prostranstve [Observations of the resonance glow of atoms in regions of solid material sublimation in the near circumsolar space]. Uspekhi Fizicheskikh Nauk, 171(2). – P. 217-219. https://doi.org/10.3367/UFNr.0171.200102f.0217 (in Rus.).

Gulyaev R.A., & Shcheglov P.V. (2001). Observations of the resonance glow of atoms in region of solid material sublimation in the near circumsolar space. Physics-Uspekhi, 44(2). – P. 203-205. https://doi.org/10.3367/UFNr.0171.200102f.0217 (in Eng.)

Kimura H., & Mann I. (1998) Brightness of the solar F-corona. Earth, Planets and Space, 50. – P. 493-499. https://doi.org/10.1186/BF03352140 (in Eng.).

Krinov E.A. (1955) Fundamentals of Meteoritics [Osnovy meteoritiki]. Moscow (in Rus.). Makarova E.A., Kazachevskaya T.V., & Kharitonov A.V. (1994) On the variability of some characteristics of solar radiative flux. Solar Physics, 152. – P. 195-200. https://doi.org/10.1007/BF01473204 (in Eng.).

MacQueen R.M. (1968) Infrared observation of the outer solar corona. The Astrophysical Journal, 154. – P. 1059-1076. https://doi.org/10.1086/149825 (in Eng.).

Mann I., et al. (2004) Dust near the Sun. Space Science Reviews, 110. – P. 269-305. (in Eng.).

Peterson A.W. (1967) Experimental detection of thermal radiation from interplanetary dust. The Astrophysical Journal, 148, L37. https://doi.org/10.1086/180009 (in Eng.).

Shestakova L.I. (1990) Is there a region of resonance emission by atoms and ions around the Sun? Soviet Astronomy Letters, 16. – P. 236-240. NASA ADS: https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1990SvAL...16..236S (in Eng.).

Shestakova L.I. (2004) Cometary-meteoric gas in the solar corona: The dynamics of Ca ions. Solar System Research, 38(1). – P. 76-84. doi: 10.1023/B:SOLS.0000015158.95033.45 (in Eng.).

Shestakova L.I. (2013) Movement of CaII ions in the inner Solar system. Astronomy & Astrophysics Transactions, 28(2). – P. 109-120. NASA ADS: https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2013A&AT...28..109S (in Eng.).

CC BY NC

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 179–193

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.413

UDC: 524.834
IRSTI: 29.05.45

©Ualikhanova U.*, Tursynkazy F., Syzdykova A.M.,
Altayeva G.S., Altaibayeva A.B., 2026.
L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.
E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

STUDYING THE AMPLITUDE OF f(T) GRAVITATIONAL WAVES USING BESSEL FUNCTIONS

Ualikhanova Ulbossyn — PhD, senior lecturer, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2351-0658;
Tursynkazy Fariza — Master student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: farizatajieva@mail.ru, https://orcid.org/0009-0002-4507-3994;
Syzdykova Arailym — PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-8999-6566;
Altayeva Gulsinay — Master, senior lecturer, Shokan Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,
E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2611-7413;
Altaibayeva Aziza — PhD, associate professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: aziza.ltaibayeva@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9254-7027.

Abstract. In this work, we study the amplitude of gravitational waves in the framework of the f(T) theory of gravity. The f(T) theory was proposed as an alternative to general relativity, provides a way to explain phenomena such as the accelerating expansion of the Universe. By modifying the torsion scalar T in the standard framework of general relativity, f(T) theory offers a new perspective on gravitational dynamics.

We propose a method for determining the amplitude of gravitational waves using Bessel functions, which are often used in wave propagation problems. This method allows us to solve the differential equations describing gravitational waves in f(T), express their amplitude in terms of these special functions. Our result show that the amplitude of gravitational waves in f(T) deviates significantly from that predicted by general relativity. These deviations are crucial for distinguishing between different gravity model, allow direct tests of f(T) in gravitational wave detection experiments. We investigate how changes in the parameters of the Bessel functions affect the amplitude of gravitational waves. The results show that gravitational waves are very sensitive to cosmological

parameters, which can further improve our understanding of the accelerating expansion of the Universe. This work provides valuable insights into the properties of gravitational waves in modified gravity theories and provides an opportunity to test the f(T) theory with future gravitational wave observations, contributing to the growing field of gravitational wave astronomy.

Keywords: f(T) gravity, gravitational waves, Bessel functions, amplitude, modified gravity

Financing. *This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP26101851).*

For citations: *Ualikhanova U., Tursynkazy F., Syzdykova A.M., Altayeva G.S., Altaibayeva A.B. Studying the Amplitude of f(T) Gravitational Waves Using Bessel Functions. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 179–193. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.413*

©Уалиханова У.А.*, Тұрсынқазы Ф., Сыздыкова А.М., Алтаева Г.С., Алтайбаева А.Б., 2026.
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.
E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

БЕССЕЛЬ ФУНКЦИЯЛАРЫН ПАЙДАЛАНЫП f(T) ГРАВИТАЦИЯЛЫҚ ТОЛҚЫНДАРДЫҢ АМПЛИТУДАСЫН ЗЕРТТЕУ

Уалиханова Улбосын — PhD, аға оқытушы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан, Email: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2351-0658;
Тұрсынқазы Фариза — магистрант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: farizatajieva@mail.ru, https://orcid.org/0009-0002-4507-3994;
Сыздыкова Арайлым — PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-8999-6566;
Алтаева Гульсинай — магистр, аға оқытушы, Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,
E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2611-7413;
Алтайбаева Азиза — PhD, қауымдастырылған профессор, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: aziza.ltaibayeva@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9254-7027.

Аннотация. Бұл жұмыста біз гравитациялық толқындардың амплитудасын гравитацияның f(T) теориясы шеңберінде зерттейміз. f(T) теориясы жалпы салыстырмалық теориясына балама ретінде ұсынылды және Әлемнің жеделдетіп кеңеюі және күңгірт энергияның жұмбақ табиғаты сияқты құбылыстарды түсіндірудің жолын ұсынады. Жалпы салыстырмалық теориясының стандартты шеңберінде бұралу скалярын T өзгерту арқылы f(T) теориясы гравитациялық динамика мен космологиялық эволюцияға жаңа перспективаны ұсынады.

CC BY NC

Сонымен қатар толқындардың таралу есептерінде жиі қолданылатын Бессель функцияларын пайдаланып, гравитация толқындарының амплитудасын анықтау әдісін ұсынамыз. Бұл әдіс гравитациялық толқындарды сипаттайтын дифференциалдық теңдеулерді f(T) теориясы шеңберінде шешуге және олардың амплитудасын осы арнайы функциялар арқылы көрсетуге мүмкіндік береді. Зерттеу нәтижелері f(T) теориясындағы гравитациялық толқындардың амплитудасы жалпы салыстырмалылық болжамынан айтарлықтай ауытқығанын көрсетеді. Бұл ауытқулар гравитацияның әртүрлі теориялық модельдерін ажыратудың маңызды критерийі болып табылып, гравитациялық толқындарды тіркеу эксперименттері негізінде f(T) теориясын тікелей сынақтан өткізуге мүмкіндік береді.

Осы жұмыстың белгілі бір бөлігін Бессель функцияларының параметрлеріндегі өзгерістер гравитациялық толқындардың амплитудасына қалай әсер ететінін зерттеуге арнаймыз. Алынған нәтижелер гравитациялық толқындардың космологиялық параметрлерге жоғары дәрежеде тәуелді екенін айқындап, Ғаламның үдемелі кеңеюін түсіндіретін физикалық механизмдерді нақтылай түседі. Бұл жұмыс модификацияланған гравитация теорияларындағы гравитациялық толқындардың сипаттамаларын тереңірек ашып көрсетіп, болашақтағы гравитациялық толқындарды бақылаулар негізінде f(T) теориясын сынақтан өткізуге мүмкіндік береді және гравитациялық толқындар астрономиясының дамуына елеулі үлес қосады.

Түйін сөздер: f(T) гравитация, гравитациялық толқындар, Бессель функциялары, амплитуда, модификацияланған гравитация

©Уалиханова У.А.*, Турсынказы Ф., Сыздыкова А.М., Алтаева Г.С., Алтайбаева А.Б., 2026.
Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,
Астана, Казахстан.
E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

ИЗУЧЕНИЕ АМПЛИТУДЫ f(T) ГРАВИТАЦИОННЫХ ВОЛН С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУНКЦИЙ БЕССЕЛЯ

Уалиханова Улбосын — PhD, старший преподаватель, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2351-0658;
Турсынказы Фариза — магистрант Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: farizatajieva@mail.ru, https://orcid.org/0009-0002-4507-3994;
Сыздыкова Арайлым — PhD докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-8999-6566;
Алтаева Гульсинай — магистр, старший преподаватель, Кокшетауский университета имени Ш.Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,
E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2611-7413;
Алтайбаева Азиза — PhD, ассоциированный профессор, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: aziza.ltaibayeva@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9254-7027.

Аннотация. В данной работе исследуется амплитуда гравитационных волн в рамках теории гравитации f(T). Теория f(T) рассматривается как одна из альтернатив общей теории относительности и предоставляет возможность объяснения таких явлений, как ускоренное расширение Вселенной и природа темной энергии. Модифицируя скаляр кручения T в стандартной гравитационной модели, теория f(T) предлагает новый подход к описанию гравитационной динамики и космологической эволюции. В работе предложен метод определения амплитуды гравитационных волн с использованием функций Бесселя, которые широко применяются в задачах распространения волн. Данный подход позволяет решать дифференциальные уравнения, описывающие гравитационные волны в рамках теории f(T), и выражать их амплитуду через специальные функции. Полученные результаты показывают, что амплитуда гравитационных волн в теории f(T) существенно отличается от значений, предсказываемых общей теорией относительности. Эти различия имеют принципиальное значение для разграничения различных гравитационных моделей и открывают возможность прямой проверки теории f(T) в экспериментах по регистрации гравитационных волн. Кроме того, исследовано влияние изменения параметров функций Бесселя на амплитуду гравитационных волн. Результаты показывают, что характеристики гравитационных волн чувствительны к космологическим параметрам, что может способствовать более глубокому пониманию ускоренного расширения Вселенной. Таким образом, данная работа предоставляет ценную информацию о свойствах гравитационных волн в модифицированных теориях гравитации и создает основу для проверки теории f(T) с помощью будущих наблюдений, внося вклад в развитие гравитационно-волновой астрономии.

Ключевые слова: f(T) гравитация, гравитационные волны, функции Бесселя, амплитуда, модифицированная гравитация

Кіріспе. Гравитациялық толқындар адамзатқа Ғаламды зерттеудің жаңа перспективаларын ашатын заманауи физиканың ең маңызды жаңалықтарының бірі болып табылады. Оларды алғаш рет Альберт Эйнштейн 1916 жылы өзінің жалпы салыстырмалық теориясының (ЖСТ) бөлігі ретінде болжаған, бірақ тек 2015 жылы LIGO детекторлары арқылы тікелей анықталған. Оқиға астрофизика мен космологияда үлкен жаңалық болып, ғалымдарға электромагниттік спектрдегі бақылауларға сүйенбей, қара құрдымдар мен нейтрондық жұлдыздардың қосылуы сияқты массивтік объектілердің динамикасын зерттеуге мүмкіндік берді (Nojiri and Odintsov, 2006, 1-2; Capozziello and De Laurentis, 2011, 2).

Дегенмен, ЖС-тың жетістіктеріне қарамастан, бұл гравитацияның соңғы теориясы емес екені анық. Соңғы онжылдықтарда жалпы салыстырмалылық теориясының стандартты үлгісі аясында толық түсіндірілмейтін құбылыстарды сипаттауға бағытталған әртүрлі модификацияланған гравитация теориялары қарқынды түрде зерттелуде (Einstein, 1928, 2; Sauer, 2006, 2; Møller, 1961, 1–2). Осындай альтернативті теориялардың бірі f(T)-гравитация, гравитациялық өрістің динамикасы кеңістік-уақыттың қисықтығы арқылы емес, оның бұралуы арқылы сипатталатын

телепараллельді гравитация түрі. Кеңістік-уақыт геометриясы Риман қисықтық тензорымен анықталатын классикалық ЖСТ-дан айырмашылығы, телепараллельдік модельдер гравитация өрісінің теңдеулерінің өзгеруіне әкелетін бұралу тензорын пайдаланады (Hayashi and Nakano, 1967, 2; Cho, 1976, 2). f(T)-гравитация күңгірт энергияны енгізбестен Ғаламның үдемелі кеңеюін түсіндіруге, сондай-ақ стандартты теорияда қол жетімсіз жаңа әсерлерді болжауға қабілетті перспективалы модельдердің бірі ретінде қарастырылады. Осы әсерлердің бірі гравитациялық толқындардың скалярлық поляризациясы түрінде көрінетін қосымша еркіндік дәрежелерінің болуы. Стандартты ЖТС-де гравитациялық толқындар метрикалық тензордың бұзылуына сәйкес келетін тек екі поляризациямен – «плюс» және «крест» арқылы ұсынылған. Сонымен қатар, гравитациялық өрістің модификацияланған теориялары, соның ішінде f(T)-гравитация, LIGO/Virgo және LISA сияқты заманауи гравитациялық толқын детекторлары арқылы анықтауға болатын скалярлық поляризациялар сияқты гравитациялық ауытқулардың жаңа режимдерін енгізуі мүмкін (Aldrovandi and Pereira, 2012, 2; Maluf, 2013, 2).

Бұл зерттеу Бессель функцияларын пайдалана отырып f(T)-гравитациялық гравитациялық толқындардың қасиеттерін талдауға бағытталған. Бессель функциялары физикада сфералық симметриялы жүйелердегі толқындық процестерді сипаттау үшін кеңінен қолданылады (Ferraro and Fiorini, 2007, 2; Ferraro and Fiorini, 2008, 2; Bengochea and Ferraro, 2009, 2).

Бұл контекстте олар скалярлық гравитациялық ауытқулар үшін қозғалыс теңдеулерін аналитикалық шешуге және олардың амплитудасының өрнектерін алуға мүмкіндік береді. Зерттеудің негізгі мақсаттарына мыналар жатады:

1. f(T)-гравитация теориясы шеңберінде гравитациялық ауытқулар үшін қозғалыс теңдеулерін талдау.

2. Гравитациялық толқындардың құрылымының модификациялануынан туындайтын қосымша еркіндік дәрежелерін анықтау.

3. Өзгертілген гравитация теориясында гравитациялық толқындардың таралуын сипаттайтын теңдеулерді шешу барысында Бессель функцияларын қолдану.

4. Алынған теориялық болжамдарды LIGO/Virgo және LISA детекторларында күтілетін бақылау нәтижелерімен салыстыру.

Осы мақсаттарға жету үшін гравитациялық ауытқулардың қозғалыс теңдеуі f(T) функциясымен байланысты массалық мүшені қамтитын есептің сфералық симметриялы тұжырымы қарастырылады (Linder, 2010, 2; Cai et al., 2016, 2). Нәтижесінде теңдеу сфералық Бессель теңдеуіне эквивалент түрге келтіріледі, оның шешімі осы теориядағы гравитациялық толқындардың амплитудасының әрекеті туралы түсінік береді (Abbott et al., 2016, 1; Abbott et al., 2017, 1). Гравитациялық толқындардың таралу жылдамдығына және ірі масштабты құрылымға қойылатын бақылаулық шектеулерді пайдалана отырып, модификацияланған гравитация модельдерінің параметрленуі қарастырылып, олардың көпшілігі космологиялық үдеуді ΛCDM-нен тыс түсіндіруде елеулі шектеулерге тап болатыны көрсетіледі (Lombriser and Taylor, 2016, 2; Lombriser and Lima, 2016, 2). Сфералық Бессель

қозғалысы теориясы гравитациялық өзара әсердің амплитудасына негізделген гравитация теориясы тұжырымдамасына сүйенеді (Chakraborty et al., 2018, 2).

Мақалада келтірілген математикалық есептеулер мен физикалық тұжырымдарды қадағалауды жеңілдету үшін, төмендегі 1-кестеде негізгі шартты белгілелер мен олардың сипаттамалары жүйеленіп көрсетілген.

1-кесте. Негізгі белгілеулер мен символдық анықтамалар

Белгілеу	**Сипаттамасы**
f(T)	Бұралу скалярының ерікті функциясы
T	Бұралу скаляры
$T_{\mu\nu}$	Энергия-импульс тензор
□	Д'Аламбер операторы (толқындық оператор)
h(r, t)	Гравитациялық толқынның амплитудасы
m	f(T) теориясындағы скалярлық еркіндік дәрежесінің тиімді массасы
ω	Гравитациялық толқынның циклдік жиілігі
k	Толқындық сан
$J_n(kr)$	Бірінші текті сфералық Бессель функциясы
$Y_n(kr)$	Екінші текті сфералық Бессель функциясы
ρ_{GW}	Гравитациялық толқынның энергия тығыздығы
r	Радиалды координат (қашықтық)
A, B	Шекаралық шарттармен анықталатын ерікті тұрақтылар

Зерттеу материалдары. *Негізгі теңдеулер.* f(T)-гравитациялық толқындар мына түрдегі теңдеулермен сипатталады:

$$\Box h_{\mu\nu} = \kappa T_{\mu\nu} + S_{\mu\nu}, \qquad (1)$$

мұндағы □ – Д'Аламбер операторы, $T_{\mu\nu}$ – энергия-импульс тензоры, $S_{\mu\nu}$ - f(T) және оның туындыларына байланысты қосымша мүшелер.

Метрикасы бар радиалды таралатын толқын үшін:

$$ds^2 = -dt^2 + (1+h_{rr})dr^2 + r^2 d\Omega^2, \qquad (2)$$

скалярлық ауытқуды $h_{rr}(r,t)$ енгіземіз.

Ауытқу теңдеуі. Үш өлшемді декарттық координаттардағы толқындық теңдеудің жалпы түрі:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial t^2} - \nabla^2 h = 0 \qquad (3)$$

Сфералық симметрия жағдайында ықшамдаудан кейін теңдеу келесі түрде өрнектеледі:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 h}{\partial r^2} - \frac{2}{r}\frac{\partial h}{\partial r} + m^2 h = 0 \tag{4}$$

мұндағы m^2 - f(T)-ның нақты түріне байланысты еркіндік дәрежесінің скаляр-лық тиімді массасы.

Әдістері. *Бессель функциялары арқылы шешу.*

Гармоникалық уақытқа тәуелділік үшін $h(r,t) = \psi(r)e^{i\omega t}$ теңдеу келесідей болады:

Мұндағы $h(r,t)$ - радиалды координат r және t уақытына тәуелді функцияны көрсетеді. $\psi(r)$ - кеңістік бөлігін сипаттайды, $e^{i\omega t}$ - ω жиілігі бар уақыт бөлігін сипаттайды.

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\psi(r)e^{i\omega t}) - \nabla^2(\psi(r)e^{i\omega t}) + m^2\psi(r)e^{i\omega t} = 0 \tag{5}$$

Уақыт бойынша туынды: $(\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\psi(r)e^{i\omega t})$. Кеңістіктік бөлік (сфералық координаталардағы лаплас операторы): $\nabla^2(\psi(r)e^{i\omega t}) = e^{i\omega t}\left(\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr}\right)$

Онда:

$$-\omega^2\psi(r)e^{i\omega t} - e^{i\omega t}\left(\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr}\right) + m^2\psi(r)e^{i\omega t} = 0 \tag{6}$$

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr} + (\omega^2 - m^2)\psi = 0 \tag{7}$$

Бұл теңдеудің шешімі сфералық Бессель функциясы болып табылады:

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} \tag{8}$$

Тұрақты коэффициенттері бар екінші ретті сызықтық біртекті дифференциал-дық теңдеу. Оның сипаттамалық теңдеуі келесі түрде жазылады:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + (\omega^2 - m^2)u = 0 \tag{9}$$

$$\psi(r) = A\frac{J_1(kr)}{r} + B\frac{Y_1(kr)}{r}, \tag{10}$$

мұндағы $k = \sqrt{\omega^2 - m^2}$, ω – толқын жиілігі, m – тиімді масса, A және B – ерікті тұрақтылар, $J_1(kr)$ және $Y_1(kr)$ бірінші және екінші ретті Бессель функциялары.

Шекаралық шарттар. Физикалық шешімдер үшін шекаралық шарттарды қою керек:

1. Шексіздік: $h(r \to \infty) \to 0$, ол $Y_1(kr)$ жоққа шығарады, өйткені бұл функция r -дің үлкен мәндері үшін алшақтайды.

2. Орталық: $h(r \to 0)$ соңғы болып қалады, $J_1(kr)$ функциясы толықтырады, өйткені $J_1(kr) \sim kr/2$ болғанда $kr \to 0$.

Осылайша, шешім келесі түрге ие болады:

$$h(r,t) = A\frac{J_1(kr)}{r}e^{i\omega t}. \tag{11}$$

Энергия тығыздығы. Толқынның энергия тығыздығын энергия импульсінің тензоры арқылы есептеуге болады:

Егер $h(r,t) = R(r)T(t)$, онда:

$$T_{00} = \frac{1}{2}\left(R^2(r)T^2(t) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial rR(r)T(t))}{\partial r}\right)^2 + m^2R^2(r)T^2(t)\right) \tag{12}$$

Мұндағы $R(r)$ радиалды функция.

$$T_{00} = \frac{1}{2}\left(R^2(r)T^2(t) + \frac{1}{r^2}T^2(t)\left(R(r) + r\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)^2 + m^2R^2(r)T^2(t)\right) \tag{13}$$

$$R(r) = AJ_1(kr) + BY_1(kr) \tag{14}$$

Шешімді $h(r,t)$ ауыстырып, Бессель функцияларынан үлесті табамыз.

Гравитациялық толқынның энергия тығыздығын есептеу. Жалпы салыстырмалылық теориясы мен оның модификацияларында, f(T) гравитациясы сияқты, энергияның таралуы энергия-импульс тензорымен $T_{\mu\nu}$ сипатталады. Энергия тығыздығы ρ_{GW} осы тензордың уақыттық компонентіне T_{00} сәйкес келеді:

$$T_{00} = \frac{1}{2}\left(\dot{h}^2 + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial(rh)}{\partial r}\right)^2 + m^2h^2\right) \tag{15}$$

CC BY NC

мұндағы $h(r,t)$ шешімімен берілген:

$$h(r,t) = A\frac{J_1(kr)}{r}e^{i\omega t} \tag{16}$$

$J_1(kr)$ - бірінші текті Бессель функциясы, $k = \sqrt{\omega^2 - m^2}$, А – ерікті тұрақты.

Кинетикалық энергия $\dot{h}^2$
Егер

$$\dot{h}(r,t) = \frac{\partial}{\partial t}\left(A\frac{J_1(kr)}{r}e^{i\omega t}\right) = i\omega A\frac{J_1(kr)}{r}e^{i\omega t} \tag{17}$$

Онда:

$$\dot{h}^2 = \left(i\omega A\frac{J_1(kr)}{r}e^{i\omega t}\right)\left(-i\omega A\frac{J_1(kr)}{r}e^{-i\omega t}\right) \tag{18}$$

$$(i\omega A)\cdot(-i\omega A) = -i^2\omega^2 A^2 = \omega^2 A^2 \tag{19}$$

$$\dot{h}^2 = \omega^2 A^2\frac{J_1^2(kr)}{r^2} \tag{20}$$

Кеңістіктік қисықтық $\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial(rh)}{\partial r}\right)^2$
$\frac{\partial(rh)}{\partial r}$ есептейміз:

$$rh = AJ_1(kr)e^{i\omega t}, \tag{21}$$

$$\frac{\partial(rh)}{\partial r} = A\frac{\partial J_1(kr)}{\partial r}e^{i\omega t} = AkJ_{1'}(kr)e^{i\omega t}. \tag{22}$$

Онда:

$$\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial(rh)}{\partial r}\right)^2 = \frac{1}{r^2}\left|AkJ_{1'}(kr)\right|^2 = A^2k^2\frac{J_{1'}^2(kr)}{r^2}. \tag{23}$$

Массаның үлесі m^2h^2

$$h^2 = \left|A\frac{J_1(kr)}{r}\right|^2 = A^2\frac{J_1^2(kr)}{r^2}, \tag{24}$$

$$m^2h^2 = m^2A^2\frac{J_1^2(kr)}{r^2}. \tag{25}$$

T_{00} үшін толық формула

Барлық үлестерді қорытындылай келе, келесі мәнді аламыз:

$$T_{00} = \frac{1}{2}\left(\omega^2A^2\frac{J_1^2(kr)}{r^2} + A^2k^2\frac{J_{1'}^2(kr)}{r^2} + m^2A^2\frac{J_1^2(kr)}{r^2}\right). \tag{26}$$

Ортақ факторды шығарайық:

$$T_{00} = \frac{A^2}{2r^2}\left(\omega^2J_1^2(kr) + k^2J_{1'}^2(kr) + m^2J_1^2(kr)\right). \tag{27}$$

$k^2 = \omega^2 - m^2$ қатынасын енгізсек:

$$T_{00} = \frac{A^2}{2r^2}\left((\omega^2 + m^2)J_1^2(kr) + (\omega^2 - m^2)J_{1'}^2(kr)\right). \tag{28}$$

Гравитациялық толқынның энергия тығыздығы T_{00} бірінші текті $J_1(kr)$ және олардың туындылары $J(kr)$ Бессель функциялары арқылы өрнектеледі. T_{00} -ге негізгі үлесті толқын жиілігі ω, тиімді массасы m және олардың k^2-мен байланысты комбинациялары қосады. Бұл гравитация толқындарының сипаттамаларын талдау үшін сандық есептеулерді жүргізуге мүмкіндік береді.

Неліктен уақытқа тәуелділік жойылады?

$h(r,t)$ уақытқа тәуелділік $h(r,t) = A\frac{J_1(kr)}{r}e^{i\omega t}$ шешімінде сақталады. Мұндағы $e^{i\omega t}$ гармоникалық уақытқа тәуелділікті білдіреді. Дегенмен, T_{00} өрнегін ауыстырған кезде уақытты орташалау қарастырылады, себебі энергия тығыздығы біз үшін орташа мән ретінде қарастырылады. $e^{i\omega t}$ түріндегі гармоникалық функциялар үшін келесі қатынас орындалады:

$$|e^{i\omega t}|^2 = e^{i\omega t}e^{-i\omega t} = 1 \tag{29}$$

Бұл T_{00} өрнегіндегі айқын уақытқа тәуелділіктің жойылуына әкеледі, бірақ соңғы формуладағы жиілік ω арқылы уақыт факторы ескеріледі. Осылайша, $h(r,t)$ уақытқа тәуелділік жойылмайды және оның үлесі орташалау арқылы тиімді түрде ескеріледі.

Нәтижелер мен талқылау. *Сандық есептеулер.* Модельді есептеу параметрлері:

• Толқын жиілігі $\omega = 10^{-3}$ Гц (LISA шегінде);

• Тиімді масса $m = 10^{-3}$ эВ (күңгірт энергия үлгілеріне тән);

• Радиусы: $r \in [0{,}1{,}100]$.

Бессель функцияларын есептеу және графикті салу үшін Python кітапханасын (SciPy) қолданамыз. Сандық есептеу нәтижесінде келесі мәндер алынды:

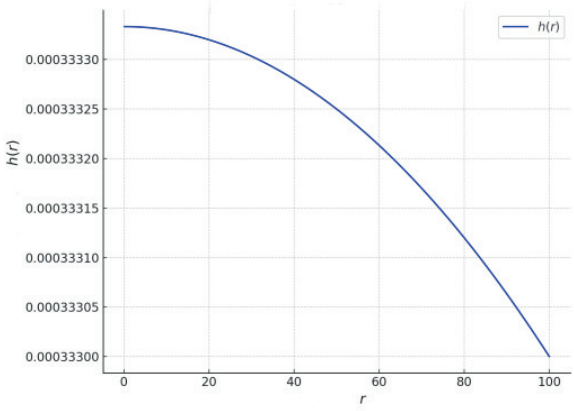
• Максималды амплитудасы: $h_{\max} \approx 0{,}00033$;

• Ең аз амплитудасы: $h_{\min} \approx 0{,}00033$;

• Максималды амплитудаға қол жеткізілетін радиус: $r_{\max} = 0{,}1$.

$h(r)$ *тәуелділік графигі*

Төмендегі суретте толқын амплитудасының $h(r)$ радиусына r тәуелділігінің графигі көрсетілген.



Сурет 1. f(T) гравитация теориясындағы гравитациялық толқынның h(r) амплитудасы

1-суретте көрсетілген h(r) амплитудасының радиалды қашықтыққа тәуелділігі f(T) теориясының өзіндік ерекшеліктерін айқындайды. Графиктен көрініп тұрғандай, r мәні артқан сайын толқын амплитудасының біртіндеп төмендеуі байқалады. Бұл құбылыс бірінші текті Бессель функциясының (J_n) қасиетіне негізделген: энергия көзден алыстаған сайын сфералық бет бойынша таралып, амплитудалық мәні азаяды. Сонымен қатар, f(T) моделіндегі тиімді массаның (m) болуы толқынның таралу сипатын Жалпы салыстырмалылық теориясынан (ЖСТ) өзгешелендіреді. Егер ЖСТ-да гравитациялық толқындар массасыз болып, жарық жылдамдығымен тараса, f(T) шеңберіндегі скалярлық режимдер дисперсияға ұшырауы мүмкін. Графиктегі қисықтың баяу өзгеруі таңдалған төмен жиілікті

(10^{-3} Гц) LISA диапазонында толқынның тұрақтылығын және оны болашақ детекторлар арқылы тіркеудің теориялық мүмкіндігін көрсетеді.

Сандық нәтижелерді физикалық интерпретациялау және детекторлармен салыстыру

Зерттеу барысында алынған сандық мәліметтер f(T) гравитациясы шеңберіндегі гравитациялық толқындардың қазіргі эксперименттік шектеулерге сәйкестігін анықтауға мүмкіндік береді:

I. **Детекторлардың сезімталдығымен салыстыру.** Есептеулерде қолданылған 10-3 Гц жиілігі болашақ LISA ғарыштық детекторының оңтайлы жұмыс диапазонына сәйкес келеді. Алынған максималды амплитуда мәні $h_{\max} \approx 0{,}00033$ теориялық тұрғыдан өте жоғары болып көрінгенімен, бұл мән таңдалған тиімді масса $m = 10^{-22}$ эВ мен бастапқы шарттарға тікелей тәуелді. LIGO/Virgo детекторлары тіркейтін жоғары жиілікті (10-1000 Гц) толқындармен салыстырғанда, біздің модельдегі төмен жиілікті скалярлық режимдер f(T) теориясының космологиялық масштабтағы әсерлерін (мысалы, Әлемнің үдемелі кеңеюін) зерттеуге қолайлы.

II. **Тиімді массаның (**m) физикалық рөлі. Модельдегі $m = 10^{-22}$ эВ мәні күңгірт энергияның қасиеттерін сипаттайтын «жеңіл» скалярлық өрістерге тән. Жалпы салыстырмалылық теориясында гравитациялық толқындар массасыз болып саналады, ал f(T) теориясындағы бұл массалық мүше толқынның таралу жылдамдығының жарық жылдамдығынан (c) сәл өзгеше болуына әкеледі. Бұл айырмашылықты GW170814 сияқты оқиғалардан алынған деректермен салыстыру арқылы f(T) параметрлеріне қатаң шектеу қоюға болады.

III. **Скалярлық поляризацияның маңызы.** ЖСТ тек екі тензорлық поляризацияны болжаса, біздің зерттеуіміз f(T) гравитациясында қосымша скалярлық режимдердің болатынын растайды. Бессель функцияларымен сипатталған амплитуданың радиалды кемуі (1-сурет) энергияның кеңістікте таралуын көрсетеді. Егер болашақ детекторлар «қосу» және «айқас» поляризацияларынан тыс сигналдарды тіркесе, бұл f(T) сияқты модификацияланған теориялардың тікелей дәлелі болмақ.

Қорытынды. Бұл жұмыста кеңістік-уақыт геометриясын қисықтықпен емес, бұралумен сипаттайтын модификацияланған гравитация теориясы f(T) шеңберінде гравитациялық толқындардың теориялық қасиеттері зерттелді. Негізгі назар гравитациялық ауытқулардың қозғалыс теңдеулерін зерттеуге және оларды сипаттау үшін Бессель функцияларын қолдануға аударылады. Зерттеу нәтижелері f(T)-гравитацияда гравитациялық толқындар стандартты ЖСТ-да кездеспейтін қосымша поляризацияға ие болуы мүмкін екенін көрсетеді. Атап айтқанда, гравитациялық толқындардың жазылған сигналдарына әсер ете алатын скалярлық режимдердің пайда болуы мүмкін. Бұл жаңа поляризациялар гравитациялық өріс теңдеулерінің модификациясынан туындайтын қосымша еркіндік дәрежелерімен байланысты. Сандық талдау гравитациялық толқындардың қозғалыс теңдеуінің шешімін сфералық Бессель функциялары арқылы өрнектеуге болатынын көрсет-

CC BY NC

ті. Бірінші текті Бессель функциялары физикалық реалистік шешімдердің шекаралық шарттарын қанағаттандыра отырып, сфералық симметриялы тұжырымда толқындық ауытқулардың динамикасын сипаттауға мүмкіндік береді.

Алынған теориялық болжамдарды гравитациялық толқын детекторларында мүмкін болатын бақылаулармен салыстыру келесі қорытындыларға әкелді:

1. f(T)-гравитациялық гравитациялық толқындардың қосымша поляризациялары өзгертілген гравитация теорияларын тексеруге мүмкіндік беретін болашақ эксперименттік бақылаулар арқылы анықталуы мүмкін.

2. Гравитациялық толқындардың амплитудасын зерттеу олардың кеңістік-уақыттағы таралу ерекшеліктерін айқындауға мүмкіндік береді.

3. Алынған сандық нәтижелер мен гравитациялық толқындардың байқалатын сипаттамалары арасындағы келісім f(T) функциясының қолайлы формаларын растай немесе шектей алады, бұл гравитацияның баламалы модельдерінің қасиеттерін нақтылауға көмектеседі.

Нәтижесінде, жүргізілген зерттеу f(T)–гравитация теориясының гравитациялық толқын детекторлары көмегімен эксперименттік тұрғыдан тексеруге болатын ықтимал байқалатын әсерлерге ие екенін айқындайды. Бұл телепараллельді гравитацияны одан әрі теориялық және эксперименттік зерттеулер үшін қызықты және перспективалы салаға айналдырады.

Болашақта жұмысты бірнеше бағытта кеңейтуге болады:

• Анизотропты кернеулердің әсерін қамтитын гравитациялық толқындарының модельдерін теориялық тұрғыдан талдау.

• Модификацияланған гравитациялық толқындардың қара құрдым және нейтрондық жұлдыздар сияқты астрофизикалық объектілермен әрекеттесуін зерттеу.

• Телепараллельдік теорияларда гравитациялық толқындардың таралуын модельдеудің дәлірек сандық әдістерін жасау. Осылайша, f(T)-гравитация аясында гравитациялық толқындардың қазіргі және болашақтағы бақылауларын пайдалану арқылы оларды тексеру тәсілдерін айқындап, альтернативті гравитациялық модельдерді зерттеуге маңызды үлес қосады.

Әдебиеттер

Aldrovandi R., Pereira J.G. (2012) Teleparallel Gravity An Introduction. Springer Dordrechts (in Eng).

Bengochea G.R., Ferraro R. (2009) Dark torsion as the cosmic speedup. Phys.Rev. D. – Vol. 79. – P. 124019. DOI: 10.1103/PhysRevD.79.124019 (in Eng).

Cai Y.F., Capozziello S., De Laurentis M., Saridakis E.N. (2016) f(T) teleparallel gravity and cosmology. Rept.Prog.Phys. – Vol. 79. – P. 106901. DOI: 10.1088/00344885/79/10/106901 (in Eng).

Capozziello S. De Laurentis M. (2011) Extended Theories of Gravity. Phys.Rept. – Vol. 509. – P. 167–321. DOI: 10.1016/j.physrep.2011.09.003 (in Eng).

Chakraborty S., Chakravarti K., Bose S., Sen Gupta S. (2018) Signatures of extra dimensions in gravitational waves from black hole quasinormal modes. Phys.Rev.D. – Vol. 97. – P. 104053. DOI: 10.1103/PhysRevD.97.104053 (in Eng).

Cho Y.M. (1976) Einstein Lagrangians Translational YangMills Lagrangian. Phys.Rev. D. – Vol. 14. – P. 2521-2525 (in Eng).

Einstein A. (1928) Riemann Geometry maintaining the concept of distant parallelism. Sitzber. Preuss. Akad. Wiss. – Vol. 17. – P. 217-221 (in Eng).

Ferraro R., Fiorini F. (2007) Modified teleparallel gravity Inflation without inflaton. Phys.Rev.D. – Vol. 75. – P.084031. DOI: 10.1103/PhysRevD.75.084031 (in Eng).

Ferraro R., Fiorini F. (2008) On Born-Infeld Gravity in Weitzenböck spacetime. Phys.Rev.D. – Vol. 78. – P. 124019. DOI: 10.1103/PhysRevD.78.124019 (in Eng).

Hayashi K. Nakano T. (1967) Extended translational invariance and associated gauge fields. Prog. Theor.Phys. – Vol. 38. – P. 491-507 (in Eng).

Hohmann M., Krššák M., Pfeifer C., Ualikhanova U. (2018) Propagation of gravitational waves in teleparallel gravity theories. Phys.Rev.D. – Vol. 98. – P. 124004. DOI: 10.1103/PhysRevD.98.124004 (in Eng).

Linder E.V. (2010) Einsteins Other Gravity and the Acceleration of the Universe. Phys.Rev.D. – Vol. 81. – P. 127301. DOI: 10.1103/PhysRevD.81.127301 (in Eng).

Lombriser L., Lima N.A. (2017) Challenges to Self-Acceleration in Modified Gravity from Gravitational Waves LargeScale Structure. Phys.Lett.B. –Vol. 765. – P. 382-385. DOI: 10.1016/j.physletb.2016.12.048 (in Eng).

Lombriser L., Taylor A. (2016) Breaking a Dark Degeneracy with Gravitational Waves. JCAP. – Vol. 03. – P. 031. DOI: 10.1088/14757516/2016/03/031 (in Eng).

Maluf J.W. (2013) The teleparallel equivalent of general relativity. Annalen Phys. – Vol. 525. – P. 339-357. DOI: 10.1002/andp.201200272 (in Eng).

Møller C. (1961) Conservation Laws Absolute Parallelism in General Relativity. K. Dan. Vidensk. Selsk.Mat.Fys.Skr. – Vol. 1. – №10. – P. 1-50 (in Eng).

Nojiri S. Odintsov S.D. (2007) Introduction to modified gravity gravitational alternative for dark energy. Int.J.Geom.Meth.Mod.Phys. – Vol. 4. – P. 115. DOI: 10.1142/S0219887807001928 (in Eng).

Sauer T. (2006) Field equations in teleparallel spacetime Einsteins distant parallelism approach to unified field theory. Historia Math. – Vol. 33. – P. 399-439. DOI: 10.1016/j.hm.2005.11.005 (in Eng).

Virgo LIGO Scientific Collaboration Abbott B.P. et al. (2016) Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger. Phys.Rev.Lett.– Vol. 116. – P. 061102. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.061102 (in Eng).

Virgo LIGO Scientific Collaboration Abbott B.P. et al. (2017) GW170814 A ThreeDetector Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Coalescence. Phys.Rev.Lett. – Vol. 119. – P. 141101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.141101 (in Eng).

References

Aldrovandi R., Pereira J.G. (2012) Teleparallel Gravity An Introduction. Springer Dordrechts (in Eng).

Bengochea G.R., Ferraro R. (2009) Dark torsion as the cosmic speedup. Phys.Rev. D. – Vol. 79. – P. 124019. DOI: 10.1103/PhysRevD.79.124019 (in Eng).

Cai Y.F., Capozziello S., De Laurentis M., Saridakis E.N. (2016) f(T) teleparallel gravity and cosmology. Rept.Prog.Phys. – Vol. 79. – P. 106901. DOI: 10.1088/00344885/79/10/106901 (in Eng).

Capozziello S. De Laurentis M. (2011) Extended Theories of Gravity. Phys.Rept. – Vol. 509. – P. 167–321. DOI: 10.1016/j.physrep.2011.09.003 (in Eng).

Chakraborty S., Chakravarti K., Bose S., Sen Gupta S. (2018) Signatures of extra dimensions in gravitational waves from black hole quasinormal modes. Phys.Rev.D. – Vol. 97. – P. 104053. DOI: 10.1103/PhysRevD.97.104053 (in Eng).

Cho Y.M. (1976) Einstein Lagrangians Translational YangMills Lagrangian. Phys.Rev. D. – Vol. 14. – P. 2521-2525 (in Eng).

Einstein A. (1928) Riemann Geometry maintaining the concept of distant parallelism. Sitzber. Preuss. Akad. Wiss. – Vol. 17. – P. 217-221 (in Eng).

Ferraro R., Fiorini F. (2007) Modified teleparallel gravity Inflation without inflaton. Phys.Rev.D. – Vol. 75. – P.084031. DOI: 10.1103/PhysRevD.75.084031 (in Eng).

Ferraro R., Fiorini F. (2008) On Born-Infeld Gravity in Weitzenböck spacetime. Phys.Rev.D. – Vol. 78. – P. 124019. DOI: 10.1103/PhysRevD.78.124019 (in Eng).

Hayashi K. Nakano T. (1967) Extended translational invariance and associated gauge fields. Prog. Theor.Phys. – Vol. 38. – P. 491-507 (in Eng).

Hohmann M., Krššák M., Pfeifer C., Ualikhanova U. (2018) Propagation of gravitational waves in teleparallel gravity theories. Phys.Rev.D. – Vol. 98. – P. 124004. DOI: 10.1103/PhysRevD.98.124004 (in Eng).

Linder E.V. (2010) Einsteins Other Gravity and the Acceleration of the Universe. Phys.Rev.D. – Vol. 81. – P. 127301. DOI: 10.1103/PhysRevD.81.127301 (in Eng).

Lombriser L., Lima N.A. (2017) Challenges to Self-Acceleration in Modified Gravity from Gravitational Waves LargeScale Structure. Phys.Lett.B. –Vol. 765. – P. 382-385. DOI: 10.1016/j.physletb.2016.12.048 (in Eng).

Lombriser L., Taylor A. (2016) Breaking a Dark Degeneracy with Gravitational Waves. JCAP. – Vol. 03. – P. 031. DOI: 10.1088/14757516/2016/03/031 (in Eng).

Maluf J.W. (2013) The teleparallel equivalent of general relativity. Annalen Phys. – Vol. 525. – P. 339-357. DOI: 10.1002/andp.201200272 (in Eng).

Møller C. (1961) Conservation Laws Absolute Parallelism in General Relativity. K. Dan. Vidensk. Selsk.Mat.Fys.Skr. – Vol. 1. – №10. – P. 1-50 (in Eng).

Nojiri S. Odintsov S.D. (2007) Introduction to modified gravity gravitational alternative for dark energy. Int.J.Geom.Meth.Mod.Phys. – Vol. 4. – P. 115. DOI: 10.1142/S0219887807001928 (in Eng).

Sauer T. (2006) Field equations in teleparallel spacetime Einsteins distant parallelism approach to unified field theory. Historia Math. – Vol. 33. – P. 399-439. DOI: 10.1016/j.hm.2005.11.005 (in Eng).

Virgo LIGO Scientific Collaboration Abbott B.P. et al. (2016) Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger. Phys.Rev.Lett.– Vol. 116. – P. 061102. DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.061102 (in Eng).

Virgo LIGO Scientific Collaboration Abbott B.P. et al. (2017) GW170814 A ThreeDetector Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Coalescence. Phys.Rev.Lett. – Vol. 119. – P. 141101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.141101 (in Eng).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 194–204

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.414

UDC: 524.3-13; 629.78.075.001.14
IRSTI: 41.23.29; 89.17.15

©Zhexenbayeva G.A.[2], Nasirova D.M.[2], Aimanova G.K.[1], Shomshekova S.A.,[1,2*] 2026.
[1]Fesenkov Astrophysical Institute (FAI), Almaty, Kazakhstan;
[2]Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan.
[*]E-mail: shomshekova@fai.kz, shomshekova.saule@gmail.com

PHOTOMETRIC STUDY OF THE SYMBIOTIC OBJECT V725 TAU

Zhexenbayeva Gulnur — PhD student, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: g.zheksenbayeva@abaiuniversity.edu.kz, https://orcid.org/0009-0009-8703-4767;
Nasirova Diana — PhD, Associate Professor, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: d.nasirova@abaiuniversity.edu.kz , https://orcid.org/0000-0002-3349-0128;
Aimanova Gauhar — Candidate of physical and mathematical sciences, Chief Researcher, Fesenkov Astrophysical Institute (FAI), Almaty, Kazakhstan,
Email: gauhar@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-3869-8913;
Shomshekova Saule — PhD, Lead Researcher, Senior Lecturer, Fesenkov Astrophysical Institute (FAI); Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

Abstract. This research presents the results of a comprehensive photometric analysis of V725 Tau (A0535+26), an object belonging to a specific class of Be/X-ray binary systems. The primary objective of the study is to characterize the photometric behavior of the object between 2025 and February 2026, monitor its brightness dynamics, and identify phases of activity. Based on observational data from the Fesenkov Astrophysical Institute (FAI), the paper provides a detailed examination of the brightness variations of the V725 Tau binary system in the B and V filters.

The study involves a comparative analysis of historical data and the object's photometric indicators in recent years. Observations conducted from January 2025 to February 2026 indicate that the system's brightness has remained at a relatively stable level, albeit with systematic oscillations. By correlating the obtained data with archival records from the All-Sky Automated Survey for Supernovae (ASAS-SN) and the American Association of Variable Star Observers (AAVSO), it is demonstrated that the object is currently in a pre-transition state leading into a new active phase. This prediction is associated with the evolution of the Be-disk, the strengthening of emission lines, and interaction with the neutron star.

The scientific significance of this work lies in explaining the processes of mass transfer, the formation of accretion disks, and the dynamics of the circumstellar environment in X-ray binaries. The findings allow for the refinement of the physical parameters of X-ray binary systems and the prediction of future «giant outbursts.» Thus, regular photometric monitoring of the V725 Tau (A0535+26) X-ray binary serves as a vital source of information for studying fundamental astrophysical processes.

Keywords: variable stars, symbiotic stars, neutron star, V725 Tau, photometry, light curve, accretion disk

Funding: *This work was carried out within the framework of the program No. BR24992759 "Development of the concept for the first Kazakhstani orbital cislunar telescope – Phase I", funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan.*

For citations: *Zhexenbayeva G.A., Nasirova D.M., Aimanova G.K., Shomshekova S.A. Photometric Study of the Symbiotic Object V725 Tau. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 194–204. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.414*

©Жексенбаева Г.А.[2], Насирова Д.М.[2], Айманова Г.К.[1], Шомшекова С.А.[1,2*], 2026.

[1]В.Г. Фесенков атындағы астрофизика институты (АФИ), Алматы, Қазақстан;
[2]Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.
*E-mail: shomshekova@fai.kz, shomshekova.saule@gmail.com

V725 TAU СИМБИОТИКАЛЫҚ ОБЪЕКТІСІН ФОТОМЕТРЛІК ЗЕРТТЕУ

Жексенбаева Гульнур — PhD докторант, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: g.zheksenbayeva@abaiuniversity.edu.kz, https://orcid.org/0009-0009-8703-4767;
Насирова Диана — PhD, қауымдастырылған профессор, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: d.nasirova@abaiuniversity.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-3349-0128;
Айманова Гаухар — физика-математика ғылымдарының кандидаты, бас ғылыми қызметкер, В.Г. Фесенков атындағы астрофизика институты (АФИ), Алматы, Қазақстан,
Email: gauhar@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-3869-8913;
Шомшекова Сауле — PhD, жетекші ғылыми қызметкер, аға оқытушы, В.Г. Фесенков атындағы астрофизика институты (АФИ); Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
Email: shomshekova@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-9841-453X.

Аннотация. Бұл зерттеу жұмысы рентгендік қос жұлдыздар жүйесінің ерекше класына жататын V725 Tau (A0535+26) объектісіне жүргізілген кешенді фотометрлік талдау нәтижелерін ұсынады. Зерттеудің негізгі мақсаты - объектінің 2025 пен 2026 жылдың қаңтар-ақпан айлары аралығындағы фотометрлік бейнесін

көрсету, оның жарықтылық динамикасын бақылау және белсенділік фазаларын анықтау болып табылады. Мақалада В.Г. Фесенков атындағы Астрофизика институтының (FAI) бақылау мәліметтері негізінде V725 Tau қос жүйесінің B және V сүзгілеріндегі жарықтылық өзгерістері жан-жақты қарастырылған.

Зерттеу барысында объектінің мұрағаттық деректері мен жаңадан алынған фотометрлік көрсеткіштеріне салыстырмалы талдау жасалып отыр. 2025 жылдың қаңтары мен 2026 жылдың ақпаны аралығындағы бақылаулар жүйенің жарықтылық деңгейінің белгілі бір тұрақты деңгейде сақталғанын, бірақ жүйелі тербелістердің бар екенін көрсетті. Жаңадан алынған мәліметтер мен All-Sky Automated Survey for Supernovae (ASAS-SN) және American Association of Variable Star Observers (AAVSO) базаларының мұрағаттық мәліметтерін салыстыру нәтижесінде объектінің қазіргі уақытта жаңа белсенді фазаға өту алдындағы күйде тұрғаны дәлелденді. Бұл болжам Ве-дискісінің эволюциясымен, эмиссиялық сызықтардың күшеюімен және де нейтрондық жұлдызбен әрекеттесуімен байланыстырылады.

Жұмыстың ғылыми маңыздылығы рентгендік қос жүйелердегі зат алмасу, аккрециялық дискілердің қалыптасуы және жұлдыз маңындағы ортаның динамикасын түсіндіруде жатыр. Зерттеу нәтижелері рентгендік қос жүйелердің физикалық параметрлерін нақтылауға және олардың болашақтағы «алып жарқылдарын» (giant outbursts) болжауға мүмкіндік береді. Осыдан, V725 Tau (A0535+26) рентгендік қос жүйесін тұрақты түрде фотометрлік бақылау жасау астрофизикалық процестерді зерттеу кезіндегі аса маңызды мәлімет көзі болып табылады.

Түйін сөздер: айнымалы жұлдыздар, симбиотикалық жұлдыздар, нейтрондық жұлдыз, V725 Tau**,** фотометрия, жарқырау қисығы, аккрециялық диск

©Жексенбаева Г.А.[2], Насирова Д.М.[2], Айманова Г.К.[1], Шомшекова С.А.[1,2 *], 2026.

[1]Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова (АФИФ), Алматы, Казахстан;
[2]Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан.
[*]E-mail: shomshekova@fai.kz, shomshekova.saule@gmail.com

ФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СИМБИОТИЧЕСКОГО ОБЪЕКТА V725 TAU

Жексенбаева Гульнур — PhD докторант, Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: g.zheksenbayeva@abaiuniversity.edu.kz, https://orcid.org/0009-0009-8703-4767;
Насирова Диана — PhD, ассоциированный профессор, Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: d.nasirova@abaiuniversity.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-3349-0128;
Айманова Гаухар — кандидат физико-математических наук, главный научный сотрудник, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова (АФИФ), Алматы, Казахстан,
Email: gauhar@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-3869-8913;
Шомшекова Сауле — PhD, ведущий научный сотрудник, старший преподаватель, Астрофизический

институт имени В.Г. Фесенкова (АФИФ), Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
Email: shomshekova@fai.kz, https://orcid.org/0000-0002-9841-453X.

Аннотация. Данная работа представляет результаты фотометрического анализа объекта V725 Tau (A0535+26), принадлежащего к особому классу рентгеновских двойных звездных систем. Основная цель исследования заключается в описании фотометрического состояния объекта в период с января 2025 года по февраль 2026 года, анализе динамики его блеска и определении фаз активности. В статье на основе наблюдательных данных Астрофизического института имени В.Г. Фесенкова (FAI) детально рассмотрены изменения яркости двойной системы V725 Tau в фильтрах B и V. В ходе исследования проведен сравнительный анализ исторических данных и фотометрических характеристик объекта за последние годы. Наблюдения, выполненные с января 2025 года по февраль 2026 года, показали, что уровень яркости системы сохранялся на относительно стабильном уровне, однако при этом наблюдались систематические колебания. В результате сопоставления полученных данных с архивными материалами баз All-Sky Automated Survey for Supernovae (ASAS-SN) и American Association of Variable Star Observers (AAVSO) показано, что в настоящее время объект, вероятно, находится в состоянии, предшествующем переходу в новую активную фазу. Данный прогноз связывается с эволюцией Be-диска, усилением эмиссионных линий и взаимодействием с нейтронной звездой. Научная значимость работы заключается в углублении понимания процессов обмена веществом, формирования аккреционных дисков и динамики околозвездной среды в рентгеновских двойных системах. Полученные результаты позволяют уточнить физические параметры подобных систем и прогнозировать их будущие гигантские вспышки (giant outbursts). Таким образом, регулярный фотометрический мониторинг рентгеновской двойной системы V725 Tau (A0535+26) является важным источником информации для изучения соответствующих астрофизических процессов.

Ключевые слова: переменные звезды, симбиотические звезды, нейтронная звезда, V725 Tau, фотометрия, кривая блеска, аккреционный диск

Кіріспе. Қазіргі астрофизикада қос жұлдыздар маңызды рөл атқарады, себебі Ғаламдағы жұлдыздардың басым бөлігі гравитациялық байланысқан жүйелерде қалыптасады және эволюцияланады. Мұндай жүйелерде құраушылардың өзара байланысуы олардың эволюциялық траекториясын және де бақыланатын сипаттамаларын айтарлықтай өзгерте алады.

Зат алмасу және жұлдыздық ортаның сәулеленуі тәрізді басты факторларға байланысты өзара әрекеттесетін қос жүйелер қызығушылық тудырады. Бұл класқа симбиотикалық жұлдыздар жатады – ол алып жұлдыз бен ақ ергежейден тұратын, өзара байланысатын күрделі спектрлік және фотометрлік көріністің қалыптасуына алып келетін эволюциялық дамыған қос жүйелер (Gaudin et al., 2022).

Қарапайым қос жұлдыздарға қарағанда симбиотикалық жұлдыздар жүйесіндегі объектілер ортақ масса центрінен айналуы арқылы бір біріне белсенді түрде әсер

ете алады. Осындай жүйеге көбінде суық алып жұлдыз бен ыстық ақ ергежейлі, кейде нейтрондық жұлдыз да кіреді. Алып жұлдыз жұлдыз желі арқылы өзінің затын жоғалтса, шағын серік бұл затты өзіне жұтып отырады. Бұл зат қызады да ультракүлгін немесе рентген диапазонында жарқырай бастайды. Мұндай жүйенің спектрінде бір мезгілде екі дененің де, яғни ыстық және суық объектінің да белгілері көрінеді. Нәтижесінде, жүйе спектрінде молекулалық сызықтары бар суық жұлдыз, ультракүлгін мен рентген көздері бар ыстық жұлдыз және олардың арасындағы иондалған газ бір мезгілде пайда болады (Lee et al., 2022; Kondratyeva et al., 2021).

Симбиотикалық жұлдыздардың спектрлік және фотометрлік айнымалылығы бірнеше механизмдерге жүгінеді:

1. Құраушылардың жалпы массаларының центрінен орбиталық айналу қозғалысы.
2. Суық құраушысының лүпілдеуі.
3. Ыстық құраушының жарқ ету белсенділігі
4. Тұрақсыз күйден туындайтын массаның шығыны, қабықшаның физикалық процестерге ұшырауы мен құрылымының өзгеруі (Kondratyeva et al., 2020)

Симбиотикалық жұлдыздарды зерттеу астрофизиктерге үлкен қызығушылық тудырады, себебі олар масса алмасуды зерттейтін табиғи зертханалар ретінде қарастырылады және жаңа жұлдыздардың жарқылының бастаушысы болуы да мүмкін. Сонымен қатар, бір симбиотикалық жүйе, ол бір мезгілде жұмыс жасайтын бірнеше табиғи физикалық зертханалар деп айтсақ болады. Олардың негізінде затты қармаудың түрлі модельдерін, аккрециялық дискілер мен ағындардың (бұл жерде осы параметрлер өте баяу өзгереді және оны бақылауға қолайлы) қалыптасу процесін, сонымен қатар, жұлдыздардың соңғы эволюциялық кезеңдерін (жүйеде екі түрлі эволюциялық кезеңіндегі жұлдыздар болады) зерттеуге, сондай-ақ, симбиотикалық жүйелер ергежей жұлдыздың бетіндегі ядролық реакцияларды зерттеуге мүмкіндік береді (Merc et al., 2022; Petit et al., 2023).

Сондай қызықты объектілердің бірі V725 Tau болып келеді, жұмыстың негізгі міндеті осы объектінің фотометрлік айнымалылығын зерттеу болып табылады.

V725 Tau=A0535+26 объектісі қызыл алыптан HD245770 (спектрлік класы O9.7-B0) және нейтрондық жұлдыздан, яғни X-Ray пульсардан тұратын қос жұлдыздар жүйесіне жатады. Нейтрондық жұлдыздың өз осінен айналуына байланысты жарқыраудың лүпілдеуінің периоды 103 секундтқа тең. Оның орбиталық периоды 1,38±0,11 күнді құрайды, ал орбита эксцентриситеті шамамен 0,46 тең (Motch et al., 1991).

Бұл объектіні зерттеумен бірқатар ғалымдар айналысқан. Көпжылдық зерттеулер негізінде бұл қос жүйенің физикалық сипаттамалары мен белсенділік механизмдеріне келесідей әдеби шолу жасауға болады.

Зерттеу материалдары. Лютый В.М., Зайцева Г.В., мақаласында 1898 жылдан бастап 1998 жылға дейінгі мәліметтерді талдау арқылы жұлдыз белсенділігінің үш фазасынан (B, Be және Be-shell) өткенін көрсеткен. Бұл қос жүйе 1970 жылдарға дейін тыныштық күйінде болды, содан кейін 1970-1997 жылдар аралығында қатты

CC BY NC

қуатпен заттың шығуынан және жұлдыз маңындағы дискінің қалыптасуымен сипатталатын белсенді фаза басталды. Бұл жарықтылықтың $\Delta V \approx 0{,}55^{m}$ шамасына артуына әкелді. 1998 жылы жарықтылық минимумға жетті, бұл белсенді фазаның уақытша аяқталғанын және дискінің ыдырағанын білдіреді (Lyuty et al., 2000).

Moritani K., және т.б. зерттеулерінде Be-дискісінің құрылымы мен динамикасы қарастырылған. Жүйенің оптикалық өзгергіштігінің негізгі көзі - жұлдыз маңындағы Be-дискісі, ал нейтрондық жұлдыз айналасындағы аккрециялық дискінің оптикалық диапазондағы үлесі небәрі бірнеше пайыз деп бағаланады. Зерттеулер дискінің бірнеше ерекшеліктерін анықтады. Олар, эмиссиялық сызықтардың күлгін (V) және қызыл (R) шыңдарының қатынасы шамамен 500 күндік кезеңмен өзгеретіндігін; Доплерлік томография әдісімен дискіде тығыздық толқынының бар екендігі дәлелденді, бұл дискінің құрылымын асимметриялық етеді; жоғары белсенділік кезеңдерінде (2008-2011жж.) диск толқындық күштермен деформацияланып, орбита жазықтығына қатысты еңіс болады. Бұл деформацияланған дискінің прецессия кезеңі шамамен 674-886 күнді құрайды (Moritani et al., 2011).

Moritani K., және т.б. тағы бір еңбегінде алып жарқылдар мен газ ағындары туралы жазды. Жүйенің рентгендік белсенділігі Be-дискісінің күйіне тікелей байланысты. 2009 және 2011 жылдардағыдай алып жарқылдар Be-дискісі қатты ұлғайып, периастрдағы Рош қуысының радиусынан асқан кезде пайда болады. 2009 жылғы жарқыл кезінде α сызықтарының профильдерінде «blue shoulder» байқалды, бұл Be-дискінің сыртқы бөлігінен нейтрондық жұлдызға бағытталған тығыз газ ағынының тікелей дәлелі болып табылады. Бальмер сериясы мен гелий сызықтарында үш шыңы бар күрделі профильдердің пайда болуы жарқыл алдында дискінің физикалық жағдайындағы күшті қозғалыстарды көрсетеді (Moritani et al., 2010).

2013 жылы жарық көрген Moritani K., және т.б. мақаласында оптикалық және рентгендік сәулелену арасындағы байланыс туралы зерттеулерін жариялады. Зерттеулер нәтижесі бойынша оптикалық жарықтылықтың шыңы рентгендік жарқылдан шамамен 8 күн бұрын болады. Бұл уақыт заттың уақытша акрециялық диск арқылы нейтрондық жұлдыз бетіне дейінгі радиалды қозғалыс кезеңі ретінде түсіндіріледі (Moritani et al., 2013).

Kondratyeva L., және т.б. жұмысында V725 Tau=A0535+26 объектісін B, V, Rc сүзгілерінде жарықтылықтың ~0.4 шамасында тұрақсыз айнымалылығы байқалғанын зерттеген, жалпы алғанда оның деңгейі орташа мәндерге сәйкес келеді. Hβ және Hα эмиссиялық сызықтарындағы сәулеленудің абсолюттік ағындары мен олардың эквиваленттік ені туралы мәліметтер алынды. Сызықтардың профильдері екі құраушыдан тұрады. «Көк» және «қызыл» құраушылардың максималды қарқындылықтарының қатынасы (V/R) әр кезеңде 0.5 - 2.5 аралығында өзгереді. Байқалатын айнымалылықтың ықтимал көздеріне талдау жасалды. V/R қатынасы объектінің жарықтылығына, сызықтардың қарқындылығына және олардың эквиваленттік еніне тәуелді емес екені анықталды. Сонымен қатар, рентгендік жұлдыздың орбитадағы орны да бұл қатынасқа әсер

етпейді. Спектрлік сызықтардағы V/R қатынасының өзгеруінде P = 491 күн болатын жаңа период анықталды. 2010–2016 жылдар аралығындағы спектрлік және фотометрлік деректер талданған. Объектіде қазіргі уақытта аккрециялық дискіні қалпына келтіру процесі жүріп жатыр. Ерекшелігін айтсақ, 2013 жылы басталған жарықтылықтың өсуі күтілгендей «алып жарқылға» ұласпаған, бұл жүйенің болжап болмайтын күйін көрсетеді. Себебі спектрдегі өзгерістер жұлдыз маңындағы дискіде газдың біркелкі таралмауынан болып отыр (Kondratyeva et al., 2016).

Nikolov Y.M., және т.б. мақаласында рентгендік қос жұлдыздар арасындағы жұтылуды қарастырған. Солтүстік жарты шардың 9 рентгендік қос жүйесін зерттеген. Негізгі міндеті, осы берілген объектілердің арасындағы жұлдызаралық жұтылуды есептеу. Жұлдызаралық жұтылуды анықтау үшін калийдің сызығы (7699 Å) және диффузиялық жұлдызаралық жолақтар (DIBs) әдістері қолданылды. Мақалада әрбір жұлдыз жүйесінің құрамы мен жаңадан есептелген мәндер берілген. V725 Tau=A0535+26 бұл объект үшін бұрынғы есептеулерден (0,77±0,04) жоғарырақ мәнді (1,045±0,058) анықтаған. Зерттеу нәтижелері көп жағдайда бұрын жарияланған деректермен сәйкес келген. Бұл қолданылған әдістердің рентгендік қос жүйелер үшін тиімді екенін дәлелдейді. Бұл мақалада алынған деректер алдыдағы уақытта осы жүйелердің теориялық модельдерін жасау үшін пайдалы болмақ (Nikolov et al., 2017).

Кондратьева Л. Н., және т.б. V725 Tau=A0535+26 объектісінің соңғы даму күйін және белсенді рентгендік фазаға өтуінің алдын ала белгілерін анықтауға бағытталған. 2017-2020 жылдар аралығындағы жүргізілген жүйелі фотометрлік және спектрлік бақылауларды талдау нәтижесінде бірнеше маңызды қорытындыларға келген. Олар: 3 жыл бойы жарықтылық деңгейі жоғары болып, ал 2019 жылдың аяғына қарай оның төмендеуі байқалған. 2016 жылдан бастап Hβ және Hα эмиссиялық сызықтарындағы сәулелену ағындарының біртіндеп артуы байқалған. Ал бұл сызықтардың эквиваленттік ені (EW(Hα)= 17A, EW(Hβ)= 2.9A) 2009 жылы болған үлкен рентгендік жарқыл кезінде тіркелген (-25A) мәніне әлі жеткен жоқ, бірақ 2011 жылы көрсеткен белсенді фазалар кезінде алынған нәтижелерден біршама жоғары (-10A) екендігін көрсеткен. Осындай параметрлер жиынтығы зерттеу объектісінің белсенді фазасының басталуы алдындағы күйіне тән екендігін көрсетті (Kondratyeva et al., 2020).

Ramsay G., және т.б. зерттеулері жоғары массалы рентгендік қос жүйелердің (HMXB) оптикалық сериктестеріндегі пульсацияларды жүйелі түрде талдауға арналған. TESS (Transiting Exoplanet Survey Satellite) деректерін пайдалана отырып, авторлар 23 нысанның барлығында дерлік (100%) квазипериодтық айнымалылықтың бар екенін анықтады. Бұл ерте спектрлік кластағы (OB және Be) жұлдыздардың ішкі құрылымы мен динамикасын түсінудегі маңызды қадам болып табылады. Мақалада ерекше назар аударылған нысандардың бірі — V725 Tau. Зерттеу барысында келесідей маңызды деректер анықталды: TESS бақылаулары кезінде V725 Tau жүйесінде айқын оптикалық жарқыл тіркелді. Ең маңыздысы, бұл құбылыс рентгендік жарқылмен (X-ray outburst) бір уақытта

орын алып, жүйенің жоғары белсенділігін көрсетті. Жарқыл мен ұзақ мерзімді вариациялар жойылғаннан кейін (detrending), деректерден ~0.48 тәулік периоды бар айқын сигнал табылды. Бұл сигнал жұлдыздың g-модалы пульсацияларымен байланысты болуы мүмкін. V725 Tau объектісіндегі мұндай айнымалылық Be-жұлдыздың айналасындағы аккрециялық дисктің күйі мен оның нейтрондық жұлдызбен әрекеттесуі туралы құнды ақпарат береді (Ramsay et al., 2022).

Жоғарыда қарастырылған мақалаларға сүйене отырып, V725 Tau=A0535+26 объектісіне В.Г. Фесенков атындағы Астрофизика институтында 2025-2026 фотометрлік бақылаулар жүргізілді және жаңа мәліметтер алынды, алынған мәліметтерге өңдеулер және талдаулар жүргізілді жасалды.

Зерттеу әдістері. Аспан объектілерінің жарқырауы мен түсін өлшейтін әдістердің бірі фотометрлік әдіс. Астрономиялық объектілердің сәулелену энергиясының спектрлік үлестірілуін сипаттау үшін олардың жұлдыздық шамалары немесе сәулелену ағындары жиі белгілі бір фотометрлік жолақтарда (толқын ұзындығы аралықтарында) өлшенеді. Мұндай жолақтардың жиынтығы фотометрлік жүйе деп аталады. Белгілі бір жолақтағы сәулеленуді өткізетін арнайы сүзгілер қолданылады (Osipov et al., 2023).

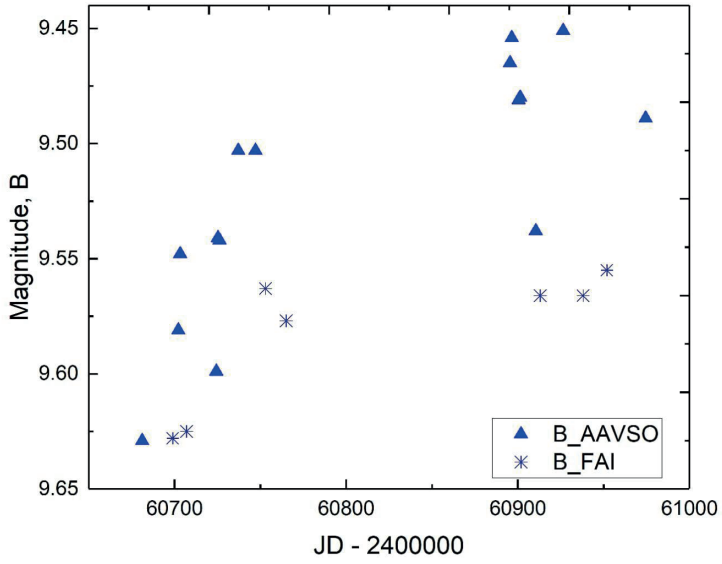
Қазіргі уақытта тұрақты түрде фотометрлік бақылаулар Тянь-Шань Астрономиялық обсерваториясының (ТШАО) «Шығыс» деп аталатын, Карл Цейсс Йена фирмасының 1 метрлік телескобында жүргізілді. Жарықтылықты тіркеу үшін Apogee фирмасының Alta F16M (4096x4096, 9μm) ПЗС-камерасы және Джонсон жүйесіндегі B, V, Rc сүзгілер жиынтығы қолданылды. Бұл объект үшін фотометрлік стандарттар ретінде объектіге жақын орналасқан HD 245816, HD 245817, TYC 1865-1869 жұлдыздары пайдаланылды. Кескіндерді алғашқы өңдеуде Bias, Dark және Flat файлдарын қолдану арқылы стандартты операциялар орындалады. Кескіндерді өлшеу MaximDl 6 стандартты бағдарламасын пайдалану арқылы орындалған. Атмосфералық экстинкцияны ескеру және алынған аспаптық жарықтылық бағалауларын стандартты жүйеге келтіру объекті мен стандарттың түс көрсеткіштерінің айырмашылығын ескеретін тиісті теңдеулер жүйесінің көмегімен жүзеге асырылады (Kondratyeva et al., 2020).

Нәтижелер мен талқылаулар. Бұл мақалада B және V сүзгілерінен алынған фотометрлік мәліметтер қарастырылды. Фотометрлік жұлдыздық шамаларды өлшеулердің апертурасы 12″.

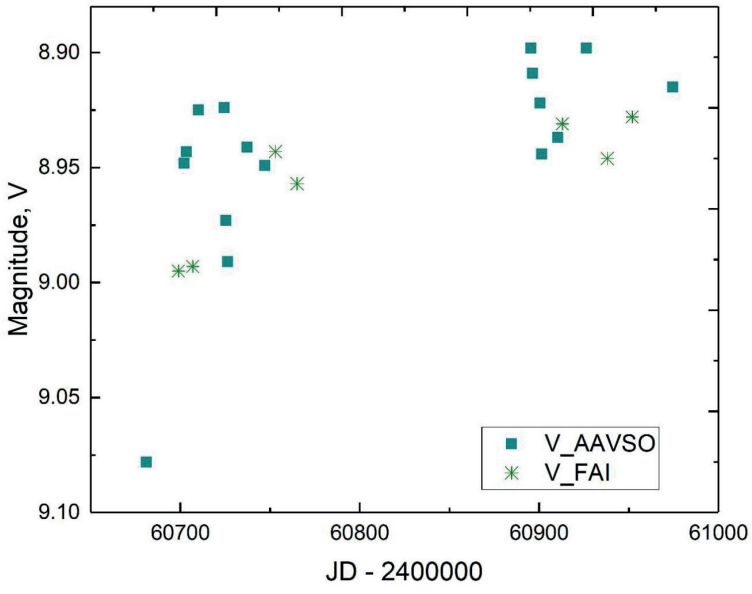
Кесте 1 - V725 Tau объектісінің B және V сүзгілеріндегі жарқырауы

Бақылау мерзімдері	JD	JD-2400000	B	V
24.01.2025	2460699	60699	9,628±0,017	8,995±0,014
01.02.2025	2460707	60707	9,625±0,017	8,993±0,012
19.03.2025	2460753	60753	9,563±0,015	8,943±0,011
31.03.2025	2460765	60765	9,577±0,012	8,957±0,011
26.08.2025	2460913	60913	9,566±0,014	8,931±0,009
20.09.2025	2460938	60938	9,566±0,015	8,946±0,009
04.10.2025	2460952	60952	9,555±0,011	8,928±0,008
25.11.2025	2461004	61004	9,552±0,015	8,948±0,010

22.12.2025	2461031	61031	9,534±0,017	8,925±0,010
05.01.2026	2461045	61045	9,543±0,015	8,924±0,010
01.02.2026	2461072	61072	9,574±0,012	8,934±0,009
08.02.2026	2461079	61079	9,561±0,012	8,922±0,008

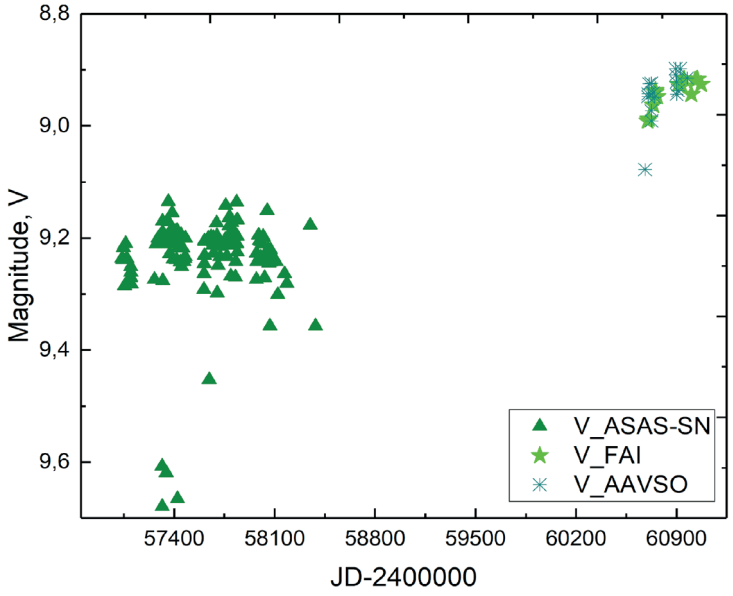


Сурет 1 - V725 Tau объектісінің 2025-2026 жылдардағы B сүзгісінен алынған жарқыраудың өзгерісі



Сурет 2 - V725 Tau объектісінің 2025-2026 жылдардағы V сүзгісінен алынған жарқыраудың өзгерісі

V725 Tau объектісі бойынша жасалған фотометрлік бақылауларының нәтижелері 1-кесте мен 1-, 2-суреттерде берілген. V725 Tau объектісінің өзгерісі бойынша нақты әрі толық мәлімет беру үшін 3-суретте бақылау деректері қосылып берілген. Бұл деректер ASAS-SN, FAI, AAVSO базаларынан алынған мұрағаттық деректер. FAI фотометірлік бақылаулары 2025-2026 жылдар аралығында V725 Tau объектісінің жарқырау қисықтары (1-2 суреттер) үшін амплитуда мәндері $\Delta B=0^m.094$, $\Delta V=0^m.073$ көрсетті. Ал, AAVSO екі сүзгінің айнымалылық амплитудасы шамамен $0^m.18$ деңгейінде бағаланды.



Сурет 3 - V725 Tau объектісінің V сүзгісінен алынған жарқыраудың өзгерісі (ASAS-SN, FAI, AAVSO)

V725 Tau объектісінің жарықтылығының айтарлықтай, бірақ қысқа мерзімді артуы 2013 жылдың бас кезінде тіркелген. Жарықтылықтың жаңадан көтерілуі болса 2015 жылдың желтоқсанынан басталған, ал рентгендік диапазондағы (4-10кэВ) сәулелену ағынының айтарлықтай күшеюі 2016 жылдың сәуірінде тіркелген (Iwakiri et al., 2016).

Қорытынды. Бұл жұмыста V725 Tau объектісінің осыған дейінгі жасалған зерттеулерге шолу жүргізу арқылы оның даму эволюциясының күрделілігін және динамикасының айнымалылығын түсінуге мүмкіндік берді. 2025 пен 2026 жылдар аралығында В.Г. Фесенков атындағы Астрофизика институтында жинақталған жаңа бақылау фотометрлік мәліметтері қос жүйенің қазіргі кездегі сипатын бағалауға мүмкіндік берді. Ве дискісінің эволюциясы мен нейтрондық жұлдыздың бір бірімен өзара әсерлесуі V725 Tau қос жүйесінің жарықтылығындағы өзгерістерге тікелей қатысты. 2025 жылдың қаңтар айынан бастап, 2026 жылдың ақпан айы аралығында жүргізілген бақылаулар В мен

V сүзгілеріндегі жарықтылықтың қандай да бір деңгейде сақталып, тұрақты түрде өзгеріп отыратындығы көрсетілді. Жаңа фотометрлік мәліметтерді және мұрағаттық мәліметтерді талдай келе, жақында V725 Tau объектісінің келесі алып (рентгендік) жарқылы болуы мүмкін екенін айтуға болады.

Бұл зерттеу V725 Tau объектісін жүйелі түрде бақылаудың құраушылар арасындағы зат алмасу мен аккреция механизмдерін зерттеудегі маңызын көрсетеді; алынған нәтижелер болашақ спектрлік зерттеулермен ұштастырылған ұзақмерзімді оптикалық фотометриялық бақылаулар базасын қалыптастыруға негіз болып, жұмыстың ғылыми құндылығын айтарлықтай күшейтеді.

References

Astrofotometriya (2023) [Astrophotometry]. Bol'shaya Rossiyskaya entsiklopediya [Great Russian Encyclopedia]: ed. Yu.S. Osipov. – Moscow: Bol'shaya Rossiyskaya entsiklopediya, 2004-2017. – Electronic version. URL: https://bigenc.ru/c/astrofotometriia-88c07d (in Russian.)

Gaudin T., Norris R., Greech-Eakman M. (2022) Investigation of Mass Transfer in Symbiotic Stars. BAS. – Vol. 54. – No. 6. (in Eng.)

Iwakiri W., Serino M., Takagi T. et al. (2016) MAXI/GSC detection of a new X-ray outburst from A 0535+262. The Astronomer's Telegram. – №8977. (in Eng.)

Kondratyeva L., Reva I., Aimanova G., et al. (2021) Active stage of the symbiotic object V694 Mon in 2018-2021. Ap 64. – P. 306. DOI:10.1007/s10511-021-09691-2. (in Eng.)

Kondratyeva L., Reva I., Krugov M. , et al. (2020) The outburst of the symbiotic star BX Monocerotis in 2019. NewA 75 id101304. DOI:10.1016/j.newast.2019.101304, (in Eng.)

Kondratyeva L., Rspaev F., Aimuratov Ye. et. al. (2016) News of the National Acad. of Sci. Republ. Kazakhstan. – V.5. – P. 12. (in Eng.)

Kondratyeva L.N., Denisyuk E.K., Reva I.V., et al. (2020). Fotometricheskiye i spektral'nyye issledovaniya ob»yekta Be/X-ray binary V725 Tau = A 0535+262 [Photometric and spectral studies of the Be/X-ray binary V725 Tau = A 0535+262]. Astrofizika [Astrophysics], 63(3). – P. 345-358. (in Russian.)

Lee Y.-M., Kmm H., Lee H.-W. (2022) Formation of the Asymmetric Accretion Disk from Stellar Wind Accretion in an S-type Symbiotic Star. ApJ 931. – P. 142. DOI: 10.3847/1538-4357/ac67d6. (in Eng.)

Lyuty V.M., & Zaitseva G.V. (2000). Sto let nablyudeniy Be-zvezdy HDE 245770 (V725 Tau/A0535+26): fotometricheskaya istoriya, preryvistaya obolochka i fizicheskiye parametry [One hundred years of observations of the Be star HDE 245770 (V725 Tau/A0535+26): Photometric history, intermittent shell, and physical parameters]. Pis'ma v Astronomicheskiy Zhurnal [Astronomy Letters], 26(11). – P. 835-849. (in Russian.)

Merc J., Galis R., Wolf M., et al. (2022) Hen 3-860: new southern eclipsing symbiotic star observed in the outburst. MNRAS 510. – P. 14. DOI: 10.1093/mnras/stab3512 (in Eng.)

Moritani K. et al. (2013) Precessing Warped Be Disk as the Origin of Giant Outbursts in the Be/X-Ray Binary A0535+262. Publications of the Astronomical Society of Japan. – Vol. 65. – №4. – Art. 83. (in Eng.)

Moritani K., Nogami D., Okazaki A. T. et al. (2010) Long-Term V/R Variations of the Be/X-Ray Binary A0535+262/V725 Tau. Publications of the Astronomical Society of Japan. – Vol. 62. – №2. – P. 391-400. (in Eng.)

Moritani K., Nogami D., Okazaki A. T. et al. (2011) High-Resolution Spectroscopy of the Be/X-Ray Binary A0535+262/V725 Tau during the 2009 Giant Outburst. Publications of the Astronomical Society of Japan. – Vol. 63. – № 1. – P. L25–L29. DOI: 10.1093/pasj/65.4.83 (in Eng.)

Motch C., Stella L., et al. (1991) Accretion mechanisms in the Be/X ray transient system A0535+26. ApJ. – V.369. – P. 490. DOI: 10.1086/169779 (in Eng.)

Nikolov Y.M., Zamanov R.K., Stoyanov K.A., Marty J. (2017) Interstellar extinction toward Be/X-ray binary stars. Bulgarian Astronomical Journal. – Vol. 27. – P. 30-43. (in Eng.)

Petit P., Mers J., Galis R., et al. (2023) DeGaPe 35: Amateur discovery of a new southern symbiotic star. NewA 9801943P. DOI:10.1016/j.newast.2022.101943. (in Eng.)

Ramsay G., Hakala P., Charles P.A. (2022) A TESS search for donor-star pulsations in high-mass X-ray binaries. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – Vol. 516. – I. 1. – P. 1219-1236. DOI: 10.1093/mnras/stac2223 (in Eng.)

url: http://asas-sn.ifa.hawaii.edu/ Query date:13.01.2026

url: https://apps.aavso.org/ Query date:12.01.2026

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 205–224

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.415

UDC: 524.8
IRSTI: 41.03.01

©Zhusupova N.K.[1], Zhadyranova A.A.[2]*, 2026.
[1]Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan;
[2]L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.
*E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com

BOUNCE COSMOLOGY IN $f(T,\mathcal{T})$ GRAVITY BASED ON ENERGY CONDITION ANALYSIS

Zhusupova Nazym — PhD student, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan, E-mail: zhnaz88@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-8900-0829;
Zhadyranova Aliya — PhD, Senior Lecturer, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.
E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-1153-3438.

Abstract. This article investigates cosmological dynamics within the framework of modified torsional gravity $f(T,\mathcal{T})$, where the gravitational action depends on the torsion scalar and the trace of the matter energy–momentum tensor $\mathcal{T}$. This formulation allows for a direct coupling between geometry and matter and enables the study of evolutionary scenarios beyond standard cosmological expansion. The analysis is performed for a spatially homogeneous and isotropic Friedmann–Lemaître–Robertson–Walker geometry. A parametrized scale factor is adopted to ensure regular behavior of the dynamical variables and to describe a cosmological bounce, in which a contracting phase smoothly transitions into an expanding one. Analytical expressions for the energy density, pressure, and equation-of-state parameter are derived, and their behavior near the transition region is examined. It is shown that the expansion rate vanishes at the bounce, signaling a change in the evolutionary regime. Around this point, the energy density reaches a maximum before decreasing, while the pressure remains negative. The equation-of-state parameter temporarily departs from standard regimes, accompanied by violations of the null and strong energy conditions. Meanwhile, the dominant energy condition remains satisfied, indicating the physical consistency of the model.

These results demonstrate that both linear and nonlinear realizations of $f(T,\mathcal{T})$ gravity successfully capture the key features of cosmological bounce scenarios and provide a viable framework for exploring alternative evolutionary paths of the early Universe.

Keywords: modified gravity, $f(T,\mathcal{T})$ theory, torsion, cosmological bounce, energy conditions

Financing. *This work is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan, Grant No. AP26194585 Gravitational wave and observational estimates of the constraints of cosmological models with non-minimal coupling.*

For citations: *Zhusupova N.K., Zhadyranova A.A. Bounce Cosmology in Gravity Based on Energy Condition Analysis. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 205–224. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.415*

©Жусупова Н.К.[1], Жадыранова А.А.[2]*, 2026.
[1]Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан;
[2]Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.
*E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com

ЭНЕРГИЯ ШАРТТАРЫН ТАЛДАУҒА НЕГІЗДЕЛГЕН $f(T,\mathcal{T})$ СЕРПІЛІС КОСМОЛОГИЯСЫ

Жусупова Назым — PhD докторант, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: zhnaz88@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-8900-0829;
Жадыранова Алия Амирбековна — PhD, аға оқытушы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-1153-3438.

Аннотация. Мақалада модифицияланған торсиондық гравитацияның $f(T,\mathcal{T})$ теориясы аясындағы космологиялық динамика қарастырылады, мұнда гравитациялық әрекет бұрылу скаляры T мен материяның энергия-импульс тензорының ізі $\mathcal{T}$ арқылы анықталатын функциямен сипатталады. Мұндай тәсіл теорияның геометриялық және материалдық құрамдас бөліктерінің тікелей өзара әсерін ескеруге және стандартты космологиялық кеңеюден өзгеше Ғалам эволюциясының сценарийлерін талдауға мүмкіндік береді. Зерттеу кеңістіктік біртекті және изотропты Фридман–Леметр–Робертсон–Уокер геометриясы үшін жүргізіледі. Масштабтық фактордың параметрленген формасы қолданылып, ол динамикалық шамалардың реттелген сипаттамасын қамтамасыз етеді және сығылу фазасының кеңею фазасына ауысуымен сипатталатын космологиялық отскок режимін сипаттауға мүмкіндік береді. Осы негізде энергия тығыздығы, қысым және күй теңдеуінің параметрі үшін өрнектер алынған және олардың өтпелі аймақ маңындағы уақыттық өзгерісі талданған. Серпіліс сәтінде кеңею жылдамдығы нөлге тең болатыны көрсетілген, бұл жүйе эволюциясының сипатының өзгеруіне сәйкес келеді. Осы кезеңде энергия тығыздығы максимал мәніне жетіп, кейін азаяды, ал қысым бүкіл эволюция барысында теріс мәнін сақтайды. Күй теңдеуінің

параметрі уақытша стандартты космологиялық режимдер шегінен шығады, бұл нөлдік және күшті энергия шарттарының бұзылуымен қатар жүреді. Сонымен қатар, басым энергия шарты сақталады, бұл қарастырылып отырған модельдің физикалық тұрғыдан үйлесімділігін көрсетеді. Алынған нәтижелер $f(T,\mathcal{T})$ теориясының сызықтық және сызықтық емес жүзеге асырылулары космологиялық отскоктың негізгі ерекшеліктерін тиімді түрде сипаттай алатынын және Ғаламның ерте эволюциясының баламалы сценарийлерін талдауда қолданылуы мүмкін екенін көрсетеді. Модель бастапқы шарттардың кең ауқымында параметрлердің орнықты сипаттамасын көрсетеді.

Түйін сөздер: модификацияланған гравитация, $f(T,\mathcal{T})$ теориясы, торсион, космологиялық серпіліс, энергия шарттары

©Жусупова Н.К.[1], Жадыранова А.А.[2]*, 2026.
[1]Казахский национальный педагогический университет имени Абая,
Алматы, Казахстан;
[2]Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва,
Астана, Казахстан.
*E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com

КОСМОЛОГИЯ ОТСКОКА В $f(T,\mathcal{T})$ ГРАВИТАЦИИ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ

Жусупова Назым — PhD докторант, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: zhnaz88@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-8900-0829;
Жадыранова Алия — PhD, старший преподаватель, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва, Астана, Казахстан,
E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-1153-3438.

Аннотация. В статье рассматривается космологическая динамика в рамках модифицированной торсионной гравитации $f(T,\mathcal{T})$, в которой гравитационное действие задается функцией от скаляра кручения T и следа тензора энергии–импульса материи $\mathcal{T}$. Такой подход позволяет учитывать прямое взаимодействие геометрической и материальной составляющих теории и анализировать сценарии эволюции Вселенной, отличающиеся от стандартной модели космологического расширения. Рассмотрение проводится для пространственно однородной и изотропной геометрии Фридмана–Леметра–Робертсона–Уокера. Используется параметризованная форма масштабного фактора, обеспечивающая регулярное поведение динамических величин и позволяющая описать режим космологического отскока, при котором фаза сжатия сменяется фазой расширения. На этой основе получены выражения для плотности энергии, давления и параметра уравнения состояния, а также проанализировано их временное поведение в окрестности переходной области. Показано, что в момент отскока скорость расширения обращается в нуль, что соответствует смене характера эволюции системы. Вблизи

этого момента плотность энергии достигает максимума, после чего убывает, тогда как давление остается отрицательным. Параметр уравнения состояния временно выходит за пределы стандартных космологических режимов, что сопровождается нарушением нулевого и сильного энергетических условий. При этом доминирующее энергетическое условие сохраняется, что указывает на физическую согласованность рассматриваемой модели. Полученные результаты показывают, что линейные и нелинейные реализации теории $f(T,\mathcal{T})$, способны воспроизводить основные особенности космологического отскока и могут использоваться для анализа альтернативных сценариев эволюции ранней Вселенной. Модель демонстрирует устойчивое поведение параметров при широком диапазоне начальных условий.

Ключевые слова: модифицированная гравитация, теория $f(T,\mathcal{T})$, торсион, космологический отскок, энергетические условия

Кіріспе. Қазіргі космологиялық модельдер Ғаламның кеш кезеңдегі эволюциясын жеткілікті дәлдікпен сипаттағанымен, ерте уақыттардағы динамикаға қатысты түбегейлі мәселелер әлі де ашық күйінде қалып отыр. Әсіресе бастапқы сингулярлықтың болуы кеңістік пен уақыттың белгілі бір мезетте физикалық мағынасын жоғалтатынын көрсетіп, классикалық гравитациялық теориялардың қолданылу шегін айқындайды. Осы мәселе балама космологиялық сценарийлерді іздеуге түрткі болып, сингулярлықсыз дамуды сипаттайтын тәсілдерге қызығушылықты арттырды. Сол бағыттардың бірі - серпіліс космологиясы, мұнда Ғалам эволюциясы сығылу фазасынан кеңею фазасына үздіксіз ауысу арқылы жүзеге асады. Мұндай сценарий сингулярлықтан қашуға мүмкіндік беріп қана қоймай, ерте кезеңдегі физикалық шамалардың уақыт бойынша өзгерісін бірізді түрде сипаттауға жол ашады. Алайда серпіліс режимін стандартты жалпы салыстырмалық теориясы аясында іске асыру көбіне энергия шарттарының бұзылуымен немесе физикалық тұрғыдан күрделі материя компоненттерін енгізумен байланысты болады.

Осыған байланысты серпіліс динамикасын геометриялық негізде түсіндіре алатын модификацияланған гравитациялық теориялар ерекше назарға ие. Телепараллельді гравитацияда гравитациялық өзара әрекет кеңістік-уақыттың қисықтығымен емес, оның бұрылу қасиетімен сипатталады, бұл балама космологиялық шешімдерді қарастыруға мүмкіндік береді. Бұл теорияны $f(T,\mathcal{T})$, түрінде кеңейту торсион скалярымен қатар материяның энергия-импульс тензорының ізін ескеруге жағдай жасап, геометрия мен материя арасындағы өзара байланысты айқын көрсетеді. Мұндағы T – бұралу скаляры, ал $\mathcal{T}$ – энергия-импульс тензорының ізі. Мұндай байланыс космологиялық динамикаға тікелей әсер етіп, энергия тығыздығы, қысым және күй теңдеуінің параметрі сияқты шамалардың уақыт бойынша бейстандарт сипаттамасын қалыптастырады. Серпіліс аймағында бұл шамалар классикалық космологияда қабылданған режимдерден уақытша ауытқуы мүмкін, соның нәтижесінде нөлдік және күшті энергия шарттарының бұзылуы байқалады, ал доминантты энергия шартының

CC BY NC

сақталуы модельдің физикалық үйлесімділігін қамтамасыз етеді. Осы тұрғыда $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясы аясындағы серпіліс космологиялық сценарийлерді талдау ерте Ғалам эволюциясын сипаттаудың балама және перспективалы бағыты ретінде қарастырылады.

Сонымен қатар, ерте Ғалам динамикасын сипаттаудағы тағы бір маңызды мәселе – бастапқы шарттарға сезімталдық пен модельдердің тұрақтылығы болып табылады. Классикалық инфляциялық сценарийлер бірқатар бақылаулық деректерді сәтті түсіндіргенімен, олардың бастапқы күйіне қатысты сұрақтар толық шешімін тапқан жоқ. Осы тұрғыдан алғанда, серпіліс космологиясы инфляцияға балама ретінде ғана емес, сонымен бірге Ғалам эволюциясының біртұтас және үздіксіз сипаттамасын ұсынатын теориялық негіз ретінде қарастырылады. Серпіліс сценарийінде кеңістік-уақыттың геометриялық сипаттамалары үздіксіз болып сақталады, ал физикалық шамалар шекті мәндерден аспайды, бұл модельдің математикалық және физикалық тұрғыдан орнықтылығын арттырады.

Тағы бір назар аударатын жайт – серпіліс космологиясында энергия шарттарының рөлі. Жалпы салыстырмалық теориясында энергия шарттары гравитациялық тартылыстың сипатын анықтайтын негізгі талаптар ретінде қарастырылғанымен, ерте Ғаламдағы экстремалды жағдайларда олардың қатаң орындалуы міндетті болмауы мүмкін. Осыған байланысты энергия шарттарының уақытша бұзылуын қамтитын модельдер ерте Ғалам динамикасын сипаттауда маңызды ақпарат береді. Телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында геометрия мен материя арасындағы байланыс бұл бұзылуларды тиімді түрде іске асырып, серпіліс режимін қосымша экзотикалық материя енгізбей-ақ жүзеге асыруға мүмкіндік береді. Сондықтан мұндай модельдерді зерттеу қазіргі космологиядағы теориялық олқылықтарды толтыруға бағытталған өзекті мәселе болып табылады.

Сонымен бірге, серпіліс космологиясының артықшылықтарының бірі – ол ерте Ғаламдағы кванттық-гравитациялық эффектілерді тиімді феноменологиялық деңгейде сипаттауға мүмкіндік береді. Бастапқы сингулярлық маңында классикалық гравитацияның жарамсыз болатыны белгілі болғандықтан, мұндай аймақта геометрия мен материяның стандартты өзара әрекеттесуін жалпылау қажеттілігі туындайды. Телепараллельді гравитация осы тұрғыдан қолайлы теориялық алаң болып табылады, себебі онда геометриялық сипаттама қисықтықтан бұрылуға ауыстырылып, кеңістік-уақыттың құрылымы өзгеше түрде ұйымдастырылады. Бұл айырмашылық серпіліс режимін іске асыру үшін қажетті динамикалық еркіндіктерді қамтамасыз етеді.

$f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында материяның энергия-импульс тензорының ізі гравитациялық секторға тікелей қатысады, нәтижесінде өріс теңдеулері классикалық телепараллельді теориямен салыстырғанда күрделірек құрылымға ие болады. Алайда дәл осы күрделілік серпіліс динамикасын сипаттауда шешуші рөл атқарады. Геометрия–материя байланысының болуы энергия тығыздығы мен қысымның уақыт бойынша өзгерісін жаңа режимдерге көшіреді және серпіліс аймағында энергия шарттарының уақытша бұзылуын табиғи түрде қамтамасыз

етеді. Бұл жағдай серпіліс сценарийін іске асыру үшін жиі қолданылатын экзотикалық немесе фантомдық материяны енгізу қажеттілігін төмендетеді.

Серпіліс космологиясында маңызды рөл атқаратын тағы бір аспект - күй теңдеуінің параметрінің эволюциясы. Классикалық космологияда бұл параметр көбіне тұрақты немесе баяу өзгеретін шама ретінде қарастырылса, серпіліс сценарийлерінде оның уақыт бойынша айқын өзгеруі динамиканың негізгі белгілерінің бірі болып табылады. Әсіресе серпіліс маңында күй теңдеуінің параметрінің фантомдық аймаққа өтуі кеңею фазасының басталуын қамтамасыз ететін маңызды фактор ретінде қарастырылады. $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясы аясында бұл режим геометрия мен материя арасындағы байланыс арқылы қалыптасып, модельдің ішкі үйлесімділігін сақтайды.

Сонымен қатар, серпіліс сценарийлерін талдауда кинематикалық шамалардың, атап айтқанда Хаббл және баяулау параметрлерінің уақыт бойынша өзгерісін зерттеу ерекше маңызға ие. Бұл шамалар серпіліс сәтіндегі сығылу мен кеңею фазалары арасындағы өтудің тегістігін және тұрақтылығын сипаттайды. Таңдалған параметрленген масштабтық фактор арқылы алынатын Хаббл параметрінің нөлдік мән арқылы үздіксіз өтуі серпіліс құбылысының негізгі кинематикалық шарттарының орындалатынын көрсетеді. Ал баяулау параметрінің теріс мәндерге уақытша өтуі үдеулі кеңею фазасының іске асуын айқындайды.

Осы тұрғыда $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясы аясындағы серпіліс космологиясын зерттеу тек теориялық қызығушылықпен ғана шектелмейді, сонымен қатар қазіргі және болашақ бақылаулық деректермен салыстыру үшін негіз қалыптастырады. Ерте Ғалам динамикасының мұндай балама сценарийлері құрылымдардың түзілуі, космологиялық параметрлердің эволюциясы және энергия шарттарының рөлі сияқты мәселелерді қайта қарастыруға мүмкіндік береді. Сондықтан телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясы негізіндегі серпіліс модельдерін жүйелі түрде талдау қазіргі космологиядағы ашық мәселелерді түсіндіруде маңызды қадам болып табылады.

Материалдар және негізгі әдістер. Бұл жұмыста серпіліс космологиялық динамикасы телепараллельді гравитацияның кеңейтілген $f(T,\mathcal{T})$ формализмі аясында қарастырылады. Аталған теорияда гравитациялық өзара әрекет кеңістік-уақыттың қисықтығымен емес, оның кбұрылу қасиетімен сипатталады, ал материяның әсері энергия-импульс тензорының ізі арқылы ескеріледі (Wald, 1984). Мұндай құрылым геометрия мен материя арасындағы өзара байланысты күшейтіп, стандартты космологиялық сценарийлерден өзгеше динамикалық режимдерді, соның ішінде серпіліс құбылысын сипаттауға мүмкіндік береді (Харко, 2014).

Телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясының негізі келесі әсер функционалымен беріледі:

$$\mathcal{S} = \frac{1}{16\pi G}\int d^4x\, e\,[T + f(T,\mathcal{T})] + \int d^4x\, e\, \mathcal{L}_m, \qquad (1)$$

мұндағы

$\mathcal{S}$ – гравитациялық–материалдық жүйенің толық әсер функционалы;

G – Ньютонның гравитациялық тұрақтысы;

x^{μ} – төртөлшемді кеңістік-уақыт координаталары ();

$e = \det(e^{A}{}_{\mu})$ – тетрада детерминанты;

$f(T, \mathcal{T})$ – торсион скаляры мен энергия-импульс тензорының ізіне тәуелді еркін функция;

$\mathcal{L}_m$ – материя лагранжианы.

Бұл әсер формасы гравитациялық және материалдық бөліктердің өзара байланысын біртұтас түрде сипаттап, космологиялық теңдеулерді вариациялық принцип арқылы алуға негіз қалайды.

Телепараллельді формализмде Вейценбёк байланысы

$$\Gamma^{\rho}_{\mu\nu} = e_{A}{}^{\rho}\partial_{\nu}e_{A}{}^{\mu} \tag{2}$$

түрінде анықталады, ал осы байланыс арқылы торсион тензоры

$$T^{\rho}{}_{\mu\nu} = \Gamma^{\rho}{}_{\nu\mu} - \Gamma^{\rho}{}_{\mu\nu} \tag{3}$$

енгізіледі. Контурсия тензоры Вейценбёк және Леви–Чивита байланыстарының айырмасы ретінде анықталып, суперпотенциал арқылы торсион скаляры

$$T = S_{\rho}{}^{\mu\nu}T^{\rho}{}_{\mu\nu} \tag{4}$$

түрінде өрнектеледі. Материяның энергия-импульс тензорының ізі

$$\mathcal{T} = T^{\mu}{}_{\mu} = \rho - 3p \tag{5}$$

ретінде анықталады. Мұндағы ρ – энергия тығыздығы, ρ – изотропты қысым

Бұл жұмыста келесі сызықтық модель қарастырылады:

$$f(T, \mathcal{T}) = \alpha T + \beta\mathcal{T}, \tag{6}$$

мұнда α және β – еркін параметрлер. Мұндай таңдау модельдің аналитикалық тұрғыдан айқын болуын қамтамасыз етіп, серпіліс режимінің негізгі қасиеттерін талдауға мүмкіндік береді (Bamba et al., 2014).

Космологиялық орта кеңістіктік біртекті және изотропты Фридман–Леметр–Робертсон–Уокер геометриясымен сипатталады. Бұл жағдайда Ғалам динамикасы масштабтық фактор α(t) арқылы анықталып, кеңею немесе сығылу жылдамдығы Хаббл параметрімен

$$H(t) = \frac{\dot{a}(t)}{a(t)} \quad (7)$$

өрнектеледі. Серпіліс космологиясында негізгі кинематикалық шарт ретінде белгілі бір мезетте $H = 0$ болуы және оның уақыт бойынша туындысының таңбасының өзгеруі қарастырылады, бұл сығылу фазасынан кеңею фазасына өтуді сипаттайды (Bamba et al., 2014).

Серпіліс режимін жүзеге асыру үшін масштабтық фактордың параметрленген формасы қолданылады. Таңдалған параметрлеу серпіліс сәтінде масштабтық фактордың нөлге тең болмауын қамтамасыз етіп, энергия тығыздығы мен қысым сияқты негізгі физикалық шамалардың шекті мәндерге ие болуына мүмкіндік береді. Бұл тәсіл нақты аналитикалық шешімге тәуелді болмай, серпіліс кинематикасының жалпы қасиеттерін сипаттауға бағытталған.

Материя компоненті идеал сұйықтық ретінде қарастырылып, энергия тығыздығы мен қысым стандартты түрде енгізіледі. Осы шамалар арқылы күй теңдеуінің параметрі

$$\omega(t) = \frac{p(t)}{\rho(t)} \quad (8)$$

анықталады. Серпіліс аймағында бұл параметр классикалық космологияда қабылданған режимдерден уақытша ауытқуы мүмкін, бұл серпіліс сценарийінің маңызды динамикалық белгісі болып табылады (Cai et al., 2010).

Материя компонентін идеал сұйықтық ретінде қарастыру серпіліс космологиясын зерттеуде кеңінен қолданылатын және физикалық тұрғыдан негізделген жуықтау болып табылады. Бұл тәсіл энергия тығыздығы мен қысым арасындағы байланысты қарапайым әрі айқын түрде сипаттауға мүмкіндік беріп, алынған динамикалық теңдеулердің интерпретациясын жеңілдетеді. Сонымен қатар, идеал сұйықтық моделі ерте Ғаламдағы орташа динамикалық қасиеттерді сипаттауға жеткілікті болып табылады, себебі серпіліс аймағында негізгі рөлді микроскопиялық процестерден гөрі, геометриялық және макроскопиялық эффектілер атқарады.

Күй теңдеуінің параметрі ω(t) космологиялық эволюцияның сипатын анықтайтын маңызды шамалардың бірі болып табылады. Оның уақыт бойынша өзгерісі Ғаламның әртүрлі динамикалық режимдерге өтуін сипаттайды. Серпіліс маңында ω(t) параметрінің классикалық мәндерден ауытқуы энергия шарттарының бұзылуымен тікелей байланысты болып, үдеулі кеңею фазасының іске асуына мүмкіндік береді. Бұл ауытқу тұрақты күйде сақталмай, уақытша сипатқа ие болуы серпіліс сценарийінің физикалық тұрғыдан орнықты екенін көрсетеді.

Серпіліс режимін талдауда масштабтық фактордың параметрленген формасын қолдану модельдің жалпы қасиеттерін айқындауға бағытталған тиімді әдіс болып табылады. Мұндай параметрлеу нақты өріс теңдеулерінің күрделі құрылымына тәуелді болмай, серпіліс құбылысының негізгі кинематикалық белгілерін зерттеуге мүмкіндік береді. Атап айтқанда, масштабтық фактордың минимумға

жетуі, Хаббл параметрінің нөл арқылы өтуі және баяулау параметрінің уақытша теріс мәндерге өтуі серпіліс сценарийінің жүзеге асатынын айқын көрсетеді.

Осылайша, идеал сұйықтық жуықтауы мен параметрленген масштабтық факторды бірге қолдану телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында серпіліс космологиясының негізгі динамикалық қасиеттерін жүйелі түрде зерттеуге мүмкіндік береді. Бұл тәсіл алынған нәтижелерді әрі қарай энергия шарттары арқылы талдауға және серпіліс механизмінің физикалық негізділігін бағалауға сенімді негіз қалайды.

Идеал сұйықтық жуықтауы серпіліс космологиясында материяның күрделі ішкі құрылымын енгізбей-ақ, гравитациялық динамиканың негізгі әсерлерін айқындауға мүмкіндік береді. Мұндай модельде тұтқырлық, жылуөткізгіштік және анизотропты кернеулер ескерілмейді, алайда бұл шектеулер серпіліс маңындағы жалпы эволюциялық қасиеттерді сипаттауға кедергі келтірмейді. Керісінше, геометрия мен материя арасындағы байланыстың $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында күшеюі идеал сұйықтық жағдайының өзінде бейстандарт динамикалық режимдердің пайда болуына әкеледі. Сондықтан бұл жуықтау серпіліс сценарийінің негізгі физикалық механизмдерін айқындау үшін жеткілікті әрі теориялық тұрғыдан негізделген болып табылады.

Масштабтық фактор мен Хаббл параметрінен бөлек, Ғалам эволюциясының үдеулі немесе баяулау сипатын сипаттау үшін баяулау параметрі енгізіледі. Ол масштабтық фактор арқылы келесі түрде анықталады:

$$q(t) = -\frac{\ddot{a}(t)}{a(t)H^2(t)}. \tag{9}$$

Берілген жұмыста қолданылған параметрленген масштабтық фактор үшін *q(t)* уақытқа тәуелді функция ретінде анықталып, серпіліс маңындағы динамикалық режимдерді талдауда қолданылады. Аталған параметр серпіліс сәтінде Ғалам эволюциясының сығылу фазасынан кеңею фазасына ауысуын және үдеулі кеңею аймағының пайда болуын айқындауға мүмкіндік береді. Осылайша, баяулау параметрі серпіліс сценарийінің кинематикалық ерекшеліктерін сипаттайтын негізгі шамалардың бірі болып табылады.

Серпіліс режимін сипаттау үшін масштабтық фактордың параметрленген формасы қолданылады, ол серпіліс сәтінде *a(t)*-тың нөлге тең болмауын қамтамасыз етеді және барлық динамикалық шамалардың шекті мәндерге ие болуына мүмкіндік береді. Осы параметрлеу арқылы H(t) және $\dot{H}(t)$ анықталып, олар энергия тығыздығы мен қысымды өрнектеуде пайдаланылады.

Осы жұмыста гравитациялық тұрақтыны қысқаша белгілеу үшін

$$\kappa^2 \equiv 8\pi G \tag{10}$$

анықтамасы енгізіледі. Мұндай белгілеу өрнектердің ықшам жазылуын қамтамасыз етеді және энергия тығыздығы мен қысымға арналған формулаларды жазуда кеңінен қолданылады.

Өріс теңдеулерін шешу нәтижесінде энергия тығыздығы мен қысым уақытқа тәуелді шамалар ретінде алынады:

$$\rho(t) = -\frac{3(\alpha+1)[(2\beta+3)H^2+5\beta\dot{H}]}{8\pi G[4\beta(\beta+1)-3]}, \quad (11)$$

$$p(t) = \frac{3(\alpha+1)[(2\beta+3)H^2+(\beta+2)\dot{H}]}{8\pi G[4\beta(\beta+1)-3]}. \quad (12)$$

Осы шамалар арқылы күй теңдеуінің параметрі, (8) формуланы пайдала отырып

$$\omega(t) = \frac{p(t)}{\rho(t)} = -\frac{(2\beta+3)H^2+(\beta+2)\dot{H}}{(2\beta+3)H^2+5\beta\dot{H}} \quad (13)$$

анықталады. Бұл өрнек серпіліс аймағында күй теңдеуінің параметрінің стандартты космологиялық режимдерден уақытша ауытқуын сипаттайды (Cai et al., 2010).

Серпіліс режимін нақты сипаттау үшін масштабтық фактордың симметриялы параметрленген формасы қолданылады. Атап айтқанда, уақытқа қатысты жұп функция ретінде алынатын

$$a(t) = \sqrt{\gamma t^2 + 1} \quad (14)$$

масштабтық факторы серпіліс космологиясының негізгі талаптарын қанағаттандырады. Бұл таңдауда масштабтық фактор барлық уақыт мезеттерінде оң мәнге $t = 0$ ие болып, нүктесінде минимумға жетеді, ал алыс өткен мен болашақта монотонды түрде өседі. Мұндай сипаттама Ғаламның ығысу фазасынан кеңею фазасына бірқалыпты ауысуын сипаттайды.

Берілген масштабтық фактор үшін Хаббл параметрі мен оның уақыт бойынша туындысы аналитикалық түрде анықталады:

$$H(t) = \frac{\gamma t}{\gamma t^2+1}, \quad \dot{H}(t) = \frac{\gamma(1-\gamma t^2)}{(\gamma t^2+1)^2}. \quad (15)$$

Аталған өрнектер серпіліс сәтінде $H(0) = 0$ болатынын және оның уақыт бойынша туындысының таңбасы осы нүктеде өзгеретінін көрсетеді, бұл серпіліс құбылысының кинематикалық шарттарына толық сәйкес келеді.

Осы нәтижелерді сызықтық $f(T, \mathcal{T}) = \alpha T + \beta \mathcal{T}$ моделінің өріс теңдеулеріне қоя отырып, энергия тығыздығы мен қысымның уақытқа тәуелді өрнектері алынады:

$$\rho(t) = \frac{3(\alpha+1)\gamma^2(3(\beta-1)\gamma^2t^2-5\beta)}{(4\beta(\beta+1)-3)(\gamma^2t^2+1)^2}, \quad (16)$$

$$p(t) = \frac{3(\alpha+1)\gamma^2(\beta+(\beta+1)\gamma^2t^2+2)}{(4\beta(\beta+1)-3)(\gamma^2t^2+1)^2}. \quad (17)$$

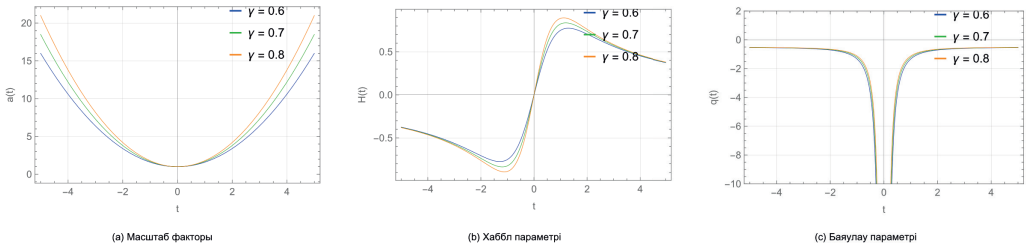
Бұл өрнектер серпіліс аймағында энергия тығыздығының шекті мәнге ие болып, $t = 0$ болғанда максимумға жететінін, ал қысымның бүкіл эволюция барысында теріс мәндер аймағында қалатынын көрсетеді.

Энергия тығыздығы мен қысым негізінде күй теңдеуінің параметрі

$$\omega(t) = \frac{p(t)}{\rho(t)} = \frac{\beta+(\beta+1)\gamma^2t^2+2}{3(\beta-1)\gamma^2t^2-5\beta} \quad (18)$$

анықталады. Бұл параметрдің уақыт бойынша өзгерісі серпіліс аймағында стандартты космологиялық режимдерден ауытқуды көрсетіп, энергия шарттарының бұзылу мүмкіндігін талдауға негіз болады.

Нәтижелер. Алынған динамикалық шешімдердің физикалық тұрғыдан үйлесімділігін бағалау үшін энергия шарттары қолданылады. Нөлдік энергия шарты (NEC), күшті энергия шарты (SEC) және доминантты энергия шарты (DEC) энергия тығыздығы мен қысымның сәйкес комбинациялары арқылы анықталып, серпіліс аймағында олардың орындалу немесе бұзылу ерекшеліктері талданады (Santos et al., 2007; Visser, 2000).



Сурет 1 - Әр түрлі параметр мәндерінде космостық уақытқа тәуелді масштаб факторы *a(t)*, Хаббл параметрі *H(t)* және баяулау параметрі q(t) эволюциясы.

Сурет 1-де масштабтық фактордың *a(t)*, Хаббл параметрінің H(t) және баяулау параметрінің q(t) космологиялық уақытқа тәуелділігі әртүрлі серпіліс параметрі мәндерінде көрсетілген. Масштабтық фактордың эволюциясы уақыт бойынша симметриялы сипатқа ие болып, $t = 0$ болғанда минимум мәнге жететіні байқалады. Бұл сипаттама Ғаламның серпіліс сценарийіне сәйкес келетін сығылу фазасынан кеңею фазасына бірқалыпты ауысуын сипаттайды. γ параметрі артқан сайын масштабтық фактордың өсу қарқыны серпілістен кейінгі аймақта күшейеді, бұл кеңею фазасының анағұрлым қарқынды болатынын көрсетеді.

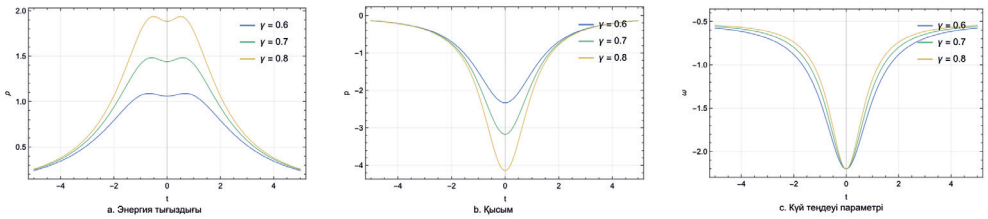
Хаббл параметрінің уақыт бойынша өзгерісі серпіліс сәтінде $H = 0$ шартын қанағаттандырады. Теріс уақыт аймағында $H(t) < 0$ болуы Ғаламның сығылу фазасын сипаттаса, оң уақыт аймағында $H(t) < 0$ мәндерге өтуі кеңею фазасының басталуын білдіреді. Осылайша, H(t) эволюциясы серпіліс құбылысының кинематикалық талаптарына толық сәйкес келеді. Сонымен қатар,

γ мәнінің ұлғаюы Хаббл параметрінің серпіліс маңындағы еңкіштігін арттырып, эволюция динамикасына айқын әсер етеді (Percival et al., 2010).

Баяулау параметрінің q(t) эволюциясы серпіліс маңында терең минимумның пайда болуымен сипатталады. Бұл серпіліс сәтінде үдеулі кеңею режимінің қысқа уақыт аралығында жүзеге асатынын көрсетеді. Уақыттың алыс аймақтарында q(t) нөлге жақындап, кеңеюдің баяулау сипатына ауысатыны байқалады. Мұндай сипаттама таңдалған масштабтық фактордың серпіліс динамикасын адекватты сипаттайтынын дәлелдейді.

Сурет 1-дегі кинематикалық шамалардың бірлескен эволюциясы серпіліс сценарийінің параметрлік тұрғыдан орнықты екенін көрсетеді. Атап айтқанда, масштабтық фактор, Хаббл параметрі және баяулау параметрінің уақыт бойынша үздіксіз және шекті мәндерге ие болуы серпіліс маңында ешбір физикалық сингулярлықтың пайда болмайтынын айқындайды. Бұл қасиет таңдалған параметрленген масштабтық фактордың тек формальды түрде ғана емес, динамикалық тұрғыдан да үйлесімді екенін көрсетеді. Серпіліс маңындағы барлық кинематикалық шамалардың тегіс өзгеруі модельдің математикалық орнықтылығын қамтамасыз етіп, ерте Ғалам эволюциясын сипаттауда қолдануға жарамды екенін дәлелдейді.

Сонымен қатар, γ параметрінің өзгеруі арқылы серпіліс сценарийінің әртүрлі кинематикалық режимдерін жүзеге асыруға болатыны байқалады. Бұл параметр серпіліс маңындағы өтудің «өткірлігін» және серпілістен кейінгі кеңею фазасының қарқындылығын реттейтін тиімді басқарушы шама ретінде көрінеді. Осы тұрғыда γ параметрі серпіліс космологиясындағы маңызды еркіндік дәрежесі болып табылады және оны әртүрлі мәндерде таңдау арқылы бақылаулық деректерге жақын модельдер құруға мүмкіндік туады. Мұндай параметрлік икемділік телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясының серпіліс сценарийлерін зерттеудегі артықшылығын көрсетеді.



Сурет 2 - Әр түрлі параметр мәндерінде космостық уақытқа тәуелді энергия тығыздығы *p(t)*, қысым *p(t)* және күй теңдеуінің параметрі ω(t) эволюциясы.

Сурет 2-де энергия тығыздығы p(t), қысым p(t) және күй теңдеуінің параметрі ω(t) уақытқа тәуелді түрде көрсетілген. Энергия тығыздығы серпіліс нүктесіне жақындаған сайын өсіп, t = 0 болғанда максимум мәнге жетеді, одан кейін кеңею фазасында біртіндеп кемиді. Бұл нәтиже серпіліс сәтінде физикалық шамалардың шекті мәндерге ие болатынын және сингулярлықтың болмауын көрсетеді.

CC BY NC

Қысымның эволюциясы барлық уақыт аралығында теріс мәндер аймағында қалып, серпіліс сценарийіне тән бейстандарт динамиканы айқындайды. Теріс қысым серпіліс маңында кеңею фазасын іске қосатын негізгі факторлардың бірі болып табылады. Әртүрлі γ мәндерінде қысымның абсолюттік шамасы өзгергенімен, оның жалпы сипаттамасы сақталады (Solanki et al., 2024).

Күй теңдеуінің параметрі ω(t) серпіліс аймағында ω < - 1 аймағына өтетінін көрсетеді. Бұл құбылыс фантомдық режимнің уақытша іске асуын білдіреді және серпіліс сценарийін жүзеге асыру үшін қажетті шарттардың бірі болып табылады. Серпілістен алыс уақыт аймақтарында мәндері біртіндеп жоғарылап, стандартты космологиялық режимдерге жақындайды. Осы нәтижелер серпіліс динамикасының негізгі ерекшеліктерін айқын көрсетіп, энергия шарттарын әрі қарай талдауға негіз қалайды (Eisenstein et al., 2005).

Сурет 2-де көрсетілген динамикалық тәуелділіктер серпіліс космологиясының энергетикалық құрылымын тереңірек түсінуге мүмкіндік береді. Энергия тығыздығының серпіліс нүктесіне жақындаған сайын шекті максимумға жетуі кеңістік-уақыт эволюциясында ешбір шексіз шамалардың пайда болмайтынын айқын көрсетеді. Бұл қасиет серпіліс сценарийінің басты артықшылықтарының бірі болып табылады, себебі ол бастапқы сингулярлық проблемасынан табиғи түрде қашуға мүмкіндік береді. Энергия тығыздығының симметриялы түрде өзгеруі сығылу және кеңею фазаларының бір-бірімен үздіксіз байланыста екенін көрсетіп, модельдің уақыттық кері симметриясын айқындайды.

Қысымның бүкіл эволюция барысында теріс мәндер аймағында қалуы серпіліс механизмінің физикалық негізін түсіндіруде маңызды рөл атқарады. Теріс қысым кеңістік-уақыттың гравитациялық түрде «итерілмелі» режимге өтуін қамтамасыз етіп, серпіліс маңында кеңею фазасының басталуына жағдай жасайды. Бұл бейстандарт қысым режимі классикалық материя түрлерінде кездеспейтіндіктен, телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында геометрия мен материя арасындағы бейминимал байланыстың шешуші маңызға ие екенін көрсетеді. Сонымен қатар, γ параметрінің әртүрлі мәндерінде қысымның тереңдігі өзгергенімен, оның теріс сипаты сақталады, бұл серпіліс динамикасының параметрлік тұрғыдан орнықты екенін білдіреді.

Күй теңдеуінің параметрінің уақыт бойынша эволюциясы серпіліс аймағында фантомдық режимнің уақытша іске асатынын көрсетеді. ω(t)<−1 аймағына өтуі энергия тығыздығы мен қысым арасындағы қатынастың классикалық шектерден шығатынын білдіріп, серпіліс сценарийін жүзеге асыру үшін қажетті энергетикалық жағдайларды қалыптастырады. Мұндай режимнің уақытша сипатта болуы модельдің физикалық тұрғыдан қолайлы екенін көрсетеді, себебі серпілістен алыс аймақтарда ω(t) стандартты космологиялық мәндерге біртіндеп жақындайды. Бұл қасиет ерте Ғаламдағы бейстандарт динамика мен кеш кезеңдегі классикалық эволюция арасындағы табиғи өтуді қамтамасыз етеді.

Жалпы алғанда, энергия тығыздығы, қысым және күй теңдеуінің параметрінің бірлескен эволюциясы телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында серпіліс космологиясының энергетикалық тұрғыдан іске асу мүмкіндігін айқын

көрсетеді. Аталған шамалардың барлығы серпіліс маңында шекті және үздіксіз өзгеріп, модельдің математикалық тұрақтылығы мен физикалық үйлесімділігін қамтамасыз етеді. Бұл нәтижелер энергия шарттарын әрі қарай талдауға берік негіз қалыптастырып, серпіліс сценарийінің энергетикалық механизмін тереңірек зерттеуге мүмкіндік береді.

Космологиялық модельдің физикалық тұрғыдан іске асу мүмкіндігін бағалау үшін энергия тығыздығы мен қысым арасындағы қатынастарды сипаттайтын шектеулер қолданылады. Бұл шектеулер кеңістік-уақыт динамикасының мағыналы болуын қамтамасыз етіп, энергия ағынының себептілік принципін бұзбауын талап етеді. Серпіліс сценарийлерінде мұндай шарттар ерекше маңызға ие, себебі сығылу фазасынан кеңею фазасына өту классикалық космологияда қабылданған энергетикалық талаптардан ауытқуды қажет етеді (Visser, 2000).

Алдымен нөлдік энергия шарты қарастырылады. Ол энергия-импульс тензорының нөлдік бағыттар бойымен проекциясы теріс болмауын талап етеді және тығыздық пен қысым арқылы

$$\rho(t) + p(t) \geq 0 \tag{19}$$

түрінде өрнектеледі. Серпіліс аймағында бұл шарттың уақытша бұзылуы күй теңдеуінің параметрінің фантомдық мәндерге өтуіне мүмкіндік береді, нәтижесінде Ғалам динамикасы баяулаудан үдеуге ауысады. Мұндай сипаттама серпіліс механизмінің негізгі белгісі ретінде қарастырылады (Cai et al., 2010).

Материяның физикалық жарамдылығын сипаттайтын келесі шектеу доминантты энергия шартымен анықталады. Бұл шарт энергия тығыздығының қысымнан басым болуын талап етіп,

$$\rho(t) \geq \mid p(t) \mid \tag{20}$$

теңсіздігімен беріледі. Осы талаптың орындалуы энергия ағынының жарық жылдамдығынан аспауын қамтамасыз етеді және модельде себептіліктің сақталатынын көрсетеді. Серпіліс космологиясында доминантты энергия шартының сақталуы алынған шешімдердің физикалық тұрғыдан қабылдануға болатынын білдіреді (Santos et al., 2007).

Гравитациялық тартылыстың сипатын сипаттайтын күшті энергия шарты энергия тығыздығы мен қысымның комбинациясына байланысты енгізіледі және

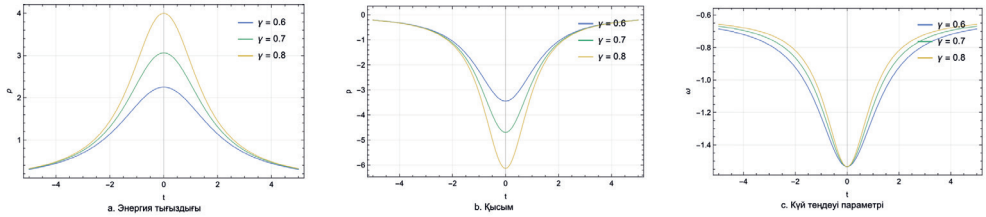
$$\rho(t) + 3p(t) \geq 0 \tag{21}$$

түрінде жазылады. Бұл шарт классикалық космологияда Ғаламның баяулау режиміне сәйкес келеді. Алайда серпіліс сценарийлерінде оның бұзылуы жиі байқалады, себебі серпіліс маңында үдемелі кеңею фазасы қалыптасады. Мұндай ерекшелік қазіргі үдемелі Ғаламды сипаттайтын бақылаулық нәтижелермен үйлеседі (Riess et al., 1998; Perlmutter et al., 1999).

CC BY NC

Таңдалған $f(T,\mathcal{T}) = \alpha T + \beta \mathcal{T}$ моделінде алынған энергия тығыздығы мен қысым өрнектері энергия шарттарының уақыт бойынша эволюциясын кешенді түрде талдауға мүмкіндік береді. Серпіліс нүктесіне жақын аймақта нөлдік және күшті энергия шарттарының бұзылуы байқалады, ал доминантты энергия шартының сақталуы модельдің физикалық үйлесімділігін көрсетеді. Бұл нәтиже телепараллельді гравитациядағы бейминимал байланыс серпіліс космологиясын іске асыруда маңызды рөл атқаратынын көрсетеді және тұтқыр эффектілерді ескеретін кеңейтілген модельдермен үйлеседі (Zhadyranova et al., 2025).

Сонымен қатар, серпіліс аймағында баяулау параметрінің шекті және үздіксіз өзгеруі алынған динамиканың тұрақты сипатқа ие екенін көрсетеді. Энергия шарттарының уақытша бұзылуы серпіліс сәтінде үдемелі кеңею фазасының қалыптасуына мүмкіндік беріп, сығылу мен кеңею фазалары арасындағы өтуді тегіс жүзеге асырады. Мұндай сипаттама бейминимал геометрия–материя байланысы бар космологиялық модельдерге тән жалпы қасиет ретінде қарастырылып, энергия тығыздығы мен қысым арасындағы қатынастардың серпіліс динамикасында шешуші рөл атқаратынын көрсетеді (Zhadyranova et al., 2026).



Сурет 3 - NEC, DEC және SEC энергия шарттарының космологиялық уақытқа тәуелділігі (γ параметрінің әртүрлі мәндері үшін).

Сурет 3-те нөлдік (NEC), доминантты (DEC) және күшті (SEC) энергия шарттарының космологиялық уақытқа тәуелді эволюциясы γ серпіліс параметрінің әртүрлі мәндері үшін көрсетілген. Бұл шарттар алынған серпіліс шешімдерінің физикалық тұрғыдан іске асу мүмкіндігін бағалауда негізгі критерийлердің бірі болып табылады, себебі олар энергия тығыздығы мен қысым арасындағы қатынастарға қойылатын іргелі шектеулерді сипаттайды.

Алдымен нөлдік энергия шартының эволюциясын қарастырайық. Суреттен серпіліс нүктесіне жақын аймақта ρ+p қосындысының теріс мәндер қабылдайтыны анық байқалады. Бұл NEC шарттарының уақытша бұзылуын білдіреді және серпіліс сценарийлеріне тән негізгі ерекшелік болып табылады. Дәл осы шарттың бұзылуы серпіліс сәтінде Хаббл параметрінің нөлдік мән арқылы өтуіне және сығылу фазасынан кеңею фазасына тегіс ауысуға мүмкіндік береді. Уақыттың алыс аймақтарында ρ+p оң мәндерге қайта оралып, классикалық космологиялық режимнің қалпына келетінін көрсетеді.

Доминантты энергия шартының эволюциясы серпіліс сценарийінің физикалық үйлесімділігін бағалауда ерекше маңызға ие. Сурет 3-тен ρ−p комбинациясының

бүкіл уақыт аралығында оң мәндер аймағында қалатынын көруге болады. Бұл энергия ағынының жарық жылдамдығынан аспайтынын және себептілік принципінің сақталатынын білдіреді. Осылайша, NEC пен SEC шарттарының уақытша бұзылуына қарамастан, DEC шарттарының орындалуы модельдің физикалық тұрғыдан қабылдануға болатынын көрсетеді.

Жалпы алғанда, Сурет 3-тегі нәтижелер телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында серпіліс космологиясының энергетикалық тұрғыдан іске асу мүмкін екенін көрсетеді. NEC және SEC шарттарының уақытша бұзылуы серпіліс механизмін қамтамасыз етсе, DEC шарттарының сақталуы алынған шешімдердің физикалық үйлесімділігін сақтап қалады. Бұл серпіліс сценарийінің тек математикалық емес, нақты физикалық модель ретінде қарастырылуына негіз береді.

Алынған энергия тығыздығы мен қысым өрнектерін пайдалана отырып, энергия шарттарын сипаттайтын негізгі комбинациялар тікелей анықталады. Атап айтқанда, нөлдік энергия шартымен байланысты ρ+p қосындысы келесі түрде жазылады (Koussour et al., 2024):

$$\rho(t)+p(t)=\frac{3(\alpha+1)\gamma^2(3(\beta-1)\gamma^2t^2-4\beta+(\beta+1)\gamma^2t^2+2)}{(4\beta(\beta+1)-3)(\gamma^2t^2+1)^2}. \tag{22}$$

Бұл өрнек серпіліс аймағында теріс мәндер қабылдап, t = 0 маңында нөлдік энергия шартының уақытша бұзылатынын көрсетеді. Аталған қасиет серпіліс механизмінің іске асуы үшін қажетті шарттардың бірі болып табылады (Cai et al., 2010; Bamba et al., 2014).

Доминантты энергия шартына сәйкес келетін ρ-p комбинациясы

$$\rho(t)-p(t)=\frac{3(\alpha+1)\gamma^2(3(\beta-1)\gamma^2t^2-6\beta-(\beta+1)\gamma^2t^2-2)}{(4\beta(\beta+1)-3)(\gamma^2t^2+1)^2} \tag{23}$$

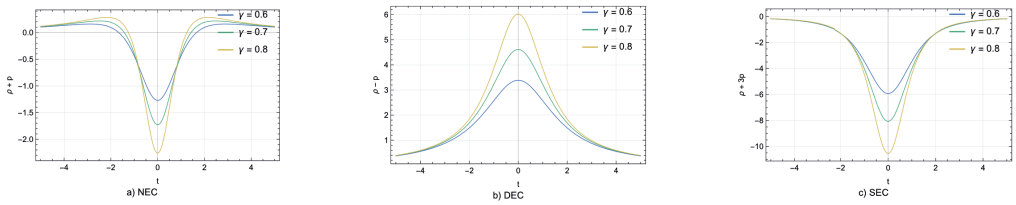
түрінде анықталады. Бұл шаманың серпіліс аймағынан тыс оң мәндерге ие болуы энергия ағынының себептілік шектерінде қалатынын және модельдің физикалық тұрғыдан үйлесімді екенін көрсетеді (Santos et al., 2007).

Күшті энергия шартымен байланысты ρ+3p қосындысы

$$\rho(t)+3p(t)=\frac{3(\alpha+1)\gamma^2(3(\beta-1)\gamma^2t^2-5\beta+3(\beta+(\beta+1)\gamma^2t^2+2))}{(4\beta(\beta+1)-3)(\gamma^2t^2+1)^2} \tag{24}$$

түрінде алынады. Серпіліс маңында бұл өрнектің теріс мәндерге өтуі үдемелі кеңею фазасының қалыптасуын сипаттайды және классикалық баяулау режимінен ауытқуды көрсетеді. Мұндай нәтиже телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында серпіліс космологиясының жүзеге асуына энергетикалық тұрғыдан мүмкіндік бар екенін айқындайды (Visser, 2000; Hawking and Ellis, 2023).

CC BY NC



Сурет 4 - Энергия шарттарын сипаттайтын ρ+p, ρ−p және ρ+3 комбинацияларының космологиялық уақытқа тәуелді эволюциясы.

Сурет 4–те энергия шарттарын сипаттайтын $\rho + p$, $\rho - p$ және комбинацияларының космологиялық уақытқа тәуелді эволюциясы әртүрлі мәндері үшін көрсетілген. Серпіліс маңында $\rho + p$ және $\rho + 3p$ шамаларының теріс аймақтарға өтуі нөлдік және күшті энергия шарттарының уақытша бұзылуын көрсетеді, бұл үдеулі кеңею фазасының қалыптасуымен тікелей байланысты. Ал $\rho - p$ комбинациясының оң мәндер аймағында қалуы доминантты энергия шартының сақталатынын және модельдің себептілік тұрғысынан орнықты екенін көрсетеді.

Модель параметрлері α, β және γ физикалық мағынаға ие және еркін таңдалған шамалар болып табылмайды. α параметрі бұралу скаляры T-нің гравитациялық динамикаға қосатын үлесін сипаттайды, ал β параметрі геометриялық бөлік пен материя арасындағы байланысты, яғни энергия–импульс тензоры ізінің $\mathcal{T}$ арқылы әсерін анықтайды. Масштабтық фактор параметризациясындағы γ шамасы серпілістің уақыттық ауқымын және оның қарқындылық дәрежесін сипаттайды. Параметрлердің таңдалған мәндері ерекшеліксіз серпілістің жүзеге асуын қамтамасыз етеді және космологиялық эволюцияның кейінгі кезеңдеріндегі стандартты динамикаға қайшы келмейді. Жалпы салыстырмалылық теориясының шегіне (α → 0, β → 0) жақындағанда модель бақылау деректерімен үйлесімді сипаттама береді.

Соңғы жылдары энергия шарттарының орындалуы немесе бұзылуы модификацияланған гравитация модельдерінің физикалық жарамдылығын бағалаудың маңызды критерийі ретінде қарастырылуда. Бақылау деректеріне негізделген заманауи зерттеулерде (Planck, SNe Ia, BAO) космологиялық модельдердің параметрлері энергия шарттары тұрғысынан талданып, олардың үдемелі кеңеюді сипаттау қабілеті тексеріледі. Осы тұрғыда ұсынылған модельде NEC және SEC шарттарының серпіліс маңында уақытша бұзылуы, ал DEC шартының сақталуы алынған шешімдердің физикалық тұрғыдан үйлесімді екенін көрсетеді және қазіргі космологиялық шектеулермен қайшылыққа келмейді (Mahmood et al., 2024).

Қорытынды

Бұл жұмыста телепараллельді $f(T, \mathcal{T}) = \alpha T + \beta \mathcal{T}$ гравитациясы аясында серпіліс космологиялық сценарийінің жүзеге асу мүмкіндігі талданды. Таңдалған

параметрленген масштабтық фактор Ғалам динамикасының сингулярлықсыз сипатта дамуына мүмкіндік беріп, сығылу фазасынан кеңею фазасына тегіс өтуді қамтамасыз ететіні көрсетілді.

Алынған аналитикалық өрнектер негізінде энергия тығыздығы серпіліс мезетінде шекті максимумға жететіні, ал қысым бүкіл эволюция барысында теріс мәндер аймағында қалатыны анықталды. Күй теңдеуінің параметрі серпіліс маңында фантомдық аймаққа уақытша өтіп, нөлдік және күшті энергия шарттарының бұзылуына әкелетіні көрсетілді. Сонымен қатар, энергия тығыздығы мен қысым комбинацияларын талдау доминантты энергия шартының сақталатынын көрсетті, бұл модельдің физикалық тұрғыдан үйлесімді екенін айқындайды. Алынған нәтижелер телепараллельді гравитациядағы геометрия мен материя арасындағы байланыс серпіліс космологиясын сипаттауда маңызды рөл атқаратынын және ерте Ғалам эволюциясының баламалы сценарийлерін зерттеуге негіз бола алатынын көрсетеді.

Серпіліс аймағында баяулау параметрінің уақыт бойынша үздіксіз өзгеруі алынған динамиканың тұрақты сипатқа ие екенін көрсетеді. Хаббл параметрінің нөлдік мән арқылы өтуі сығылу мен кеңею фазалары арасындағы өтудің кинематикалық тұрғыдан дұрыс жүзеге асатынын растайды. Бұл серпіліс сценарийінің тек формальды емес, нақты космологиялық эволюцияны сипаттай алатынын білдіреді.

Сонымен бірге, алынған нәтижелер серпіліс космологиясында энергия шарттарының классикалық түрде орындалмауы міндетті түрде физикалық қайшылыққа әкелмейтінін көрсетеді. Керісінше, геометрия мен материя арасындағы байланыс арқылы мұндай бұзылулар ерте Ғалам динамикасының табиғи бөлігі ретінде қарастырылуы мүмкін. Бұл телепараллельді гравитация аясында серпіліс сценарийлерін одан әрі кеңейтіп, параметрлік зерттеулер жүргізуге және бақылаулық деректермен салыстыруға мүмкіндік береді.

Жалпы алғанда, алынған нәтижелер серпіліс космологиясы тек теориялық тұрғыдан қызықты модель ғана емес, сонымен қатар ерте Ғалам эволюциясын сипаттауда нақты физикалық мағынасы бар сценарий екенін көрсетеді. Телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясында геометриялық сипаттамалардың өзгеруі материя қасиеттерімен тікелей байланысып, динамикалық теңдеулердің құрылымын елеулі түрде түрлендіреді. Бұл өз кезегінде серпіліс аймағында байқалатын энергия шарттарының бұзылуын табиғи құбылыс ретінде қарастыруға мүмкіндік береді және модельдің ішкі логикалық тұтастығын сақтайды.

Бұдан бөлек, алынған серпіліс шешімдері параметрлердің кең ауқымында орнықты болып шықты, бұл модельдің әмбебап сипатын көрсетеді. Мұндай тұрақтылық серпіліс сценарийлерін одан әрі күрделірек жағдайларда, мысалы анизотропты немесе тұтқыр космологиялық модельдерде зерттеуге негіз қалайды. Сонымен қатар, телепараллельді гравитациядағы бейминимал байланыстарды бақылаулық деректермен салыстыру арқылы шектеу қою мүмкіндігі болашақ зерттеулердің маңызды бағыты ретінде қарастырылуы мүмкін. Осы тұрғыда ұсынылған тәсіл ерте Ғалам физикасын түсінуге және балама космологиялық модельдерді дамытуға арналған тиімді құралдардың бірі болып табылады.

CC BY NC

Сонымен қатар, алынған нәтижелер серпіліс космологиясының телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясы аясында өздігінен қалыптасатын динамикалық механизм ретінде қарастырылуы мүмкін екенін көрсетеді. Бұл тұрғыда серпіліс құбылысы арнайы таңдалған бастапқы шарттардың немесе жасанды параметрлердің нәтижесі емес, керісінше, геометрия мен материя арасындағы өзара әрекеттесудің табиғи салдары болып табылады. Мұндай сипаттама модельдің физикалық негізділігін күшейтіп, оны ерте Ғалам эволюциясын сипаттайтын балама сценарий ретінде қарастыруға мүмкіндік береді.

Алынған аналитикалық шешімдердің маңызды ерекшелігі – барлық негізгі физикалық шамалардың серпіліс маңында шекті мәндерге ие болуы. Энергия тығыздығының, қысымның, Хаббл және баяулау параметрлерінің үздіксіз және тегіс эволюциясы кеңістік-уақыттың геометриялық құрылымында үзілістердің жоқ екенін көрсетеді. Бұл қасиет серпіліс сценарийінің математикалық тұрғыдан орнықты екенін ғана емес, сонымен қатар физикалық мағынасы бар екенін де айқындайды. Мұндай орнықтылық ерте Ғалам динамикасын сипаттауда ерекше маңызды, себебі дәл осы аймақта классикалық теориялар көбіне өз қолданылу шегіне жетеді.

Серпіліс аймағында энергия шарттарының уақытша бұзылуы алынған модельде орталық рөл атқарады. Нөлдік және күшті энергия шарттарының бұзылуы үдеулі кеңею фазасының пайда болуына мүмкіндік берсе, доминантты энергия шартының сақталуы себептілік пен энергия ағынының физикалық шектерін қамтамасыз етеді. Бұл тепе-теңдік серпіліс космологиясының ішкі логикасын көрсетіп, энергия шарттарының классикалық түсіндірмесін ерте Ғалам жағдайларына бейімдеу қажеттігін айқын көрсетеді. Осы тұрғыда алынған нәтижелер энергия шарттарын абсолютті талап ретінде емес, кеңістік-уақыттың динамикасына тәуелді шарттар ретінде қарастыру орынды екенін меңзейді.

Бұл жұмыста $f(T,\mathcal{T})$-гравитация теориясы аясында энергия шарттарын талдау негізінде серпіліс моделі қарастырылады. f(T), f(R) және $f(T,\mathcal{T})$ теорияларында серпіліс қарастырылған жұмыстардан айырмашылығы - бұл зерттеуде функцияның бұралу скаляры T мен энергия-импульс тензоры ізінің $\mathcal{T}$ -ға бір мезгілде тәуелділігі ескеріледі. Мұндай тәсіл геометрия мен материялық үлестің өзара әсерінің ығысудан кеңеюге өтудің динамикасына ықпалын талдауға мүмкіндік береді. Масштабтық фактордың бір параметризациясы аясында функцияның сызықтық және бейсызықтық түрлері қарастырылды. Нәтижелер серпіліс нүктесінің маңында NEC шартының бұзылатынын, алайда DEC шартының сақталатынын көрсетеді, бұл ығысудан кеңеюге ерекшеліксіз өтудің жүзеге асу шарттарымен үйлеседі. Жалпы алғанда, телепараллельді $f(T,\mathcal{T})$ гравитациясы аясында алынған серпіліс шешімдері ерте Ғалам физикасын түсіндіруде жаңа мүмкіндіктер ашады. Геометрия мен материя арасындағы бейминимал байланыс динамикалық теңдеулердің құрылымын түбегейлі өзгертіп, серпіліс құбылысын қосымша экзотикалық компоненттерді енгізбей-ақ сипаттауға мүмкіндік береді. Бұл қасиет модельді теориялық тұрғыдан ғана емес, феноменологиялық тұрғыдан да тартымды етеді.

Алдағы зерттеулерде ұсынылған тәсілді кеңейту арқылы анизотропты кеңістік-уақыттарда серпіліс динамикасын талдау, тұтқыр эффектілерді немесе қосымша еркін параметрлерді енгізу, сондай-ақ бақылаулық деректермен салыстыру арқылы модель параметрлеріне шектеу қою мүмкіндіктері қарастырылуы мүмкін. Осы бағыттар телепараллельді гравитациядағы серпіліс космологиясын әрі қарай дамытуға және ерте Ғалам эволюциясын сипаттаудың толыққанды теориялық негізін қалыптастыруға жол ашады.

References

Bamba K., Cai Y.F., Nojiri S., Odintsov S.D. (2014) Bounce cosmology from F(R) gravity and F(R) bigravity. Journal of Cosmology and Astroparticle Physics, 01:008. DOI: 10.1088/1475-7516/2014/01/008 (in Eng.).

Cai Y.F., Saridakis E.N., Setare M.R., Xia J.Q. (2010) Quintom cosmology: Theoretical implications and observations. Physics Reports, 493:1–60. DOI: 10.1016/j.physrep.2010.04.001 (in Eng.).

Eisenstein D.J., Zehavi I., Hogg D.W., et al. (2005) Detection of the baryon acoustic peak in the large-scale correlation function of SDSS luminous red galaxies. Astrophysical Journal, 633:560–574. DOI: 10.1086/466512 (in Eng.).

Hawking S.W., Ellis G.F.R. (2023) The Large Scale Structure of Space–Time. Cambridge University Press. DOI: 10.1017/9781009253161 (in Eng.).

Koussour M., et al. (2024) Exploring cosmological evolution and constraints in f(T) teleparallel gravity. Physics of the Dark Universe, 46:101664. DOI: 10.1016/j.dark.2024.101664 (in Eng.).

Mahmood I., Sohail H., Ditta A., Shekh S.H., Yadav A.K. (2024) Reconstruction of symmetric teleparallel gravity with energy conditions. International Journal of Geometric Methods in Modern Physics, 21(12):2450204. DOI: 10.1017/9781009253161 (in Eng.).

Percival W.J., et al. (2010) Baryon acoustic oscillations in the Sloan Digital Sky Survey Data Release 7 galaxy sample. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 401:2148–2168. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2009.15812.x (in Eng.).

Perlmutter S., et al. (1999) Measurements of Ω and Λ from 42 high-redshift supernovae. Astrophysical Journal, 517:565–586. DOI: 10.1086/307221 (in Eng.).

Riess A.G., et al. (1998) Observational evidence from supernovae for an accelerating universe and a cosmological constant. Astronomical Journal, 116:1009–1038. DOI: 10.1086/300499 (in Eng.).

Santos J., Alcaniz J.S., Reboucas M.J., Carvalho F.C. (2007) Energy conditions in f(R) gravity. Physical Review D, 76:083513. DOI: 10.1103/PhysRevD.76.083513 (in Eng.).

Solanki R., Bhat A., Sahoo P.K. (2024) Bulk viscous cosmological model in f(T,$\mathcal{T}$) modified gravity. Astroparticle Physics, 163:103013. DOI: 10.1016/j.astropartphys.2024.103013 (in Eng.).

Visser M. (2000) Energy conditions and their cosmological implications. In: Particle Physics and the Early Universe, 98–112. (in Eng.).

Wald R.M. (1984) General Relativity. University of Chicago Press, 506 p. (in Eng.).

Zhadyranova A., Kanibekova Zh., Zhumabekova V., Koussour M., Anshokova D., Muminov S., Rayimbaev J. (2025) Observational evidence of bulk viscosity effects in f(R,T) cosmological models. Physics Letters A, 548:130560. DOI: 10.1016/j.physleta.2025.130560 (in Eng.).

Zhadyranova A., Koussour M., Kanibekova Zh., Zhumabekova V., Ismail U., Muminov S., Rayimbaev J. (2026) Divergence-free deceleration and energy conditions in non-minimal f(R,T) gravity. International Journal of Geometric Methods in Modern Physics, 23:2550154. DOI: 10.1142/S021988782550154X (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 225–235

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.416

UDC: 61:519.8:004.5
IRSTI: 50.41.17

©Ziyatbekova G.[1,2*], Abdimanapova P.[1], Sagyntay O.[2,3], Nurym A.[1], Ilinov R.[1], 2026.
[1]Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan;
[2]Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;
[3]Narxoz University, School of Digital Technologies, Almaty, Kazakhstan.
*E-mail: ziyatbekova1@gmail.com

USING ARTIFICIAL INTELLIGENCE TO PREDICT DISEASES BASED ON MEDICAL DATA

Ziyatbekova Gulzat — PhD, Associate Professor, Almaty Technological University; Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: ziyatbekova1@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-9290-6074;
Abdimanapova Perizat — PhD, Assistant Professor, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: peryzat74@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8879-9985;
Sagyntay Orynkul — PhD student, senior lecturer, Al-Farabi Kazakh National University; Narxoz University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: orynkulargin@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-4882-4219;
Nurym Akgul — Master's student, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: nurymakgul@gmail.ru, https://orcid.org/0009-0004-8941-832X;
Ilinov Renat — Master's student, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: rinlife13@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-2017-1208.

Abstract. Artificial intelligence (AI) has become a transformative force across numerous sectors, particularly in healthcare. In the field of medical diagnostics, AI technologies are reshaping traditional approaches by enhancing both the speed and precision of disease detection. This paper analyzes contemporary developments in the application of AI for diagnostic purposes, emphasizing its capacity to utilize extensive clinical datasets and genomic information to improve predictive modeling, early detection, and preventive strategies, thereby contributing to improved patient care outcomes. The study seeks to evaluate emerging directions in AI-driven diagnostics and assess their broader implications for the modernization of healthcare systems. This analytical review is grounded in a comprehensive examination of scholarly literature retrieved from major academic databases, including Scopus, PubMed, Web of Science, and Elsevier. The selection of sources was guided by clearly defined inclusion and

exclusion criteria centered on AI methodologies and their diagnostic applications. The findings reveal a significant expansion in the integration of AI into medical diagnostics, underscoring its effectiveness in processing complex and large-scale patient data to generate reliable and clinically relevant diagnostic insights. Ongoing advancements in AI technologies facilitate the rapid evaluation of heterogeneous patient information, such as clinical histories, demographic characteristics, and laboratory findings. As a result, diagnostic practices are becoming increasingly data-driven, anticipatory, and precise, offering substantial potential for healthcare improvement. Nevertheless, despite its considerable capabilities, AI should be regarded as a supportive instrument rather than a substitute for medical professionals in the diagnostic process.

Keywords: artificial intelligence, machine learning, deep learning, healthcare analytics, disease risk assessment, clinical decision support

For citations: *Ziyatbekova G., Abdimanapova P., Sagyntay O., Nurym A., Ilinov R. Using Artificial Intelligence to Predict Diseases Based on Medical Data. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 225–235. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.416*

©Зиятбекова Г.З.[1,2*], Абдиманапова П.Б.[1], Сағынтай О.А.[2,3], Нұрым А.А.[1], Ильинов Р.А.[1], 2026.

[1]Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан;
[2]әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;
[3]Нархоз университеті, Алматы, Қазақстан.
*E-mail: ziyatbekova1@gmail.com

ЖАСАНДЫ ИНТЕЛЛЕКТ КӨМЕГІМЕН МЕДИНИЦИНАЛЫҚ ДЕРЕКТЕР БОЙЫНША АУРУЛАРДЫ БОЛЖАУ

Зиятбекова Гулзат — PhD, қауымдастырылған профессор, Алматы технологиялық университеті; әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: ziyatbekova1@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-9290-6074;
Абдиманапова Перизат — PhD, ассистент-профессор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан, E-mail: peryzat74@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8879-9985;
Сағынтай Орынқұл — PhD докторант, аға оқытушы, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті; Нархоз университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: orynkulargin@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-4882-4219;
Нұрым Ақгүл — магистрант, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: nurymakgul@gmail.ru, https://orcid.org/0009-0004-8941-832X;
Ильинов Ренат — магистрант, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: rinlife13@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-2017-1208.

Аннотация. Жасанды интеллект (ЖИ) әртүрлі салаларға, соның ішінде денсаулық сақтау саласына да айтарлықтай әсер етті. ЖИ ауруларды диагностикалау үдерісін тиімділік пен дәлдікті едәуір арттыру арқылы түбегейлі өзгертуде. Бұл зерттеу ауруларды диагностикалауда ЖИ қолданудың қазіргі үрдістерін қарастырады және клиникалық болжамдарды, ауруларды анықтау мен алдын алуды

CC BY NC

жақсарту үшін ауқымды клиникалық деректер мен геномиканы пайдаланудың әлеуетіне ерекше назар аударады. Соның нәтижесінде науқастардың емдеу нәтижелері жақсарады. Зерттеудің мақсаты — ауруларды диагностикалауда ЖИ қолданудың соңғы үрдістерін талдау және осы технологиялық жетістіктердің денсаулық сақтау саласын қалай өзгерте алатынын түсіну. Бұл аналитикалық шолу Scopus, PubMed, Web of Science және Elsevier сияқты академиялық дерекқорларда жүргізілген кең көлемді әдебиеттерді талдауға негізделген. Зерттеуде ЖИ әдістері мен олардың ауруларды диагностикалауда қолданылуына бағытталған енгізу және шығару критерийлері пайдаланылды. Нәтижелер медициналық диагностикада ЖИ-дің қарқынды дамып келе жатқанын көрсетеді және оның пациенттерге қатысты үлкен көлемдегі деректерді тиімді өңдеп, талдау арқылы дәл әрі нақты диагноз қою мүмкіндігін айқындайды. ЖИ технологияларының үздіксіз дамуы медициналық тарих, демографиялық мәліметтер және зертханалық талдау нәтижелері сияқты әртүрлі пациент деректерін жылдам бағалауға мүмкіндік береді. Бұл жетістіктер диагностиканы болжаушы, алдын алушы және анағұрлым дәл етеді, соның нәтижесінде денсаулық сақтау жүйесінде елеулі өзгерістер болады деп күтілуде. Алайда, ЖИ қуатты құрал болғанымен, ол ауруларды диагностикалауда дәрігердің рөлін толық алмастыра алмайтынын атап өткен жөн.

Түйін сөздер: жасанды интеллект, машиналық оқыту, терең оқыту, медициналық деректер, ауруларды болжау, клиникалық шешім қабылдау

©Зиятбекова Г.З.[1,2*], Абдиманапова П.Б.[1], Сағынтай О.А.[2,3], Нұрым А.А.[1], Ильинов Р.А.[1], 2026.

[1]Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан;
[2]Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;
[3]Университет Нархоз, Алматы, Казахстан.
*E-mail: ziyatbekova1@gmail.com

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЗАБОЛЕВАНИЙ НА ОСНОВЕ МЕДИЦИНСКИХ ДАННЫХ

Зиятбекова Гулзат — PhD, ассоциированный профессор, Алматинский технологический университет; Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: ziyatbekova1@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-9290-6074;
Абдиманапова Перизат — PhD, ассистент-профессор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: peryzat74@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8879-9985;
Сағынтай Орынқұл — PhD докторант, старший преподаватель, Казахский национальный университет имени аль-Фараби; Университет Нархоз, Алматы, Казахстан,
E-mail: orynkulargin@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-4882-4219;
Нұрым Ақгүл — магистрант, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: nurymakgul@gmail.ru, https://orcid.org/0009-0004-8941-832X;
Ильинов Ренат — магистрант, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: rinlife13@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-2017-1208.

Аннотация. Искусственный интеллект (ИИ) оказывает значительное влияние на различные сферы, включая здравоохранение. В частности, технологии ИИ трансформируют медицинскую диагностику, существенно повышая эффективность и точность выявления заболеваний. В данном исследовании рассматриваются современные тенденции применения ИИ в диагностике заболеваний с акцентом на его потенциал в использовании крупномасштабных клинических данных и геномной информации для совершенствования клинического прогнозирования, диагностики и профилактики заболеваний, что в конечном итоге способствует улучшению результатов лечения пациентов. Целью исследования является анализ современных тенденций использования ИИ в диагностике заболеваний и определение того, каким образом данные технологические достижения могут трансформировать сферу здравоохранения. Настоящий аналитический обзор основан на широком анализе научной литературы, представленной в таких академических базах данных, как Scopus, PubMed, Web of Science и Elsevier, с применением критериев включения и исключения, ориентированных на методы ИИ и их использование в диагностике заболеваний. Полученные результаты свидетельствуют о стремительном росте применения ИИ в медицинской диагностике и подчеркивают его способность эффективно обрабатывать и анализировать большие объемы данных пациентов, обеспечивая точные и надежные диагностические решения. Постоянное развитие технологий ИИ позволяет оперативно оценивать разнородные данные пациентов, включая медицинский анамнез, демографические характеристики и результаты лабораторных исследований. Эти достижения делают диагностические процессы более прогностическими, профилактическими и точными, что открывает значительные перспективы для трансформации системы здравоохранения. Однако, несмотря на высокий потенциал ИИ как мощного инструмента, он не может полностью заменить роль врача в процессе диагностики заболеваний.

Ключевые слова: искусственный интеллект, машинное обучение, глубокое обучение, медицинские данные, прогнозирование заболеваний, клиническое принятие решений

Introduction. Artificial intelligence (AI) is increasingly reshaping modern healthcare systems, particularly in the domain of disease diagnostics, by enhancing precision, operational efficiency, and individualized care strategies. AI-driven technologies are widely applied in areas such as medical imaging, digital pathology, and personalized treatment planning, contributing to measurable improvements in clinical outcomes. Despite these advancements, several barriers limit the seamless integration of AI into routine medical practice. Ethical considerations, concerns regarding patient data confidentiality, and the risk of algorithmic bias remain critical challenges. Moreover, existing research lacks comprehensive and context-sensitive frameworks capable of addressing these issues systematically, especially in healthcare environments with limited technological and financial resources. Artificial intelligence has emerged as a powerful instrument for disease risk assessment and predictive analytics based on

CC BY NC

large-scale medical datasets. Techniques derived from machine learning (ML) and deep learning (DL) enable the analysis of electronic health records, clinical parameters, and laboratory findings, facilitating earlier and more accurate disease identification. Empirical evidence suggests that AI-based predictive models achieve high diagnostic performance in detecting cardiovascular disorders, metabolic diseases such as diabetes, and various oncological conditions. Beyond predictive capabilities, AI systems increasingly function as decision-support tools that assist healthcare professionals in improving diagnostic speed and consistency. Nevertheless, persistent concerns regarding data quality, information security, and the interpretability of complex AI models continue to restrict broader clinical acceptance. Overall, scholarly findings consistently highlight the substantial promise of AI technologies in enhancing disease prediction and supporting evidence-based medicine. In addition, artificial intelligence supports physicians' decision-making processes, increasing the speed and quality of diagnosis. Nevertheless, the quality and privacy of medical data, as well as the interpretability of AI systems, remain significant issues. Overall, the literature indicates that artificial intelligence has great potential in disease prediction.

Literature Review. Artificial intelligence (AI), an interdisciplinary field of science and engineering, is primarily aimed at creating and understanding intelligent computational processes, as well as developing systems that demonstrate such intelligence (Mintz et al. 2019; Gupta et al. 2021; Peiffer-Smadja et al. 2020). Within healthcare systems, AI contributes to improved diagnostic accuracy, more effective chronic disease management, and faster drug discovery pathways. However, the implementation of AI-based solutions often involves substantial financial investment and technical complexity. A defining strength of AI lies in its capacity to process and interpret multifaceted clinical information – including radiological images, pathological findings, endoscopic data, ultrasound results, and biochemical indicators – thereby modernizing traditional diagnostic approaches. In particular, AI-driven models have demonstrated strong performance in identifying malignant lesions in medical imaging and enhancing patient selection procedures for clinical trials (Sisodia 2021; Chen et al. 2022; Rajkomar et al. 2019).

From a structural perspective, AI applications in medicine can be categorized into two principal domains: virtual and physical. The virtual domain encompasses machine learning and deep learning methodologies, with deep learning representing a specialized subset of machine learning. Machine learning techniques are typically classified into supervised, unsupervised, and reinforcement learning paradigms, as illustrated in Figure 7. The physical domain, by contrast, involves AI-integrated medical equipment and robotic systems designed to assist in clinical interventions and procedural tasks. Comparative distinctions between artificial intelligence, machine learning, and deep learning are also presented in Figure 7.

AI technologies have been successfully implemented across several key healthcare domains. Clinical decision support systems, initially introduced in the late twentieth century, were developed to standardize clinical workflows and promote adherence to evidence-based guidelines (Topol 2019; Liu et al. 2019; Beam 2018). Furthermore, the

rise of precision medicine has emphasized the use of individual genetic and molecular profiles to customize therapeutic interventions and medication regimens, thereby advancing personalized healthcare models (Memon et al. 2021; Chatterjee et al. 2020; Luo et al. 2019; Romanini et al. 2020).

In medical image analysis, AI has substantially reduced interpretative variability and achieved diagnostic performance comparable to that of experienced specialists in fields such as retinal imaging and mammographic screening (Rodriguez et al. 2020; Nasser et al. 2019; Sklyarov 2022). Additionally, the rapid expansion of the Internet of Things (IoT), supported by the proliferation of smart devices and advanced sensor technologies, has created new opportunities for integrating AI-driven solutions into both hospital-based and remote healthcare environments.

Materials and Methods. Artificial intelligence has achieved significant progress across various domains, including medical imaging, pathology, and personalized medicine. Key technologies such as machine learning, deep learning, and natural language processing have enhanced diagnostic accuracy and efficiency. Applications including tumor detection, drug development, and wearable health monitoring devices have demonstrated substantial impact. However, several challenges remain, including ethical dilemmas, algorithmic bias, regulatory gaps, and data security concerns. To address these issues, innovative solutions have been proposed, such as interdisciplinary collaboration, synthetic data generation, and the establishment of robust legal frameworks.

Results and discussion. Medical Data and Artificial Intelligence. Medical data include clinical indicators, biochemical analyses, medical images, and patient demographic information. Artificial intelligence processes these data to enable early prediction of disease risk and progression.

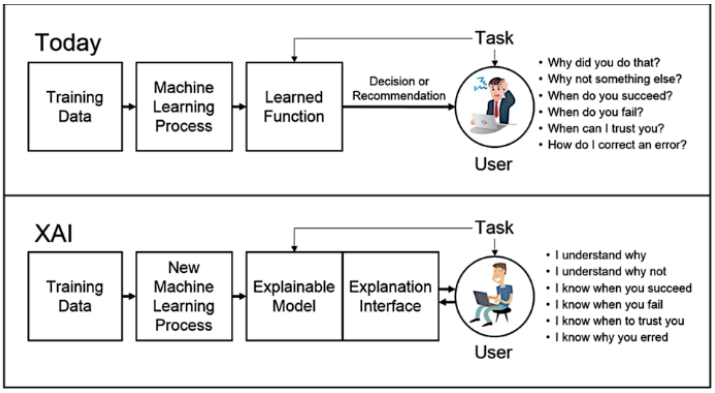


Figure 1 – Comparison of Traditional Machine Learning and Explainable AI (XAI) Frameworks

As shown in Figure 1, the traditional machine learning process produces a learned function that outputs decisions or recommendations without explanation. In contrast, explainable AI (XAI) provides an explanation interface, enabling the user to understand the model's reasoning.

CC BY NC

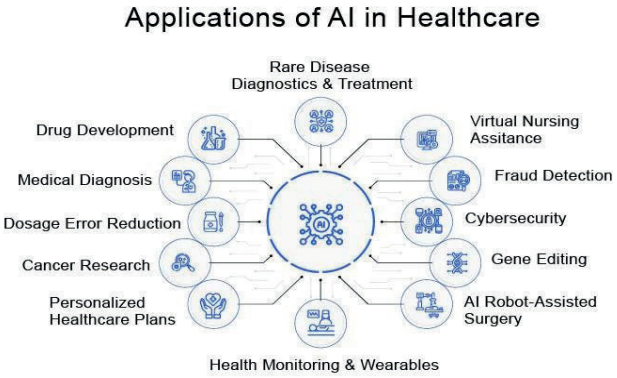


Figure 2 – Applications of AI in Healthcare

As illustrated in Figure 2, artificial intelligence is applied in various healthcare domains such as rare disease diagnostics, drug development, personalized healthcare plans, and robot-assisted surgery.

The Future of Artificial Intelligence in Disease Diagnosis. Medical Data Used in Diabetes Detection.

The following key medical indicators are used to predict diabetes:

- Blood glucose level
- Body Mass Index (BMI)
- Age
- Blood pressure
- Insulin level
- Family history factor (genetic predisposition)

The AI-based workflow for diabetes prediction using neural networks is presented in Figure 3.

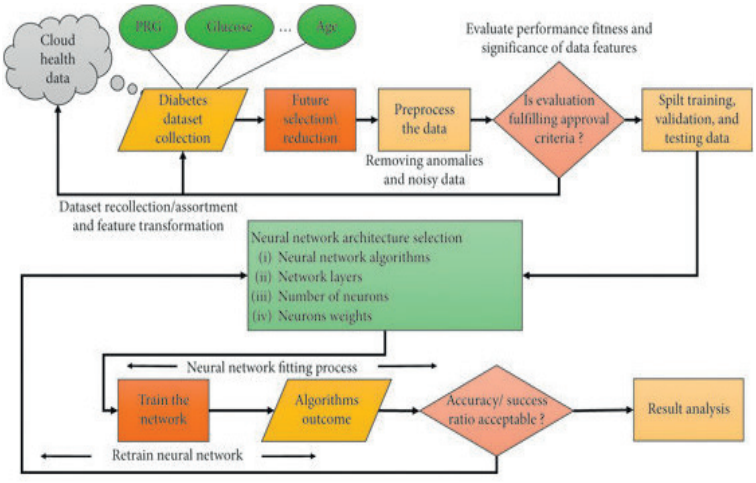


Figure 3 - AI-Based Workflow for Diabetes Prediction Using Neural Networks

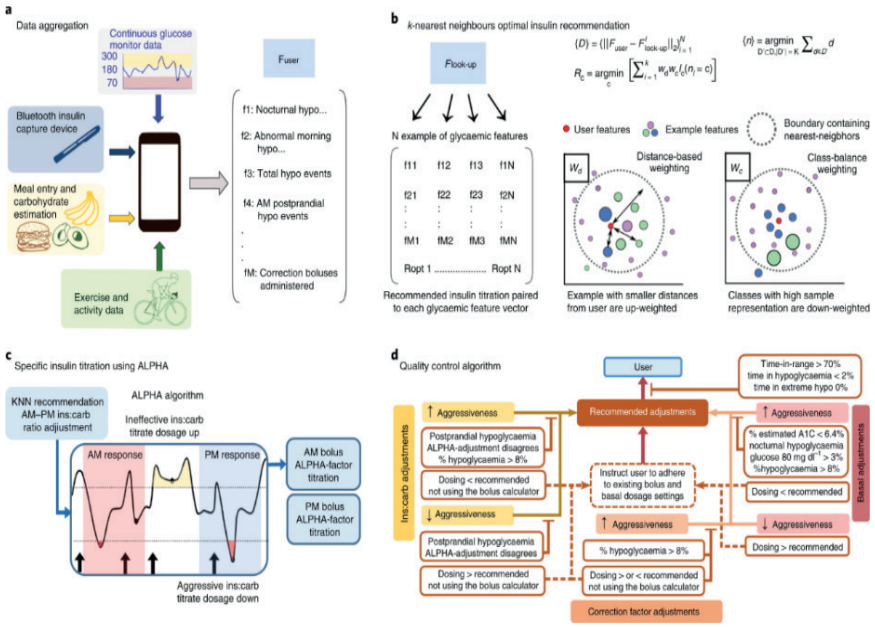


Figure 4 – AI-based decision support system for insulin titration

The AI-based decision support system for insulin titration (Figure 4).

Sample dataset used in the study. The table below presents a sample of medical data used for diabetes detection.

Table 1 – Sample Dataset for Diabetes Detection

№	Age	Glucose (mmol/L)	BMI	Blood Pressure	Diabetes
1	45	8.2	31.4	140/90	Yes
2	34	5.6	24.1	120/80	No
3	50	9.1	33.8	150/95	Yes
4	29	4.9	22.5	110/70	No
5	41	7.8	29.6	135/85	Yes

Based on the analyzed dataset, machine learning algorithms can predict diabetes risk with high accuracy by identifying complex nonlinear relationships between clinical indicators such as glucose level, BMI, age, blood pressure, and genetic predisposition. Predictive models enable early risk stratification and support preventive interventions before clinical complications develop (Table 1).

Predictive Modeling in Chronic Diseases. Artificial intelligence plays a crucial role in predicting chronic diseases through the analysis of large-scale clinical datasets. Machine learning models process structured and unstructured medical data, including electronic health records (EHRs), laboratory results, medical imaging, and demographic information. These systems identify hidden patterns and risk factors that may not be immediately apparent to clinicians. In diabetes prediction, supervised learning algorithms such as logistic regression, decision trees, random forests, and neural networks are

CC BY NC

commonly applied. These models classify patients into risk categories and provide probability-based predictions, improving early diagnosis and disease management.

AI in Oncology Prediction. In oncology, AI-based predictive models analyze tumor characteristics, genetic mutations, and patient-specific clinical parameters to forecast disease progression and treatment response. Machine learning algorithms assist in:

- Predicting cancer recurrence risk;
- Estimating survival probabilities;
- Identifying patients who may benefit from personalized therapies.

Future advancements include integrating multi-omics data (genomics, proteomics, metabolomics) to enhance predictive accuracy and enable precision oncology strategies.

Predictive Analytics in Pathology. Digital pathology combined with deep learning enables automated detection of abnormal cellular structures and early-stage malignancies. AI systems trained on large annotated image datasets can identify micro-level pathological changes associated with disease progression.

Future developments should focus on:

- Standardizing digital data formats for interoperability across healthcare systems;
- Combining histological, molecular, and clinical data to improve diagnostic prediction models. Skin Cancer Risk Prediction. Deep learning models have demonstrated high performance in classifying skin lesions using dermoscopic images. By integrating imaging data with patient history and genetic factors, multimodal AI systems can significantly enhance early skin cancer detection and reduce diagnostic errors.

Integration with Emerging Technologies. The synergy between artificial intelligence, genomics, and the Internet of Things (IoT) expands predictive capabilities in healthcare. Wearable devices and remote monitoring systems continuously collect physiological data, enabling real-time disease risk assessment and proactive medical intervention.

Overview of AI Applications in Disease Prediction. AI applications in healthcare focus on early disease detection, risk stratification, prognosis estimation, and personalized treatment planning. The integration of machine learning, deep learning, predictive analytics, and big data technologies provides substantial improvements in diagnostic accuracy and healthcare efficiency. Table 2 provides a comprehensive overview of the various applications of artificial intelligence in the healthcare sector, highlighting the primary objectives, technologies employed, key benefits, and relevant references for each application, thereby illustrating the transformative potential of AI across multiple domains of medical practice and research.

Table 2 – Summary of AI Applications in Healthcare

AI Application	Primary Objective	Technologies Used	Key Benefits	References
Disease Diagnosis	Early detection of diseases such as cancer and neurological disorders	Deep Learning, CNN, NLP	Improves diagnostic accuracy and enables early intervention	Memon et al.
Drug Discovery	Accelerates the identification of molecular patterns and drug efficacy	Machine Learning, Reinforcement Learning	Reduces time and costs in early stages of drug development	Memon et al.

Personalized Treatment	Tailors treatment strategies based on genetic, lifestyle, and medical history data	Predictive Analytics, Genomic Data Integration	Enhances treatment effectiveness and reduces adverse effects	Chatterjee et al.
Healthcare Records Management	Automates the organization and retrieval of electronic health records	Natural Language Processing (NLP), Blockchain	Streamlines management and ensures secure access to patient data	Luo et al.
Clinical Trial Optimization	Improves patient selection and study design using clinical data	Supervised Learning, Pattern Recognition	Increases trial efficiency and reduces costs	Romanini et al.
Population Health Data Analysis	Processes large-scale healthcare data for research and public health monitoring	Big Data Analytics, Cloud Computing	Enables epidemiological research and improves public health response	Rodriguez et al.
Disease Outbreak Prediction	Predicts and monitors disease outbreaks using multiple data sources	Machine Learning, Predictive Modeling	Enhances epidemic preparedness and resource allocation	Chen et al.
Medical Imaging	Improves interpretation of medical images such as X-rays and MRI scans	CNN, Image Processing	Reduces diagnostic errors and supports early disease detection	Nasser et al.

Conclusions. This study examined the role and potential of artificial intelligence (AI) in disease diagnosis, with particular emphasis on medical imaging, predictive analytics, and personalized medicine. The research reviewed current AI technologies – including machine learning (ML), deep learning (DL), and explainable AI (XAI) – and analyzed their applications in clinical decision support systems, tumor detection, chronic disease prediction, and diabetes risk assessment based on key medical indicators such as blood glucose level, BMI, age, blood pressure, insulin level, and genetic predisposition. The findings demonstrate that AI-based models significantly improve diagnostic accuracy, speed, and efficiency compared to traditional approaches. Neural network–based prediction models, when properly trained and validated, show strong performance in identifying disease risk factors and supporting early diagnosis. Furthermore, AI systems reduce variability in medical image interpretation and enhance data-driven clinical decision-making. At the same time, the study identified critical challenges limiting large-scale implementation, including data quality issues, algorithmic bias, limited interpretability of models, regulatory gaps, and concerns related to data privacy and cybersecurity. The analysis highlights the importance of integrating explainable AI frameworks, ensuring the use of diverse and representative datasets, and strengthening data protection mechanisms. Overall, the research confirms that AI has substantial potential to transform disease diagnosis and healthcare delivery. However, its effective and responsible implementation requires interdisciplinary collaboration, transparent model development, ethical oversight, and robust regulatory standards. Continued advancement in AI technologies, combined with practical clinical validation, will be essential for achieving sustainable and equitable integration of AI into modern healthcare systems.

CC BY NC

References

Beam A.L., & Kohane I.S. (2018). Big data and machine learning in health care. JAMA, 319(13). – P. 1317–1318. https://doi.org/10.1001/jama.2017.18391 (in Eng).

Chatterjee S., et al. (2020). AI-driven personalized medicine: Integrating genomic and clinical data. Frontiers in Genetics, 11, 576123. https://doi.org/10.3389/fgene.2020.576123 (in Eng).

Chen X., Wang X., Zhang K., et al. (2022). Recent advances in deep learning and clinical application in medical image analysis. Medical Image Analysis, 79. – P. 102444. https://doi.org/10.1016/j.media.2022.102444 (in Eng).

Gupta R., Srivastava D., Sahu M., et al. (2021). From artificial intelligence to deep learning: A machine intelligence approach to drug discovery. Molecular Diversity, 25. – P. 1315–1360. https://doi.org/10.1007/s11030-021-10217-3 (in Eng).

Liu X., Faes L., Kale A.U., et al. (2019). A comparison of deep learning performance against healthcare professionals in detecting diseases from medical imaging: A systematic review and meta-analysis. Lancet Digital Health, 1(6), e271–e297. https://doi.org/10.1016/S2589-7500(19)30123-2 (in Eng).

Luo J., et al. (2019). Blockchain and NLP for secure management of electronic health records. Journal of Medical Systems, 43. – P. 178. https://doi.org/10.1007/s10916-019-1280-5 (in Eng).

Memon A., et al. (2021). Artificial intelligence applications in healthcare and diagnostics. Journal of Healthcare Engineering, 2021, 6623457. https://doi.org/10.1155/2021/6623457 (in Eng).

Mintz Y. and Brody R. (2019). Introduction to artificial intelligence in medicine. Minimally Invasive Therapy & Allied Technologies, 28(2). – P. 73–81. https://doi.org/10.1080/13645706.2018.1563140 (in Eng).

Nasser M., et al. (2019). Deep learning for medical imaging: Applications in disease detection. Computers in Biology and Medicine, 109. – P. 108–120. https://doi.org/10.1016/j.compbiomed.2019.03.036 (in Eng).

Peiffer-Smadja N., Rawson T.M., Ahmad R., et al. (2020). Machine learning to support clinical decision-making in infectious diseases: An overview of current applications. Clinical Microbiology and Infection, 26(5). – P. 584–595. https://doi.org/10.1016/j.cmi.2019.11.022 (in Eng).

Rajkomar A., Dean J., & Kohane I. (2019). Machine learning in medicine. New England Journal of Medicine, 380. – P. 1347–1358. https://doi.org/10.1056/NEJMra1814259 (in Eng).

Rodriguez L., et al. (2020). Big data analytics for population health management. International Journal of Medical Informatics, 139, 104144. https://doi.org/10.1016/j.ijmedinf.2020.104144 (in Eng).

Romanini F., et al. (2020). Optimization of clinical trials using machine learning and pattern recognition. Computer Methods and Programs in Biomedicine, 190, 105346. https://doi.org/10.1016/j.cmpb.2020.105346 (in Eng).

Sisodia S.M. (2021). Precision medicine and therapy of the future. Epilepsy, 62 (Suppl 1). – P. S90–S105. https://doi.org/10.1111/epi.16982 (in Eng).

Sklyarov O.K. (2022). Volokonno-opticheskie seti i sistemy svyazi [Fiber-optic networks and communication systems]. 6th edition. – 268 p. ISBN 978-5-8114-9781-2. (in Russian)

Topol E.J. (2019). High-performance medicine: The convergence of human and artificial intelligence. Nature Medicine, 25. – P. 44–56. https://doi.org/10.1038/s41591-018-0300-7 (in Eng).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 236–250

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.417

UDC: 621.311
IRSTI: 31.15.37

©Almassov N.Zh.*, Zhumagaliyeva A.N., Duisenbekov S.E., Zhakiyev N.K. 2026.
*****National Laboratory Astana, Astana, Kazakhstan.
*E-mail: nurlan.almassov@nu.edu.kz

DESIGN AND OPTIMIZATION OF HYBRID RENEWABLE ENERGY SYSTEMS FOR HYDROGEN PRODUCTION IN KAZAKHSTAN

Almassov Nurlan — PhD, National Laboratory Astana, Astana, Kazakhstan,
E-mail: nurlan.almassov@nu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0003-2183-3389;
Zhumagaliyeva Assem — PhD, National Laboratory Astana, Astana, Kazakhstan,
E-mail: assem.zhumagaliyeva@nu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6686-2709;
Duisenbekov Sagydat — PhD Student, National Laboratory Astana, Astana, Kazakhstan,
E-mail: sagydat.duisenbekov@nu.edu.kz, https://orcid.org/0009-0009-9142-9980;
Zhakiyev Nurkhat — PhD, Astana IT University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: Nurkhat.Zhakiyev@astanait.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-4904-2047.

Abstract. Concerns about energy security, national decarbonization goals, and the explosive growth of the global hydrogen economy are the main forces behind Kazakhstan's shift to a low-carbon energy system. In this regard, water electrolysis combined with hybrid renewable energy systems (HRES) offers a viable route to environmentally friendly hydrogen generation, especially in areas like Astana that have a wealth of solar and wind energy. This paper offers a thorough and critical evaluation of HRES design and optimization techniques for hydrogen production under technological, economic, and environmental conditions unique to Kazakhstan. Systems modeled using high-resolution meteorological data for Astana are highlighted, allowing for a realistic assessment of the fluctuation of renewable resources and system performance. The paper focuses on wind-solar-battery-electrolyzer configurations as the most practical designs for central Kazakhstan, synthesizing results from current techno-economic evaluations, optimization frameworks, and sensitivity studies. Important optimization goals are methodically investigated, such as minimizing net present cost and levelized cost of hydrogen, as well as reliability and environmental performance measures. The impact of resource unpredictability, component cost assumptions, and macroeconomic instability on system viability is specifically examined. This review emphasizes key design trends, cost trajectories, and strategic trade-offs pertinent to Kazakhstan's

CC BY NC

deployment of hydrogen-oriented HRES by critically analyzing the body of current literature in a localized context. For academics, system designers, and politicians, the findings offer insightful information that facilitates well-informed decision-making and helps build a strong national framework for the production of green hydrogen.

Keywords: hybrid renewable energy systems, hydrogen production, electrolyzer, ptimization, Astana weather data, Kazakhstan, techno-economic analysis, green hydrogen

Financing. *This research was conducted as part of the targeted funding program for the project IRN* AP26199973*, titled " Design and optimization of a hybrid energy systemfor hydrogen production using an electrolyzerbasedonweatherdatainthecityofAstana".*

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 236–000. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.417*

©Алмассов Н.Ж.*, Жумагалиева А.Н., Дүйсенбеков С.Е., Жакиев Н.К., 2026.
Ұлттық зертхана Астана, Астана, Қазақстан.
*E-mail: nurlan.almassov@nu.edu.kz

ҚАЗАҚСТАНДА СУТЕГІ ӨНДІРУГЕ АРНАЛҒАН ГИБРИДТІК ЖАҢАРТЫЛАТЫН ЭНЕРГИЯ ЖҮЙЕЛЕРІН ЖОБАЛАУ ЖӘНЕ ОҢТАЙЛАНДЫРУ

Almassov Nurlan — PhD, Ұлттық зертхана Астана, Астана, Қазақстан,
E-mail: nurlan.almassov@nu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0003-2183-3389;
Zhumagaliyeva Assem — PhD, Ұлттық зертхана Астана, Астана, Қазақстан,
E-mail: assem.zhumagaliyeva@nu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6686-2709;
Duisenbekov Sagydat — PhD Student, Ұлттық зертхана Астана, Астана, Қазақстан,
E-mail: sagydat.duisenbekov@nu.edu.kz, https://orcid.org/0009-0009-9142-9980;
Zhakiyev Nurkhat — PhD, *Астана IT университеті, Астана, Қазақстан,*
E-mail: Nurkhat.Zhakiyev@astanait.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-4904-2047.

Аннотация. Энергетикалық қауіпсіздік мәселелері, ұлттық декарбонизация мақсаттары және жаһандық сутегі экономикасының жылдам өсуі Қазақстанның төмен көміртекті энергетикалық жүйеге көшуінің негізгі қозғаушы күші болып табылады. Осыған байланысты, су электролизі гибридті жаңартылатын энергия көздерімен (ГЖЭК) біріктіріліп, әсіресе күн және жел энергиясы ресурстары мол Астана сияқты аймақтарда таза сутегі өндірісінің тиімді жолын ұсынады. Бұл мақалада Қазақстанға тән технологиялық, экономикалық және экологиялық жағдайларда сутегі өндірісі үшін ГЖЭК жобалау және оңтайландыру әдістерінің кешенді және сыни бағасы берілген. Астана үшін жоғары дәлдіктегі

метеорологиялық деректерді пайдалана отырып модельденген жүйелерге ерекше назар аударылады, бұл жаңартылатын ресурстардың өзгергіштігі мен жүйенің жұмысын шынайы бағалауға мүмкіндік береді. Мақалада Орталық Қазақстан үшін ең практикалық нұсқалар ретінде жел-күн-аккумулятор-электролизер конфигурацияларына назар аударылады, жүргізіліп жатқан техникалық-экономикалық бағалаулардың, оңтайландыру модельдерінің және сезімталдық зерттеулерінің нәтижелері қорытындыланады. Бұл мақалада таза ағымдағы құнды азайту және сутегінің теңестірілген құнын, сондай-ақ сенімділік пен экологиялық тиімділік көрсеткіштерін азайту сияқты маңызды оңтайландыру мақсаттары әдістемелік тұрғыдан қарастырылады. Бұл шолуда ресурстардың болжанбауының, компоненттердің құны туралы болжамдардың және макроэкономикалық тұрақсыздықтың жүйенің өміршеңдігіне әсері мұқият қарастырылады. Жергілікті контекстегі қолданыстағы әдебиеттерді сыни талдау арқылы Қазақстанда сутегімен жаңартылатын энергияны енгізуге қатысты негізгі жобалау үрдістеріне, шығындар динамикасына және стратегиялық келісімдерге ерекше назар аударылады. Ғалымдар, жүйе әзірлеушілері және саясаткерлер үшін зерттеу нәтижелері ақпараттандырылған шешім қабылдауды қолдау және таза сутегі өндірісі үшін берік ұлттық негіз құруға көмектесетін құнды түсініктер береді.

Түйін сөздер: гибридтік жаңартылатын энергия жүйелері, сутекті өндіру, электролизер, онтайландыру, Астана ауа райы деректері, Қазақстан, техникалық-экономикалық талдау, жасыл сутегі

©Алмассов Н.Ж.*, Жумагалиева А.Н., Дуйсенбеков С.Е., Жакиев Н.К., 2026.
Национальная лаборатория Астана, Астана, Казахстан.
*E-mail: nurlan.almassov@nu.edu.kz

ПРОЕКТИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ГИБРИДНЫХ ВОЗОБНОВЛЯЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ ЭНЕРГИИ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ВОДОРОДА В КАЗАХСТАНЕ

Almassov Nurlan — PhD, Национальная лаборатория Астана, Астана, Казахстан,
E-mail: nurlan.almassov@nu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0003-2183-3389;
Zhumagaliyeva Assem — PhD, Национальная лаборатория Астана, Астана, Казахстан,
E-mail: assem.zhumagaliyeva@nu.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6686-2709;
Duisenbekov Sagydat — PhD Student, Национальная лаборатория Астана, Астана, Казахстан,
E-mail: sagydat.duisenbekov@nu.edu.kz, https://orcid.org/0009-0009-9142-9980;
Zhakiyev Nurkhat — PhD, Астана IT университет, Астана, Казахстан,
E-mail: Nurkhat.Zhakiyev@astanait.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-4904-2047.

Аннотация. Обеспокоенность вопросами энергетической безопасности, национальные цели декарбонизации и стремительный рост мировой водородной экономики выступают основными движущими силами перехода Казахстана к

CC BY NC

низкоуглеродной энергетической системе. В этом контексте электролиз воды в сочетании с гибридными возобновляемыми источниками энергии (ГВИЭ) представляет собой перспективный путь к экологически чистому производству водорода, особенно в таких регионах, как Астана, обладающих значительным потенциалом солнечной и ветровой энергии. В статье представлена всесторонняя критическая оценка методов проектирования и оптимизации гибридных систем для производства водорода с учетом технологических, экономических и экологических условий, характерных для Казахстана. Особое внимание уделяется системам, смоделированным с использованием высокоточных метеорологических данных по Астане, что позволяет реалистично оценить изменчивость возобновляемых ресурсов и эффективность системы. Основное внимание сосредоточено на конфигурациях типа «ветер–солнечная энергия–аккумулятор–электролизер» как на наиболее практичных решениях для центрального Казахстана; при этом обобщаются результаты современных технико-экономических оценок, оптимизационных моделей и исследований чувствительности. В методическом аспекте рассматриваются ключевые цели оптимизации, включая минимизацию чистой приведенной стоимости и приведенной стоимости водорода, а также показатели надежности и экологической эффективности. В обзоре подробно анализируется влияние неопределенности ресурсной базы, допущений о стоимости компонентов и макроэкономической нестабильности на жизнеспособность системы. На основе критического анализа существующей литературы в локальном контексте выделяются основные тенденции проектирования, динамика затрат и стратегические компромиссы, имеющие значение для внедрения водородных технологий на основе возобновляемых источников энергии в Казахстане. Полученные результаты представляют ценность для ученых, разработчиков систем и лиц, принимающих решения, поскольку способствуют выработке обоснованных подходов к формированию надежной национальной базы производства экологически чистого водорода.

Ключевые слова: гибридные системы возобновляемой энергетики, производство водорода, электролизер, оптимизация, метеоданные Астаны, Казахстан, технико-экономический анализ, зеленый водород

Кіріспе. Жаңартылатын энергия көздері мен энергия сақтау технологияларындағы жедел жетістіктер, энергия қауіпсіздігіне деген қажеттілік және климаттың өзгеруін азайту жаһандық энергетика секторын айтарлықтай қайта құруға түрткі болуда. Бейімделгіштігі, жоғары энергия тығыздығы және ауыр өнеркәсіп, қалааралық көлік және маусымдық энергия сақтау сияқты азайту қиын секторларды көміртегінен тазарту әлеуетіне байланысты сутегі осы өтпелі кезеңде негізгі энергия тасымалдаушысы ретінде қайта пайда болды (Franco and Giovannini, 2023). «Жасыл» сутегі деп аталатын ол 100% жаңартылатын электр энергиясын пайдалана отырып, су электролизі арқылы өндірілген кезде нөлге жақын өмірлік цикл шығарындыларына жол ашады (Shin et al., 2023).

Орталық Азиядағы ең ірі экономика болып табылатын Қазақстан дәстүрлі

және жаңартылатын энергия ресурстарының молдығына қарамастан, әлі де негізінен қазба отындарына, әсіресе солтүстік және орталық аймақтарында электр энергиясын өндірудің көп бөлігін құрайтын көмірге тәуелді (Karatayev et al., 2016). Елдің қазба отынын жағудан туындайтын CO_2 шығарындылары 2023 жылы шамамен 237 миллион тоннаға жетті, бұл ұлттық саясатқа да, халықаралық климаттық мақсаттарға да сәйкес көміртегінсіздендіру міндеттемелерінің өзектілігін көрсетеді (IEA, 2023). Жаңартылатын энергия көздерінің қуаты соңғы кезде артқанымен, ол әлі де елдің энергетикалық қоспасының аз ғана бөлігін құрайды. Қазақстанның кең далалары мен тиімді жел сызығына байланысты, әсіресе Астана маңындағы орталық аймақта, жел энергиясы жаңартылатын ресурстар арасында ерекше техникалық перспективаларды көрсетеді (Mussagaliyeva et al., 2025).

Ресурстардың үзілісін азайту, сенімділікті арттыру және жалпы жүйе экономикасын арттыру мүмкіндігіне байланысты бірнеше жаңартылатын көздерді энергия сақтау және энергияны түрлендіру қондырғыларымен бірлесіп біріктіретін гибридті жаңартылатын энергия жүйелері (ГЖЭЖ) барған сайын танымал бола бастады (Jahan et al., 2025). Энергияны сутегіге түрлендіру ГЖЭЖ-ны электролизерлермен біріктіру, артық жаңартылатын электр энергиясын тасымалданатын, сақтауға болатын және бейімделетін энергия көзіне айналдыру арқылы мүмкін болады (Bhattacharyya et al., 2024). Қазақстан сияқты сенімді, бірақ болжау мүмкін емес жаңартылатын ресурстарды ішкі декарбонизациялау және экспорттау үшін жасыл сутегі өндіру үшін пайдалануға болатын жерлерде мұндай интеграцияланған жүйелер әсіресе орынды.

Жергілікті метеорологиялық, технологиялық және әлеуметтік-экономикалық жағдайларда сутегіге бағытталған ГЖЭЖ-ны жобалау және оңтайландыру бойынша кешенді зерттеу Қазақстанның айтарлықтай жаңартылатын әлеуетіне және жасыл сутегіге деген саяси қызығушылықтың артуына қарамастан әлі де жетіспейді. Бұрынғы зерттеулер микрожелілерге, жалпы жаңартылатын интеграцияға немесе тәуелсіз техникалық-экономикалық бағалауға бағытталған (Opakhai et al., 2024). Астананың жоғары ажыратымдылықтағы метеорологиялық деректері мен жергілікті шығындар параметрлерін пайдаланып модельденген жүйелерге баса назар аудара отырып, бұл зерттеу жасыл сутегі өндірісіне арналған ГЖЭЖ жобалау және оңтайландыру тәсілдерін синтездеу және сыни бағалау арқылы осы олқылықты жоюға тырысады.

Көмір, газ және мұнай сияқты қазба отындары Қазақстанның электр энергиясы нарығында басымдықты жалғастыруда, жаңартылатын энергия көздері жалпы электр энергиясын өндірудің тек 6%-ын ғана құрайды (Omirgaliyev et al., 2025). ГЖЭЖ ескірген жылу электр станциялары белгілеген қымбат, жоғары көміртекті стандартқа қарсы тұруы керек, олардың тиімділігі төмендеп, шығарындылары артады. Ірі көлемді жаңартылатын энергия көздерін интеграциялау электр беру шектеулерімен және генерациялау орындары мен жүктеме орталықтары арасындағы айтарлықтай алшақтықпен одан әрі күрделене түседі (Omirgaliyev et al., 2025). Осы жүйелік ерекшеліктерге байланысты ГЖЭЖ жобалары маусымдық

CC BY NC

сұраныстың шектен шығуын, әсіресе қысқы жылыту жүктемелерін және электр желісінің әлсіздігін ескеруі керек. Қазба отындарын жағудан туындайтын Қазақстанның жалпы CO_2 шығарындылары 2023 жылы шамамен 237,3 миллион тоннаға жетті, бұл таза энергияға көшу қажеттілігін көрсетеді (IEA, 2023). ГЖЭЖ көмегімен жасыл сутегі өндірісінің экономикалық және экологиялық құндылық ұсынысын бағалаған кезде, бұл мұрагерлік параметр маңызды базалық деңгейді белгілейді.

Бұл мақаланың мақсаты - жасыл сутегі өндірісі үшін гибридті жаңартылатын энергия жүйелерін (ГЖЭЖ) жобалау және оңтайландыру тәсілдеріне кешенді шолу жасау, олардың Қазақстан жағдайларына қолданылуына ерекше назар аудару. Зерттеуде ГЖЭЖ конфигурациялары, оңтайландыру әдіснамалары, экономикалық параметрлер және Қазақстанға ұқсас континенттік климатта сутегі өндірісіне қатысты сезімталдық факторлары бойынша қолданыстағы әдебиеттер жүйелі түрде қарастырылады. Астана үшін жоғары ажыратымдылықтағы метеорологиялық деректерді пайдаланып модельденген жүйелерге ерекше назар аударылады, бұл жаңартылатын ресурстардың өзгергіштігін және жергілікті жағдайларда жүйенің жұмысын шынайы бағалауға мүмкіндік береді. Жаңартылатын энергияны бағалауды (Karatayev et al., 2016; Mussagaliyeva et al., 2025) немесе сутегі әлеуетін (Opakhai et al., 2024) жеке қарастырған бұрынғы зерттеулерден айырмашылығы, бұл мақала бұрын әртүрлі болған зерттеу салаларын жаңартылатын ресурстарды бағалауды, электролизер технологияларын, көп мақсатты оңтайландыру әдіснамаларын және Қазақстанға тән экономикалық және климаттық параметрлерді байланыстыратын бірыңғай құрылымға біріктіреді. Мақалада халықаралық техникалық-экономикалық бағалаулардың, оңтайландыру модельдерінің және сезімталдық зерттеулерінің нәтижелері синтезделеді, оларды елдің жаңартылатын энергия әлеуеті, макроэкономикалық көрсеткіштері және энергетикалық жүйенің сипаттамалары туралы жарияланған деректерді қосу арқылы Қазақстан жағдайына бейімдейді. Қолданыстағы әдебиеттерді сыни талдау арқылы бұл шолу Қазақстанда сутегі негізіндегі жаңартылатын энергия жүйелерін енгізуге қатысты негізгі жобалау үрдістерін, шығындар динамикасын және стратегиялық ымыраларды анықтауға бағытталған, осылайша елде жасыл сутегі өндірісін дамыту бойынша жұмыс істейтін зерттеушілерге, жүйе әзірлеушілеріне және саясаткерлерге негізгі анықтамалық болып табылады.

Әдебиетке шолу. Қазақстанда жаңартылатын ресурстардың берік негізі бар. Астананың ұзақ мерзімді деректері жоғары қуаттылық факторларын қолдайтын күшті, тұрақты жел үлгілерін көрсетеді, ал жел әлеуеті әсіресе орталық және солтүстік дәліздерде үлкен. Маусымдық ауытқуларға қарамастан, күн фотоэлектрлік (ФЭ) әлеуеті жазғы және тәуліктік пайдалы өнімділікті қамтамасыз етеді. Ең бастысы, Орталық Қазақстанда жел және күн ресурстары уақытша өзара толықтыруды көрсетеді; жел өндірісі көбінесе қыста шыңына жетеді, бұл ФЭ өнімділігінің төмендеуін өтейді (Mussagaliyeva et al., 2025). Жел-күн будандастыруының негізгі негіздемелерінің бірі - осы өзара толықтыру. Бірақ температура –35°C-тан +35°C-тан жоғарыға дейін өзгеретіндіктен, континенттік

орта компоненттердің өнімділігі мен тозу жылдамдығына әсер ететін ауыр жұмыс стресстерін тудырады, бұл мәселені нақты модельдеу қажет (Guddanti et al., 2024). Жергілікті жағдайларда ГЖЭЖ өнімділігін дәл модельдеу және оңтайландыру үшін Астананың типтік метеорологиялық жылы (ТМҮ) деректері, соның ішінде сағаттық жел жылдамдығы, күн сәулеленуі және температура өте маңызды.

Ұлттық стратегия сутекті экспортты әртараптандыру және терең декарбонизациялау құралы ретінде бекітеді. ГЖЭЖ көмегімен жүзеге асырылатын электролиз арқылы жасыл сутегін өндіру Қазақстанның мол жаңартылатын ресурстарын тасымалданатын және сақтауға болатын тауарға айналдыруға мүмкіндік береді. Бұл отандық өнеркәсіптік стратегияға да, жаһандық нарықтық үрдістерге де сәйкес келеді. Артық жаңартылатын өндірісті сіңіре алатын икемді жүктемені қосу арқылы электролизерді интеграциялау шектеуді азайтады және жүйелік экономиканы жақсартады (Bhattacharyya et al., 2024). Нәтижесінде, Қазақстанның ГЖЭЖ оңтайландыруы энергия шығындарына бір ғана назар аударудан сутегі өндірісінің шығындарын, өмірлік цикл шығарындыларын кешенді бағалауға және экспорттық логистиканы қоса алғанда, үлкен сутегі құндылық тізбектеріне интеграциялауға ауысуы керек. Ұлттың жаһандық нарықтар үшін жасыл сутегі өндірісін арттыруға деген ұмтылысы ұсынылған Hyrasia One бағдарламасы сияқты жобалармен көрсетілген, бұл ГЖЭЖ қолдауын оңтайландыруды маңызды зерттеу және әзірлеу басымдығына айналдырады (IRENA, 2025).

Қазақстанда жасыл сутегі өндіруге арналған ең көп таралған және техникалық тұрғыдан негізделген ГЖЭЖ дизайны - жел турбиналарының, күн фотоэлектрлік (ФФ) панельдерінің, батарея энергиясын сақтау жүйелерінің (BESS) және су электролизерлерінің үйлесімі. Астана сияқты орталық жерлерде жел мен күн энергиясының толықтырушы ресурстарының профильдері бұл құрылыстың негізгі қозғаушы күштері болып табылады. Күн фотоэлектрлік энергиясын өндіру жазда шыңына жететін айтарлықтай маусымдық өзгерістерді көрсетсе де, ұзақ мерзімді метеорологиялық талдаулар Астананың жел ресурстарының жыл бойы берік және салыстырмалы түрде тұрақты екенін, қыста айтарлықтай өнімділікпен жұмыс істейтінін растайды (Mussagaliyeva et al., 2025). Бұл уақытша толықтыру жүйенің жалпы үзіліссіздігін төмендету, сенімділікті жақсарту және капиталды көп қажет ететін электролизердің жұмыс уақытын ұзарту арқылы сутегінің деңгейленген құнын (LCOH) арзандатуға бірден ықпал етеді.

Қазақстанның күшті жел қуаты факторлары мен тиімді экономикасына байланысты, елдің электр жүйесін оңтайландыруға негізделген бағалаулар жел басым портфолиолардың құны бойынша оңтайлы екенін бірнеше рет анықтады (Omirgaliyev et al., 2025). Мұндай жағдайларда күн фотоэлектрлік энергиясы қосымша функция атқарады, сәулелену деңгейі жоғары болған кезде жаңартылатын энергия көздерінің қысқаруын азайтуға және электролиз негізіндегі сутегі өндірісін қоса алғанда, күндізгі энергияға деген сұранысты қанағаттандыруға көмектеседі. Батареялар кВт/сағ қымбатырақ болғандықтан, сутегі сақтау ұзақ мерзімді энергия теңгерімі үшін тиімдірек, ал қысқа мерзімді батарея сақтау

CC BY NC

әдетте қуатты тегістеу, үдеткішті қолдау және жиілікті реттеу үшін қолданылады (Zhang et al., 2020). Артық жаңартылатын энергия өндірісін сіңіретін диспетчерлік жүктемелер ретінде қызмет ете отырып, электролизерлер жүйенің икемділігін одан әрі арттырады және жүйенің жалпы пайдаланылуын және экономикалық көрсеткіштерін жақсартады (IEA, 2023).

Қазақстан жағдайындағы оңтайландыру нәтижесі мен экономикалық өміршеңдігіне электр желісіне қосылған және автономды ЖЭС арасындағы стратегиялық шешім үлкен әсер етеді. Желіге қосылған жүйелер жоғары икемділікті қамтамасыз етеді, бұл жаңартылатын энергия көздерін өндірудегі тапшылық кезінде электр қуатын импорттауға және артық электр энергиясын экспорттауға мүмкіндік береді. Өндіріс және сақтау активтерінің шамадан тыс көлеміне қажеттілік аз болғандықтан, бұл келісім әдетте таза ағымдағы құнның (NPC) және LCOH-тың төмендеуіне әкеледі (IRENA, 2025). Дегенмен, бұл экономикалық пайданы бағалау кезінде қоршаған ортамен өзара әрекеттесуді ескеру қажет. Электр желісінің айтарлықтай импорты өндірілген сутегінің «жасыл» сапасына қауіп төндіруі және жанама өмірлік цикл шығарындыларын арттыруы мүмкін, себебі Қазақстан электр желісі әлі де көмірмен жұмыс істейтін өндіріске тәуелді (Shin et al., 2023).

Екінші жағынан, толығымен автономды (желіден тыс) жүйелер, әсіресе Астананың қатты қыстарында сенімділікті сақтау үшін жаңартылатын қуат пен сақтау үшін бастапқы шығындарды көп қажет етсе де, сөзсіз экологиялық таза сутегін жасау артықшылығына ие. Қатаң тұрақтылық талаптары бар жоғары деңгейлі шетелдік нарықтарға бағытталған экспортқа бағытталған жобалар үшін бұл сапа өте маңызды. Алыстағы өнеркәсіптік орындар үшін автономды жүйелер энергетикалық қауіпсіздікті де жақсартады. Ақырында, таңдау инфрақұрылымның қолжетімділігін, сутегінің соңғы пайдаланылуын (ішкі және экспорттық), орналасқан жеріне байланысты желілік көміртегі қарқындылығын және ұзақ мерзімді декарбонизация мақсаттарын теңестіретін көп критерийлі бағалауға негізделген.

Жүйе шекараларын дәл анықтау және жоғары дәлдіктегі, учаскеге тән кіріс деректерін жинау ГЖЭЖ -ні мұқият жобалаудың алғашқы қадамдары болып табылады. Қазақстандық бағыттағы зерттеулерге арналған жүйе шекарасы әдетте электролизер стегі, сутегі қоймасы, қуатты түрлендіру қондырғылары, электр қоймасы (BESS), жаңартылатын генераторлар (жел, фотоэлектрлік) және қажет болған жағдайда электр желісіне қосылу нүктесін қамтиды. Мақсатты учаске үшін нақты, ұзақ мерзімді сағаттық ауа райы деректерін пайдалану өте маңызды. Бұл қоршаған орта температурасын, жаһандық көлденең сәулеленуді және Астана үшін хаб биіктігіндегі жел жылдамдығын қамтиды, мұның бәрі қатал континенттік ортаның өнімділікке қалай әсер ететінін түсіну үшін өте маңызды (Huld and Amillo, 2015).

Негізгі жүйелік шектеулерді репрезентативті жүктеме профильдері және сутегі өндірісінің нақты мақсаты (мысалы, жылдық тонна) ретінде сипаттау қажет. Қосымша маңызды кіріс қабаты экономикалық параметрлерден тұрады.

Қазақстанның электр энергиясының бағалары айтарлықтай ауытқып, 2019 жылдың басындағы 11,57 теңге/кВтсағ-тан 2025 жылдың ортасына қарай 27,93 теңге/кВтсағ-қа дейін жетті. Сол сияқты, соңғы он жылда жылдық инфляция 5,2%-дан 15,0%-ға дейін өзгерді, бұл динамикалық экономикалық модельдеудің қажеттілігін көрсетеді (Stat.gov.kz, 2025). Капиталдық шығындарды есептеу жабдық құнына негізделген. Егер бұл параметрлер нақты құжатталса, оңтайландыру моделі жергілікті шындыққа негізделгеніне кепілдік беріледі.

Сенімді модельдеу әрбір жүйе компонентін дәл модельдеуден басталады. Астананың қысқы төмен температурасы ауа тығыздығында орынға тән өзгерістерге әкеледі, бұл өндірушінің қуат қисықтарын пайдаланып жел турбинасының қуат шығысын есептеу кезінде ескерілуі керек. Фотоэлектрлік модульдердің жұмысын модельдеу кезінде сәулелену және температураға тәуелді тиімділік шығындары ескеріледі. Циклдің қызмет ету мерзімі, разряд тереңдігінің шектеулері және температураға тәуелді тозу - мұның бәрі батареяны сақтау модельдеріне енгізілуі керек. LiFePO4 химиясы қатал ортада ұзақ қызмет етуі және қауіпсіздігі үшін жиі қолданылады (Tang et al., 2024). Shiva Kumar and Himabindu (2019) айтуынша, электролизер моделіне түрлендіру тиімділігі (әдетте қазіргі заманғы PEM/AEL жүйелері үшін 60-75%), минималды жартылай жүктеме шегі, рамп жылдамдығы және уақыт өте келе деградация параметрлері қажет.

Диспетчерлік алгоритм, сондай-ақ операциялық стратегия деп аталады, энергия ағынын нақты уақыт режимінде басқарады. Әдетте иерархиялық басымдық қолданылады: 1) электролизер жүктемесі алдымен жаңартылатын энергия көздерімен қамтамасыз етіледі; 2) кез келген артық заряд батареяны зарядтайды; 3) толық зарядталған батарея электр желісінің экспортына (егер қосылған болса) немесе қысқартуға әкелуі мүмкін; және 4) батарея жаңартылатын энергия тапшылығы кезінде разрядталады, электр желісінің импорты немесе резервтік генератор соңғы шара ретінде қолданылады. Бұл тәсіл сутегі өндірісіне басымдық бере отырып, айнымалы жаңартылатын ресурстарды пайдалануды барынша арттырады (Zhao et al., 2022).

Электролизер суды электрохимиялық жолмен бөлу арқылы электр энергиясын сутегі газына айналдырады. Сутегі өндірісінің жылдамдығының моделі:

$$P_{el} = \frac{\dot{m}_{H2} * LHV_{H2}}{\eta_{el}}$$

Мұндағы,

- P_{el} – электролизерге түсетін электр қуаты (кВт),
- $\dot{m}_{H2}$ – сутегінің массалық ағынының жылдамдығы (кг*сағ$^{-1}$),
- η_{el} – электролизердің тиімділігі,
- LHV_{H2} – сутегінің төменгі қыздыру мәні (≈ 33.33 кВт*сағ*кг$^{-1}$) (Shabeeb Alkhaldi et al., 2024).

Протон алмасу мембранасы (PEM) және сілтілі (AEL) электролизер технологиялары ескеріледі; қазіргі заманғы коммерциялық жүйелер үшін стек

тиімділігі әдетте 60%-дан 75%-ға дейін болады (Shiva Kumar and Himabindu, 2019). Модельге негізгі операциялық шектеулер де кіреді, мысалы, рамп-жылдамдық шектеулері, жүктеме функциясы ретіндегі тиімділіктің ауытқулары және жартылай жүктеменің минималды шектері (әдетте номиналды қуаттың 10-20%) (Zhao et al., 2022).

Материалдар мен әдістер. Бұл зерттеу сутегі өндірісі бар гибридті жаңартылатын энергия жүйелері (ГЖЭЖ) бойынша тиісті зерттеулерді анықтау, таңдау және талдау үшін құрылымдалған және ашық әдебиетке негізделген әдіснаманы пайдаланады. Әдістемелік негіз объективтілікті, қайталанымдылықты және жүйені оңтайландыру зерттеулеріне қатыстылықты қамтамасыз ету үшін әзірленді.

Ғылыми басылымдар Scopus, ScienceDirect және Google Scholar сияқты кеңінен танымал академиялық дерекқорлардан жиналды. Әдебиеттерді іздеу соңғы технологиялық және әдіснамалық әзірлемелерді көрсету үшін 2017 жылдан бері жарияланған сарапшылар қарастырған журнал мақалаларына, конференция материалдарына және техникалық есептерге бағытталған. Іздеу стратегиясы гибридті жаңартылатын энергия жүйелеріне, сутегі өндірісіне, энергия сақтау технологияларына және оңтайландыру әдістеріне қатысты кілт сөздер тіркесімдеріне сүйенді. Әлеуетті тиісті зерттеулерді анықтау үшін алдымен тақырыптар, тезистер және автор ұсынған кілт сөздер талданды.

Содан кейін деректер жиынтығын нақтылау үшін көп сатылы іріктеу процесі қолданылды. Біріншіден, жарияланым тақырыбы мен құжат түріне байланысты қайталанатын және маңызды емес жазбалар алынып тасталды. Екіншіден, қалған зерттеулер жүйенің конфигурациясы, жаңартылатын энергия көздерінің саны, оңтайландыру мәселелерінің болуы және сутегі немесе энергия үнемдеу жүйелеріне қатыстылығы сияқты алдын ала анықталған іріктеу критерийлеріне сәйкес бағаланды. Бұл кезеңде нақты оңтайландыру шеңбері жоқ шолу мақалалары мен зерттеулері алынып тасталды.

Соңғы іріктеу кезеңі әдіснамалық дәлдікті, жүйелік модельдеу тәсілін және қолданылатын оңтайландыру әдістерін бағалау үшін толық мәтінді шолуды қамтыды. Тек кем дегенде екі жаңартылатын энергия көзі бар сутегі негізіндегі жаңартылатын энергия жүйелерін зерттейтін және жүйені жобалау немесе пайдалануды оңтайландыру мәселелерін нақты қарастыратын зерттеулер ғана таңдалды. Содан кейін оңтайландыру алгоритмдері, мақсатты функциялар, есептеу күрделілігі және жүйенің шектеулері сияқты негізгі әдіснамалық сипаттамаларды алу және салыстыру үшін құрылымдалған дерекқор жасалды. Бұл әдіснама жаңартылатын энергия жүйелері үшін кеңінен қолданылатын оңтайландыру тәсілдерін мақсатты және бірізді талдауға мүмкіндік береді және болашақ жүйені дамытуға қатысты басым зерттеу үрдістері мен әдіснамалық олқылықтарды анықтауға көмектеседі.

Ашықтығы мен қолжетімділігіне байланысты, пайдаланушы анықтаған шекаралардағы жан-жақты іздеу әдістерін қолданатын HOMER Pro сияқты бағдарламалық құралдар Қазақстанда алдын ала ГЖЭЖ жобалау үшін кеңінен

қолданылады (Giedraityte et al., 2025). Модельденген конфигурациялар арасындағы шығындарды осы технологиялардың арқасында анық түсіндіруге болады. Дегенмен, түйіршіктілік өзгерген сайын, олардың есептеу жүктемесі тез артады. Аралас бүтін санды сызықтық бағдарламалау (MILP) сияқты детерминистік әдістер есептеуді талап етеді және бірнеше сақтау технологиялары мен климаттық белгісіздіктері бар ГЖЭЖ-ға тән жоғары өлшемді, сызықтық емес мәселелерді шеше алмауы мүмкін болса да, олар айқын компромисстік сандық бағалау маңызды болатын жоғары дәлдіктегі жоспарлау сценарийлері үшін өте қолайлы.

Күрделі, сызықтық емес жобалау кеңістіктерінде тиімдірек шарлау үшін генетикалық алгоритмдер (GA), бөлшектер тобын оңтайландыру (PSO), дифференциалды эволюция (DE) және басым емес сұрыптау генетикалық алгоритмі II (NSGA-II) сияқты күрделі әдістер қолданылады. PSO және DE сияқты метаевристика өздерінің керемет жаһандық іздеу мүмкіндіктері мен жылдам конвергенциясының арқасында желіден тыс жүйелерді жобалауда жоғары өнімділік көрсетті. Әсіресе, торға қосылған жүйелерде NSGA-II сияқты эволюциялық алгоритмдер көп мақсатты оңтайландыру үшін өте қолайлы, себебі олар құны, сенімділігі және шығарындылары сияқты қарама-қайшы мақсаттарды теңестіру үшін кең көлемді Парето фронтын зерттеуді қамтамасыз етеді (Ssekulima and Etemadi, 2025).

Нәтижелер мен талқылау. ГЖЭЖ оңтайландыру зерттеулерінің көпшілігінде экономикалық тиімділік басты мақсат болып қала береді. Сутегінің деңгейленген құнын (LCOH) және таза ағымдағы құнның (NPC) төмендеуі негізгі шаралар болып табылады. Жоба барысында NPC барлық дисконтталған шығындарды, соның ішінде капиталдық инвестицияларды, ауыстыруды, пайдалануды және техникалық қызмет көрсетуді, отынды (қажет болған жағдайда) және энергия сатып алу шығындарын есептемегенде жинақтайды. Өндірілген сутегінің бір килограммына шаққандағы орташа құны немесе LCOH жүйенің жалпы құнын да, өндірілген сутегінің жалпы мөлшерін де ескереді (IRENA, 2025).

Қазақстанның макроэкономикалық құбылмалылығының бұл көрсеткіштерге тигізетін айтарлықтай әсерін асыра бағалау мүмкін емес. Капиталды және пайдалану шығындарының орташа өлшенген құны инфляцияның күрт өсуімен айтарлықтай артады (мысалы, 2022 жылы 15%). Сонымен қатар, су электр станциялары (ГЭС) сияқты ұзақ мерзімді капиталды көп қажет ететін жобалар дисконттау мөлшерлемесін анықтайтын 14-17% жоғары депозиттік мөлшерлемелерден зардап шегеді (2025 жылғы деректерге негізделген) (Stat.gov.kz, 2025). Дисконттау мөлшерлемесінің ±2%-ға өзгеруі жүйенің идеалды конфигурациясын және LCOH-ны 15%-дан астамға өзгерте алатындықтан, осы экономикалық факторлар бойынша сезімталдықты зерттеу міндетті емес, бірақ қажет (IRENA, 2025).

Қазақстандағы айтарлықтай макроэкономикалық құбылмалылыққа байланысты ГЖЭЖ үшін экономикалық сезімталдықты талдау өте маңызды. Зерттеліп отырған жобалық құжаттар дисконттау мөлшерлемелері мен инфляцияның өзгерістерін арнайы қарастырады. Техникалық көрсеткіштер тұрақты болып қалса

CC BY NC

да, өмірлік цикл шығындары жоғары инфляция сценарийлерінде айтарлықтай артады (мысалы, >10%) (Karatayev et al., 2016). Жел турбиналары мен электролизерлер дисконттау мөлшерлемесін таңдауға өте сезімтал капиталды көп қажет ететін компоненттердің мысалдары болып табылады. 2025 жылы байқалған 14-17% депозиттік мөлшерлемелермен салыстыруға болатын жоғары дисконттау мөлшерлемелері алдын ала инвестицияларды жазалайды және көбінесе ең жақсы шешімдердің кішірек жүйе өлшемдеріне немесе электр желісіне көбірек тәуелділікке ауысуына әкеледі. Бұл нәтижелер экономикалық белгісіздікті екінші фактор ретінде қарастырудың орнына тікелей қамтитын оңтайландыру құрылымдарының қажеттілігін көрсетеді (Jahan et al., 2025).

Техникалық сезімталдықты талдау компоненттердің жұмыс істеуіндегі белгісіздіктің және жаңартылатын ресурстардың өзгергіштігінің әсерін бағалайды. Жылдық энергияның көп бөлігін жел энергиясы қамтамасыз ететін Астанада орналасқан жүйелер үшін жел жылдамдығына сезімталдық ерекше маңызды. Зерттеу нәтижелері LCOH орташа жел жылдамдығының 10%-ға төмендеуімен 15%-дан астамға артуы мүмкін екенін көрсетеді, бұл негізінен электролизерді пайдаланудың төмендеуіне байланысты (Li et al., 2024). Оңтайландыру нәтижелеріне минималды жүктеме шектеулері мен электролизердің тиімділігі де әсер етеді. Шектеулі минималды жүктеме жұмыс икемділігін шектесе, жоғары тиімділік сутегі өндіру құнын тікелей төмендетеді. Өмірлік циклді модельдеуде батареяның қызмет ету мерзімі мен қатты температурада тозуымен байланысты қосымша белгісіздікке байланысты сақтықпен болжамдар жасау қажет (Tang et al., 2024).

Осылайша, жел энергиясы басым гибридті конфигурациялар Астана сияқты континенттік климат үшін ең тиімді шешім болып табылады, бұл жоғары қуат факторларын және күн фотоэлектрлік жүйелерімен маусымдық үйлесімділікті жақсартады, бұл жүйенің жалпы сенімділігін арттырады және артық энергияны сақтау қажеттілігін азайтады. Экономикалық бағалаулар сутегінің (LCOH) теңестірілген құнын және таза ағымдағы құнды (NPC) негізгі оңтайландыру мақсаттары ретінде үнемі анықтайды, жел-PEM жүйелері үшін жаһандық LCOH мәндері килограммына 4,5 доллардан 6,5 долларға дейін өзгереді, бұл Қазақстанның дамып келе жатқан сутегі секторы үшін пайдалы эталон болып табылады. Макроэкономикалық тұрақсыздықтың әсеріне ерекше назар аударылады, өйткені инфляцияның күрт өсуі 15%-ға жетеді (2022) және 14-17% депозиттік мөлшерлемелер айтарлықтай белгісіздік тудырады, бұл сенімді жобаны бағалау үшін сенімді сезімталдық талдауын қажет етеді. Жел жылдамдығының өзгергіштігіне техникалық сезімталдық Астанада орналасқан жүйелер үшін маңызды факторға айналуда, онда жел жылдық энергия өндірісінің көп бөлігін құрайды; орташа жел жылдамдығының 10%-ға төмендеуі электролизерді пайдаланудың азаюына байланысты LCOH-ны 15%-дан астамға арттыруы мүмкін. Жеке компонент сипаттамалары, мысалы, минималды жүктеме шектеулері, тиімділік қисықтары және экстремалды температурадағы ыдырау жылдамдығы, оңтайландыру нәтижелеріне одан әрі әсер етеді, әсіресе суық жағдайларда литий

темір фосфаты батареяларының жұмысына баса назар аударылады. Сонымен қатар, электр желісіне қосылу мен электр желісінен тыс қосылу арасындағы ымыра стратегиялық тұрғыдан маңызды: электр желісіне қосылу артық қуат талаптарын азайту арқылы шығындарды 20-30%-ға төмендетуді қамтамасыз етеді, ал электр желісінен тыс жүйелер экспортқа бағытталған сутегі өндірісі үшін ымырасыз экологиялық сертификаттауға кепілдік береді, бұл әсіресе қатаң тұрақтылық критерийлері бар премиум еуропалық нарықтарға қол жеткізу үшін маңызды. Бұл тұжырымдар жергілікті метеорологиялық деректерді, экономикалық параметрлерді және сертификаттау талаптарын біріктіретін Қазақстанға тән оңтайландыру модельдерін әзірлеу қажеттілігін көрсетеді. Дегенмен, экстремалды континентальды температура жағдайындағы компоненттер үшін ұзақ мерзімді пайдалану деректерінде айтарлықтай олқылықтар сақталуда, бұл болашақ зерттеулер мен пилоттық жобалардың басымдықтарын көрсетеді, бұл жүйені дәлірек модельдеу және жобалау үшін эмпирикалық негіз бола алады.

Қорытынды. Бұл зерттеу Қазақстанның аймақтық экономикалық параметрлерге және Астананың климаттық деректеріне негізделген оңтайландырылған гибридті жаңартылатын энергия жүйелері арқылы таза сутегін өндірудің техникалық тұрғыдан мүмкін және тиімді жолын ұсынатынын көрсетеді. Күн фотоэлектрлік жүйелерімен, батарея сақтау құрылғыларымен және мұқият таңдалған электролизерлермен біріктірілген гибридті жел жобалары аймақтық климаттық және қаржылық жағдайларда сенімді жұмыс істеуді қамтамасыз етеді. Әдебиетке шолу жел мен күн ресурстары арасындағы маусымдық өзара толықтыру жүйенің сенімділігін арттыратынын және электролизердің жұмыс уақытын ұзарту арқылы сутегі өндірісінің шығындарын азайтатынын растайды. Экономикалық бағалаулар LCOH (бірлік көлемдегі ұшпа органикалық қосылыстар) жел ресурстарының өзгергіштігіне және дисконттау мөлшерлемелеріне өте сезімтал екенін көрсетеді, бұл Қазақстанның тұрақсыз макроэкономикалық ортасында жобаларды жоспарлау кезінде сезімталдықты талдаудың маңыздылығын көрсетеді.

Бәсекеге қабілеттілікке қол жеткізу, әсіресе экспорттық нарықтарда, сутегі инфрақұрылымын кешенді дамытуды, стратегиялық саясатты қолдауды және технологиялық шығындарды үздіксіз төмендетуді қажет етеді. Электр желісіне қосылған және электр желісінен тыс жүйелер арасында таңдау жасау стратегиялық шешім болып табылады: электр желісіне қосылған жүйелер шығындарды 20-30%-ға төмендете алады, ал электр желісінен тыс жүйелер экспортқа бағытталған жобалар үшін ымырасыз экологиялық сертификаттауды қамтамасыз етеді. Эмпирикалық деректердегі, әсіресе экстремалды температурадағы ұзақ мерзімді компоненттердің өнімділігіне қатысты олқылықтарды жою, күрделі динамикалық оңтайландыру модельдерін енгізу және жүйе шекараларын бүкіл жеткізу тізбегі экономикасын қамту үшін кеңейту болашақ зерттеулердің негізгі басымдықтары болуы керек. Осы қиындықтарды шешу арқылы Қазақстан өзінің мол жаңартылатын ресурстарын стратегиялық тұрғыдан пайдаланып, дамып келе жатқан жаһандық жасыл сутегі экономикасының негізгі қатысушысы бола алады.

CC BY NC

References

Bhattacharyya R., Singh K., K Bhanja and Grover R. (2024). Using electrolytic hydrogen production and energy storage for balancing a low carbon electricity grid: scenario assessments for India. Energy and Climate Change, 5, 100131–100131. DOI: 10.1016/j.egycc.2024.100131 (in Eng.).

Franco A., and Giovannini C. (2023). Routes for hydrogen introduction in the industrial hard-to-abate sectors for promoting energy transition. Energies, 16 (16). – P. 6098–6098. DOI: 10.3390/en16166098 (in Eng.).

Giedraityte A., Rimkevicius S., Marciukaitis M., Radziukynas V., and Bakas R. (2025). Hybrid renewable energy systems–A review of optimization approaches and future challenges. Applied Sciences, 15(4). – P. 1744. DOI: 10.3390/app15041744 (in Eng.).

Guddanti K.P., Bharati A.K., Nekkalapu S., McWheter J., and Morris S. (2024). A comprehensive review: Impacts of extreme temperatures due to climate change on power grid infrastructure and operation. arXiv. DOI: 10.48550/arXiv.2410.08425 (in Eng.).

Huld T., and Amillo A. (2015). Estimating PV module performance over large geographical regions: The role of irradiance, air temperature, wind speed and solar spectrum. Energies, 8(6). – P. 5159–5181. DOI: 10.3390/en8065159 (in Eng.).

IEA. (2023). Renewable power generation costs in 2021. Abu Dhabi: International Renewable Energy Agency (in Eng.).

IRENA. (2025). Green hydrogen for industrial decarbonisation: Central Asia and the South Caucasus (in Eng.).

Jahan F., Md Mahfuj Hosen, Khan M.R., Islam M.S., and Talukder M. J. (2025). Hybrid renewable energy systems: Integrating solar, wind, and biomass for enhanced sustainability and performance. SSRN Electronic Journal. DOI: 10.2139/ssrn.5162816 (in Eng.).

Karatayev M., Hall S., Kalyuzhnova Y., and Clarke M.L. (2016). Renewable energy technology uptake in Kazakhstan: Policy drivers and barriers in a transitional economy. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 66. – P. 120–136. DOI: 10.1016/j.rser.2016.07.057 (in Eng.).

Li X., Tang X., Ma M., Wang M., and Xu C. (2024). Levelized cost analysis of onshore wind-powered hydrogen production system in China considering landform heterogeneity. Energy, 313, 133942. DOI: 10.1016/j.energy.2024.133942 (in Eng.).

Mussagaliyeva A., Mursal M., Mukayev Z., and Zhunussova M. (2025). Sustainable siting of wind farms in Kazakhstan: A case study of the Karaganda region. Geojournal of Tourism and Geosites, 63(4spl). – P. 2860–2868. DOI: 10.30892/gtg.634spl30-1645 (in Eng.).

Omirgaliyev R., Shauyenova A., Merlenkyzy N., Maulen A., and Zhakiyev N. (2025). Study of scenario analysis of the aleectricity market of Kazakhstan using renewable energy sources on the PyPSA tool. Applied Sciences, 15(21). – P. 11497. DOI: 10.3390/app152111497 (in Eng.).

Opakhai S., Kuterbekov K. and Zhumadilova Z. (2024). Hydrogen energy in Kazakhstan: prospects for development and potential. Polityka Energetyczna, 27(2). – P. 141–194. DOI: 10.33223/epj/188475 (in Eng.).

Shin H., Jang D., Lee S., Cho H.-S., Kim K.-H., and Kang S. (2023). Techno-economic evaluation of green hydrogen production with low-temperature water electrolysis technologies directly coupled with renewable power sources. Energy Conversion and Management, 286, 117083. DOI: 10.1016/j.enconman.2023.117083 (in Eng.).

Shiva K.S., and Himabindu V. (2019). Hydrogen production by PEM water electrolysis – A review. Materials Science for Energy Technologies, 2(3). DOI: 10.1016/j.mset.2019.03.002 (in Eng.).

Ssekulima E.B., and Etemadi A.H. (2025). Stochastic optimization framework for capacity planning of hybrid solar PV–small hydropower systems using metaheuristic algorithms. Complex and Intelligent Systems, 12(1). DOI: 10.1007/s40747-025-02151-w (in Eng.).

Stat.gov.kz. (2025). Inflation in the Republic of Kazakhstan: price dynamics including electricity tariffs (in Eng.).

Tang Z., Xie Z., Cai Q., Xia Z., Chen Q., Liang W., He J., Xing L., and Li W. (2024). Unlocking superior safety, rate capability, and low-temperature performances in LiFePO4 power batteries. Energy Storage Materials, 67, 103309. DOI: 10.1016/j.ensm.2024.103309 (in Eng.).

Zhang Y., Hua Q.S., Sun L., and Liu Q. (2020). Life cycle optimization of renewable energy systems configuration with hybrid battery/hydrogen storage: A comparative study. Journal of Energy Storage, 30, 101470. DOI: 10.1016/j.est.2020.101470 (in Eng.).

Zhao D., Xia Z., Guo M., He Q., Xu Q., Li X., and Ni M. (2022). Capacity optimization and energy dispatch strategy of hybrid energy storage system based on proton exchange membrane electrolyzer cell. Energy Conversion and Management, 272, 116366. DOI: 10.1016/j.enconman.2022.116366 (in Eng.).

CC BY NC

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 251–266

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.418

UDC: 666.942.8
IRSTI: 65.35.33

©Amangeldi B.[1], Zhanikulov N.[2*], Taimasov B.[1], Aitureev M.M.[1], Dauletiyarov M.[1], 2026.
[1]M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan;
[2]Academician Ye.A. Buketov Karaganda National Research University, Karaganda, Kazakhstan.
E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru

CALCULATION OF THE RAW MATERIAL COMPOSITION FOR OBTAINING WHITE PORTLAND CEMENT CLINKER

Amangeldi Bekassyl — PhD student, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: bekasyl700@mail.ru, https://orcid.org/my-orcid?orcid=0009-0002-3378-6110;
Zhanikulov Nurgali — PhD, associate professor, Academician Ye.A. Buketov Karaganda National Research University, Karaganda, Kazakhstan,
E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0750-9753;
Taimasov Bakhitzhan — Doctor of Technical Sciences, Professor, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: taimasovukgu@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-1844-4932;
Aitureev Murat — Candidate technical sciences, associate professor, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: murattssm@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-8154-0417,
Dauletiyarov Mukhtar — Candidate technical sciences, associate professor, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: muhtar-66@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-9578-8202.

Abstract. This scientific article presents the results of a study examining the suitability of raw materials required to produce white Portland cement clinker, calculating optimized raw mix compositions, and evaluating the quality of the fired clinker. There is a very high demand globally for high-quality, environmentally friendly, high-strength white Portland cement. This work is relevant both for our country and for global white Portland cement production. This is due to the fact that for the first time, a composition of white Portland cement clinker for decorative and construction work has been developed using Kazakhstani raw materials and industrial waste. In this article, the chemical composition of the raw materials and industrial waste was determined using an X-ray fluorescence spectrometer. The composition of the raw mix was calculated and optimized using the "Shikhta" computer program. The quality of the fired clinker

was determined using the ethylene glycerate method for the content of unbound CaO_{free} in the clinker. The final quality and whiteness of the clinker were determined using the «R3-TBMS-M» instrument. The following raw material batch compositions were calculated: “Limestone+Kokshetau kaolin+electrothermophosphorus slag” and “Limestone+Angren kaolin+electrothermophosphorus slag”. The dependence of clinker on the raw material type, saturation coefficient, silicate and alumina moduli was determined. The feasibility of introducing 5-35% electrothermophosphorus slag into the batch composition to produce white Portland cement clinker was established. In the developed batch compositions from the raw material composition “Limestone+Kokshetau kaolin+electrothermophosphorus slag”, the clinker formation process was completed at a temperature of 1500□, and the CaO_{free} content was 0.54-1.62%. The clinker whiteness was 74.1-78.1%. When using a raw material composition of “Limestone+Angren kaolin+electrothermophosphorus slag,” the clinker formation process was completed at a temperature of 1450-1500°C, and the CaO_{free} content was 0.27-1.35%. The whiteness of the resulting clinker was 71.4-82.1%. As a result, it was proven that all the resulting clinker is suitable for producing class 1 and 2 white cements.

Keywords: limestone, kaolin, electrothermophosphoric slag, raw mix, whiteness, clinker, white cement

For citations: *Amangeldi B., ZhanikulovN., Taimasov B., Aitureev M.M., Dauletiyarov M. Calculation of the Raw Material Composition for Obtaining White Portland Cement Clinker. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 251–266. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.418*

©Амангелді Б.[1], Жаникулов Н.[2*], Таймасов Б.[1], Айтуреев М.[1], Даулетияров М.[1], 2026.

[1]М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан;
[2]Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан.
E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru

АҚ ПОРТЛАНДЦЕМЕНТ КЛИНКЕРІН АЛУ ҮШІН ШИКІЗАТ ШИХТА ҚҰРАМЫН ЕСЕПТЕУ

Амангелді Бекасыл — PhD докторант, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: bekasyl700@mail.ru, https://orcid.org/my-orcid?orcid=0009-0002-3378-6110;
Жаникулов Нұрғали — PhD, қауымдастырылған профессор, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0750-9753;
Таймасов Бахитжан — техника ғылымдарының докторы, профессор, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: taimasovukgu@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-1844-4932;
Айтуреев Мұрат — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail:murattssm@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-8154-0417;

Даулетияров Мухтар — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: muhtar-66@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-9578-8202.

Аннотация. Ғылыми мақалада ақ портландцемент клинкерін алу үшін қажетті шикізат материалдардың жарамдылығы, оңтайландырылған шикізат шихта құрамдарды есептеу және күйдірілген клинкердің сапасы бойынша нәтижелер көрсетілген. Әлемде жоғары сапалы, 1 және 2 дәрежелі ақ, экологиялық таза, беріктігі жоғары ақ портландцементке сұраныс өте жоғары. Зерттеу жұмысы еліміз үшінде, жалпы әлемдік ақ портландцемент өндірісі үшінде өзекті. Себебі, алғаш рет Қазақстандық шикізат материалдар мен өндіріс қалдықтарды пайдаланып декоративті құрылыс жұмыстарға арналған ақ портландцемент клинкерінің құрамы әзірленген. Мақалада шикізат материалдар мен өндіріс қалдығының химиялық құрамы рентгендік флуоресценциялық спектрометр көмегімен анықталды. «Шихта» компьютерлік бағдарламасының көмегімен шикізат шихта құрамы есептелді және оңтайландырылды. Күйдірілген клинкер сапасы этиленді-глицератты әдіс көмегімен клинкер құрамындағы байланыспаған $CaO_{бос}$ анықталды. Клинкердің ақтық сапасы «Р3-ТБМС-М» құралының көмегімен анықталды. «Әктас+каолин Көкшетау+электротермофосфор шлагы» және «Әктас+каолин Ангрен+электротермофосфор шлагы» шикізат шихта құрамдары есептелді. Клинкердің шикізат түріне, қанығу коэффициентіне, силикатты және глиноземді модульдерге тәуелділік заңдылықтары айқындалды. Ақ портландцемент клинкер алу үшін шихта құрамына 5 – 35 % дейін электротермофосфор шлагын ендіру мүмкіндігі белгіленді. Әзірленген «Әктас+каолин Көкшетау+электротермофосфор шлагы» шикізат шихта құрамдарда клинкер түзілу процесі 1500 □ температурада аяқталды және $CaO_{бос}$ мөлшері 0,54–1,62 % болды. Клинкерлердің ақтық дәржесі 74,1–78,1 % көрсетті. Ал «Әктас+каолин Ангрен+электротермофосфор шлагы» шикізат шихта құрамдарда клинкер түзілу процесі 1450-1500 □ температурада аяқталды және $CaO_{бос}$ мөлшері 0,27–1,35 % болды. Алынған клинкерлердің ақтық дәржесі 71,4–82,1 % көрсетті. Нәтижесінде барлық алынған клинкерлер 1-ші және 2-ші дәрежелі ақ цементтерді алуға жарамды екендігі дәлелденді.

Түйін сөздер: әктас, каолин, электротермофосфор шлагы, шикізат шихтасы, ақтық дәрежесі, клинкер, ақ цемент

©Амангелді Б.[1], Жаникулов Н.[2*], Таймасов Б.[1], Айтуреев М.[1], Даулетияров М.[1], 2026.
[1]Южно-Казахстанский университет имени Ауэзова, Шымкент, Казахстан;
[2] Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан.
E-mail:nurgali.zhanikulov@mail.ru

РАСЧЁТ СОСТАВА СЫРЬЕВОЙ ШИХТЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ БЕЛОГО ПОРТЛАНДЦЕМЕНТНОГО КЛИНКЕРА

Амангелди Бекасыл — PhD докторант, Южно-Казахстанского университета имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: bekasyl700@mail.ru, https://orcid.org/my-orcid?orcid=0009-0002-3378-6110;

Жаникулов Нургали — PhD, ассоциированный профессор, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0750-9753;
Таймасов Бахитжан — доктор технических наук, профессор, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: taimasovukgu@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-1844-4932;
Айтуреев Мурат — кандидат технических наук, доцент, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail:murattssm@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-8154-0417;
Даулетияров Мухтар — кандидат технических наук, доцент, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: muhtar-66@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-9578-8202.

Аннотация. В статье представлены результаты исследования пригодности сырьевых материалов для получения белого портландцементного клинкера, расчета оптимизированных составов сырьевых смесей и оценки качества обожженного клинкера. В настоящее время в мире сохраняется высокий спрос на высококачественный, экологически безопасный и высокопрочный белый портландцемент. Актуальность работы обусловлена как потребностями отечественной промышленности, так и общемировыми тенденциями развития производства белого портландцемента. Научная новизна исследования заключается в том, что впервые разработан состав белого портландцементного клинкера для декоративных и строительных работ с использованием казахстанского сырья и техногенных отходов. В исследовании химический состав сырья и техногенных отходов определяли с помощью рентгенофлуоресцентного спектрометра. Составы сырьевых смесей рассчитывали и оптимизировали с использованием компьютерной программы «Шихта». Качество обожженного клинкера оценивали методом этиленгликолята по содержанию свободного CaO в клинкере. Конечное качество и белизну клинкера определяли с помощью прибора «РЗ-ТБМС-М». Были рассчитаны следующие составы сырьевых смесей: «известняк + кокшетауский каолин + электротермофосфорный шлак» и «известняк + ангренский каолин + электротермофосфорный шлак». Установлена зависимость свойств клинкера от типа сырья, коэффициента насыщения, силикатного и глиноземного модулей. Показана возможность введения 5–35 % электротермофосфорного шлака в состав сырьевой смеси для получения белого портландцементного клинкера. Для разработанных составов на основе смеси «известняк + кокшетауский каолин + электротермофосфорный шлак» процесс клинкерообразования завершался при температуре 1500 °С, а содержание свободного CaO составляло 0,54–1,62 %. Белизна клинкера находилась в пределах 74,1–78,1 %. При использовании сырьевой смеси «известняк + ангренский каолин + электротермофосфорный шлак» процесс клинкерообразования завершался при температуре 1450–1500 °С, а содержание свободного CaO составляло 0,27–1,35 %. Белизна полученного клинкера составляла 71,4–82,1 %. В результате установлено, что весь полученный клинкер пригоден для производства белых цементов 1-го и 2-го классов..

Ключевые слова: известняк, каолин, электротермофосфорный шлак, сырьевая смесь, белизна, клинкер, белый цемент

Кіріспе. Әлемдік портландцемент өндірісінің көлемі 2025 жылы 4 млрд тонна цементке жетті, оның ішінде ақ портландцементтің көлемі 23 млн тоннаны құрады, бұл жалпы өндіріс көлемінің небәрі 1 % үлесінеде жетпейді (White cement, 2026). Ақ портландцементті өндірген елдердің қатарына Қытай – 40 %, Үндістан – 15 % және Еуропа құрлығынан Дания мен Түркияның көрсеткіші жоғары болып келеді. Дүние жүзінде ақ портландцементтің нарықтық бағамы 2025 жылы 9,85 млрд АҚШ долларды құрады, бұл 2024 жылғы көрсеткіштен 6,8 % жоғары болды (White cement, 2025). Негізгі ақ портландцемент өндірушілер тізіміне Aalborg White, Çimsa, JK Cement, UltraTech Cement, Cemex және Holcim секілді ірі кәсіпорындар жатады. Бұл зауыттар ақ портландцемент өндірісінде «жасыл құрылыс» принциптерді қатаң түрде сақтап, энергия және ресурс үнемдеу технологияларды жүзеге асыра отырып, жоғары сападағы экологиялық таза ақ цементтерді өндіреді.

Ақ портландцемент өндіру үшін оған бірнеше талаптар қойылады. Негізгі талаптардың бірі жоғары сапалы құрамында темір оксиді өте төмен болып келетін табиғи шикізаттар мен техногенді қалдықтарды қолдану ұсынылған. Ақ портландцемент алу кезінде клинкер күйдіру процессі жоғары температурада 1450-1500^{0}C жүргендіктен, атмосфераға таралатын зиянды парникті газдардың да үлесі жоғары болып келеді. Жалпы құрылыста қолданатын сұр цемент алу кезінде CO_2 шығарындылары 1 т клинкер үшін 620-690 кг болса, ақ портландцемент клинкері үшін 860-960 кг дейін жетеді (Euronext Sustainability, 2025). CO_2 газының көптеп бөліну себебінің бірі шикізаттарда температураны төмендетуші Fe_2O_3 аз болуымен байланыстырылады. Технологиялық процесте шикізат материалының жентектелуі есебінен айналмалы пеште атмосфераның төмендеуі негізгі фактордың бірі болып саналады.

БҰҰ-ның мәліметіне сәйкес әлемде цемент өндіруші компанияларға зиянды газдарды (CO, CO_2, SO_2, NO_x) атмосфераға тарату бойынша 7-8 % тиесілі екен. Осы себептен ақ портландцемент өндіру климаттың өзгеруіне, жаһандық жылыну мәселесіне, табиғи шикізат көздердің азаюына, энергияны көп тұтынуға әсерін тигізері сөзсіз (Cement Industry, 2024). Ғалымдар ақ портландцемент өндірісін дамытуда тиімді технологиялық ұсыныстар мен мәселелердің тиімді шешімдерін ұсынып келеді. 2005 жылы ақ портландцемент клинкерді алу үшін шикізат шихта құрамына доменді шлакты қосу арқылы клинкердің ақшыл түсін жақсартуға болатындығын, сонымен қатар, басқада химиялық өндіріс қалдықтарды қолданып көру қажеттігін ұсынған. Осы доменді шлак қосылған шикізат шихтасын күйдіру кезінде энергия қажеттілік және зиянды түтінді газдардың шығу көрсеткіші 20 % төмендегені, өнімнің беріктік көрсеткіші артқандығы анықталған (Brett et. al, 2008).

2024 жылы Еуропалық одақ елдерінде CASPER жобасы аясында цемент зауытының пештерінде парникті газдарды ұстау, соның ішінде CO_2 газын 20 тонна ұстау сәтті жүзеге асты. Осы жоба аясында ACCSION инновациялық қорының қолдауымен барлық цемент зауыттарды CO_2 газын бір жылда 400 мың тоннаға дейін жинау жоспарлады, ары қарай 2030 жылы бұл көрсеткішті нөлге дейін

жеткізу көзделді. Негізі мақсат парниктi газдардың таралуын азайту арқылы жаһандық жылыну процесін тежеуге бағытталған (Chatterjee, 2018).

Arusmalem G. және басқада ғалымдар алынған ақ портландцемент беріктігін бетон қоспасына әсерін сынау арқылы сұр портландцементпен салыстыру жұмыстарды жүргізген. Әдеттегідей ақ портландцемент бағасының сұр цементке қарағанда қымбат екендігін, алайда сәулет жұмыстарында ақ портландцемент түрін пайдалану тиімді екендігіне тоқталған. Бетон беріктігін 3, 7, 14, 21 және 28 тәуліктен кейінгі көрсеткіштерге сынау арқылы қысудағы беріктігін салыстырған. Нәтижесінде ақ портландцемент ендірілген бетон беріктігі 3 тәуліктен кейін 13,81 МПа жетсе, бұл көрсеткіш сұр цементте 13,03 МПа құраған. Осы секілді 7 тәуліктен кейінгі көрсеткіш ақ портландцементте 16,68 МПа болса, сұр цементте 15,11 МПа болды. Бетон беріктігінің толық қатаюы көрсеткіші 80-90 % ға 28 тәуліктен кейін жететіндігін ескерсек, ақ портландцементте 28 тәуліктен кейін беріктігі 23,11 МПа болса, сұр цемент ендірілген бетон беріктігі 20,54 МПа болды. Салыстырмалы түрде анықталғандай, ақ портландцемент бетон беріктігіне әсері тиімді екендігі дәлелденген (Arusmalem et. al, 2022).

Ақ портландцемент сапасын арттыру үшін қытайлық цемент өндірушілер шикізат шихта құрамына 16-18 % - SiO_2, 0,5-0,7 % - боксит және 0,8-1,0 % - минерализатор ендіру, шикізат шихтаның модульдік көрсеткіштерін ҚК=0,98; n=5,2; p=6,1 жеткізу, шихтаны 1500^0C температурда күйдіру арқылы клинкер күйдіріп алды. Нәтижесінде алынған ақ портландцемент клинкерінің ақтық дәрежесі шамамен 86 % дейін жетті. Компания жетекші мамандары аталған рецептураны және технологиялық процестерді қатаң сақтау қажеттігін ескерткен (Patent, 2019).

Mohamed B. және басқа ғалымдар ақ портландцемент алу кезінде қателіктерге тап болғанын және технологиялық қателіктерді алдын алу қажеттігі бойынша ғылыми мақала жариялаған. Атылған ғалымдар ақ портландцемент клинкер алу үшін шикізат материалдардың құрамында Fe_2O_3 мөлшерінің минималды болуын, сапалы таза, ақтығы жоғары әктас минералын пайдалу қажет екендігін, каолин құрамында SiO_2 мөлшерінің артық болуын, гомегенизация (біректілеу) процесінің нашар болмауын қамтамасыз ету қажетігіне тоқталған. Ақ портландцемент клинкер түзілу процесінде шикізат шихтасының модульдік көрсеткіштері (ҚК және модульдер), күйдіру жоғары температура режимінде сақталмай ақ клинкер алу мүмкін еместігін алға тартқан. Күйдіру процестегі кез-келген ауытқулар мен өзгерістер энергиялық шығындардың артуы мен технологиялық мәселеге әкелетіндігін айқындаған. Зерттеу жұмыстары кезінде алынған ақ клинкердің минералогиялық құрамында алит – 58,5-85,5 %, белит – 2,8-27,6 % дейін ауытқыған. Клинкердегі бос CaO мөлшері 3,8 % дейін артып кеткендігі анықталған. Алынған клинкерді микроскопиялық талдау нәтижесінде клинкер суыту процесі дұрыс орындалмағыны әсерінен түзілген минералдардың геометриялық пішіндері өзгерген, кристал түзілу, портландит және периклаз екіншілік минералдарының түзілуі анықталған. Алит минералы пішінсіз, қуыс тесікті болып кездескен (Mohamed et. al, 2016).

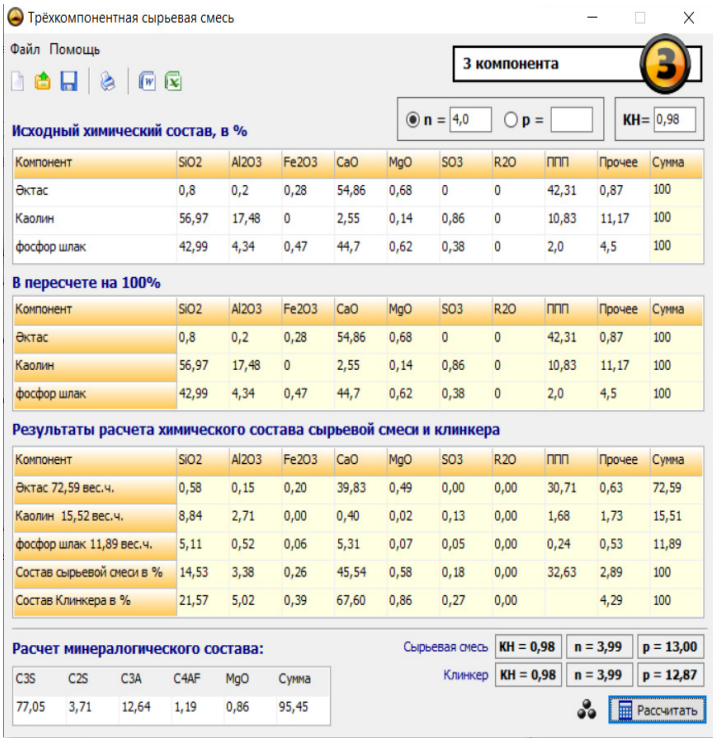
Материалдар мен зерттеу әдістері. Ғылыми мақалада зерттеу жұмыстарды жүргізу үшін Састөбе кенорнының әктастын, Ангрен (Өзбекстан) кенорнының және Көкшетау кенорнының каолинін, реттеуші қоспа ретінде техногенді қалдық Жаңа Жамбыл фосфор зауытының электротермофосфор шлагын таңдап алдық. Алынған шикізат материалдар рентгендік флуоресценциялық спектрометрде химиялық құрамы анықталды.

Ақ портландцемент клинкерін алу үшін шикізат шихта құрамын әзірлеу ең алдымен «Шихта» бағдарламасының көмегімен есептеулер жүргізілді. Оңтайландырылған шикізат шихта құрамдарды дайындау, оларды жоғары температурада күйдіру арқылы ақ клинкер алу, клинкер сапасына талдау, оның ақтық дәрежесін анықтау жұмыстары жүргізілді.

Шикізат материалдарды Bruker компаниясының S8 Tiger рентгендік флуоресценциялық спектрометрде химиялық құрамын анықталды. Аталған құрал-жабдық элементтерді CaO, SiO_2, Al_2O_3, Fe_2O_3, MgO, SO_3, ККЖ (күйдіру кезінде жоғалулар) мөлшерін сандық түрінде дәлме дәл талдап берді. BRUKER S8 TIGER рентген флуоресценциялық спектрометрі (толқынды дисперсиялық, WDXRF), Родий (Rh) анодымен рентген түтігі, қуаты 4 кВт дейін, SPECTRAPlus бағдарламалық жасақтамасы, Планшеттік пресс, Муфель пеші (егер кальцинация қажет болса), ±0,0001 г дәлдікпен аналитикалық таразы жабдықталған. Үлгі дайындау 105 ± 5 °С температурада тұрақты салмаққа дейін кептіріледі, содан кейін 63 мкм-ден аз бөлшектердің өлшеміне дейін ұнтақталады. Алынған ұнтақ біртектілікті қамтамасыз ету үшін мұқият араластырылады. Аналитикалық мақсаттарға байланысты престелген таблеткалар дайындалады. 5,0–7,0 г ұнтақ үлгісі 10% байланыстырғышпен (бор қышқылымен) араластырылады. Үлгі 20–30 т қысыммен престеледі. Алынған таблетка анализатор кюветіне орналастырылады. Талдау кезінде түтіктің жұмыс режимі: 20–60 кВ, 20–150 мА, талдау атмосферасы: вакуум немесе гелий (жеңіл элементтер үшін), талданатын элементтер диапазоны: Na-дан U-ға дейін, сигналдың жинақталу уақыты: әр жолға 10–40 с, қолданылатын анализатор кристалдары: LiF, PET, Ge (элементке байланысты). Дайындалған үлгі өлшеу камерасына орналастырылады. Талдау элементтердің сипаттамалық сызықтарын тізбектей өлшеуді қамтитын алдын ала орнатылған бағдарламаға сәйкес автоматты түрде жүргізіледі. Алынған спектрлер элементтердің немесе оксидтердің массалық үлестерін есептеу үшін бағдарламалық жасақтамамен өңделеді. Талдау нәтижелері элементтердің массалық үлестері (%) немесе оксидтер (%) ретінде ұсынылады. Анықтау шегі элементке байланысты 0,001-ден 0,01%-ға дейін болады. Салыстырмалы өлшеу қателігі 2–5%-дан аспайды (Zhanikulov et al, 2020).

«Шихта» компьютерлік бағдарлама Ресейдің В.Г. Шухов атындағы Белгород мемлекеттік технологиялар университетінде құрастырылған. Бағдарламада шикізат материалдардың химиялық құрамын және модульдік көрсеткіштерін ендіру арқылы есептеу жүргізіледі. Есептеу нәтижесінде шикізат шихта құрамы, 1 т клинкер үшін қажетті шикізат материалдардың меншікті шығыны мен үлесі, алынатын клинкердің химиялық және минералогиялық құрамы, клинкердің

модульдік мәндері және клинкер күйдіру процесінің болжамды технологиялық көрсеткіштері келтіріледі. 1 суретте «Шихта» бағдарламасымен есептеу жүргізудің жалпы көрінісі келтірілген (Перескок және басқа, 2010).



Сурет 1 – «Шихта» бағдарламасымен шикізат шихта құрамын есептеу

Күйдірілген клинкердегі байланыспаған бос кальций оксиді ($CaO_{бос}$) мөлшерін анықтау бұл минералдардың түзілу процестерінің толығымен аяқталғанын және күйдіру сапасын анықтауға мүмкіндік береді. $CaO_{бос}$ мөлшері ГОСТ 5382–2019 «Цемент өндірісіне арналған цементтер мен материалдар. Химиялық талдау әдістері» талаптарына сәйкес орындалады (ГОСТ 5382-2019, 2019). Бос кальций оксиді ($CaO_{бос}$) мөлшерін анықтау этилен-глицератты әдіспен жүргізіледі. Бұл әдіспен анықтауды Э.И. Нагеров пен Н.И. Колендзян ғалымдар ұсынған. Әдіс $CaO_{бос}$ жалпы құрамын CaO және $Ca(OH)_2$ түрінде анықтайды. Әдіс цементті ыстық сусыз глициринді ерітіндімен және абсолютты спирттпен өңдеуге арналған, нәтижесінде цемент құрамындағы кальций окиси сусыз глицеринмен әрекеттеспегенде кальций глицераты пайда болады. Осы глицерат спиртті ерітінді бензой қышқылы және сіркеқышқылды аммониймен әрекеттесіп титрлейді. Ерітінді кальций глицератына ғана ауысады. Бос магний оксиді глицеринмен реакцияға түспейді.

$CaO_{бос}$ анықтауда этиленді-глицератты әдіс басқа әдістерге қарағанда дәл нәтиже береді. *Зерттеуді жүргізу кезінде* 0,5 г салмақтағы клинкер үлгісін

конусты колбаға орналастырып, кейін 30 см^3 ерітінді құйамыз, колбаны жақсылап араластырып, қайта суыту механизміне жалғап қоямыз. Колбаны 20-30 мин аралығында қыздырып,ерітіндіде қызғылт түс пайда болған кезде қайта суыту механизмінен ажыратып, ыстық ерітіндіні бензой қышқылымен титрлейміз. Титрлеу қызғылт түстің жоғалуна дейін жалғасады, сол кезде ғана титрлеу аяқталды деп есептелінеді. *Нәтижелерді өңдеу* $CaO_{бос}$ *массалық үлесін пайыздық мөлшерде анықталады*, төмендегі формула бойынша ($Xcao_{бос}$) есептеледі:

$$Xcao_{бос} = VxT(CaO_{бос}) \times 100/m \quad (1)$$

мұнда: *V — зерттеп жатқан ерітіндіні титрлеуге кеткен бензой қышқылының көлемі*, см;

m — алынған үлгінің салмағы, г (Макарова және басқа, 2011).

Цементтің ақтық дәрежесін анықтау «Р3-ТБМС-М ұн ақтығын өлшейтін тестер» құралының көмегімен орындалды. Ұнтақталған клинкердің ақтық дәрежесін анықтау әдісінің негізгі мәні — тығыздалған әрі тегістелген ұнтақ бетінің спектрдің жасыл бөлігіндегі (540±50 нм диапазонында) диффузиялық шағылу коэффициенттерін өлшеуге негізделген. Ақтық дәреже $45°/_{diff}$ геометриясында алынған зоналық диффузиялық шағылу коэффициенті бойынша анықталады. Анықталған нәтиже құралдың экранында екі сан түрінде көрсетіледі: бірінші сан — пайыздық көрсеткіш, диффузиялық шағылу коэффициенті, ал екінші сан — құралдың шартты бірліктерімен, ақтық дәреже мәні. Құралдың өлшеу көлемі фотометриялық жартышар камерасынан тұрады, ол клинкер ұнтақ үлгісінің көлемінен оптикалық мөлдір шыны пластинамен бөлінген. Бұл пластина оған орналастырылатын клинкер ұнтақ үлгісінің тұрақты орнын қамтамасыз етеді. Сәулелену толқын ұзындығы 540 нм болатын жасыл жарық диодтан шыққан жарық ағыны пластинаға қатысты 45° бұрышпен клинкердің ұнтақ бетіне түседі. Клинкер ұнтақ пен жартышардан көп мәрте шағылу нәтижесінде пайда болған шашыраған сәуле фотодетекторға бағытталады. Фотодетектордан алынған сигнал электрондық түрде өңделіп, сандық индикаторда бейнеленеді. Өлшенген нәтиже шашыраған сәулелену деңгейіне, яғни клинкердің ақтығына, тазалығына, гранулометриялық құрамына және түсіне тәуелділігін көрсетеді (Мырзақожа және басқа, 2014).

Нәтижелер және талқылаулар**.** Табиғи шикізат материалдар мен техногенді қалдықтың химиялық құрамы 1 кестеде келтірілген.

Кесте 1. Шикізат материалдардың химиялық құрамы.

Шикізат	Химиялық құрамы, сал. %								
	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	ККЖ	басқа	жалпы
Састөбе кен орнының әктасты	0,8	0,2	0,28	54,86	0,68	-	42,31	0,87	100
Ангрен кен орнының каолині	63,99	19,22	0,36	0,64	0,52	0,19	7,98	7,1	100
Көкшетау кен орнының каолині	56,97	17,48	-	2,55	0,14	0,86	10,83	11,17	100

Жаңа Жамбыл фосфор зауытының электротермофосфор шлагы	42,99	4,34	0,47	44,7	0,62	0,38	2,0	4,5	100

Карбонатты жыныс әктас минералы құрамында CaO – 54,86 % және күйдіру кезіндегі жоғалу – 42,31 % тұрады. Сазды компонент ретінде алынған каолин минералының химиялық құрамдарында SiO_2 мөлшері 56,97-63,99 % аралығында және Al_2O_3 мөлшері 17,48-19,22 % мөлшерінде тұратындығы анықталды. Реттеуші қоспа ретінде алынған қалдық электротермофосфор шлагының химиялық құрамында SiO_2 – 42,99 % және CaO – 44,7 % кездеседі. Бұл оның ақ портландцемент клинкер алу үшін жарамды шикізат екендігін көрсетеді. Химиялық талдау нәтижесінде, барлық шикізат материалдардың құрамында Fe_2O_3 мөлшері 0,5 %-дан төмен екендігі анықталды және клинкер алу үшін күйдіру процессіне кері әсер етуші зиянды қоспалардың кездеспейтіндігі анықталды.

Жоғарыда келтірілген шикізат материалдарды пайдаланып ақ портландцемент алу үшін клинкер күйдіруге жарамды шихта құрамын есептеу және оңтайлы қоспа таңдау қажеттігі зерделенді.

1) «Әктас + каолин Көкшетау + электротермофосфор шлагы»;

2) «Әктас + каолин Ангрен + электротермофосфор шлагы».

Көп нұсқалы есептеу нәтижелері 2-7 кестелерде келтірілген.

Кесте 2. «Әктас + каолин Көкшетау + электротермофосфор шлагы» үш компонентті шикізат шихталарының химиялық құрамы және шикізаттың меншікті шығыны.

Қоспа №	Шикізат құрамы, %			Меншікті шикізат шығыны, т/т клинкер			ҚК	Модульдер		**Шикізат шихтасының химиялық құрамы**, сал. %							
	әктас	каолин Көкшетау	фосфор шлак	әктас	каолин Көкшетау	фосфор шлак		n	p	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	басқа	ккж
1	76,43	20,73	5,81	1,104	0,312	0,087	0,88	3,5	17,27	14,9	4,02	0,23	43,42	0,56	0,2	3,22	33,44
2	73,85	20,38	5,77	1,112	0,307	0,087	0,90	3,5	16,9	14,67	3,96	0,23	43,61	0,57	0,2	3,18	33,57
3	74,79	19,55	5,66	1,131	0,296	0,086	0,95	3,5	16,15	14,17	3,81	0,24	44,06	0,57	0,19	3,09	33,87
4	75,32	19,07	5,60	1,142	0,289	0,085	0,98	3,5	15,7	13,88	3,73	0,24	44,31	0,57	0,19	3,04	34,05
5	70,88	16,68	12,44	1,043	0,245	0,183	0,90	4,0	14,0	15,42	3,60	0,26	44,87	0,58	0,19	3,04	32,05
6	71,98	15,94	12,08	1,065	0,236	0,179	0,95	4,0	13,37	14,85	3,45	0,26	45,29	0,59	0,18	2,95	32,42
7	72,59	15,52	11,89	1,078	0,23	0,176	0,98	4,0	13,00	14,53	3,38	0,26	45,54	0,58	0,18	2,89	32,63
8	66,19	10,82	22,98	0,941	0,154	0,327	0,90	5,0	10,3	16,58	3,02	0,29	46,86	0,61	0,18	2,82	29,64
9	67,55	10,26	22,19	0,967	0,147	0,318	0,95	5,0	9,85	15,93	2,89	0,29	47,25	0,61	0,17	2,73	30,13
10	64,22	6,0	29,78	0,897	0,084	0,416	0,95	6,0	7,72	16,73	2,47	0,32	48,7	0,63	0,16	2,57	28,42

Есептеу нәтижесі 2 кестеде келтірілгендей, шикізат шихта құрамына фосфор шлагы 5,6 – 29,7 % дейін ендіру мүмкіндігі анықталды. Қанығу коэффициентінің мәнін 0,88-ден 0,98-ге дейін жоғарлату кезінде силикатты және глиноземді модульдердің мәнінің өзгеруіне алып келуде. Шикізат материалдардың меншікті теориялық шығыны 1 тонна клинкер үшін 1,39 - 1,52 т/т аралығын қамтылды. Силикатты модуль көрсеткіші 3,5-тен 6,0-ға дейін арттырған кезде сазды компонент каолиннің үлесі 20,7 %-дан 6,0 %-ға дейін біртіндеп төмендеуіне алып келді. Сондай-ақ, силикатты модульдың артуымен глиноземді модуль 17,27-ден

7,72-ге дейін төмендеді. Шикізат шихтасының химиялық құрамында Fe_2O_3 үлесі талап бойынша 0,3–0,5 %-дан жоғары болған жоқ.

Кесте 3. «Әктас + каолин Көкшетау + электротермофосфор шлагы» үш компонентті шикізат шихталарына негізделген клинкерлердің химиялық және минералогиялық құрамы.

Қоспа №	Клинкердің химиялық құрамы, сал. %							ҚК	Модульдер		Минералогиялық құрамы, сал.%			
	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	басқа		n	p	C_3S	C_2S	C_3A	C_4AF
1	22,38	6,04	0,35	65,24	0,85	0,3	4,83	0,88	3,5	17,27	54,43	23,1	15,42	1,06
2	22,10	5,96	0,35	65,65	0,85	0,3	4,78	0,90	3,5	16,9	58,79	19,01	15,2	1,07
3	21,43	5,76	0,36	66,63	0,86	0,29	4,67	0,95	3,5	16,15	69,21	9,21	14,67	1,09
4	21,04	5,65	0,36	67,19	0,87	0,28	4,61	0,98	3,5	15,7	75,16	3,62	14,37	1,09
5	22,69	5,29	0,38	66,03	0,86	0,28	4,47	0,90	4,0	15,42	60,34	19,51	13,38	1,15
6	21,98	5,11	0,38	67,03	0,87	0,27	4,37	0,95	4,0	13,37	70,98	9,45	12,9	1,16
7	21,57	5,02	0,39	67,60	0,86	0,27	4,29	0,98	4,0	13,0	77,05	3,71	12,64	1,19
8	23,56	4,29	0,42	66,6	0,86	0,26	4,01	0,90	5,0	10,3	62,67	20,26	10,67	1,27
9	22,8	4,14	0,42	67,61	0,87	0,25	3,91	0,95	5,0	9,85	73,63	9,8	10,25	1,27
10	23,38	3,45	0,45	68,03	0,88	0,23	3,59	0,95	6,0	7,72	75,51	10,05	8,38	1,36

Есептеу нәтижесі 3 кестеде келтірілгендей, клинкердің химиялық құрамында Fe_2O_3 үлесі талап бойынша 0,3–0,5 %-дан жоғары емес, бұл цемент түсінің ақ болу үшін маңызды көрсеткіш болып саналады. Күйдірілген клинкердің болжамды минералогиялық құрамында қанығу коэффициентінің мәні 0,88-ден 0,98-ге дейін жоғарлағанда алит (C_3S) минералының үлесі 54,4 - 77,0 %-ға дейін артқаны және керісінше белит (C_2S) минералының үлесі 23 %-дан 3,62 %-ға дейін төмендегені анықталды. Аралық фазаның (C_3A+C_4AF) саны 16 %-дан 9,6 %-ға дейін төмендеді. Ақ портландцемент клинкер алу үшін клинкер құрамында C_4AF минералы минималды мөлшерде 3-5 %-дан төмен болу керек екендігі талап ретінде қойылған. Аталған есептеу нәтижесінде C_4AF минералының үлесі 1,5 %-да жетпеді. C_3S минералының үлесі 50-60 %-дан жоғары болу керек талабы толық орындалғаны көрсетілген.

Кесте 4. «Әктас + каолин Көкшетау + электротермофосфор шлагы» шикізат шихталардың күйдіру индексі және күйдіру коэффициенті.

Қоспа №	ҚК	Модульдер		Сұйық фаза саны, L %	**Күйдіру индексі (оңтайлы 2,5-3,0)**	n*p	**Жентектелу коэффициенті (оңтайлы 0,5-0,6)**	**Гидравликалық модуль (оңтайлы 1,7-2,4)**	**Материадың футеровкаға жабысу критерії (оңтайлы 3,0-3,5)**	**Жылу калометриялық модуль (оңтайлы 0,3-1,8)**
		n	p							
1	0,88	3,5	17,27	24,7	3,3	60,4	0,7	2,27	3,7	2,89
2	0,90	3,5	16,9	24,4	3,61	59,27	0,77	2,31	3,7	3,68
3	0,95	3,5	16,15	23,72	4,39	56,53	0,94	2,42	3,72	8,14
4	0,98	3,5	15,7	23,32	4,86	54,99	1,04	2,48	3,72	19
5	0,90	4,0	15,42	22,15	4,15	56	0,88	2,33	4,28	3,57
6	0,95	4,0	13,37	21,52	5,05	53,49	1,07	2,44	4,3	7,9
7	0,98	4,0	13,0	21,15	5,59	52,08	1,19	2,5	4,3	18,38
8	0,90	5,0	10,3	18,8	5,25	51,5	1,11	2,36	5,48	3,4

9	0,95	5,0	9,85	18,24	6,38	49,27	1,35	2,47	5,51	7,57
10	0,95	6,0	7,72	15,92	7,75	46,32	1,63	2,49	6,78	7,35

Есептеу нәтижесі 4 кестеде келтірілгендей, күйдірілген клинкердің өндірістік көрсеткіштеріне сипаттама жасай отырып, зерттеліп отырған үш компонентті шихталардың күйдіру қабілеті қиын екені анықталды. Сұйық фазаның мөлшері төмен — 24 %-тен 18%-ға дейін азайды. Сұйық фазаның мөлшері ҚК шамасына және силикатты модуліне байланысты өзгерді. Бұл көрсеткіштер артқан сайын клинкердегі сұйық фазаның мөлшері азаяды, бұл өз кезегінде ақ клинкерді күйдіру процесіне едәуір қиындатады. Күйдірілу индексі, жентектелу коэффициенті және футеровкаға жабысу критерийі оңтайлы мәндерден жоғары. ҚК шамасы мен силикатты модулі артқан сайын бұл критерийлер нашарлап жатыр деген қорытынды жасауға болады.

Кесте 5. «Әктас + каолин Ангрен + электротермофосфор шлагы» үш компонентті шикізат шихталарының химиялық құрамы және шикізаттың меншікті шығыны.

Қоспа №	Шикізат құрамы, %			Меншікті шикізат шығыны, т/т клинкер			ҚК	Модульдер		**Шикізат шихтасының химиялық құрамы**, сал. %							
	әктас	каолин Ангрен	фосфор шлак	әктас	каолин Ангрен	фосфор шлак		n	p	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	басқа	ккж
1	75,37	18,33	5,8	1,133	0,283	0,087	0,88	3,5	13,14	15,15	4,02	0,31	44,06	0,65	0,06	2,25	33,51
2	71,94	15,38	13,67	1,057	0,226	0,186	0,88	4	11,54	15,87	3,65	0,32	45,23	0,65	0,08	2,29	31,92
3	75,74	18,56	5,76	1,141	0,28	0,087	0,9	3,5	12,94	14,92	3,96	0,31	44,24	0,65	0,06	2,19	33,64
4	76,61	17,79	5,66	1,16	0,269	0,086	0,95	3,5	12,48	14,39	3,81	0,3	44,67	0,65	0,06	2,23	33,94
5	77,11	17,35	5,6	1,17	0,263	0,085	0,98	3,5	12,22	14,09	3,72	0,3	44,91	0,65	0,05	2,2	34,12
6	67,12	9,78	23,13	0,954	0,139	0,329	0,9	5	9,08	16,72	3,01	0,33	47,22	0,65	0,11	2,35	29,64
7	68,41	9,27	22,32	0,98	0,133	0,320	0,95	5	8,74	16,06	2,88	0,33	47,58	0,65	0,1	2,28	30,14
8	69,18	8,98	21,87	0,994	0,129	0,314	0,98	5	8,54	15,68	2,81	0,33	47,78	0,65	0,1	2,25	30,42
9	61,85	2,4	35,76	0,848	0,033	0,49	0,95	7	6,1	17,4	2,14	0,35	49,93	0,65	0,14	2,32	-

Есептеу нәтижесі 5 кестеде келтірілгендей, Ангрен кенорнынан алынған каолинмен келтірілген есептеу нәтижесінде, 1 тонна клинкер алу үшін қажетті фосфор шлагының үлесі шамамен 85-490 кг құрады. Қанығу коэффициентінің мәні 0,88-ден 0,98-ге дейін жоғарлату силикатты молдульдің 3,5-тен 7-ге дейін жоғарлауына және глиноземді модульдің 13-тен 6-ға дейін мәнінің төмендеуіне алып келді. Шикізат материалдардың меншікті теориялық шығыны 1 тонна клинкер үшін 1,515 т/т-дан 1,437 т/т дейін өзгерді. Силикатты модуль көрсеткіші 3,5-тен 7,0-ге дейін жоғарлауы кезінде сазды компонент каолиннің үлесі 18 %-дан 2,5 %-ға дейін біртіндеп төмендеуіне алып келді. Шикізат шихтасының химиялық құрамында Fe_2O_3 мөлшері 0,3–0,35 % аралығын құрады.

CC BY NC

Кесте 6. «Әктас + каолин Ангрен + электротермофосфор шлагы» үш компонентті шикізат шихталарына негізделген клинкерлердің химиялық және минералогиялық құрамы.

Қоспа №	Клинкердің химиялық құрамы, сал. %							ҚК	Модульдер		Минералогиялық құрамы, сал.%			
	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	басқа		n	p	C_3S	C_2S	C_3A	C_4AF
1	22,78	6,05	0,46	66,27	0,97	0,09	3,39	0,88	3,5	13,14	55,4	23,51	15,24	1,4
2	23,31	5,36	0,46	66,44	0,95	0,11	3,36	0,88	4	11,54	56,68	24,05	13,42	1,41
3	22,49	5,96	0,46	66,67	0,97	0,09	3,36	0,9	3,5	12,94	59,81	19,34	15,02	1,4
4	21,79	5,76	0,46	67,62	0,98	0,08	3,3	0,95	3,5	12,48	70,38	9,37	14,49	1,4
5	21,39	5,65	0,46	68,17	0,99	0,08	3,26	0,98	3,5	12,22	76,4	3,68	04,18	1,4
6	23,76	4,28	0,47	67,11	0,92	0,15	3,29	0,9	5	9,08	63,21	20,44	10,54	1,43
7	22,98	4,12	0,47	68,11	0,93	0,15	3,23	0,95	5	8,74	74,24	9,88	10,13	1,44
8	22,54	4,04	0,47	68,68	0,94	0,14	3,19	0,98	5	8,54	80,52	3,88	9,89	1,44
9	23,86	2,93	0,48	68,46	0,9	0,19	3,18	0,95	7	6,1	77,06	10,26	6,95	1,46

Есептеу нәтижесі 6 кестеде келтірілгендей, клинкердің химиялық құрамында Fe_2O_3 мөлшері 0,46–0,48 %-ды құрады, бұл талап бойынша белгіленген 0,3–0,5 %-дан жоғары емес екендігін көрсетеді. Клинкердің минералогиялық құрамында қанығу коэффициентінің мәнін 0,88-ден 0,98-ге дейін жоғарлатқанда алит (C_3S) минералының үлесі 55 %-дан - 80,0 %-ға дейін жоғарлағаны және керісінше белит (C_2S) минералының үлесі 23,5 %-дан 3,6 %-ға дейін төмендегені анықталды. Есептеулерге сәйкес, 0,95-0,98 жоғары қанығу коэффициенті бар клинкерлерде алит мөлшері 70-76 % және 4-9 % аз мөлшерде белит шығуы сапалы ақ портландцемент клинкерді алуға тиімді болып табылады. Аралық фазаның (C_3A+C_4AF) мөлшері 16,5 %-дан 7,5 %-ға дейін төмендеді. Ақ портландцемент клинкерді алу үшін клинкер құрамында C_4AF минералы минималды мөлшерде 3-5 %-дан төмен болу керек талабы қойылған. Аталған есептеу нәтижесінде C_4AF минералының үлесі 1,5 %-да жетпейді. C_3S минералының үлесі 50-60 %-дан жоғары болуы қойылған талаптарды толық орындалғанын көрсетеді.

Кесте 7. «Әктас + каолин Ангрен + электротермофосфор шлагы» шикізат шихталардың күйдіру индексі және күйдіру коэффициенті.

Қоспа №	ҚК	Модульдер		Сұйық фаза саны, L %	**Күйдіру индексі (оңтайлы 2,5-3,0)**	n*p	**Жентектелу коэффициенті (оңтайлы 0,5-0,6)**	**Гидравликалық модуль (оңтайлы 1,7-2,4)**	**Материалдың футеровкаға жабысу критериі (оңтайлы 3,0-3,5)**	**Жылу калометриялық модуль (оңтайлы 0,3-1,8)**
		n	p							
1	0,88	3,5	13,14	23,41	3,33	45,98	0,7	2,26	3,77	2,84
2	0,88	4	11,54	24,33	3,23	45,69	0,62	2,23	3,44	2,91
3	0,9	3,5	12,94	18,11	5,28	45,4	1,12	2,35	5,55	3,37
4	0,95	3,5	12,48	17,59	6,42	43,68	1,35	2,47	5,57	7,45
5	0,98	3,5	12,22	17,29	7,1	42,7	1,50	2,54	5,58	17,01
6	0,9	5	9,08	23,14	3,64	45,3	0,77	2,3	3,77	3,60
7	0,95	5	8,74	22,48	4,43	43,7	0,94	2,41	3,78	7,88
8	0,98	5	8,54	22,11	4,9	42,8	1,04	2,48	3,79	17,82
9	0,95	7	6,1	14,01	9,17	42,73	1,91	2,51	8,15	7,17

7 кестеде келтірілген нәтижеде, күйдірілетін клинкердің өндірістік көрсеткіштеріне сипаттама жасай отырып, зерттеліп отырған үш компонентті шихталардың күйдіру қабілеті қиын жүретіндігі анықталды. Сұйық фазаның мөлшері төмен, 23-тен 17,5% -ға дейін азаюда. Сұйық фазаның мөлшері ҚК және силикат модуліне байланысты өзгереді. ҚК және глиноземді модуль артқан сайын клинкердің сұйық фазасының мөлшері азаяды, бұл ақ клинкерді күйдіруді қиындатады. Күйдіру индексі, жентектелу коэффициенті және футеровкаға жабысу критерийі оңтайлы мәндерден жоғары. ҚК шамасы мен силикат модуль артқан сайын бұл критерийлер нашарлай түсуде.

Есептеу нәтижесінде алынған шикізат шихта құрамдардың көмегімен 1450 және 1500 ^{0}С температурада ақ портландцемент клинкер алу үшін күйдіру жұмыстары орындалды. Алынған клинкердің сапасын анықтау мақсатында құрамында байланыспаған бос CaO мөлшері анықталды. Зерттеу жұмысының нәтилері 8 және 9 кестелерде көрсетілген.

Кесте 8. «Әктас + каолин Көкшетау + электротермофосфор шлагы» шихта құрамының CaO байланысу процесіне және клинкерлердің ақтығына әсері.

Қоспа №	Шикізат құрамы, %			ҚК	Модульдер		Бос CaO мөлшері, %,	Ақтық дәрежесі, %	008 електегі қалдық, %
	әктас	каолин Көкшетау	фосфор шлак		n	p	күйдіру температурасында 1500, ^{0}С		
1	76,43	20,73	5,81	0,88	3,5	17,27	0,54	78	3,5
2	73,85	20,38	5,77	0,90	3,5	16,9	0,88	76,8	5
3	74,79	19,55	5,66	0,95	3,5	16,15	0,95	78,1	7,3
4	75,32	19,07	5,60	0,98	3,5	15,7	0,95	77,7	4,2
5	70,88	16,68	12,44	0,90	4,0	14,0	1,22	75,1	5,7
6	71,98	15,94	12,08	0,95	4,0	13,37	1,22	75,2	6,5
7	72,59	15,52	11,89	0,98	4,0	13,00	1,62	77,2	7,4
8	66,19	10,82	22,98	0,90	5,0	10,3	1,08	74,9	3,2
9	67,55	10,26	22,19	0,95	5,0	9,85	1,48	71,3	6,9
10	64,22	6,0	29,78	0,95	6,0	7,72	2,7	74,1	1

«Әктас + каолин Көкшетау + электротермофосфор шлагы» шикізат шихталарды 1500 °С температурада күйдіру нәтижесінде алынған клинкерлердің құрамындағы байланыспаған бос CaO мөлшері 0,54-2,7 % аралығында болды. Мұнда №10 клинкер құрамында байланыспаған бос CaO мөлшері 2 % артық болуы оның ГОСТ 30108-2020 талаптарына (ГОСТ 31108-2020, 2019) сәйкес келмейтіндігін көрсетті.

Алынған клинкерлердің ақтық дәржесі 74,1 – 78,1 % көрсетті. Бұл жалпы 2-ші дәрежелі ақ цементтерді алуға мүмкіндік береді. Шикізат шихта құрамында фосфор шлағының мөлшері 22-29 %-ға дейін артқан сайын клинкердің ақтық дәрежесі аздап төмендейді. Клинкердің ең жақсы ақтық дәрежесі (77-78%) 5-6 % ғана фосфор шлак ендірілген құрамдарда қол жеткізілген. Силикатты модулді 5-6-ға дейін арттыру клинкер күйдіруді қиындатады және клинкерлердегі бос CaO мөлшерін 1,6 %-дан 2,7 %-ға дейін арттуын алып келді.

CC BY NC

Кесте 9. «Әктас + каолин Ангрен + электротермофосфор шлагы» шихта құрамының CaO байланысу процесіне және клинкерлердің ақтығына әсері.

Қоспа №	Шикізат құрамы, %			ҚК	Модульдер		Бос CaO мөлшері, %, күйдіру температурасында, °С		Ақтық дәрежесі, %		008 електегі қалдық, %	
	әктас	каолин Ангрен	фосфор шлак		n	p	1450	1500	1450	1500	1450	1500
1	75,37	18,33	5,8	0,88	3,5	13,14	-	0,27	-	78	-	4,4
2	71,94	15,38	13,67	0,88	4	11,54	-	0,27	-	75,2	-	7,9
3	75,74	18,56	5,76	0,9	3,5	12,94	-	0,54	-	80,7	-	8,9
4	76,61	17,79	5,66	0,95	3,5	12,48	-	0,68	-	80,6	-	7,3
5	77,11	17,35	5,6	0,98	3,5	12,22	-	1,08	-	82,1	-	5,9
6	67,12	9,78	23,13	0,9	5	9,08	0,54	0,81	79,5	75	3,2	10,2
7	68,41	9,27	22,32	0,95	5	8,74	0,68	0,95	72,5	72,5	8,9	10
8	69,18	8,98	21,87	0,98	5	8,54	0,95	1,08	71,4	76,8	6,7	8,9
9	61,85	2,4	35,76	0,95	7	6,1	0,68	1,35	73,3	73,2	4,3	5,54

«Әктас + каолин Ангрен + электротермофосфор шлагы» шикізат шихталарды 1450 және 1500 °С температурада күйдіру нәтижесінде алынған клинкерлердің құрамындағы байланыспаған бос CaO мөлшері 2 % төмен болды. Бұл ГОСТ 30108-2020 талаптарына толық сәйкес келеді. Алынған клинкерлердің ақтық дәрежесін анықтау кезінде фосфор шлагының мөлшері ең аз болған №3, 4 және 5 клинкерлерде 80,6 - 82,1% құрады — бұл клинкерлер 1-ші дәрежелі ақ цементтер типіне жатады. Фосфор шлак мөлшері 21,8 – 35,7 %-ға дейін артқан сайын клинкерлердің ақтығы 72 – 76,8 %-ға дейін төмендеді (2 және 3-ші дәрежелі ақ цемент). Бұл клинкер құрамында фосфор шлагының үлесінің артуы мен және фосфор шлагының құрамында темір оксидінің мөлшерінің айтарлықтай жоғары болуымен (0,47 %) түсіндіріледі, бұл ақ клинкерде төрт кальцийлі алюмоферрит минералының көп мөлшерде түзілуіне алып келді (Taimasov and Klassen, 2017).

Қорытынды**.** Зерттеу жұмысының нәтижесінде келесідей қорытынды жасалды:

1. Ақ портландцемент клинкерді алу үшін «Шихта» бағдарламасында «Әктас + каолин Көкшетау + электротермофосфор шлагы» және «Әктас + каолин Ангрен + электротермофосфор шлагы» шикізат шихта құрамдары есептелді. Нәтижесінде оңтайландырылған шикізат шихта құрамдары мен теориялық алынатын клинкерлердің химиялық және минералогиялық құрамдары анықталды. Клинкердің шикізат түріне, қанығу коэффициентіне, силикатты және глиноземді модульдерге тәуелділік заңдылықтары айқындалды. Ақ портландцемент клинкер алу үшін шихта құрамына 5 – 35 % дейін электротермофосфор шлагын ендіру мүмкіндігі белгіленді.

2. Әзірленген «Әктас + каолин Көкшетау + электротермофосфор шлагы» шикізат шихта құрамдарда клинкер түзілу процесі 1500 °С температурада аяқталғаны және $CaO_{бос}$ мөлшері 0,54–1,62 % аралығында болғаны анықталды. Алынған клинкерлердің ақтық дәржесі 74,1–78,1 % болды, бұл 2-ші дәрежелі ақ цементтерді алуға жарамды клинкер екендігі анықталды.

3. Әзірленген «Әктас + каолин Ангрен + электротермофосфор шлагы» шикізат

шихта құрамдарда клинкер түзілу процесі 1450-1500 ^{0}C температурада аяқталғаны және $CaO_{бос}$ мөлшері 0,27–1,35 % аралығында болғаны анықталды. Алынған клинкерлердің ақтық дәржесі 71,4–82,1 % болды, бұл 1-ші және 2-ші дәрежелі ақ цементтерді алуға жарамды клинкер екендігі анықталды.

Қорытындылай келе, жүргізілген есептеу және клинкер күйдіру жұмыстарының нәтижесінде электротермофосфор шлагын шихта құрамына ендіру әсерінен жоғары сапалы, ақтық дәрежесі 1-ші және 2-ші болатын портландцемент клинкерін алуға толықтай мүмкіндік бар екендігі дәлелденді.

References

Arusmalem G., Damar H.P., Bing S., Prasetya A. (2022) Comparison of Compressive Strength of Concrete using white Portland cement with Gray cement. Journal Teknik sipil & perencanaan. – 24. – P. 01-07. (in English)

Brett D.Y., Smith J.L. (2008) Technology of Portland cement: textbook for institutes of higher education, Michigan Technical Institute: USA. – 345 p. (in English)

Cement Industry Net Zero Progress Report 2024/25. Global Cement and Concrete Association. On this link. https://gccassociation.org/wp-content/uploads/2024/11/GCCA-Cement-Industry-Progress-Report-202425.pdf 10.11.2024. (in English)

Chatterjee A.K. (2018) Cement production technology: principles and practice, CRC Press: USA. – 419 p. (in English)

Euronext Sustainability Week 2025. Cementirholding. On this link. https://www.cementirholding.com/sites/default/files/documenti/2025-09/InvestorPresentation%20ESG%20Sept%202025_0.pdf 10.09.2025. (in English)

GOST 31108-2020 (2019) Tsementy obshchestroitel'nyye. Tekhnicheskiye usloviya. [General construction cements. Technical specifications.]. Standard Inform Publishing House: Moscow, Russia. – 18 p. (in Russian)

GOST 5382-2019 (2019) Tsementy i materialy tsementnogo proizvodstva. Metody khimicheskogo analiza. [Cements and materials for cement production. Methods of chemical analysis.]. Standard Inform Publishing House: Moscow, Russia. – 30 p. (in Russian)

Makarova I.A., Lokhova N.A. (2011) Fiziko-khimicheskiye metody issledovaniya stroitel'nykh materialov [Physico-chemical methods of research of building materials]. BSU edition: Belarus. – 2011. – 139 p. (in Russian)

Mohamed B., Rabah A., Amel J., Abdesslem Ben H.A., Hafsia Ben R. (2016) Morphological analysis of white cement clinker minerals: Discussion on the crystallization-related defects. International Journal of Analytical Chemistry. – 4. – P. 1-10. (in English)

Myrzakozha D.A., Mirzakhodzhaev A.A. (2014) Zamanaui zertteu adisteri [Modern research methods]. Almaty. – 2014. – 352 p. (in Kazakh)

Patent CN110698089B (2019) White portland cement clinker and preparation process thereof. Sichuan Zongsheng Special Cement Co ltd. – 8 p. (in English)

Pereskok S.A., Bandurin A.A., Filippov P.A., Serkina N.N., Shirshov D.S. (2010) Metodicheskoye rukovodstvo po primeneniyu programmy «Shikhta» [Methodological guidance on the use of the «Mixture» program]. V.G. Shukhov BSTU: Belgorod, Russian Federation. (in Russian)

Taimasov B.T., Klassen V.K. (2017) Khimicheskaya tekhnologiya vyazhushchikh materialov [Chemical technology of binding materials]. Publishing house of BSTU: Belgorod. – 448 p. (in Russian)

White Cement Market (2025-2030). Market Analysis Report. On this link. https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/white-cement-market-report 30.12.2025. (in English)

White cement market size & share analysis – Growth trends and forecast (2026-2031). Mordor Intelligence. On this link. https://www.mordorintelligence.com/industry-reports/white-cement-market 07.01.2026. (in English)

Zhanikulov N.N., Taimasov B.T., Borisov I.N., Dzhanmuldaeva Zh.K., Dauletiarov M.S. (2020) Research on the obtaining of low energy cements from technogenic raw materials. Journal of Chemical Technology and Metallurgy. – 4. – P. 814-823. (in English)

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 267–276

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.419

UDC: 541.13
IRSTI: 61.31.29

©Bayeshov A.[1]*, Tashenov E.A.[2], Atykhanova S.B.[3], Koshkarbayeva Sh.T.[2], 2026.
[1]D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan;
[2]South Kazakhstan Research University named after M. Auezov, Shymkent, Kazakhstan;
[3]Kazakh National Pedagogical University named after Abai, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: bayeshov@mail.ru

PREPARATION OF CADMIUM SULFIDE BY ELECTROCHEMICAL METHOD USING A COMPOSITE SULFUR - GRAPHITE ELECTRODE

Bayeshov Abduali — Doctor of Chemical Sciences, Professor, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty,Kazakhstan,
E-mail: bayeshov@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0745-039;
Tashenov Yerkebulan — Doctoral student, M.O. Auezov South Kazakhstan Research University, Shymkent,
E-mail: Tashenov1987@mail.ru, https://orcid.org/0009-0007-6674-7501;
Atykhanova Sabira — Doctoral student, Kazakh National Pedagogical University named after Abai, Almaty,
E-mail: sabi_jan.90@mail.ru, https://orcid.org/0009-0005-1704-6229;
Koshkarbayeva Shaizada — Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, M. O. Auezov South Kazakhstan Research University, Shymkent,
E-mail: shayzada-1968@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8753-3245.

Abstract. The electrochemical properties of a composite sulfur–graphite electrode and a cadmium electrode in a neutral medium were studied, and the effective parameters of the process were determined. The electrochemical synthesis method has several advantages compared with traditional thermochemical approaches, including lower process temperatures, easier reaction control, and a reduced amount of harmful emissions into the environment.

A sulfur–graphite electrode (SGE) containing sulfur was used as the cathode material in the experimental setup. During electrolysis, reduction occurred on this electrode with the formation of sulfide ions. A cadmium plate was used as the anode material. It was established that anodically polarized cadmium, dissolving into the solution in the form of Cd^{2-} ions, interacts with sulfide ions (S^{2-}) in the electrolyte volume, resulting in the formation of a CdS precipitate at the bottom of the solution.

Electrolysis was carried out in a Na_2SO_4 solution. The main process parameters investigated included current density and electrolysis duration, and an elemental analysis of the composition of the obtained CdS product was performed. As a result of the synthesis, a CdS precipitate was formed, represented by a mixture of yellow hexagonal and cubic phases.

The samples were studied using UV–visible spectrophotometry, while the morphological and structural characteristics of the precipitate were investigated using scanning electron microscopy (SEM).

The results of the study showed that the electrochemical synthesis of cadmium sulfide is a simple and highly efficient method. The obtained cadmium sulfide can be used in the production of thin-film solar panels as an n-type conductive layer, as well as a component for the growth of optical crystals used in detectors, photovoltaic elements, and electronic devices.

In addition, cadmium sulfide can be used as a pigment for plastics, as a component in the production of electronics, optical devices, scintillators, piezoelectric and pyroelectric materials, as well as in mixtures for the synthesis of nanomaterials. Promising directions for its application also include photosensors, solar cells, and optoelectronic systems.

Keywords: composite sulfur-graphite (SGE) electrode, sodium sulfate, electrolysis, current density, cadmium, concentration, cadmium sulfide, cathode electrode

Financing. *This study was conducted as part of the targeted financing program for Project №10/ZhG, which is called «obtaining useful compounds through the processing of industrial harmful sulfur-containing waste».*

For citations: *Bayeshov A., Tashenov E.A., Atykhanova S.B., Koshkarbayeva Sh.T. Preparation of Cadmium Sulfide by Electrochemical Method Using a Composite Sulfur–Graphite Electrode. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 267–276. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.419*

©Баешов А.[1*], Ташенов Е.А.[2], Атыханова С.Б.[3], Кошкарбаева Ш.Т.[2], 2026.
[1]Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан;
[2]М.О. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан зерттеу университеті, Шымкент, Қазақстан;
[3]Абай атындағы Қазақ ұлттық педогогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.
E-mail: bayeshov@mail.ru

КОМПОЗИЦИЯЛЫ КҮКІРТ-ГРАФИТЭЛЕКТРОДЫН ҚОЛДАНУ АРҚЫЛЫ КАДМИЙ СУЛЬФИДІН ЭЛЕКТРОХИМИЯЛЫҚ ӘДІСПЕН АЛУ

Баешов Абдуали — химия ғылымдарының докторы, профессор, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: bayeshov@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0745-039;

CC BY NC

ТашеновЕркебулан — докторант, М.О. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан зерттеу университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: Tashenov1987@mail.ru, https://orcid.org/0009-0007-6674-7501;
АтыхановаСабира — докторант, Абай атындағы Қазақ ұлттық педогогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: sabi_jan.90@mail.ru, https://orcid.org/0009-0005-1704-6229;
Кошкарбаева Шайзада — техника ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, М.О.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан зерттеу университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: shayzada-1968@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8753-3245.

Аннотация. Бейтарап ортада күкірт–графитті композиттік электрод пен кадмий электродының электрохимиялық қасиеттері зерттеліп, процестің тиімді параметрлері анықталды. Электрохимиялық синтез әдісі дәстүрлі термохимиялық тәсілдермен салыстырғанда бірқатар артықшылықтарға ие, соның ішінде процестің төмен температурада жүруі, реакцияны басқарудың қарапайымдылығы және қоршаған ортаға зиянды шығарындылардың аз болуы.

Эксперименттік қондырғыда катод материалы ретінде құрамында күкірті бар күкірт–графитті электрод (СГЭ) қолданылды. Электролиз барысында осы электродта тотықсыздану реакциясы жүріп, сульфид-иондары түзілді. Анод материалы ретінде кадмий пластинасы пайдаланылды. Анодтық поляризацияланған кадмий ерітіндіге Cd^{2-} иондары түрінде өтіп, электролит көлеміндегі сульфид-иондарымен (S^{2-}) әрекеттесіп, нәтижесінде ерітінді түбінде CdS тұнбасы түзілетіні анықталды.

Электролиз Na_2SO_4 ерітіндісінде жүргізілді. Процестің негізгі параметрлері ретінде ток тығыздығы мен электролиз ұзақтығы зерттелді, сондай-ақ алынған CdS өнімінің элементтік құрамына талдау жасалды. Синтез нәтижесінде сары түсті гексагональды және кубтық фазалардың қоспасынан тұратын CdS тұнбасы алынды.

Үлгілер ультракүлгін–көрінетін спектрофотометрия әдісімен зерттелді, ал тұнбаның морфологиялық және құрылымдық сипаттамалары сканерлеуші электрондық микроскопия (SEM) көмегімен анықталды.

Зерттеу нәтижелері кадмий сульфидінің электрохимиялық синтезі қарапайым әрі жоғары тиімді әдіс екенін көрсетті. Алынған кадмий сульфиді жұқа қабатты технологияларға негізделген күн панельдерін өндіруде n-типті өткізгіш қабат ретінде, сондай-ақ детекторларда, фотоэлектрлік элементтерде және электрондық құрылғыларда қолданылатын оптикалық кристалдарды өсіру үшін компонент ретінде пайдаланылуы мүмкін.

Сонымен қатар кадмий сульфиді пластмассаларға арналған пигмент ретінде, электроника өндірісінде, оптикалық құрылғыларда, сцинтилляторларда, пьезо- және пироэлектрлік материалдарда, сондай-ақ наноматериалдарды синтездеуге арналған қоспалар құрамында қолданылуы мүмкін. Оның қолданылуының перспективалы бағыттарына фотосенсорлар, күн элементтері және оптоэлектрондық жүйелер жатады.

Түйін сөздер: композициялы күкірт-графит (ККГ) электроды, натрий сульфаты, электролиз, ток тығыздығы, кадмий, концетрация, кадмий сульфиді

©Баешов А.[1*], Ташенов Е.А.[2], Атыханова С.Б.[3], Кошкарбаева Ш.Т.[2], 2026.
[1]Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан;
[2]Южно-Казахстанский Исследовательский университет имени М.О. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;
[3]Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казазхстан.
E-mail:bayeshov@mail.ru

ПОЛУЧЕНИЕ СУЛЬФИДА КАДМИЯ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИМ МЕТОДОМ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПОЗИТНОГО СЕРА-ГРАФИТОВОГО ЭЛЕКТРОДА

Баешов Абдуали — доктор химических наук, профессор, Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,
E-mail:bayeshov@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0745-039;
Ташенов Еркебулан — докторант, Южно-Казахстанский Исследовательскийуниверситет имени М.О. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: Tashenov1987@mail.ru, https://orcid.org/0009-0007-6674-7501;
Атыханова Сабира — докторант, Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: sabi_jan.90@mail.ru, https://orcid.org/0009-0005-1704-6229;
Кошкарбаева Шайзада — кандидат технических наук, ассоциированный профессор, Южно-Казахстанский Исследовательскийуниверситет имени М.О. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: shayzada-1968@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8753-3245.

Аннотация. В исследовании, посвященном разработке электрохимического метода синтеза сульфида кадмия, были изучены электрохимические свойства композитного сера-графитового электрода и кадмиевого электрода в нейтральной среде, а также определены эффективные параметры процесса. Метод электрохимического синтеза обладает рядом преимуществ по сравнению с традиционными термохимическими подходами, включая более низкую температуру процесса, простоту управления реакцией и меньшее количество вредных выбросов в окружающую среду.

В качестве катодного материала в экспериментальной установке использовали сера-графитовый электрод (СГЭ), содержащий серу. В процессе электролиза на данном электроде происходило восстановление с образованием сульфид-ионов. В качестве анодного материала применяли кадмиевую пластину. Установлено, что анодно-поляризованный кадмий, переходя в раствор в виде ионов Cd2+, взаимодействует в объеме электролита с сульфид-ионами S2−, в результате чего на дне раствора образуется осадок CdS.

Электролиз проводили в растворе Na2SO4. В качестве основных параметров процесса были исследованы плотность тока, продолжительность электролиза, а также выполнен элементный анализ состава полученного продукта CdS. В результате синтеза образовался осадок CdS, представленный смесью желтой

гексагональной и кубической фаз. Образцы были исследованы методом УФ-видимой спектрофотометрии, а морфологические и структурные характеристики осадка изучены с использованием сканирующей электронной микроскопии (SEM).

Результаты исследования показали, что электрохимический синтез сульфида кадмия является простым и высокоэффективным методом. Полученный сульфид кадмия может применяться при производстве солнечных панелей на основе тонкопленочных технологий в качестве проводящего слоя n-типа, а также как компонент для выращивания оптических кристаллов, используемых в детекторах, фотогальванических элементах и электронных устройствах. Кроме того, сульфид кадмия может использоваться как пигмент для пластмасс, как компонент при производстве электроники, оптических устройств, сцинтилляторов, пьезо- и пироэлектрических материалов, а также в составе смесей для синтеза наноматериалов. Перспективными направлениями его применения также являются фотосенсоры, солнечные элементы и оптоэлектронные системы.

Ключевые слова: композитный серно-графитовый (ККГ) электрод, сульфат натрия, электролиз, плотность тока, кадмий, концетрация, сульфид кадмия, катодный электрод

Кіріспе. Қазіргі уақытта –химия өнеркәсіптерінде, металлургия мен өндірістің басқа да түрлі салаларында күкірттің –полисульфиді, сульфиді, тиосульфаты, сульфаты, және сульфитті қосылыстарына деген қажеттілікдүние жүзі бойынша жылдан жылға артып келеді. Сол үшін, химиялық өндірістерге, ауыл шаруашылығына сондай-ақ металлургия саласына қажетті күкірткұрамды қосылыстарды пайдалануға деген сұраныстарды қанағаттандыру үшін, тиімді және ұтқыр технологияны пайдалана отырып, элементті күкірттен оның пайдалы қосылыстарын синтездеудің отандық өндіріс орнын құру өте өзекті мәселелердің бірі деп айтуға болады (Baeshov, 2014).

Әдеби шолу. Зерттеу жұмысында кадмий сульфидін алудың электрохимиялық тәсілі ұсынылған. Кадмий сульфидіжартылай өткізгіш, оптоэлектроника, фотовольтаика, сенсорлар және жарық детекторлары сондай-ақ люминофорлар сияқты көптеген заманауи технологияларда кең қолданылатын материалдардың бірі.

Табиғи және техногенді шикізат көздерінен соның ішінде мұнайды өңдеу кезіндегі мұнайға ілесіп шыққан күкіртсутек газын залалсыздандырғанда түзілген элементті күкіртті бағалы және пайдалы қосылыстардысинтездеуде қолдану экономика тұрғысынан тиімді технологиясын жасау, өте маңызды іс шара болып табылады. Бұл, еліміздің отандық өндірістің даму аумағын кеңейтіп қана қоймай, әрі қоршаған орта мен табиғатқа зиянсыз жасыл экономиканы құруға мүмкіндік береді (Menkovsky, 1985).

Кадмий сульфидінің құрылымдық қасиеттерін, түйіршік өлшемінжәне электрлік параметрлерін басқару олардың функционалдық мүмкіндіктерін айқындайды. Сондықтан кадмий сульфидін алу тәсілдерін жетілдіру, оның ішінде экологиялық қауіпсіз, арзан және тиімді технологияларын дамыту маңызды ғылыми міндет болып табылады.

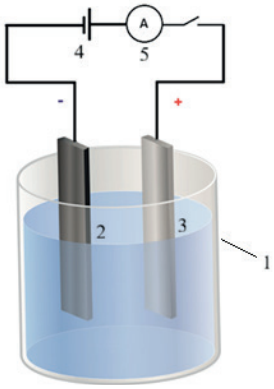
Электрохимиялық синтез – жартылай өткізгіш материалдарды алудың

перспективалы әдістерінің бірі. Бұл тәсіл температураның салыстырмалы түрде төмен диапазонында жүзеге асады, электролит құрамын, ток бойынша шығымын, электролиз ұзақтығын, ток тығыздығынбасқару арқылы кадмий сульфидінің түзілуініңтиімді параметрлерін дәл анықтауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар электрохимиялық әдіс энергия шығыны төмен, технологиялық тұрғыдан қарапайым және масштабтауға қолайлы.

Материалдар мен әдістер. Біздің жұмысымыздың негізгі мақсаты, кадмий сульфиді қосылысын синтездеудің электрохимиялық жаңа әдісін жасау, ол үшін ең алдымен композициялы күкірт-графит электродының электрохимиялық қасиеттерін жан- жақты саралай отырып үрдістің тиімді параметрлерін анықтау керек. Осы мақсаттакомпозициялы күкірт-графит электроды жасалынды. Электрод құрамындағы күкірт пен графиттің масалық ара қатынасы – S:C = 1:1 болды.Академик А. Баешовтың және шәкірттерінің зерттеу жұмыстарында композициялы КГЭ дайындаудың бірнеше әдіс тәсілдерін келтірген және патенттермен қорғалған (Baeshov, 2015).

Кадмий сульфидін алу - электролиз әдісімен зерттеу жүргізілді. Кадмий сульфидінің түзілуіне әр түрлі параметрлердің әсері (электролиз ұзақтығы, ток тығыздығы, ток бойынша шығымы)зерттелді. Түзілген кадмий сульфидінің құрамы УК-көрінетін аймақтың сканерлеуші спектрофотометрімен элементті талдау жасалды, тұнбаның морфологиялық және құрылымдық қасиеттері сканерлеуші электронды микроскопия (SEM), әдістерімен сипатталды.

Нәтижелер мен талқылаулар. Кадмий сульфидін синтездеуді органикалық шыныдан жасалғанарасы бөлінбеген электролизерде жүргізілді. Катод ретінде композициялы күкірт-графит электроды, ал анод болыпкадмий металл пластинкасықолданылды. Электролизер натрий сульфаты ерітіндісімен толтырылды (1-сурет). Кадмий ионы натрий сульфаты ерітіндісінде гидролизге ұшырмайтыны белгілі, сол себепті бейтарап орта ерітіндісі қолданылды. Күкірт-графит электродындағы ток тығыздығының әсері зерттелді.



1 сурет – Композициялы күкірт-графит электродын қолдану арқылы кадмий сульфидін алуға арналған электролизердіңпринципиальдысхемасы:электролизердің кеңістігі – натрийсульфатыерітіндісімен толтырылған. 1-электролизер;2- композициялықүкірт-графитэлектроды; 3- кадмий электроды;4- ток көзі; 5- амперметр;

Жоғарыда келтірілген электролизерде электродтарды поляризациялау кезде электродтарда төмендегідей реакциялар орын алады:

Анодты поляризациялау кезінде кадмий электродынатрий сульфаты ерітіндісіндеоңай ионизацияланып кадмий иондары түзіледі:

$$Cd\text{-}2e \rightarrow Cd^{2+} \qquad (1)$$

Катодты поляризацияланған композициялы КГЭ құрамындағы күкірт тотықсызданып, полисульфид және моносульфид иондары түзіледі, демеккелесі реакциялар орын алады:

$$nS^{0}\text{-}2e \rightarrow Sn^{2-} \qquad (2)$$

Алполисульфид-иондары біртіндеп моносульфид-иондарына дейін тотықсызданады:

$$nS^{2-}+2e \rightarrow Sn^{2-}+2e \rightarrow S^{2-}_{(n-1)} \ldots \rightarrow nS^{2-} \qquad (3)$$

Бөлек жүргізілген зерттеулердің нәтижелері бойынша, алғашқы уақытта электролизердің катод кеңістігіндегі электролиттің түсі полисульфид иондарына тән қызғылт-сары реңге боялып, уақыт өткен сайын түссізденетіндігі байқалды. Бұл құбылысты полисульфид- иондарының біртіндеп моносульфид-иондарына өтетіндігімен түсіндіруге болады. Өйткені, полисульфид иондарына қызғылт-сары түс беретін, олардың құрамындағы күкірттің өз адатомдары екендігі белгілі.

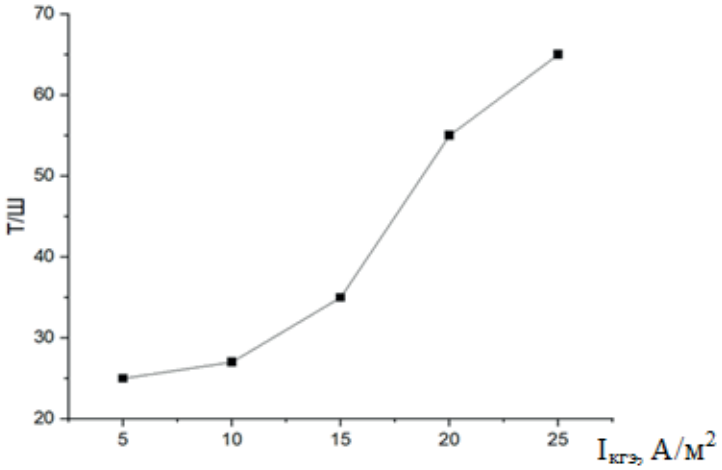
Электроллиз кезінде түзілген сульфид иондары электродтар аралығында кадмий иондарымен әрекеттесіп кадмий сульфиді түзіледі:

$$Cd^{2+}+S^{2-} \rightarrow CdS \downarrow \qquad (4)$$

Бұл қосылыстың түзілуі CdS тұнбасының ерігіштік көбейтіндісінің (ЕК $8{,}0\cdot10^{-27}$) төмендігімен түсіндіруге болады.

Катодты поляризациялаған кезде композициялы КГЭ құрамындағы күкірттің тотықсыздануына түрлі параметрлердің әсері қарастырылды.

Композициялы КГЭ-ның тотықсызданып кадмий сульфидінің түзілуіне – электродтағы ток тығыздығының натрий сульфаты концентрациясының әсерлері зерттелінді.



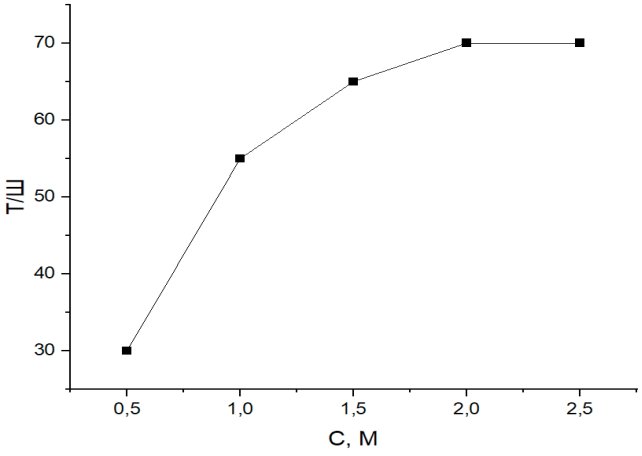
Na_2SO_4–1 М,τ=0,5сағ, t = 25С^0

1 сурет– Композициялы күкірт-графитэлектродын поляризациялағанда кадмий сульфидініңтүзілуінің ток тығыздығына әсері

Электролиз жүргізу барысында композициялы КГЭ1М натрий сульфатының ерітіндісінде поляризацияланған кезде 1 суретте көрсетілгендей ток бойынша шығым күрт өтесіндігі байқалды.

КГЭ ток тығыздығы 5-25А/м^{2}аралығында өзгерткенде кадмий сульфидінің түзілуінің ток бойынша шығымының өсуіне әсер ететіндігі зерттеу нәтижелері көрсетті.

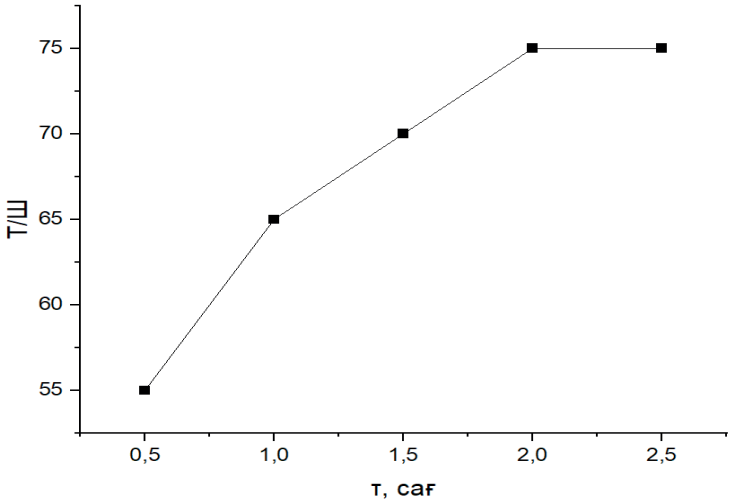
Натрий сульфаты ерітіндісіңіңконцентрациясын 0,5-2,5 М аралығында өсіргенде кадмий сульфидінің түзілуінің ток бойынша шығымының жоғарылайтындығын зерттеу нәтижелері көрсетті.



$I_{кгэ}$= 20 А/м^2, τ=0,5сағ, t = 25С^0

2 сурет–Электролизердіңкатодкеңістігіндетүзілгенкадмий сульфидініңтүзілуіне натрий сульфаты концентрациясының әсері

3 - суретте келтірілген зерттеу нәтижелері, кадмий сульфидінің түзілуіне электролиз процесінің узақтығына әсері көрсетілді. Кадмий сульфидінің түзілуі уақыт өте келе аздап көтерілетіндігі анықталды. Алғашқы кездеэлектродтар арасында алғаш келген Cd^{2+} және S^{2-}иондары әсерлеседі, уақыт өткен сайын диффузия нәтижесінде иондардың концетрациясы көбейе бастайды.



Na_2SO_4–1 М, $I_{кгэ}$= 20 А/м^2,t = 25С^0

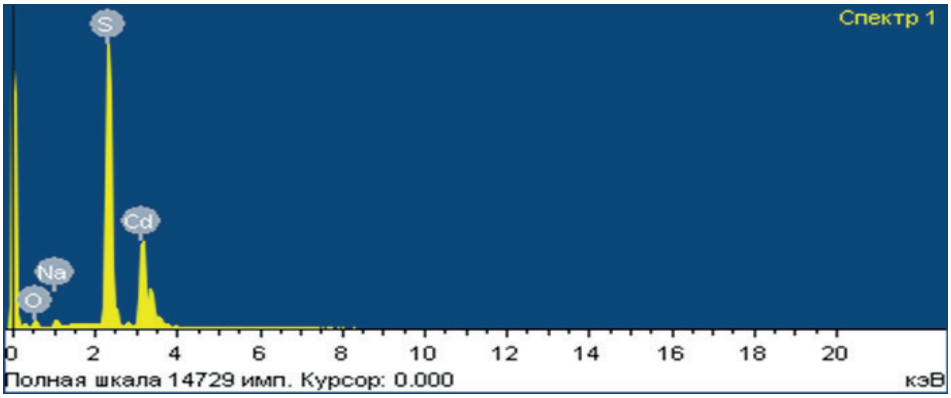
3 сурет–Композициялы күкірт-графитэлектродын поляризациялағанда түзілген кадмий сульфидініңэлектролиз ұзақтығынаәсері

Электролиз нәтижесінде түзілген мырыш сульфиді қосылысын электролиттен сүзіп бөліп алып, жуып, одан соң кептірілді. Элементті анализ нәтижелері, төмендегі нәтижелер көрсетті (1-кесте)

Композициялы күкірт-графит және кадмий электродтарын поляризациялаған кезде түзілген тұнбаның құрамында 22,54% күкірт, 71,73% кадмий элементтері бар екендігін көрсетеді. Демек бұл мәліметтер кадмий сульфидінің түзілгенін дәлелдеп тұр. Электролиз процесі натрий сульфаты ерітіндісінде жүргендіктен, тұнба құрамында 2,11% натрий иондары бар екендігі анықталды. Тұнбаны бірнеше қайталап жуу арқылы, таза кадмий сульфидін алуға болады.

1-кесте. Электролизден кейінгі алынған мырыш сульфиді қосылысын элементтік құрамы.

Спектр	O	S	Na	Cd	Барлығы
Спектр 1	3,69	22,18	2,14	72,01	100,00
Спектр 2	3,56	22,81	2,11	71,52	100,00
Спектр 3	3,61	22,63	2,09	71,67	100,00
Орташа	**3,62**	**22,54**	**2,11**	**71,73**	100,00



4-суретте алынған мырыш сульфиді ұнтақтарының элементті
анализ нәтижесінің спектрінің көрінісі

Зерттеу нәтижелері композициялы күкірт-графит электродын натрий сульфаты ерітіндісіндекатодтыанодты пояризациялау кезінде түзілген сульфид иондары менкадмиий иондары әрекеттестіріп кадмий сульфидін түзілетіндігін көрсетеді:

Қорытынды. Қорыта айтқанда алғаш рет композициялық күкірт-графит және кадмий электродтарын қолдану арқылы электролиз жүргізген кезде катодта түзілген сульфид иондарымен анодта түзілген кадмий иондары өз ара әрекеттесіп құрамында 71,73 % кадмий, 22,54 % күкірт бар кадмий сульфиді тұнбасы түзілетіндігі анықталды. Композициялы КГЭ катодта ток тығыздығын жоғарлатқан кезде және электролиз ұзақтығы артқан сайын кадмий сульфидінің түзілуінің ток бойынша шығымы да артатындығы анықталды.

References

Baeshov A.B., Konyrbaev A. Sarbayeva M.G. Myrysh (2014) Myryş sulfidın elektrohimiyalyq ədıspen alu [Obtaining zinc sulfide by electrochemical method]. Izvestiya NAS RK, 2014. – №. 6. – P. 44-49. (in Kazakh)

Baeshov A.B., Ivanov N.S. Myrzabekov B.E. (2014) Kompozitsiyaly kükırt-grafit elektrodynyŋ anodty polyarizatsiyasy [Anode polarization of composite sulfur-graphite electrode. News of NAS RK, 2014. – №. 6. – P. 3-4. (in Kazakh)

Baeshov A.B., Konurbaev A.E., Zhurinov M.Zh., (2013) Baeshova A.K. Problemy utilizacii sery i vozmozhnost' sozdaniya tekhnologii polucheniya flotoreagentov [Problems of sulfur utilization and the possibility of creating a technology for producing flotation reagents]. Proceedings of the International Scientific and Practical Conference «Innovative development of the oil and gas complex of Kazakhstan». Aktau, 2013. – Vol. 2. – P. 448-451. (in Russian)

Baeshov A., Zhdanov S.I., Baeshova A.K. and others (1997) Elektrohimiya sery i ee soedinenij[Electrochemistry of sulfur and its compounds], Science, Almaty. – 1997. – 160 p. (in Russian)

Baeshov A., Figinene I.V., Dospaev M. (2017) Elektrohimicheskij sintez soedinenij sery [Electrochemical synthesis of sulfur compounds]. Publishing house ″glasir″, Karaganda, 2017. – 273 p. (in Russian)

Baeshov A., Mamyrbekova A., Omarova E. And others. (2006) Sposoby izgotovleniya serografitovogo elektroda [Methods of manufacturing a serographite electrode], Preliminary patent of the Republic of Kazakhstan 17771 dated 09.03.2005, byul. 9, 2006. (in Russian)

Menkovsky M.A., Yavorsky V.T. (1985) Tekhnologiya sery [Technology of sulfur]. – Moscow, 1985. – 327 p. (in Russian)

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 277–286

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.420

UDC: 547.9
IRSTI: 31.23.39

©Baisalova G.Zh.[1], Azhikhanova Zh.[2,3], Taltenov A.A.[1], Kuzhatova P.[4], 2026.
[1]L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;
[2]Teqnovate LLC, Astana, Kazakhstan;
[3]Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan;
[2]Astana Medical University, Astana, Kazakhstan.
E-mail: galya_72@mail.ru

DETERMINATION OF THE TOTAL PHENOLIC CONTENT IN PERENNIAL HERBACEOUS PLANTS OF THE FLORA OF KAZAKHSTAN

Baisalova Galiya — Candidate of Chemical Sciences, Acting Professor, L.N. Gumilyev Eurasian National university, Astana, Kazakhstan,
E-mail: galya_72@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-1338-0308;
Azhikhanova Zhanat — Junior Researcher, Teqnovate LLC; Kazakhstan; Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: zhanat.azhikhanova@nu.edu.kz, https://orcid.org/0009-0003-9556-270X;
Taltenov Abzal — Doctor of Chemical Sciences, Professor, L. N. Gumilyov Eurasian National university, Astana, Kazakhstan,
E-mail: abzal06@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0620-3816;
Kuzhatova Pernegul — Master, Senior lecturer, Astana Medical University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: perne-orazai@mail.ru, https://orcid.org/0009-0008-4378-0568.

Abstract. Phenolic compounds are bioactive substances that mitigate chronic diseases associated with oxidative stress, inflammation, and aging. These compounds exert pleiotropic effects on regulatory proteins and are known for their activity against pathologies such as diabetes, obesity, osteoarthritis, atherosclerosis, Crohn's disease, hypertension, skin hyperpigmentation, and Alzheimer's disease. Flavonoids**,** which belong to the class of phenolic compounds**,** are known for their anti-inflammatory, antimicrobial, anti-obesity, anticancer, neuroprotective, cardioprotective, and antioxidant activities**.** In this study, the total phenolic content of perennial herbaceous plants from the flora of Kazakhstan (*Phlomis tuberosa* and *Achillea setacea*) was determined spectrophotometrically using the Folin-Ciocalteu reagent. The total phenolic content was quantified using a gallic acid calibration curve. Comparative analysis of various parts of *P. tuberosa* showed that the highest concentration of polyphenols was found in the leaves (19.88%) and flowers (18.06%). In *A. setacea*, the phenolic content in the leaves (11.83%) was higher than in the flowers, roots, and stems. Overall, the total phenolic content in all studied organs of *P. tuberosa* exceeded that of *A. setacea*. Furthermore, the flavonoid content in the flowers, stems, leaves, and roots was determined using differential spectrophotometry. The electronic absorption spectra of the test and

reference solutions were analyzed to identify absorption maxima and bathochromic shifts. The calculation of the total flavonoid content in plants from the literature sources is carried out by the optical density of the maximum formed on the absorption curve of the complex with aluminum chloride. However, due to the absence of distinct maxima in the absorption spectra of the flavonoid complexes of the two studied herbs, it was not possible to determine their total flavonoid content.

Keywords: phenolic compounds, flavonoids, *Phlomis tuberosa, Achillea setacea*, Folin-Ciocalteu reagent, spectrophotometry, antioxidant activity, gallic acid

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 277–286. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.420*

©Байсалова Г.Ж.[1]*, Ажиханова Ж.[2,3], Талтенов А.А.[1], Құжатова П.[4], 2026.
[1]Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан;
[2]Teqnovate ЖШС, Астана, Қазақстан;
[3]Назарбаев Университеті, Астана, Қазақстан;
[2]Астана медицина университеті, Астана, Қазақстан.
E-mail: galya_72@mail.ru

ҚАЗАҚСТАН ФЛОРАСЫНДАҒЫ КӨПЖЫЛДЫҚ ШӨПТЕСІН ӨСІМДІКТЕРДІҢ ФЕНОЛДЫҚ ҚОСЫЛЫСТАРЫНЫҢ ЖИЫНТЫҚ МӨЛШЕРІН АНЫҚТАУ

Байсалова Галия — химия ғылымдары кандидаты, профессор м.а, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: galya_72@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-1338-0308;
Ажиханова Жанат — кіші ғылыми қызметкер, Teqnovate ЖШС; Назарбаев университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: zhanat.azhikhanova@nu.edu.kz, https://orcid.org/0009-0003-9556-270X;
Талтенов Абзал — химия ғылымдарының докторы, профессор, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: abzal06@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0620-3816;
Құжатова Пернегүл — магистр, аға оқытушы, Астана медицина университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: perne-orazai@mail.ru, https://orcid.org/0009-0008-4378-0568.

Аннотация. Фенолды қосылыстар тотығу стрессімен, қабыну үдерістерінен немесе қартаю кезеңінен туындаған созылмалы ауруларға әсер ететін биобелсенді қосылыстар. Бұл қосылыстар реттеуші функциясын атқаратын ақуыздарға плеотропты әсер көрсетеді. Бұл қосылыстар созылмалы аурулардың өршуінен пайда болатын қант диабеті, семіру, остеоартрит, атеросклероз, Кронь ауруына, сонымен қатар гипертония, терінің гиперпигментациясы, Альцгеймер ауруына да қарсы белсенділікке ие екендігі белгілі. Фенолды қосылыстар қатарындағы флавоноидтар қабынуға, микробтарға, семіздікке, ісікке қарсы, нейропротекторлық, кардиопротекторлық және антиоксиданттық белсенділіктерімен белгілі. Спектрофотометрия әдісінің көмегімен Folin-Ciocalteu

реактивін қолдану арқылы Қазақстан флорасында өсетін көпжылдық шөптесін өсімдіктердің (P. tuberosa, A. setacea) фенолдық қосылыстарының мөлшері анықталды. Фенолдық қосылыстардың жиынтық мөлшері галл қышқылының градуирлеу графигін қолдана отырып есептелді. P. tuberosa өсімдігінің түрлі мүшелеріндегі фенолды қосылыстардың жиынтық мөлшерін салыстыра талдағанда, жапырағы (19,88%) мен гүліндегі (18,06%) полифенолдар мөлшері басымдыққа ие болды. Салыстырмалы талдау A. setacea өсімдігінің жапырағындағы (11,83%) фенолдық қосылыстар мөлшері гүл, тамыр, сабағымен салыстырғанда жоғары екендігі анықталды. P. tuberosa өсімдігінің түрлі мүшелеріндегі фенолдық қосылыстар жиынтық мөлшері A. setacea өсімдігімен салыстырғанда жоғары мәнге ие. Мақалада дифференциалдық спектрофотометрия көмегімен осы аталған өсімдіктердің гүл, сабағы, жапырағы мен тамырындағы флавоноидтар мөлшерін анықтау мақсатында зерттеулер жүргізілді. Әрбір зерттеу нысаны үшін алынған жұмысшы және салыстырмалы ерітінділердің электрондық спектрлері салыстырылып, жұтылу максимумдары мен батахромды ығысудың пайда болуы талданды. Әдебиет көздерінен өсімдіктердегі флавоноидтардың жиынтық мөлшерін есептеу алюминий хлоридімен түзген комплексінің жұтылу қисығында пайда болған максимумның оптикалық тығыздығы арқылы жүзеге асырылады. Зерттелген екі шөптесін өсімдіктің флавоноидты кешендерінің жұтылу спектрінде айқын максимумдардың түзілмеуіне байланысты олардың жиынтық флавоноид мөлшерін анықтау мүмкін болмады.

Түйін сөздер: фенолдық қосылыстар, флавоноидтар, *Phlomis tuberosa, Achillea setacea*, Folin-Ciocalteu реактиві, спектрофотометрия, антиоксиданттық белсенділік, галл қышқылы

©Байсалова Г.Ж.[1]*, Ажиханова Ж.[2,3], Талтенов А.А.[1], Кужатова П.[4], 2026.
[1]Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,
Астана, Казахстан;
[2]ТОО «Teqnovate», Астана, Казахстан;
[3]Назарбаев Университет, Астана, Казахстан;
[2]Медицинский университет Астана, Астана, Казахстан.
E-mail: galya_72@mail.ru

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СУММЫ ФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В МНОГОЛЕТНИХ ТРАВЯНИСТЫХ РАСТЕНИЯХ ФЛОРЫ КАЗАХСТАНА

Байсалова Галия — кандидат химических наук, и.о профессора, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: galya_72@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-1338-0308;
Ажиханова Жанат младший научный сотрудник, ТОО «Teqnovate»; Назарбаев университет, Астана, Казахстан.
E-mail: zhanat.azhikhanova@nu.edu.kz, https://orcid.org/0009-0003-9556-270X;
Талтенов Абзал — доктор химических наук, профессор, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, **Астана, Казахстан,**
E-mail: abzal06@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0620-3816;
Құжатова Пернегүл — магистр, старший преподаватель, Медицинский университет Астана, Астана, Казахстан,
E-mail: perne-orazai@mail.ru, https://orcid.org/0009-0008-4378-0568.

Аннотация. Фенольные соединения представляют собой биологически активные вещества, способные корректировать патологические состояния при хронических заболеваниях, обусловленных окислительным стрессом, воспалительными процессами и старением. Эти соединения оказывают плейотропное воздействие на регуляторные белки. Известно, что они проявляют активность в отношении таких патологий, как сахарный диабет, ожирение, остеоартрит, атеросклероз, болезнь Крона, артериальная гипертензия, гиперпигментация кожи и болезнь Альцгеймера. Флавоноиды - группа фенольных соединений, известная своими противовоспалительными, антимикробными, антиожирительными, противоопухолевыми, нейропротекторными, кардио-протекторными и антиоксидантными свойствами. Содержание фенольных соединений в многолетних травянистых растениях флоры Казахстана (P. tuberosa, A. setacea) определяли спектрофотометрическим методом с использованием реактива Фолина-Чокальтеу. Общее содержание фенольных соединений рассчитывали по калибровочному графику галловой кислоты. При сравнении различных органов P. tuberosa наибольшее количество полифенолов выявлено в листьях (19,88 %) и цветках (18,06 %). Сравнительный анализ показал, что содержание фенольных соединений в листьях A. setacea (11,83 %) выше, чем в цветках, корнях и стеблях. В целом общее содержание фенольных соединений в органах P. tuberosa выше, чем у A. setacea. В статье также представлены результаты количественного определения флавоноидов в цветках, стеблях, листьях и корнях указанных растений методом дифференциальной спектрофотометрии. Проведен сравнительный анализ электронных спектров рабочих и эталонных растворов, а также проанализировано наличие максимумов поглощения и батохромных сдвигов. Согласно литературным данным, суммарное содержание флавоноидов в растениях определяют по оптической плотности максимума, возникающего на кривой поглощения комплекса с хлоридом алюминия. Однако из-за отсутствия выраженных максимумов в спектрах поглощения флавоноидных комплексов двух исследованных травянистых растений определить их суммарное содержание не удалось.

Ключевые слова: фенольные соединения, флавоноиды, *Phlomis tuberosa, Achillea setacea*, реактив Folin-Ciocalteu, спектрофотометрия, антиоксидантная активность, галловая кислота

Кіріспе. Фенолды қосылыстар (флавоноидтар, тритерпендер, кумариндер) адам ағзасы үшін фармацевтикалық маңызға ие кең таралған екіншілік метаболиттер болып табылады. Өсімдік жасушаларындағы екіншілік метаболиттердің синтезі температураның күрт өзгеруі, экстремалды температуралар, ультракүлгін сәулелену мен топырақ теңгерімсіздігі сияқты абиотикалық факторлардың әсеріне жауап ретінде жүреді (Dada et al., 2017; Sánchez-Hernández et al., 2021; Dar et al., 2017). Өсімдіктер мен жануарлардағы бейімделу механизмі ұқсас болуы, екіншілік өсімдік метаболиттерін адамзат пайдасы үшін қолдануға мүмкіндік береді. Өсімдік текті биокомпоненттер оттегінің белсенді формаларын сіңіруі,

түрлі ферменттердің белсенділігін, жасушалық циклін, дезоксирибонуклеин қышқылы мен ақуыздар функциясын, липидтердің асқынтотығуын реттеу арқылы бос радикалдардың жоғары деңгейі тудырған аурулардың өршуінің алдын алады және баяулатады (Rahman et al., 2021; Elgadir et al., 2023; Panche et al., 2016).

Фенолдық қосылыстардың бір түрі болып саналатын флавоноидтар қабынуға, микробтарға, семіздікке, ісікке қарсы, нейропротекторлық, кардиопротекторлық және антиоксиданттық белсенділіктерімен белгілі (Stachelska et al., 2025).

Қазақстанның орталық аймағында өсетін *P. tuberosa* мен *A. setacea* өсімдіктері фенолды қосылыстардың потенциалды көздері ретінде қызығушылық тудырады.

P. tuberosa - Lamiaceae тұқымдасы *Phlomis* тегіне жататын көпжылдық жабайы өсімдік. *P. tuberosa* өсімдігі тыныс алу, жүрек-қантамыр, бауыр және қабыну ауыруларын емдеуде дәстүрлі және тибеттік медицинада кеңінен қолданылады. *Phlomis* түрлері флавоноидтар, иридоидтар және эфир майларымен бай екендігі зерттелген (Javzan & Selenge, 2014; Azhikhanova, et al., 2025).

A. setacea – күрделігүлділер Asteraceae тұқымдасына *Achillea* тегіне жататын көпжылдық шөптесін өсімдік. Бұл жабайы өсімдік құрғақ шалғындарда, далалық және жартылай шөлейтті аймақтарда, кездеседі. *A. setacea* өсімдігінің эфир майының зеңдік саңырауқұлақтарға қарсы антимикробтық және антиоксиданттық белсенділігі зерттелген (Rezaei et al., 2017; Saeidnia et al., 2011).

P. tuberosa және *A. setacea* – адам ықпалынан тыс, табиғи қолайлы жағдайларда өсетін, экологиялық тұрғыдан бейімделген тіршілік формасы жағынан гемикриптофиттер қатарына жататын көпжылдық жабайы өсімдіктер (Azhikhanova et al., 2024).

Бұл ғылыми жұмыстың мақсаты P. tuberosa мен A. setacea өсімдіктеріндегі фенолдық қосылыстар мен флавоноидтардың жиынтық мөлшерін спектрофотометриялық әдіспен анықтауға арналған.

Материалдар мен зерттеу әдістері. Зерттеу нысандары ретінде Қазақстанның орталық аймағы, Қарағанды облысы Ортау тауларында өсетін *Phlomis tuberosa L.* (*P. tuberosa*) мен *Achillea setacea* Waldst. Et Kit. (*A. setacea*) өсімдіктері алынған.

Жиналған үлгілер ауада кептіріліп, механикалық қоспалардан тазартылды және зертханалық диірменде ұнтақталды. Аналитикалық үлгі диаметрі 2 мм електен өтетін бөлшектер өлшеміне дейін майдаланды.

Ұнтақталған өсімдік шикізатынан дәл 0,500 г өлшеніп алынып, көлемі 100 мл тығыз жабылатын колбаға орналастырылды. Үстіне 50 мл 70% этанол ерітіндісі қосылды. Колба герметикалық түрде жабылып, ±0,01 г дәлдікпен өлшенді (Sumaiyah, et al, 2018; Saptarini, et al, 2022).

Экстракция су моншасында кері тоңазытқыш көмегімен 45 минут бойы жүргізілді. Қыздыру аяқталғаннан кейін қоспа бөлме температурасына дейін салқындатылып, сүзгі қағазы арқылы сүзілді. Сүзіндінің алғашқы 5 мл бөлігі тасталып, қалған бөлігі талдау үшін «А ерітіндісі» ретінде пайдаланылды.

0,1 мл көлемдегі «А ерітіндісіне» 0,1 мл дистилденген су және 0,4 мл Folin–Ciocalteu реагенті қосылды. Содан кейін реакциялық ортаны жасау үшін қоспаға 2,5 мл 15%-дық Na_2CO_3 ерітіндісі енгізілді.

Реакциялық қоспа толық бояу кешенінің түзілуі үшін бөлме температурасында 30 минут бойы қараңғы жарық түспейтін жағдайда ұсталды. Белгіленген уақыт өткеннен кейін түзілген кешеннің оптикалық тығыздығы спектрофотометрде 500–800 нм толқын ұзындығы диапазонында өлшенді. Өлшеулердің дәлдігін қамтамасыз ету үшін жұтылу максимумы (λ_{max}) 760–765 нм аймағында нақтыланды.

Ішкі стандарт ретінде галл қышқылы қолданылды. Алынған оптикалық тығыздық көрсеткіштері алдын ала құрылған галл қышқылының калибрлеу графигіне сәйкес қайта есептелді. Фенолды қосылыстардың жиынтық мөлшері галл қышқылының эквивалентімен пайыздық көрсеткіш (%) түрінде келесі формула бойынша анықталды:

$$X = \frac{A_э * m_0 * P * V_э * V_э'}{A_0 * m_ш * V_{xэ} * V_0 * V_0'} * \frac{V_{x0}}{(100-W)} * 100\%$$

мұндағы:

$A_э$ - тәжірибелік үлгінің оптикалық тығыздығы;

A_o - галл қышқылы стандартының оптикалық тығыздығы;

$m_ш$ - шикізат массасы (г);

m_o - галл қышқылы стандартының массасы (г);

$V_э$ – алынған экстрактінің көлемі (мл);

$V_{xэ}$ – экстракт аликвотасы көлемі(мл);

V_o - галл қышқылы ерітіндісі көлемі (мл);

V_o' - галл қышқылы өлшеуіш колбаның көлемі(мл);

V_{xo} - галл қышқылы аликвотасы көлемі(мл);

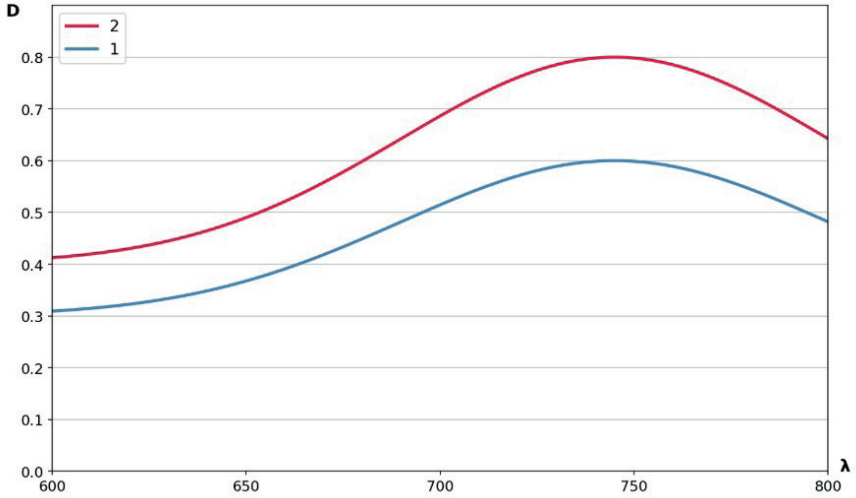
W – кептіру кезіндегі массаның жоғалуы (%).

Флавоноидтарды анықтау үшін 25 мл колбаға жоғарыдағы А ерітіндісінен 5 мл алып, 5%-дық алюминий хлориді ерітіндісін қосып, 10 минутқа қалдырады. Уақыт өткен соң үстіне көлемі 0,2 мл 3%-дық CH_3COOH ерітіндісін құяды. Өлшегіш колбаның белгісіне дейін этил спиртімен толтырып, 40 минут уақытқа қалдырады. Бұл жұмысшы ерітінді болып саналады.

Салыстыру ерітіндісін даярлау үшін, жоғарыдағы барлық процедураны қайталайды. Бірақ алюминий хлориді ерітіндісі қоспайды (Kurdyukov, 2021).

Нәтижелер және оларды талқылау. Өсімдік шикізаттарындағы фенолды қосылыстардың жиынтық мөлшерін анықтау үшін, спектрофотометрлік әдіс қолданылды. Бұл әдіс полифенолды қосылыстардың Folin-Ciocalteu реактивімен әрекеттесуіне негізделген. Фенолды қосылыстардағы гидроксилді тобтардың Folin-Ciocalteu реактивімен реакциясындағы тотықсыздандырғыш қасиеті анықталады. Нәтижесінде түсті қосылыс түзіліп, бояудың қарқындылығына қарай фенолды қосылыстардың мөлшері анықталады.

Төмендегі 1-суретте *A. setacea* жапырағы мен *P. tuberosa* гүлінен алынған фенолдық қосылыстардың Folin-Ciocalteu реактивімен кешенінің жұтылу спектрлері келтірілген.



Сурет 1 - Фенолдық қосылыстар жиынтығының Folin-Ciocalteu реактивімен кешенінің жұтылу спектрі 1- *A. setacea* жапырағы, 2 - *P. tuberosa* гүлі.

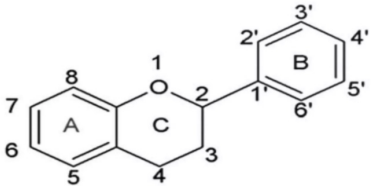
Фенолды қосылыстардың жиынтық мөлшері бойынша *P. tuberosa* өсімдігінің жапырағы (19,88%) мен гүліндегі (18,06%) полифенолдар мөлшері ең жоғары мөлшерде. Ал *A. setacea* өсімдігінің жапырағындағы (11,83%) фенолдық қосылыстар мөлшері басқа қарастырылған мүшелерімен салыстырғанда басымдыққа ие. Жалпы фенолдық қосылыстар жиынтық мөлшері бойынша *P. tuberosa* доминант болып табылады (кесте 1).

Кесте 1- Фенолды қосылыстардың жиынтық мөлшері

Өсімдіктің мүшелері	Фенолды қосылыстардың жиынтық мөлшері, %	
	P. tuberosa	*A. setacea*
Гүл	18,06	6,80
Сабағы	9,82	2,95
Тамыр	5,69	3,07
Жапырақ	19,88	11,83

Әдетте өсімдік шикізатындағы флавоноидтарды сандық анықтау үшін, алюминий хлоридімен комплекстүзу реакциясы қолданылады. Бұл реакция флавоноидты қосылыстарды полифенолды қосылыстардың күрделі қоспасынан таңдамалы (селективті) анықтауға мүмкіндік береді. Комплекстүзілу жағдайында спектрдің ұзынтолқынды аймаққа батохромды ығысуы орын алады. Сандық анықтау осы реакцияның түсті өнімдерінің жұтылу максимумдарындағы оптикалық тығыздықтарын өлшеу арқылы жүргізіледі.

Флавоноидтардағы C_4-тегі кето-тобпен және C_3 немесе C_5 жағдайындағы гидроксилді тобтар арасында (сурет 2) сары түске боялған тұрақты қосылыс түзіледі (Sumaiyah, et al, 2018).

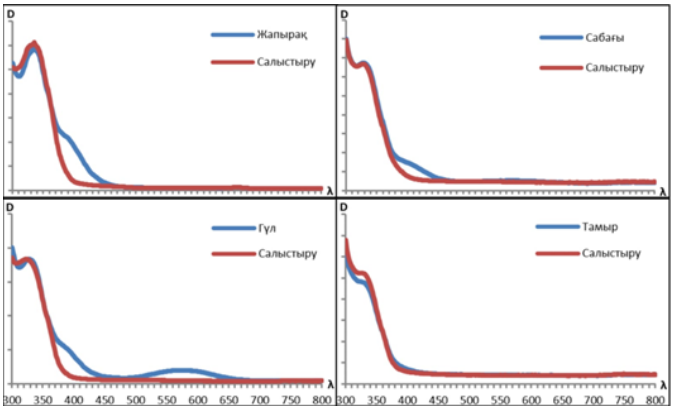


Сурет 2 - Флавоноидтардың негізгі көміртектік қаңқасының формуласы.

В-сақинасындағы ОН-тобтарының болуы жұтылу шыңының пайда болуына ықпал ететіні белгілі. Алайда C_2-C_3 атомдарында қос байланыстың болмауы π-электрондардың делокализациясы үшін қолайсыз болғандықтан, кез-келген хиноноидты құрылымның түзілуі мүмкін емес. Сонымен В сақинасындағы орто-гидроксилді тобтардың қатысумен комплекстүзу жүрсе де, ол комплекстер тұрақсыз немесе лабилді болады. Одан бөлек C_4-те кетотоп болмаса, тұрақты комплекстүзілу C_5 жағдайында ОН-тобтары болса да жүрмес еді. ОН-тобтарымен қатар, C_2-C_3-те қос байланыстың болуы және C_4-жағдайында кетотобтың болуы комплекстүзілуде шешуші роль атқаратынын көрсетеді. Алюминий хлоридімен комплекстүзуде флавондар мен флавонолдар үшін электрондық спектрде батохромды ығысу жұтылу максимумы түрінде 380-412 нм аймақта айқындалады.

P. tuberosa түрлі мүшелеріндегі флавоноидтарды сандық анықтау барысында төмендегі суреттегі (сурет 3) қисықтар алынды.

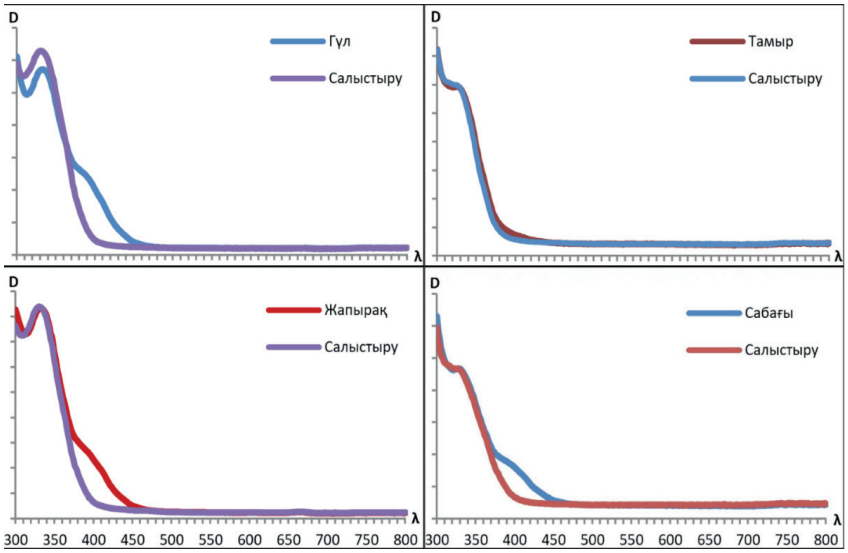
P. tuberosa жапырақтарындағы флавоноидтарға алюминий хлоридін қосқан кездегі және ол реагентсіз жағдайда да максимум 328 нм көрінді. Жұтылудың ұзынтолқынды жолағының батохромды ығысу «әлсіз иық» түрінде шамамен 390-420 нм аралығында байқалған. Осыған ұқсас жағдайлар жапырақ пен сабағының сығындыларының электрондық спектрінде байқалады. Бізге дейінгі бір зерттеуде (De, et al, 2022) бұл байқалған жағдайды флавоноидтардың алюминий ионымен тұрақсыз комплекс түзуімен байланыстырады. Ал тамырының сығындысының электрондық спектрінде мұндай батохромдық ығысу мүлдем жоқ. Бұл жағдай алюминиймен комплекс түзетін тобтардың сығынды құрамындағы флавоноидтарда болмауымен түсіндіріледі.



Сурет 3 - *P. tuberosa* өсімдігінің түрлі мүшелерінен алынған сығындылардың электрондық спектрлері.

CC BY NC

Ұқсас жағдай *A. setacea* өсімдігінің түрлі мүшелерінен алынған сығындылардың электрондық спектрінен байқалды. Гүлі, жапырағы мен сабағының сығындыларының электрондық спектрлерінен батохромды ығысу «иық» түрінде кескінделген. Тамырында бұл интервалда мұндай ығысу мүлдем жоқ (сурет 4). Қисықтардағы ерекшеліктер жоғарыдағы *P. tuberosa* сығындыларының жұтылу жолақтарын сипаттағандай түсіндіріледі.



Сурет 4 - *A. setacea* өсімдігінің түрлі мүшелерінен алынған сығындылардың электрондық спектрлері.

Көптеген ғылыми еңбектерде флавоноидтардың жиынтық мөлшері олардың алюминий хлоридімен түзген комплексінің жұтылу қисығында пайда болған максимумының сәйкес оптикалық тығыздығы арқылы табылған. Қарастырып отырған екі шөптесін өсімдіктердің флавоноидты жиынтықтарының жұтылу спектрінде айқын максимумдардың түзілмеуіне байланысты флавоноидты қосылыстардың жиынтық мөлшері анықталмады.

Қорытынды. Елімізде өсетін кейбір көпжылдық шөптесін өсімдіктердің түрлі мүшелеріндегі фенолдық қосылыстарының жиынтық мөлшері спектрофотометрия әдісімен анықталды. Бұл қосылыстардың P. tuberosa өсімдігінің жапырағы (19,88%) мен гүліндегі (18,06%) мөлшері сабағы және тамырымен салыстырғанда жоғары мәнге ие. Ал A. setacea өсімдігінің жапырағындағы (11,83%) фенолдық қосылыстар мөлшері басқа мүшелеріне (гүл, тамыр, сабағы) қарағанда басымдыққа ие. Бұл зерттеуде P. tuberosa өсімдігінің қарастырып отырған барлық мүшелеріндегі фенолдық қосылыстардың жиынтық мөлшері A. setacea өсімдігімен салыстырғанда жоғары екендігі анықталды. Сонымен қатар дифференциалдық спектрофотометрия көмегімен алынған электрондық спектрлерді талдау арқылы, осы аталған шикізаттың әрқайсысындағы флавоноидтар жиынтығының алюминий хлоридімен комплекс түзу мүмкіндігі қарастырылды.

References

Azhikhanova Z., Duru M.E., Kucukaydin S., Megbenu H.K., Tas-Kucukaydin M., Baisalova G., Shaimardan M., Nuraje N., Özler M.A. (2025) Phytochemical profiling and various biological activities of Phlomis tuberosa L. Scientific reports, 15. – P. 7293. DOI: doi.org/10.1038/s41598-024-80456-5 (in Eng.).

Azhikhanova Zh., Duru M.E., Megbenu H.K., Kucukaydin S., Tas-Kucukaydin M., Baisalova G., Shaimardan M., Seiilgazy M., Adekenov S., Nuraje N., Özler M.A. (2024) Phytochemical study of Achillea setacea Waldst. et Kit. with anticholinesterase, antidiabetic, anti-Urease, and anti tyrosinase activities. Eng. Sci., 31. – P. 256. DOI: dx.doi.org/10.30919/es1256 (in Eng.).

Dada F.A., Oyeleye S.I., Ogunsuyi O.B., Olasehinde T.A., Adefegha S.A., Oboh G., Boligon A.A. (2017) Phenolic constituents and modulatory effects of raffia palm leaf [raphia hookeri] extract on carbohydrate hydrolyzing enzymes linked to type-2 diabetes. J Tradit Complement Med, 7(4). – P. 494-500. DOI:doi.org/10.1016/j.jtcme.2017.01.003 (in Eng.).

Dar R.A., Brahman R.K., Khurana N., Wagay J.A., Lone Z.A., Ganaie M.A., Pitre K.S. (2017) Evaluation of antioxidant activity of crocin, podophyllotoxin and kaempferol by chemical, biochemical and electrochemical assays. Arabian J Chem., 10. – P. 1119-1128. DOI: 10.1016/j.arabjc.2013.02.004 (in Eng.).

De R., Jo K.W., Kim K.T. (2022) Influence of molecular structures on fluorescence of flavonoids and their detection in mammalian cells. Biomedicines,10(6). – P. 1265-1282. DOI: doi.org/10.3390/biomedicines10061265 (in Eng.).

Elgadir M.A., Chigurupati S., Mariod A.A. (2023) Review: Selected potential pharmaceutical and medical benefits phenolic compounds: Recent advances. Functional Food Science, 3(7). – P. 108-128. DOI: doi.org/10.31989/ffs.v3i7.1118 (in Eng.).

Javzan S., Selenge D. (2014) Phytochemical study of aerial parts from Phlomis tuberosa L. Mongolian Journal of Chemistry, 14. – P. 20-24. DOI:doi.org/10.5564/mjc.v14i0.192 (in Eng.).

Kurdyukov E.E., Vodopyanova O.A., Moiseeva, I.Y., Semenova E.F. (2021) A method for the quantitative determination of the total flavonoid content of Moringa leaves (Moringa oleifera). Moscow University Chemistry Bulletin, 76(3). – P. 224-226. (in Eng.).

Panche A.N., Diwan A.D., Chandra S.R. (2016) Flavonoids: an overview. J Nutr Sci., 5:e47. DOI: 0.1017/jns.2016.41. (in Eng.).

Rahman M.M., Rahaman M.S., Islam M.R., Rahman F., Mithi F.M., Alqahtani T., Almikhlafi M. A., Alghamdi S.Q., Alruwaili A.S., Hossain M.S., Ahmed M., Das R., Emran T.B., Uddin M.S. (2021) Role of phenolic compounds in human disease: Current knowledge and future prospects. Molecules, 27(1). – P. 233. DOI:doi.org/10.3390/molecules27010233 (in Eng.).

Rezaei F., Jamei R., Heidari R. (2017) Chemical composition and antioxidant activity of oil from wild Achillea setacea and A. vermicularis. International Journal of Food Properties, 20. – P. 1522-1531. DOI: /10.1080/10942912.2016.1213281 (in Eng.).

Saeidnia S., Gohari A.R., Mokhber-Dezfuli N., Kiuchi F. (2011) Achillea species: Comprehensive review of their traditional uses, phytochemicals, and biological activities. Journal of Medicinal Plants Research, 5(13). – P. 2736-2746. (in Eng.).

Sánchez-Hernández S., Esteban-Muñoz A., Samaniego Sánchez C., Giménez-Martínez R., Miralles B., Olalla Herrera M. (2021) Study of the phenolic compound profile and antioxidant activity of human milk from spanish women at different stages of lactation: A comparison with infant formulas. Food Res Int, 141. – P. 10149. DOI: doi.org/10.1016/j.foodres.2021.110149 (in Eng.).

Saptarini N.M., Pratiwi R., Maisyarah I.T. (2022) Colorimetric method for total phenolic and flanonoid content determination of fig (Ficus carica L.) leaves extract from west Java, Indonesia. Rasayan J. Chem, 15(1). – P. 600-605. DOI:dx.doi.org/10.31788/RJC.2022.1516670 (in Eng.).

Stachelska M.A., Karpiński P., Kruszewski B**.** *A (2025) Comprehensive review of biological properties of flavonoids and their role in the prevention of metabolic, cancer and neurodegenerative diseases.* Appl. Sci., 15(19). – P. 10840. DOI:/doi.org/10.3390/app151910840 (in Eng.).

Sumaiyah S., Masfria M., Dalimunthe A. (2018) Determination of total phenolic content, total flavonoid content, and antimutagenic activity of ethanol extract nanoparticles of Rhaphidophora pinnata (L.f) Schott leaves. Rasayan Journal of Chemistry, 11(2). – P. 505-510. (in Eng.).

Villegas-Aguilar M.C., Fernandez-Ochoa A., Cadiz-Gurrea M.L., Pimentel-Moral S., Lozano-Sanchez J., Arraez-Roman D., Segura-Carretero A. (2020) Pleiotropic biological effects of dietary phenolic compounds and their metabolites on energy metabolism, inflammation and aging. Molecules, 25. – P. 596. DOI:doi.org/10.3390/molecules25030596 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 287–303

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.421

UDC: 547.458:678.7:620.22
IRSTI: 31.25.19

©Darmenbayeva A.S.[1,*], Rajasekharan R.[2], Zhussipnazarova G.M.[1], Mukazhanova Zh.B.[3], Begenova B.E.[4], 2026.
[1]M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan;
[2]Providence College of Engineering, Kerala, India;
[3]S. Amanzholov East Kazakhstan University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan;
[4]M. Kozybayev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan.
E-mail: maral88.ad@gmail.com

COMPOSITES BASED ON CHITOSAN AND CELLULOSE: SYNTHESIS, PROPERTIES AND APPLICATION PROSPECTS

Darmenbayeva Akmaral — PhD in Chemistry, Associate Professor, M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan, E-mail: maral88.ad@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2974-0398;
Rajasekharan Reshmy — PhD in Chemistry, Associate Professor, Providence Engineering College, Kerala, India,
E-mail: reshmypkumar@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2091-0135;
Zhussipnazarova Gaziza — doctoral student, M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan,
E-mail: jgm.092016@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5175-5169;
Mukazhanova Zhazira — PhD, S. Amanzholov East Kazakhstan University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan,
E-mail: mukazhanovazhb@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4635-8000;
Begenova Bahyt — Professor, Doctor of Chemical Sciences, M. Kozybayev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan,
E-mail: bebegenova@ku.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6343-1153.

Abstract. In recent years, chitosan-cellulose composites have attracted growing attention in both scientific research and industrial development due to their biodegradability, biocompatibility, renewability, and broad functional potential. These biopolymer-based materials are increasingly regarded as environmentally friendly alternatives to conventional petrochemical polymers, particularly in response to global challenges related to sustainability, environmental protection, and resource efficiency. Chitosan-cellulose composites have demonstrated significant promise in medicine, water and wastewater treatment, food packaging technologies, and ecological applications. The aim of this review article is to systematize contemporary approaches to the synthesis and modification of chitosan-cellulose composites, to analyze the relationship between their structural features and functional properties, and to assess their prospects for practical and industrial application. A critical analysis of scientific

publications published in leading peer-reviewed journals between 2000 and 2025 was conducted. The review compares key fabrication and modification techniques, including gelation, electrospinning, regeneration from solution, chemical cross-linking, and surface functionalization, with particular attention to their influence on composite performance. The analysis shows that the incorporation of cellulose, especially in micro- and nanostructured forms, significantly enhances the mechanical strength, dimensional stability, and durability of the composites. At the same time, the presence of chitosan provides reactive functional groups that impart high sorption capacity, antimicrobial activity, and bioactivity. In water treatment applications, chitosan-cellulose composites exhibit high adsorption efficiency toward heavy metal ions and organic contaminants, while in food packaging they demonstrate reduced gas and moisture permeability. Moreover, biodegradability, low toxicity, and environmental safety are identified as key advantages of these materials. Overall, chitosan-cellulose composites represent promising multifunctional materials for future large-scale applications, particularly within the framework of green technologies, circular economy principles, and advanced nanostructured systems.

Keywords: chitosan; cellulose; biocomposite; sorbents; hydrogel; nanofiber; biodegradable packaging materials

Financing. *The study was conducted with the financial support of the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (AP22686347).*

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 287–303. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.421*

©Дарменбаева А.С.[1,*], Rajasekharan R.[2], Жусипназарова Г.М.[1], Мукажанова Ж.Б.[3], Бегенова Б.Е.[4], 2026.

[1]М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан;
[2]Провиденс инженерлік колледжі, Керала, Үндістан;
[3]С.Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті, Өскемен, Қазақстан;
[4]М.Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университеті, Петропавл, Қазақстан.
E-mail: maral88.ad@gmail.com

ХИТОЗАН ЖӘНЕ ЦЕЛЛЮЛОЗА НЕГІЗІНДЕГІ КОМПОЗИТТЕР: СИНТЕЗ, ҚАСИЕТТЕРІ ЖӘНЕ ҚОЛДАНУ ПЕРСПЕКТИВАЛАРЫ

Дарменбаева Ақмарал — PhD (химия), қауымдастырылған профессор, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,
E-mail: maral88.ad@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2974-0398;
Rajasekharan Reshmy — PhD (химия), қауымдастырылған профессор, Провиденс инженерлік

CC BY NC

колледжі, Керала, Үндістан,
E-mail: reshmypkumar@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2091-0135;
Жусипназарова Газиза — PhD докторант, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,
E-mail: jgm.092016@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5175-5169;
Мукажанова Жазира — PhD, С. Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті, Өскемен, Қазақстан,
E-mail: mukazhanovazhb@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4635-8000;
Бегенова Бакыт — профессор, химия ғылымдарының докторы, М.Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университеті, Петропавл, Қазақстан,
E-mail: bebegenova@ku.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6343-1153.

Аннотация. Соңғы жылдары хитозан-целлюлоза композиттері биоыдырағыштығы, биоүйлесімділігі, жаңартылуы және кең функционалдық әлеуетіне байланысты ғылыми зерттеулерде де, өнеркәсіптік дамуда да назар аударды. Бұл биополимер негізіндегі материалдар, әсіресе тұрақтылыққа, қоршаған ортаны қорғауға және ресурстарды тиімді пайдалануға байланысты жаһандық қиындықтарға жауап ретінде, дәстүрлі мұнай-химия полимерлеріне экологиялық таза балама ретінде қарастырылуда. Хитозан-целлюлоза композиттері медицинада, су мен ағынды суларды тазартуда, тамақ өнімдерін қаптау технологияларында және экологиялық қолдануда айтарлықтай перспективалылық көрсетті. Бұл шолу мақаласының мақсаты - хитозан-целлюлоза композиттерін синтездеу мен модификациялаудың заманауи тәсілдерін жүйелеу, олардың құрылымдық ерекшеліктері мен функционалдық қасиеттері арасындағы байланысты талдау және олардың практикалық және өнеркәсіптік қолданылу перспективаларын бағалау. 2000 және 2025 жылдар аралығында жетекші рецензияланған журналдарда жарияланған ғылыми жарияланымдарға сыни талдау жүргізілді. Шолуда композиттік өнімділікке әсеріне ерекше назар аудара отырып, гельдеу, электроспининг, ерітіндіден регенерацияны қоса алғанда, негізгі өндіріс және модификациялау әдістері салыстырылады. Талдау целлюлозаны, әсіресе микро және нанокұрылымды формаларда қосу композиттердің механикалық беріктігін, өлшемдік тұрақтылығын және төзімділігін айтарлықтай арттыратынын көрсетеді. Сонымен қатар, хитозанның болуы жоғары сорбциялық қабілеттілік, микробқа қарсы белсенділік және биоактивтілік беретін реактивті функционалдық топтарды қамтамасыз етеді. Суды тазарту қолданбаларында хитозан-целлюлоза композиттері ауыр металл иондары мен органикалық ластаушы заттарға жоғары адсорбциялық тиімділік көрсетеді, ал тамақ қаптамасында олар газ бен ылғал өткізгіштігінің төмендеуін көрсетеді. Сонымен қатар, биоыдырағыштық, төмен уыттылық және экологиялық қауіпсіздік бұл материалдардың негізгі артықшылықтары ретінде анықталған. Жалпы алғанда, хитозан-целлюлоза композиттері болашақта кең ауқымды қолданбалар үшін, әсіресе жасыл технологиялар, айналмалы экономика принциптері және озық нанокұрылымды жүйелер шеңберінде перспективалы көпфункционалды материалдар болып табылады.

Түйін сөздер: хитозан; целлюлоза; биокомпозит; сорбенттер; гидрогель; наноталшық; биоыдырайтын орау материалдары

©Дарменбаева А.С.[1]*, Rajasekharan R.[2], Жусипназарова Г.М.[1], Мукажанова Ж.Б.[3], Бегенова Б.Е.[4], 2026.

[1]Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан;

[2]Инженерный колледж Провиденса, Керала, Индия;

[3]Восточно-Казахстанский университет имени С. Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан;

[4]Северо-Казахстанский университет имени М. Козыбаева, Петропавловск, Казахстан.

E-mail: maral88.ad@gmail.com

КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И ЦЕЛЛЮЛОЗЫ: СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ

Дарменбаева Акмарал — PhD по химии, ассоциированный профессор, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,
E-mail: maral88.ad@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2974-0398;

Rajasekharan Reshmy — PhD по химии, ассоциированный профессор, Инженерный колледж Провиденса, Керала, Индия,
E-mail: reshmypkumar@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2091-0135;

Жусипназарова Газиза — докторант, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,
E-mail: jgm.092016@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5175-5169;

Мукажанова Жазира — PhD, Восточно-Казахстанский университет имени С. Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан,
E-mail: mukazhanovazhb@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4635-8000;

Бегенова Бакыт — профессор, доктор химических наук, Северо-Казахстанский университет имени М. Козыбаева, Петропавловск, Казахстан,
E-mail: bebegenova@ku.edu.kz, https://orcid.org/0000-0002-6343-1153.

Аннотация. В последние годы хитозан-целлюлозные композиты привлекают все большее внимание как в научных исследованиях, так и в промышленности благодаря своей биоразлагаемости, биосовместимости, возобновляемости и широкому функциональному потенциалу. Эти биополимерные материалы все чаще рассматриваются как экологически безопасная альтернатива традиционным нефтехимическим полимерам, особенно в условиях глобальных вызовов, связанных с устойчивым развитием, охраной окружающей среды и рациональным использованием ресурсов. Хитозан-целлюлозные композиты демонстрируют значительный потенциал в медицине, очистке воды и сточных вод, технологиях упаковки пищевых продуктов, а также в других экологически ориентированных областях применения. Цель настоящей обзорной статьи заключается в систематизации современных подходов к синтезу и модификации хитозан-целлюлозных композитов, анализе взаимосвязи между их структурными особенностями и функциональными свойствами, а также в оценке перспектив их практического и промышленного применения. Для достижения этой цели

был проведен критический анализ научных публикаций, опубликованных в ведущих рецензируемых журналах в период с 2000 по 2025 год. В обзоре сопоставляются основные методы получения и модификации композитов, включая гелеобразование, электропрядение и регенерацию из раствора, с особым вниманием к их влиянию на свойства материалов. Анализ показывает, что введение целлюлозы, особенно в микро- и наноструктурированной форме, существенно повышает механическую прочность, размерную стабильность и долговечность композитов. В то же время присутствие хитозана обеспечивает наличие реакционноспособных функциональных групп, придающих материалам высокую сорбционную способность, антимикробную активность и биоактивность. В системах водоочистки хитозан-целлюлозные композиты демонстрируют высокую эффективность адсорбции ионов тяжелых металлов и органических загрязнителей, а в пищевой упаковке — снижение газо- и влагопроницаемости. Ключевыми преимуществами данных материалов также являются биоразлагаемость, низкая токсичность и экологическая безопасность. В целом хитозан-целлюлозные композиты представляют собой перспективные многофункциональные материалы для будущего крупномасштабного применения, особенно в рамках «зеленых» технологий, принципов циркулярной экономики и разработки передовых наноструктурированных систем.

Ключевые слова: хитозан; целлюлоза; биокомпозит; сорбенты; гидрогель; нановолокно; биоразлагаемые упаковочные материалы

Кіріспе. Қазіргі таңда қоршаған ортаның ластануы, мұнай-химиялық полимерлерге тәуелділіктің артуы және биомедициналық материалдарға қойылатын қауіпсіздік талаптарының күшеюі функционалды биополимерлік композиттерді әзірлеуді өзекті ғылыми бағыттардың біріне айналдырды. Осы тұрғыдан алғанда табиғи, жаңартылатын және биоыдырайтын полисахаридтерге негізделген материалдар экология, медицина және аграрлық технологиялар салаларында кең қолдану әлеуетіне ие болып отыр (Strnad and Fras Zemljič, 2023).

Хитозан мен целлюлоза – табиғи шығу тегі, биосәйкестігі және құрылымдық икемділігімен ерекшеленетін полисахаридтер. Хитозан – хитиннің ішінара деацетилденген туындысы болып, құрамында протондануға және кешен түзуге қабілетті амин топтарының болуына байланысты жоғары сорбциялық және антимикробтық қасиеттер көрсетеді (Dash et al., 2011). Ал целлюлоза өсімдік биомассасының негізгі компоненті ретінде жоғары механикалық беріктікке, химиялық тұрақтылыққа (яғни уақыт өте келе механикалық және химиялық қасиеттерін сақтап қалу қабілеті) және кең ауқымды химиялық модификация мүмкіндігіне ие. Бұл екі биополимерді бір композиттік жүйеде біріктіру синергетикалық әсердің пайда болуына әкеледі: целлюлоза матрицасы материалдың құрылымдық және механикалық тұрақтылығын қамтамасыз етсе, хитозан функционалдық белсенділікті, соның ішінде сорбциялық қабілет пен биологиялық әсерді күшейтеді. Мұндай композиттерде сутектік байланыстар, электростатикалық өзара әрекеттесулер және кейбір жағдайларда ковалентті

айқаспалы байланыстар түзілуі мүмкін, бұл материал қасиеттерін мақсатты түрде басқаруға мүмкіндік береді (Habibi, 2014).

Соңғы жылдары хитозан-целлюлоза композиттерін алудың әртүрлі әдістері қарқынды дамуда, оның ішінде гель түзуші, электрлік иіру, ерітіндіден қайта қалпына келтіру, қабат-қабат (layer-by-layer) жинақтау және кеуекті аэрогельдік құрылымдар қалыптастыру тәсілдері кеңінен зерттелуде (Niu et al., 2023). Бұл әдістер композиттердің морфологиясын, кеуектілігін, беттік ауданын және функционалдық топтарының қолжетімділігін реттеуге мүмкіндік береді, ал бұл олардың қолдану тиімділігіне тікелей әсер етеді.

Хитозан-целлюлоза композиттері ауыр металл иондарын және органикалық ластағыштарды тиімді байланыстыратын сорбенттер ретінде су тазалау технологияларында, жараны емдеуге арналған биоматериалдар мен дәрілік заттарды жеткізу жүйелерінде, сондай-ақ биоыдырайтын (табиғи немесе ферментативтік ортада экологиялық зиянсыз өнімдерге ыдырау қабілеті) және антимикробтық орау материалдары ретінде тағам өнеркәсібінде қолданылуда. Сонымен қатар, соңғы зерттеулерде бұл композиттердің энергетика саласындағы перспективалары, атап айтқанда протоналмасу мембраналары мен биополимерлік электролиттер ретінде қолданылу мүмкіндігі қарастырылуда (Ahmed, 2026). Алайда, хитозан-целлюлоза негізіндегі композиттердің кең ауқымды қолданылуына кедергі келтіретін бірқатар мәселелер сақталуда. Олардың қатарына материалдардың ұзақ мерзімді тұрақтылығы, ылғал ортадағы механикалық қасиеттердің төмендеуі, өндірісті масштабтау қиындығы және қасиеттерді стандарттау қажеттілігі жатады. Осыған байланысты, композиттерді синтездеу тәсілдерін, құрылым-қасиет арасындағы өзара байланысты және қолдану бағыттарын жүйелі түрде талдау ғылыми және практикалық тұрғыдан маңызды болып табылады. Мақаланың мақсаты – хитозан және целлюлоза негізіндегі композиттерді синтездеудің қазіргі заманғы әдістерін жинақтап талдау, олардың негізгі физика-химиялық және функционалдық қасиеттерін сипаттау, сондай-ақ экология, медицина және агроөнеркәсіп салаларындағы қолдану перспективаларын айқындау.

Зерттеу материалдары. Бұл мақалада материалдары ретінде хитозан, целлюлоза және олардың негізінде алынған композиттік жүйелерге арналған отандық және шетелдік ғылыми жарияланымдар пайдаланылды. Зерттеу нысанына хитозан-целлюлоза композиттерінің әртүрлі түрлері, соның ішінде гидрогельдер, аэрогельдер, наноталшықтар, үлбірлер және кеуекті сорбенттік материалдар енгізілді. Талдауға алынған әдеби дереккөздерде композиттерді синтездеудің және модификациялаудың заманауи әдістері, олардың құрылымдық ерекшеліктері, механикалық, сорбциялық, тосқауылдық және биологиялық қасиеттері, сондай-ақ медицинада, су тазалауда және тағамдық орау технологияларында қолдану мүмкіндіктері қарастырылған. Материал ретінде пайдаланылған деректер 2000-2025 жылдар аралығында жарияланған, эксперименттік нәтижелер мен сандық көрсеткіштерді қамтитын ғылыми жұмыстардан іріктелді.

Зерттеу әдістері. Әдеби деректерді жинау және іріктеу Web of Science**,** Scopus**,** ScienceDirect**,** SpringerLink және MDPI дерекқорларында индекстелген

рецензияланатын журналдар негізінде жүргізілді. Іздеу барысында *chitosan*, *cellulose*, *chitosan–cellulose composites*, *biopolymer composites*, *hydrogels*, *adsorbents*, *wound dressing*, *food packaging* сияқты кілт сөздер және олардың әртүрлі комбинациялары қолданылды. Іріктеу критерийлері ретінде зерттеулердің ғылыми сапасы, әдістемелік анықтығы, алынған нәтижелердің сенімділігі және практикалық маңыздылығы қарастырылды. Қайталанатын, ескірген немесе жеткілікті эксперименттік негізі жоқ жұмыстар талдауға енгізілмеді. Таңдап алынған жарияланымдарда ұсынылған деректер салыстырмалы және жүйелі талдау әдістері арқылы өңделді. Композиттерді алу тәсілдері (гель түзуші, электрлік иіру, ерітіндіден қайта қалпына келтіру), құрылымдық параметрлері және функционалдық қасиеттері құрылым-қасиет-қолдану өзара байланысы тұрғысынан бағаланды. Алынған нәтижелер хитозан-целлюлоза композиттерінің қазіргі жағдайын және болашақ даму бағыттарын анықтау үшін қорытындыланды.

Нәтиже мен талқылау. Хитозан мен целлюлоза табиғи полисахаридтер класына жататын, химиялық құрылымы мен функционалдық топтарының табиғаты бойынша ерекшеленетін биополимерлер болып табылады. Олардың құрылымдық ерекшеліктері мен физика-химиялық қасиеттері композиттік материалдар түзу үшін кең мүмкіндіктер ашады.

Хитозанның химиялық құрылымы және қасиеттері. Хитозан хитиннің ішінара немесе толық деацетилденуі нәтижесінде алынатын сызықтық полисахарид болып табылады. Оның негізгі құрылымдық буыны β-(1→4)-байланыс арқылы жалғасқан D-глюкозамин және N-ацетил-D-глюкозамин қалдықтарынан тұрады. Хитозан молекуласындағы басты функционал топтар – амин (–NH□) және гидроксил (–OH) топтары, олар молекулааралық сутектік байланыстар түзуге, протондануға және металл иондарымен кешен түзуге қабілетті. Хитозанның физика-химиялық қасиеттері деацетилдену дәрежесіне, молекулалық массасына және кристалдылық деңгейіне тәуелді. Қышқыл ортада амин топтарының протондануы нәтижесінде хитозан катиондық полимер ретінде әрекет етеді, бұл оның су ерітінділерінде ерігіштігін және биологиялық белсенділігін арттырады. Осы қасиет хитозанды аниондық ластағыштармен және теріс зарядталған беттермен өзара әрекеттесуге қабілетті етеді. Биологиялық тұрғыдан хитозан биосәйкестігімен, биоыдырағыштығымен және антимикробтық белсенділігімен сипатталады. Оның бактериялар мен саңырауқұлақтарға қарсы әсері жасуша қабырғасымен электростатикалық әрекеттесуге және мембрананың өткізгіштігін бұзуға негізделген (Rinaudo, 2006). Осы себепті хитозан медицинада, тағам өнеркәсібінде және экологиялық технологияларда кеңінен зерттеліп келеді.

Целлюлозаның химиялық құрылымы және қасиеттері. Целлюлоза – β-(1→4)-гликозидтік байланыстар арқылы байланысқан D-глюкопираноза қалдықтарынан тұратын табиғи полисахарид. Оның молекуласында көп мөлшерде гидроксил топтарының болуы целлюлозаның дамыған сутектік байланыстар жүйесін түзуіне және жоғары кристалдылық деңгейіне әкеледі (Klemm et al., 2023). Бұл қасиеттер целлюлозаның механикалық беріктігін және құрылымдық тұрақтылығын қамтамасыз етеді.

Целлюлоза табиғи жағдайда суда ерімейді, алайда химиялық модификация немесе регенерациялау арқылы әртүрлі туындыларын (карбоксиметилцеллюлоза, целлюлоза ацетаты, наноцеллюлоза) алуға болады. Наноөлшемді целлюлоза түрлері (нанофибрилдер, нанокристалдар) жоғары меншікті бет ауданына және ерекше механикалық қасиеттерге ие, бұл оларды композиттік материалдар үшін тиімді толтырғыштар етеді. Целлюлоза биосәйкесті, улы емес және қоршаған ортада оңай ыдырайтын материал болып табылады. Оның өсімдік қалдықтарынан, агроөнеркәсіптік биомассадан алынуы тұрақты даму қағидаттарына сәйкес келеді және целлюлозаны «жасыл» материалдар қатарында маңызды орынға қояды (Darmenbayeva et al., 2025).

Хитозан мен целлюлозаны композиттер жасауда қолданудың артықшылықтары. Хитозан мен целлюлозаны бір композиттік жүйеде біріктіру олардың жеке кемшіліктерін өзара толықтыруға мүмкіндік береді. Целлюлоза матрицасы композитке механикалық беріктік пен пішін тұрақтылығын берсе, хитозан функционалдық белсенділікті, соның ішінде сорбциялық және биологиялық қасиеттерді қамтамасыз етеді. Бұл биополимерлер арасында сутектік байланыстар, электростатикалық тартылыс және кей жағдайларда ковалентті байланыстар түзілуі мүмкін, нәтижесінде құрылымдық біртектілігі жоғары композиттер қалыптасады. Мұндай өзара әрекеттесулер материалдың кеуектілігін, ісіну қабілетін және беттік қасиеттерін реттеуге мүмкіндік береді (Isogai, 2021).

Сонымен қатар, хитозан-целлюлоза композиттері химиялық және физикалық модификацияға бейім, бұл олардың қасиеттерін мақсатты түрде өзгертуге жол ашады. Функционал топтарды енгізу, наноқұрылымды компоненттермен үйлестіру және кросслинкинг әдістерін қолдану арқылы сорбциялық сыйымдылығы (сорбенттің бірлік массасына шаққанда сіңірілетін зат мөлшері, мг/г) жоғары, биосәйкесті және ұзақ мерзімді тұрақты материалдар алуға болады. Осы артықшылықтар хитозан мен целлюлозаны экологиялық, биомедициналық және агрохимиялық қолданбалар үшін перспективалы композиттер жасаудың негізі ретінде қарастыруға мүмкіндік береді.

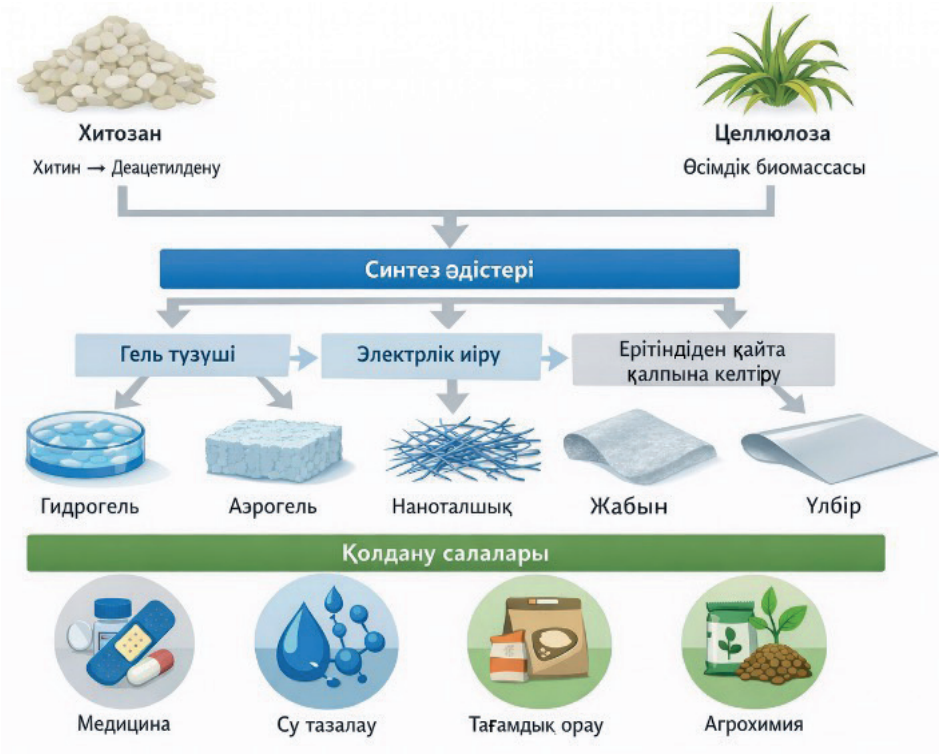
Хитозан-целлюлоза композиттерін синтездеу және модификациялау әдістері. Хитозан-целлюлоза негізіндегі композиттердің қасиеттері оларды синтездеу әдістеріне, фазалардың өзара әрекеттесу сипатына және модификациялау тәсілдеріне тікелей тәуелді. Соңғы жылдары бұл композиттерді алудың әртүрлі физикалық және химиялық әдістері дамып, материалдың морфологиясын, кеуектілігін және функционалдық белсенділігін басқаруға мүмкіндік берді.

1-суретте хитозан мен целлюлозаны бастапқы шикізат ретінде пайдаланып, композиттерді синтездеудің негізгі әдістері (гель түзуші, электрлік иіру, ерітіндіден қайта қалпына келтіру), алынатын құрылымдық формалар (гидрогель, аэрогель, наноталшық, жабын, үлбір) және олардың медицина, су тазалау, тағамдық орау және агрохимия салаларындағы қолдану бағыттары көрсетілген. Схема синтез әдістері мен материал құрылымы арасындағы байланысты көрнекі түрде бейнелейді.

CC BY NC

Гель түзу әдісі. Гель түзу хитозан-целлюлоза композиттерін алудың ең кең таралған тәсілдерінің бірі болып табылады. Бұл әдіс негізінен полимер тізбектері арасында физикалық немесе химиялық айқаспалы байланыстар түзу арқылы үшөлшемді торлы құрылым қалыптастыруға негізделген. Гель түзу процесінде хитозанның амин топтары мен целлюлозаның гидроксил немесе карбоксил топтары арасында сутектік және иондық өзара әрекеттесулер жүзеге асады, нәтижесінде механикалық тұрақты және кеуекті гидрогельдер түзіледі. Соңғы зерттеулерде гель түзу әдісі ауыр металл иондарын адсорбциялауға арналған функционалды гидрогельдер алу үшін тиімді екені көрсетілді. Мұндай жүйелерде гельдің ісіну қабілеті мен кеуек өлшемі иондардың диффузиясын және байланысу кинетикасын анықтайды (Appuhamillage, 2019). Сонымен қатар, жұмсақ синтез шарттары биомедициналық қолданбалар үшін маңызды артықшылық болып табылады.

Электрлік иіру (electrospinning) әдіс. Электрлік иіру әдісі хитозан-целлюлоза композиттерінен наноталшықты құрылымдар алу үшін кеңінен қолданылады. Бұл тәсіл жоғары кернеу өрісінің әсерімен полимер ерітіндісінен диаметрі нанометрлік деңгейдегі үздіксіз талшықтар түзуге мүмкіндік береді. Электрлік иіру нәтижесінде алынған композиттік маттар жоғары меншікті бет ауданына, кеуекті құрылымға және бағытталған морфологияға ие болады.



Сурет 1 – Хитозан-целлюлоза композиттерін алу әдістері, құрылымдық формалары және қолдану салаларының схемалық көрінісі.

Хитозан-целлюлоза негізіндегі электрлік иірілген материалдар жара таңғыштар, сүзгілік мембраналар және антимикробтық жабындар ретінде перспективалы деп танылған. Зерттеулер көрсеткендей, целлюлозалық компонент талшықтардың механикалық беріктігін арттырса, хитозан олардың биологиялық белсенділігін қамтамасыз етеді. Сонымен қатар, электрлік иірң параметрлерін өзгерту арқылы талшық диаметрін және кеуектілік деңгейін басқаруға болады.

Ерітіндіден тұндыру және регенерациялау әдістері. Ерітіндіден тұндыру немесе регенерациялау әдісі целлюлозаны арнайы ерітіштерде ерітіп, кейін антиеріткіш қосу арқылы қатты фазаға айналдыруға негізделген. Бұл процесс барысында хитозан целлюлозалық матрицаға біркелкі таралып, композиттік құрылым қалыптасады. Қайта қалпына келтірілген хитозан-целлюлоза композиттері көбінесе пленкалар, мембраналар және аэрогельдер алу үшін қолданылады. Бұл әдістің артықшылығы – фазалардың микродеңгейде жақсы араласуы және материал құрылымының салыстырмалы біртектілігі. Соңғы еңбектерде регенерацияланған композиттердің бояғыштар мен органикалық ластағыштарды тиімді сорбциялайтыны көрсетілген, бұл оларды су тазалау технологиялары үшін перспективалы етеді (He et al., 2023).

Беттік және көлемдік модификациялау тәсілдері. Хитозан-целлюлоза композиттерінің функционалдық қасиеттерін арттыру үшін беттік және көлемдік модификациялау кеңінен қолданылады. Ковалентті модификациялау кезінде полимер тізбектеріне функционал топтар енгізіледі немесе айқаспалы байланыстар түзіледі, бұл материалдың механикалық тұрақтылығын және химиялық төзімділігін арттырады. Ал ковалентсіз модификациялау сутектік байланыстар мен электростатикалық өзара әрекеттесулерге негізделеді. Мұндай тәсілдер материалдың икемділігін сақтай отырып, сорбциялық немесе биологиялық белсенділікті күшейтуге мүмкіндік береді. Әсіресе қабат-қабат (layer-by-layer) жинақтау әдісі арқылы алынған хитозан-целлюлоза жабындары құрылымдық біртектілігімен және басқарылатын қалыңдығымен ерекшеленеді.

Құрылым түзілуіндегі ковалентті және ковалентсіз әрекеттесулердің рөлі. Хитозан-целлюлоза композиттерінің қасиеттері ковалентті және ковалентсіз байланыстардың арақатынасына тікелей тәуелді. Ковалентті айқаспалы байланыстар материалдың ұзақ мерзімді тұрақтылығын және механикалық беріктігін қамтамасыз етсе, ковалентсіз әрекеттесулер (сутектік байланыстар, иондық тартылыс) құрылымның икемділігін және функционалдық жауап беру қабілетін арттырады. Соңғы зерттеулерде осы екі типтегі өзара әрекеттесулерді үйлестіре қолдану арқылы «реттелетін» композиттер жасау мүмкіндігі көрсетілді. Мұндай материалдар қолдану ортасына бейімделіп, сорбциялық, тосқауылдық немесе биологиялық қасиеттерін тиімді көрсете алады (Nicolle et al., 2021).

Хитозан-целлюлоза композиттерінің физика-химиялық және функционалдық қасиеттері. Хитозан-целлюлоза композиттерінің практикалық құндылығы олардың физика-химиялық және функционалдық қасиеттерінің үйлесімділігімен анықталады. Бұл қасиеттер материалдың морфологиясына, кеуектілік деңгейіне, полимер тізбектері арасындағы өзара әрекеттесулерге және қолданылған синтез

немесе модификация әдістеріне тікелей тәуелді. Соңғы жылдары жүргізілген эксперименттік зерттеулер композиттердің қасиеттерін мақсатты түрде реттеу мүмкіндігін көрсетті, бұл оларды әртүрлі қолданбалар үшін бейімдеуге жол ашады.

Хитозан-целлюлоза композиттерінің механикалық сипаттамалары олардың фазалық құрамына, целлюлозалық компоненттің мөлшері мен дисперсия дәрежесіне, сондай-ақ құрылымдық ұйымдасу ерекшеліктерінетікелей байланысты. Әсіресе наноөлшемді целлюлозаны енгізу композиттердің механикалық беріктігін едәуір арттыратыны белгілі. Мұндай жүйелерде жүктеменің тиімді берілуі қамтамасыз етіліп, полимерлік матрица мен арматуралаушы фаза арасында берік өзара әрекеттесу қалыптасады. Наноцеллюлоза негізіндегі биополимер композиттерінде созылу беріктігінің 40-60 МПа-ға дейін жоғарылайтыны, ал серпімділік модулінің 3-6 ГПа диапазонына жететіні эксперименттік түрде көрсетілген. Бұл көрсеткіштер таза хитозан матрицасымен салыстырғанда бірнеше есе жоғары және композиттердің конструкциялық тұрғыдан қолданылу мүмкіндігін айқындайды. Ылғалды ортада механикалық тұрақтылықты сақтау биомедициналық және экологиялық қолданбалар үшін аса маңызды мәселе болып табылады. Су ортасында көптеген биополимерлердің беріктігі төмендейтіні белгілі, алайда целлюлозалық фазамен күшейтілген хитозан-целлюлоза гидрогельдері суға қанықкан күйде де өз құрылымдық тұтастығын сақтайды. Мұндай гидрогельдердің қысуға төзімділігі 150-250 кПа деңгейінде сақталатыны көрсетілген, бұл оларды инъекциялық жүйелерде және жараны жабуға арналған материалдар ретінде пайдалануға мүмкіндік береді (Li et al., 2021). Осылайша, композиттердің механикалық қасиеттері олардың нақты қолдану ортасына бейімделе алатынын дәлелдейді.

Хитозан-целлюлоза композиттерінің маңызды функционалдық сипаттамаларының бірі – олардың сорбциялық белсенділігі. Хитозан құрамындағы амин топтары ауыр металл иондарымен кешен түзуге қабілетті болса, целлюлоза кеуекті құрылым түзіп, массалмасу процесін жеңілдетеді. Эксперименттік деректер биополимер сорбенттері үшін ауыр металл иондарына қатысты адсорбциялық сыйымдылықтың 50-200 мг/г диапазонында өзгеретінін көрсетеді. Сонымен қатар, химиялық немесе физикалық функционалдандыру арқылы бұл көрсеткіштерді айтарлықтай арттыруға болатыны анықталған. Функционал топтарға бай хитозан-целлюлоза композиттері Pb(II) сияқты токсикалық иондарға қатысты жоғары селективтілік пен тез сорбция кинетикасын көрсетеді, бұл оларды су тазалау технологиялары үшін перспективалы материалдар қатарына жатқызады (Fu and Wang, 2011).

Тоскауылдық қасиеттер хитозан-целлюлоза композиттерінің тағамдық және фармацевтикалық орау материалдары ретіндегі қолданылуын айқындайды. Композиттердің тығыздығы мен қабатталған құрылымы газдардың және су буының өтуін шектеп, өнімнің сақтау мерзімін арттыруға мүмкіндік береді. Наноцеллюлозаның енгізілуі құрылымның тығыздалуына ықпал етіп, тоскауылдық тиімділікті күшейтеді (Fu and Wang, 2011).

Биосәйкестік хитозан-целлюлоза композиттерінің басты артықшылықтарының бірі болып табылады. *In vitro* зерттеулер бұл материалдардың жасушалық уыттылығы төмен екенін және тірі тіндермен жақсы үйлесетінін көрсетеді. Сонымен қатар, хитозан мен целлюлоза табиғи полисахаридтер болғандықтан, олардың ферментативтік ортада біртіндеп биодеградациялануы экологиялық қауіпсіздікті қамтамасыз етеді. Мұндай материалдар бірнеше апта ішінде ыдырап, қоршаған ортаға зиянды өнімдер бөлмейді, бұл оларды қысқа және орта мерзімді қолданбалар үшін қолайлы етеді (Aranaz et al., 2009).

Жалпы алғанда, эксперименттік деректер хитозан-целлюлоза композиттерінде құрылым мен қасиет арасындағы тығыз байланысты айқын көрсетеді. Наноөлшемді целлюлозалық фазаның біркелкі таралуы механикалық беріктікті арттырып, ал кеуекті морфология сорбциялық тиімділіктің жоғарылауына ықпал етеді. Сондықтан композит құрылымын мақсатты түрде басқару олардың функционалдық қасиеттерін реттеудің негізгі құралы болып табылады.

2-суретте хитозан-целлюлоза композиттерінің құрылымдық параметрлері (кеуектілік, функционал топтар, айқаспалы байланыстар), олардың негізгі физика-химиялық және функционалдық қасиеттеріне (механикалық беріктік, сорбциялық сыйымдылық, биосәйкестік) әсері және практикалық қолдану салаларымен (сорбенттер, су тазалау жүйелері, тағамдық орау, агрохимиялық материалдар) байланысы көрсетілген. Схема материал құрылымын мақсатты басқару арқылы қасиеттерді реттеу мүмкіндігін айқындайды.



Сурет 2 – Хитозан–целлюлоза композиттеріндегі құрылым-қасиет-қолдану арасындағы өзара байланыс.

Жүргізілген эксперименттік зерттеулерді талдау хитозан-целлюлоза композиттерінің физика-химиялық және функционалдық қасиеттері олардың құрылымдық параметрлерімен тығыз байланысты екенін көрсетті. Наноцеллюлоза сияқты құрылымдық күшейткіштерді енгізу композиттердің механикалық беріктігін айтарлықтай арттырады, ал кеуекті гидро- және аэрогельдік құрылымдар жоғары сорбциялық сыйымдылық пен жылдам массалмасуды қамтамасыз етеді. Тосқауылдық қасиеттердің жақсаруы композиттерді орау материалдары ретінде қолдануға мүмкіндік берсе, биосәйкестік пен бақыланатын биодеградация оларды биомедициналық және экологиялық қолданбалар үшін перспективалы етеді. Осылайша, құрылымды мақсатты түрде басқару хитозан-целлюлоза композиттерінің қасиеттерін нақты қолдану салаларына бейімдеудің негізгі факторы болып табылады.

Хитозан-целлюлоза композиттерін қолдану және даму перспективалары. Хитозан-целлюлоза композиттері табиғи полисахаридтердің құрылымдық және функционалдық артықшылықтарын біріктіруі нәтижесінде әртүрлі қолдану салаларында практикалық маңызға ие материалдар ретінде қарастырылуда. Соңғы жылдары жүргізілген эксперименттік зерттеулер бұл композиттердің нақты ортада тиімді жұмыс істей алатынын және өнеркәсіптік қолдануға жақындағанын көрсетеді.

1-кестеде хитозан-целлюлоза негізіндегі композиттерді синтездеудің негізгі әдістері, нәтижесінде түзілетін құрылымдық формалар, олардың басым физика-химиялық және функционалдық қасиеттері, сондай-ақ негізгі қолдану салалары жинақталған.

Кесте 1 – Хитозан-целлюлоза композиттерін алу әдістері, құрылымдық формалары, негізгі қасиеттері және қолдану салалары

Синтез әдісі	Құрылымдық форма	Негізгі қасиеттер	Қолдану саласы
Гель түзуші	Гидрогель	Жоғары ісіну, биосәйкестік	Жара таңғыштар, дәрі жеткізу
Гель түзуші	Аэрогель	Жоғары кеуектілік, сорбция	Су тазалау
Электрлік иіру	Наноталшық	Үлкен бет ауданы, антимикробтық	Медицина, фильтрация
Ерітіндіден қайта қалпына келтіру	Жабын	Тосқауылдық қасиет	Тағамдық орау
Ерітіндіден қайта қалпына келтіру	Үлбір	Газ және бу өткізгіштігін төмендету	Орау материалдары
Микрокапсулация	Микробөлшек	Баяу босап шығу	Агрохимия

Кестеде әртүрлі синтез тәсілдерінің хитозан-целлюлоза композиттерінің құрылымдық, механикалық және функционалдық қасиеттеріне әсері жинақталған түрде ұсынылған. Жүргізілген салыстырмалы талдау материал қасиеттерінің синтез әдісіне тәуелді екенін көрсетіп, алынған композиттерді медицинада, су тазалау жүйелерінде және тағамдық орау технологияларында мақсатты түрде қолдану бағыттарын негіздеуге мүмкіндік береді.

Медицинада қолдану: жара таңғыштар және дәрі жеткізу жүйелері. Медицина саласында хитозан-целлюлоза композиттері ең алдымен жара таңғыш материалдар және дәрілік заттарды жеткізу жүйелері ретінде зерттелуде. Эксперименттік деректер көрсеткендей, мұндай композиттер жоғары ылғал ұстау қабілетіне, газ алмасуға қолайлы кеуекті құрылымға және айқын антимикробтық белсенділікке ие. Хитозан мен целлюлозаның синергетикалық әсері жара аймағында қолайлы микросреда қалыптастырып, тіндердің регенерациясын жеделдетуге мүмкіндік береді. Эксперименттік зерттеулерде хитозан-наноцеллюлоза негізіндегі гидрогель таңғыштардың *Staphylococcus aureus* және *Escherichia coli* өсуін 95%-дан астам тежейтіні, ал жасушалық уыттылық сынақтарында фибробласттардың тіршілік қабілетінің 90%-дан жоғары деңгейде сақталатыны көрсетілген. Сонымен қатар, хитозан-целлюлоза микробөлшектеріне инкапсуляцияланған антибиотиктердің баяу және бақыланатын босап шығуы 72 сағатқа дейін созылатыны анықталған, бұл инфекцияланған жараларды емдеуде маңызды артықшылық болып табылады (Deng et al., 2025).

Су тазалауда қолдану: ауыр металл иондары мен органикалық ластағыштар. Су тазалау технологияларында хитозан-целлюлоза композиттері ауыр металл иондары мен органикалық ластағыштарды жоюға арналған тиімді сорбенттер ретінде кеңінен зерттелуде. Эксперименттік зерттеулер бұл материалдардың жоғары адсорбциялық сыйымдылығын, жылдам сорбция кинетикасын және бірнеше рет регенерациялауға жарамдылығын көрсетеді. Хитозан-целлюлоза аэрогельдерінің Pb(II) иондарына қатысты максималды адсорбциялық сыйымдылығы 300 мг/г-дан жоғары мәндерге жететіні, ал бірнеше регенерация циклінен кейін де сорбциялық тиімділіктің 80-85%деңгейінде сақталатыны анықталған. Сонымен қатар, органикалық бояғыштарды жоюға арналған зерттеулерде мұндай кеуекті композиттердің метилен көгін қысқа уақыт ішінде 90%-дан астам мөлшерде адсорбциялайтыны көрсетілген (Li et al., 2019). Бұл нәтижелер композиттердің нақты ағынды суларды тазалау жүйелерінде қолдануға жарамды екенін дәлелдейді.

Орау және тағам технологияларында қолдану. Тағамдық және фармацевтикалық орау саласында хитозан-целлюлоза композиттері биоыдырайтын және антимикробтық материалдар ретінде ерекше қызығушылық тудырады. Мұндай материалдар тағам өнімдерінің микробиологиялық бұзылуын баяулатып, сақтау мерзімін ұзартуға мүмкіндік береді. Эксперименттік деректер хитозан-целлюлоза композит үлбірлерінің оттегі өткізгіштігі дәстүрлі биополимерлік материалдармен салыстырғанда 40-60% төмен екенін, ал микробиологиялық тұрақтылығының айтарлықтай жоғарылайтынын көрсетеді. Бұл көрсеткіштер композиттердің тағам өнімдерін сақтау үшін тиімді тосқауылдық және экологиялық қауіпсіз орау материалдары екенін айқындайды (Costa et al., 2021).

Агрохимия және экология саласындағы қолдану. Агрохимияда хитозан-целлюлоза композиттері баяу босап шығатын тыңайтқыштар мен пестицидтерді тасымалдаушы матрица ретінде зерттелуде. Мұндай жүйелер қоршаған ортаға түсетін жүктемені азайтып, белсенді заттардың тиімділігін арттыруға

мүмкіндік береді. Ma et. al. хитозан-целлюлоза негізіндегі микрокапсулаларда инкапсуляцияланған тыңайтқыштардың топырақта босап шығу уақыты 10-14 күнге дейін созылатынын және өсімдікке сіңу тиімділігінің артатынын көрсетті (Ma et al., 2023). Экологиялық тұрғыдан алғанда, бұл композиттер топырақта толық биодеградацияланып, улы қалдықтар түзбейтіні анықталған, бұл оларды тұрақты ауыл шаруашылығы үшін перспективалы материалдарға жатқызады.

Даму перспективалары. Хитозан-целлюлоза композиттерін дамытудың болашақ бағыттары көпқырлы сипатқа ие. Бірінші кезекте, оларды металл немесе көміртекті нанобөлшектермен біріктіру арқылы көпфункциялы материалдар алу мүмкіндігі зерттелуде. Мұндай гибридті жүйелер бір мезгілде сорбциялық, антимикробтық және каталитикалық қасиеттер көрсете алады. Сонымен қатар, соңғы еңбектерде хитозан-целлюлоза композиттерінің энергетика саласындағы әлеуеті, атап айтқанда биополимерлік электролиттер мен ионалмасу мембраналары ретінде қолданылуы қарастырылуда. Тәжірибелік *fuel cell* сынақтарында мұндай мембраналардың протон өткізгіштігі 10^{-3}-10^{-2} См/см деңгейіне жететіні көрсетілген (Abouricha et al., 2024).

Перспективалы бағыттардың қатарына «жасыл» технологияларды дамыту, яғни еріткішсіз немесе төмен энергиялы синтез әдістерін енгізу, жаңартылатын шикізатты пайдалану және материалдардың толық өмірлік циклін бағалау жатады. Бұл бағыттар хитозан-целлюлоза композиттерінің өнеркәсіптік деңгейде кеңінен қолданылуына негіз қалайды.

Қорытынды. Бұл шолу жұмысында хитозан мен целлюлоза негізіндегі композиттердің қазіргі даму деңгейі, оларды синтездеудің негізгі тәсілдері, физика-химиялық және функционалдық қасиеттері, сондай-ақ практикалық қолдану мүмкіндіктері жүйелі түрде талданды. Әдеби деректерді салыстырмалы талдау аталған биополимерлерді біріктіру синергетикалық әсер беретінін және нәтижесінде қасиеттері басқарылатын, экологиялық тұрғыдан қауіпсіз материалдар алуға болатынын көрсетті.

Зерттеулер хитозан-целлюлоза композиттерінің құрылымы мен қасиеттері арасындағы тығыз байланысты айқын дәлелдейді. Целлюлозаның құрылымдық рөлі материалдың механикалық тұрақтылығын қамтамасыз етсе, хитозан функционалдық белсенділікті, соның ішінде сорбциялық және биологиялық әсерді күшейтеді. Синтез және модификация әдістерін мақсатты таңдау арқылы композиттердің кеуектілігін, беттік қасиеттерін, биосәйкестігін және тоскауылдық сипаттамаларын нақты қолдану салаларына бейімдеуге мүмкіндік бар екені анықталды.

Эксперименттік деректер хитозан-целлюлоза композиттерінің медицинада (жара таңғыштар, дәрі жеткізу жүйелері), су тазалау технологияларында (ауыр металл иондары мен органикалық ластағыштарға арналған сорбенттер), тағамдық орауда (биоыдырайтын және антимикробтық пленкалар), сондай-ақ агрохимия мен экологияда (баяу босап шығатын препараттар, топыраққа қауіпсіз материалдар) жоғары тиімділік көрсететінін растайды. Бұл композиттерді қолдану қоршаған ортаға түсетін жүктемені азайтып, тұрақты даму қағидаттарын жүзеге

асыруға ықпал етеді. Сонымен қатар, шолу барысында бірқатар шешімін толық таппаған мәселелер де айқындалды. Олардың қатарына композиттердің ұзақ мерзімді тұрақтылығын қамтамасыз ету, ылғал ортада механикалық қасиеттердің сақталуы, өндірістік масштабтау мүмкіндіктері және қасиеттерді стандарттау қажеттілігі жатады. Бұл аспектілер хитозан-целлюлоза композиттерін кең ауқымды өнеркәсіптік қолдануға енгізу жолындағы негізгі ғылыми-техникалық кедергілер болып табылады.

Болашақ зерттеулер хитозан-целлюлоза композиттерін нанобөлшектермен және басқа биоматериалдармен біріктіруге, көпфункциялы жүйелерді әзірлеуге, сондай-ақ энергетика саласындағы қолдану мүмкіндіктерін кеңейтуге бағытталуы тиіс. Сонымен қатар, «жасыл» химия қағидаттарына негізделген синтез тәсілдерін дамыту және материалдардың толық өмірлік циклін бағалау осы бағыттағы зерттеулердің практикалық маңызын арттыра түседі. Жалпы алғанда, хитозан-целлюлоза композиттері заманауи материалтанудың маңызды әрі перспективалы бағыты болып табылады және олардың әрі қарай дамуы ғылыми және қолданбалы тұрғыдан өзекті болып қала береді. Сонымен қатар, хитозан-целлюлоза композиттерін практикалық қолдануға енгізу барысында олардың ұзақ мерзімді тұрақтылығы, әсіресе ылғалды және биологиялық белсенді ортадағы құрылымдық өзгерістері маңызды мәселе болып қала береді. Өндірістік масштабта қолдану кезінде шикізаттың біркелкілігі, технологиялық процестердің қайталанбалылығы және экономикалық тиімділігі қосымша зерттеулерді талап етеді. Осы факторларды ескеру композиттердің өнеркәсіптік деңгейде қолданылуын қамтамасыз етудің негізгі шарттарының бірі болып табылады.

References

Abouricha S., Aziam H., Noukrati H., Sel O., Saadoune I., Lahcini M., & Youcef H.B. (2024). Biopolymers-based proton exchange membranes for fuel cells. *ChemElectroChem*, 11(9), e202300648. https://doi.org/10.1002/celc.202300648 (in English)

Ahmed A. (2026). Challenges of polymer bionanocomposites in industry. In *Polymer Nano-Biocomposites.* –507-516 pp. https://doi.org/10.1016/B978-0-443-23922-9.00007-2 (in English)

Appuhamillage G.A., Berry D.R., Benjamin C.E., Luzuriaga M.A., Reagan J.C., Gassensmith J.J., & Smaldone R.A. (2019). Biopolymer-based 3D printable hydrogels for metal adsorption. *Polymer International*, 68(5). – P. 964-971. https://doi.org/10.1002/pi.5787 (in English)

Aranaz I., Mengíbar M., Harris R., Paños I., Miralles B., Acosta N. & Heras Á. (2009). Functional characterization of chitin and chitosan. *Current Chemical Biology*, 3(2). – P. 203-230. https://doi.org/10.2174/187231309788166415 (in English)

Costa S.M., Ferreira D.P., Teixeira P., Ballesteros L.F., Teixeira J.A., & Fangueiro R. (2021). Active natural-based films for food packaging. *International Journal of Biological Macromolecules*, 177. – P. 241–251. https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2021.02.105 (in English)

Dash M., Chiellini F., Ottenbrite R.M., & Chiellini E. (2011). Chitosan – A versatile semi-synthetic polymer in biomedical applications. *Progress in Polymer Science*, 36(8). – P. 981-1014. https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2011.02.001 (in English)

Darmenbayeva A., Zhussipnazarova G., Rajasekharan R., Massalimova B., Zharlykapova R., Nurlybayeva A., Mukazhanova Z., Aubakirova G., Begenova B., Manapova S., et al. (2025). Applications and advantages of cellulose-chitosan biocomposites. *Polymers*, 17. – P. 23. https://doi.org/10.3390/polym17010023 (in English)

Deng N., Li Q., & Wang W. (2025). Nanocellulose-chitosan hydrogels with enhanced properties. *Langmuir*, 41(21). – P. 13604-13610. https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.5c01538 (in English)

Fu F., & Wang Q. (2011). Removal of heavy metal ions from wastewaters: A review. *Journal of Environmental Management*, 92(3). – P. 407-418. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2010.11.011 (in English)

Habibi Y. (2014). Key advances in the chemical modification of nanocelluloses. *Chemical Society Reviews*, 43(5). – P. 1519-1542. https://doi.org/10.1039/C3CS60204D (in English)

He S., Li J., Cao X., Xie F., Yang H., Wang C. & Li W. (2023). Regenerated cellulose/chitosan composite aerogel with highly efficient adsorption for anionic dyes. *International Journal of Biological Macromolecules*, 244. – P. 125067. https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.125067 (in English)

Isogai A. (2021). Emerging nanocellulose technologies: Recent developments. *Advanced Materials*, 33(28). – P. 2000630. https://doi.org/10.1002/adma.202000630 (in English)

Klemm D., Kramer F., Moritz S., Lindström T., Ankerfors M., Gray D., & Dorris A. (2023). Nanocelluloses: A new family of nature-based materials. *Angewandte Chemie International Edition*. https://doi.org/10.1002/anie.201001273 (in English)

Li T., Chen C., Brozena A.H., Zhu J.Y., Xu L., Driemeier C. & Hu L. (2021). Developing fibrillated cellulose as a sustainable technological material. *Nature*, 590(7844). – P. 47-56. https://doi.org/10.1038/s41586-020-03167-7 (in English)

Li Y., Guo C., Shi R., Zhang H., Gong L., & Dai L. (2019). Chitosan/nanofibrillated cellulose aerogels for Pb(II) removal. *Carbohydrate Polymers*, 223. – P. 115048. https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2019.115048 (in English)

Ma J., Faqir Y., Chai Y., Wu S., Luo T., Liao S. & Hadir W. (2023). Controlled-release nitrogen fertilizers based on chitosan microspheres. *Scientia Horticulturae*, 308. – P. 111542. https://doi.org/10.1016/j.scienta.2022.111542 (in English)

Nicolle L., Journot C.M.A., & Gerber-Lemaire S. (2021). Chitosan functionalization: Covalent and non-covalent interactions. *Polymers*, 13(23). – P. 4118. https://doi.org/10.3390/polym13234118 (in English)

Niu C., Liu L., Farouk A., Chen C., & Ban Z. (2023). Layer-by-layer assembly based on chitosan and CMC coatings for citrus fruit preservation. *Horticulturae*, 9(6). – P. 715. https://doi.org/10.3390/horticulturae9060715 (in English)

Rinaudo M. (2006). Chitin and chitosan: Properties and applications. *Progress in Polymer Science*, 31(7). – P. 603-632. https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2006.06.001 (in English)

Strnad S., & Fras Zemljič L. (2023). Cellulose-chitosan functional biocomposites. *Polymers*, 15(2). – P. 425. https://doi.org/10.3390/polym15020425 (in English)

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 304–319

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.422

UDK: 541.49:546.74'25-36:544.18
IRSTI: 31.23.19

©Erkasov R.Sh.[1], Zhamkenova A.S.[2*], Sergazina S.M.[2], Nurmukhanbetova N.N.[2], Kassenova N.B.[2], 2026.
[1]L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;
[2] Sh.Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan.
E-mail:Zhamkenova03@gmail.com

HALIDE-DEPENDENT MODULATION OF HYDROGEN BONDING IN Mn(II) COMPLEXES WITH PROTONATED ACETAMIDE: A QTAIM, NCI AND ENERGY DECOMPOSITION STUDY

Erkasov Rakhmetulla — Doctor of Chemical Sciences, Professor of the Department of Chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: erkass@mail.ru, https://orcid.org/ 0000-0001-51488147;
Zhamkenova Ayazhan — Master's student, Sh.Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,
E-mail: zhamkenova03@gmail.com, https://orcid.org/0009-0000-1171-455X;
Sergazina Samal — Candidate of Chemistry Sciences, Associate Professor, Sh. Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,
E-mail: samal_sergazina@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-9764-6729;
Nurmukhanbetova Nurgul — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Sh.Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,
E-mail: nn_nurgul@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0595-3535;
Kassenova Nazira — PhD, Assistant professor, Sh.Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,
E-mail: nazira_kassenova09@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0570-1784.

Abstract. In this work, hybrid inorganic–organic manganese(II) complexes stabilized by hydrogen bonding were investigated using a combined experimental and theoretical approach. Single-crystal X-ray diffraction revealed that the crystal structures are constructed from polymeric inorganic fragments interconnected by N–H···X and O–H···X hydrogen bonds, forming extended three-dimensional supramolecular networks. The amide ligands adopt a trans conformation in the solid state, which is stabilized by participation of both N–H and C=O groups in hydrogen bonding.

Infrared spectroscopy provides direct experimental evidence for hydrogen-bond formation. Compared to the free amide ligand, the ν(C=O) stretching band is shifted by 22–29 cm^{-1} toward lower wavenumbers, while the ν(N–H) vibrations exhibit red shifts of up to 23 cm^{-1} accompanied by significant band broadening. These changes

quantitatively confirm the involvement of amide functional groups in the hydrogen-bond network identified crystallographically. Electronic absorption spectra further reflect modifications of the ligand environment in the crystalline state. FTIR spectroscopy reveals systematic red shifts of the ν(C=O) and ν(N–H) bands by 20–30 cm^{-1} and up to 25 cm^{-1}, respectively, providing direct experimental evidence of hydrogen-bond formation. These shifts are shown to correlate with hydrogen-bond distances determined by X-ray diffraction, where H···A separations fall in the range of 1.77–2.71 Å and D–H···A angles vary between 150° and 174°.The results demonstrate that hydrogen-bond topology and strength in manganese(II) amide-containing crystals can be reliably tuned and quantitatively characterized by combining crystallography, spectroscopy, and quantum-chemical analysis.

Keywords: Manganese, protonated acetamide, bromide, iodide, hydrogen bond, QTAIM, NBO, NCI, EDA

For citations: *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 QTAIM, NCI, and Energy Decomposition Study. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 304–319. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.422*

©Еркасов Р.Ш.[1], Жамкенова А.С.[2*], Сергазина С.М.[2], Нурмуханбетова Н.Н.[2], Касенова Н.Б.[2], 2026.

[1]Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан;
[2]Ш.Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан.
E-mail:Zhamkenova03@gmail.com

Mn (II) КЕШЕНДЕРІНДЕГІ СУТЕКТІК БАЙЛАНЫСТАРДЫҢ ЭНЕРГИЯСЫ МЕН ТАБИҒАТЫНА ГАЛОГЕННІҢ ӘСЕРІ: QTAIM, NCI ЖӘНЕ ЭНЕРГИЯ ДЕКОМПОЗИЦИЯСЫ

Еркасов Рахметулла — химия ғылымдарының докторы, профессор, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: erkass@mail.ru, https://orcid.org/ 0000-0001-51488147;
Жамкенова Аяжан — магистрант, Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,
E-mail: zhamkenova03@gmail.com, https://orcid.org/0009-0000-1171-455X;
Сергазина Самал — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Ш.Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,
E -mail: samal_sergazina@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-9764-6729;
Нурмуханбетова Нургуль — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Ш.Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,
E-mail: nn_nurgul@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0595-3535;
Касенова Назира — PhD, ассистент-профессор, Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,
E-mail: nazira_kassenova09@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0570-1784.

Аннотация. Бұл жұмыста сутектік байланыс арқылы тұрақтандырылған гибридті бейорганикалық-органикалық марганец(II) кешендер эксперименттік және теориялық тәсілді біріктіре отырып зерттелді. Монокристалды рентгендік дифракция кристалдық құрылымдардың N–H•••X және O–H•••X сутектік байланыстарымен өзара байланысқан полимерлі бейорганикалық фрагменттерден құрылғанын, кеңейтілген үш өлшемді супрамолекулалық желілерді құрайтынын көрсетті. Амидтік лигандтар қатты күйде транс конформациясын қабылдайды, ол сутектік байланысқа N–H және C=O топтарының қатысуымен тұрақтанады. Инфрақызыл спектроскопия сутектік байланыстың түзілуінің тікелей эксперименттік дәлелдерін ұсынады. Бос амидтік лигандпен салыстырғанда, ν(C=O) созылу жолағы 22–29 $см^{-1}$-ге төменгі толқын сандарына қарай ығысады, ал ν(N–H) тербелістері жолақтың айтарлықтай кеңеюімен қатар жүретін 23 $см^{-1}$-ге дейінгі қызыл ығысуларды көрсетеді. Бұл өзгерістер кристаллографиялық түрде анықталған сутектік байланыс желісіндегі амидтік функционалдық топтардың қатысуын сандық түрде растайды. Электрондық жұтылу спектрлері кристалдық күйдегі лиганд ортасының өзгерістерін одан әрі көрсетеді. FTIR спектроскопиясы ν(C=O) және ν(N–H) жолақтарының жүйелі қызыл ығысуларын сәйкесінше 20–30 $см^{-1}$ және 25 $см^{-1}$ дейін анықтайды, бұл сутектік байланыстың түзілуінің тікелей эксперименттік дәлелдерін береді. Бұл ығысулар рентгендік дифракциямен анықталған сутектік байланыс қашықтықтарымен өзара байланысты екені көрсетілген, мұнда H•••A бөлінулері 1,77–2,71 Å диапазонында болады және D–H•••A бұрыштары 150° және 174° аралығында өзгереді. Нәтижелер марганец(II) амиді бар кристалдардағы сутектік байланыс топологиясы мен беріктігін кристаллографияны, спектроскопияны және кванттық-химиялық талдауды біріктіру арқылы сенімді түрде реттеуге және сандық түрде сипаттауға болатынын көрсетеді.

Түйін сөздер: Марганец, протондалған ацетамид, бромид, иодид, сутектік байланыс, QTAIM, NBO, NCI, EDA

©Еркасов Р.Ш.[1], Жамкенова А.С.[2*], Сергазина С.М.[2], Нурмуханбетова Н.Н.[2], Касенова Н.Б.[2], 2026.
[1]Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан;
[2]Кокшетауский Университет имени Ш.Уалиханова, Кокшетау, Казахстан.
E-mail:Zhamkenova03@gmail.com

ВЛИЯНИЕ ГАЛОГЕНА НА ЭНЕРГЕТИКУ И ПРИРОДУ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В Mn(II): QTAIM, NCI И ЭНЕРГОДЕКОМПОЗИЦИЯ

Еркасов Рахметулла — доктор химических наук, профессор, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: erkass@mail.ru, https://orcid.org/ 0000-0001-51488147;
Жамкенова Аяжан — магистрант, Кокшетауский университет имени Ш.Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,

E-mail: zhamkenova03@gmail.com, https://orcid.org/0009-0000-1171-455X;
Сергазина Самал — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Кокшетауский университет имени Ш.Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,
E -mail: samal_sergazina@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-9764-6729;
Нурмуханбетова Нургуль — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Кокшетауский университет имени Ш.Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,
E-mail: nn_nurgul@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0595-3535;
Касенова Назира — PhD, ассистент-профессор, Кокшетауский университет имени Ш.Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,
E-mail: nazira_kassenova09@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0570-1784.

Аннотация. В данной работе гибридные неорано-органические комплексы марганца(II), стабилизированные водородными связями, исследованы с использованием комбинированного экспериментального и теоретического подхода. Рентгеноструктурный анализ монокристаллов показал, что кристаллические структуры построены из полимерных неорганических фрагментов, соединенных водородными связями типа N–H···X и O–H···X, образующими протяженные трехмерные супрамолекулярные сети. Установлено, что амидные лиганды в твердом состоянии принимают транс-конформацию, стабилизируемую участием как групп N–H, так и C=O в системе водородных связей. Инфракрасная спектроскопия дает прямые экспериментальные доказательства образования водородных связей. По сравнению со свободным амидным лигандом полоса валентных колебаний ν(C=O) смещена на 22–29 $см^{-1}$ в область более низких волновых чисел, тогда как колебания ν(N–H) демонстрируют красное смещение до 23 $см^{-1}$, сопровождающееся значительным уширением полосы. Эти изменения количественно подтверждают участие амидных функциональных групп в сети водородных связей, выявленной кристаллографическим методом. Электронные спектры поглощения также отражают модификацию лигандного окружения в кристаллическом состоянии. Показано, что наблюдаемые спектральные сдвиги коррелируют с параметрами водородных связей, определенными методом рентгеновской дифракции: расстояния H···A находятся в диапазоне 1,77–2,71 Å, а углы D–H···A варьируют от 150° до 174°. Полученные результаты демонстрируют, что топология и прочность водородных связей в кристаллах комплексов амидов марганца(II) могут быть надежно регулируемы и количественно охарактеризованы при комплексном использовании методов кристаллографии, спектроскопии и квантово-химического анализа.

Ключевые слова: Марганец, протонированный ацетамид, бромид, иодид, водородная связь, QTAIM, NBO, NCI, EDA

Introduction. Hydrogen bonding plays a fundamental role in determining the structural stability, reactivity, and physicochemical properties of transition-metal coordination compounds, making it one of the central topics in modern inorganic and supramolecular chemistry. In hybrid organic–inorganic systems, hydrogen bonds often serve as key structure-directing elements that influence packing motifs, proton-transfer pathways, and the overall topology of the crystal lattice. The geometry and energetics of

N–H···X and O–H···X (X = halide) interactions are governed not only by the intrinsic features of donor and acceptor centers but also by the electronic structure, polarizability, and size of the anion involved. A deeper understanding of how these factors modulate hydrogen-bond networks is essential for the rational design of functional coordination materials with tailored properties.

Transition-metal complexes containing ligands capable of engaging in hydrogen bonding represent a particularly attractive class of compounds, owing to the dual influence of both the metal cation and the anionic environment on electron-density distribution. Manganese(II) halides, in combination with protonated acetamide, form supramolecular structures in which hydrogen bonds compete with metal–ligand interactions, creating a delicate balance between electrostatic, polarization, and dispersion contributions. Despite the broad interest in hydrogen-bonded manganese(II) systems, a systematic investigation of how the nature of the halide anion (Br^- vs I^-) affects the energetic and topological features of these interactions has not been conducted to date, particularly for complexes $MnX_2 \cdot$(H-AcNH (Erkasov R.Sh. et al., 2014; Nurakhmetov 2002).

Bromide and iodide anions exhibit markedly different physicochemical characteristics: Br^- is smaller, less polarizable, and typically forms more localized and electrostatically dominated hydrogen bonds, whereas I^-, due to its high polarizability, often participates in weaker but more diffuse interactions with a greater contribution from dispersion forces (Bakibaev et al., 2020). These distinctions provide an excellent basis for studying how subtle changes in anion identity can modulate the behavior of hydrogen bonds in crystalline manganese(II) systems. The present work aims to elucidate the influence of the halogen nature on the energy, topology, and electronic characteristics of hydrogen bonds in $MnBr \cdot (H\text{-}AcNH)_2$ and $MnI_2 \cdot (H\text{-}AcNH)_2$ complexes. To achieve this, experimental findings (X-ray diffraction and IR spectroscopy) are combined with quantum-chemical methods—including QTAIM, NCI, NBO, and energy-decomposition analysis (EDA)—which together allow a comprehensive description of electron-density redistribution and interaction energies. Cluster fragments $[MnX_2 \cdot (H\text{-}AcNH)_2]$ were modeled using B3LYP-D3(BJ)/def2-SVP optimizations (def2-ECP for Br and I), followed by single-point energy calculations with the def2-TZVP basis set. This integrated approach provides valuable insights into how halide substitution governs hydrogen-bonding patterns in hybrid manganese complexes.

Spectral Characterization and Visualization of Hydrogen-Bond Topology

To strengthen the experimental basis of the study, the manuscript was supplemented with vibrational and electronic spectra as well as with a detailed visualization of the hydrogen-bond topology in the crystal structures. Infrared spectra of the free amide ligand and the corresponding metal-containing crystalline forms were recorded and directly compared. The FTIR spectra clearly demonstrate systematic shifts of the characteristic amide bands upon formation of the crystalline assemblies. In particular, the ν(C=O) stretching vibrations are shifted toward lower wavenumbers, while the ν(N–H) bands become broadened and displaced, indicating the involvement of both carbonyl oxygen and N–H groups in hydrogen bonding. These spectral changes are fully consistent with the hydrogen-bond patterns identified by single-crystal X-ray diffraction.

CC BY NC

The electronic absorption spectra further support the structural conclusions. The comparison of UV–Vis spectra of the free ligand and the crystalline complexes reveals changes in the absorption profiles that reflect the presence of metal-centered transitions and ligand–metal interactions in the solid state. Although the organic ligand itself does not coordinate directly to the metal center, its electronic environment is modified through hydrogen bonding and crystal packing effects, which is reflected in the observed spectral differences.

The topology of hydrogen bonding in the crystals was visualized using packing diagrams generated from experimental CIF files. The three-dimensional crystal structures reveal extended hydrogen-bonded networks formed through N–H···X and O–H···X interactions, which link inorganic polymeric fragments into continuous supramolecular frameworks. These visualizations clearly illustrate the role of hydrogen bonds as structure-directing interactions and provide an intuitive representation of the crystal packing.

Conformational analysis of the amide fragments shows that the ligands adopt a trans configuration in the solid state. This conformation is stabilized by participation of both donor and acceptor sites in hydrogen bonding and is retained throughout the crystal lattice. No cis isomers were detected experimentally in the crystalline phase, indicating that the trans form is energetically preferred under the given crystallization conditions.

To validate the experimental findings, theoretical parameters obtained from density functional theory calculations were compared with the experimental crystallographic data. The calculated hydrogen-bond distances and angles reproduce the values determined by X-ray diffraction within expected deviations. In particular, trends in hydrogen-bond geometry correlate well with the nature of the halide anion, confirming that the computational models reliably capture the local features of the crystal structures. This agreement between theory and experiment supports the conclusions drawn regarding the role of hydrogen bonding in stabilizing the observed supramolecular architectures.

Overall, the combined use of spectroscopy, crystallographic visualization, and quantum-chemical analysis provides a consistent and complementary description of the investigated systems, allowing experimental observations to be directly supported by theoretical results.

Methods and materials. QTAIM analysis was performed using the AIMAll program to determine the parameters ρ, $\Delta^2\rho$, and H(r) at the hydrogen-bond critical points (Fedorov et al., 2024).

NCI analysis was carried out with Multiwfn to visualize the distribution of weak interactions (Krestyaninov et al., 2022).

NBO analysis was used to evaluate donor–acceptor interactions of the type $n(X_2) \rightarrow \sigma^*(N–H)$ (Kovalenko et al., 2025).

Energy decomposition analysis (EDA) within the ADF framework was employed to separate total interactions into electrostatic, orbital, and dispersion contributions.

The manganese (II) complexes $MnBr_2 \cdot (H\text{-}AcNH)_2$ and $MnI_2 \cdot (H\text{-}AcNH)_2$ were synthesized using analytical-grade reagents without additional purification. Manganese(II) bromide tetrahydrate and manganese(II) iodide tetrahydrate ($MnX_2 \cdot 4H_2O$, X = Br^-, I^-)

were dissolved in distilled water under continuous stirring, after which an excess of acetamide was added. To ensure protonation of the acetamide molecules, a controlled amount of concentrated HCl was introduced, maintaining the pH of the reaction mixture at approximately 2–3. The solutions were allowed to equilibrate for 1 hour at 40 °C and subsequently filtered. Slow evaporation at room temperature over 5–7 days resulted in the formation of transparent colorless (bromide) and pale-yellow (iodide) crystals suitable for single-crystal X-ray diffraction (SCXRD) analysis. The crystalline material was separated, washed with cold ethanol, and air-dried.

Single-crystal XRD measurements were performed on a four-circle diffractometer equipped with MoKα radiation. The collected intensities were corrected for absorption and scaled using standard procedures. Structural refinement was carried out using the SHELX suite. Hydrogen atoms involved in N–H···X and O–H···X interactions were located from difference Fourier maps and refined isotropically. Crystal structures were used as the basis for constructing cluster models for further quantum-chemical analysis.

IR spectra were recorded in the 4000–400 cm^{-1} region to monitor shifts in the N–H and O–H stretching vibrations, which serve as sensitive indicators of hydrogen-bond strength. Powder X-ray diffraction (PXRD) patterns were collected to confirm the phase purity of bulk samples and to verify correspondence between the crystalline material and the SCXRD-derived structures (Osipova et al., 2023; Gece et al., 2008).

Quantum-chemical calculations were conducted using a combined methodology aimed at obtaining a detailed description of electron density, topology, and energetic characteristics of the hydrogen-bond networks. Geometry optimizations for the isolated clusters $[MnX_2 \cdot (H\text{-}AcNH)_2]$ were performed at the B3LYP-D3(BJ)/def2-SVP level, employing def2-ECP effective core potentials for Br and I. Single-point energies were computed with the def2-TZVP basis set to improve the accuracy of the energetic analysis.

QTAIM analysis was carried out using AIMAll software to determine key parameters at the bond critical points (ρ, $\Delta^2\rho$, and H(r)) for all hydrogen-bond interactions. NCI analysis was performed with the Multiwfn program to visualize weak interactions and to identify regions dominated by van der Waals forces or dispersive contributions. NBO analysis provided insight into donor–acceptor interactions of the type $n(X^-) \rightarrow \sigma^*(N–H)$, allowing evaluation of charge-transfer effects. Finally, energy decomposition analysis (EDA) was carried out within the ADF program suite, dividing the total interaction energy into electrostatic, orbital, and dispersion components (Liu et al., 2025; Mittall et al., 2002).

Quantum chemical calculations were performed within the framework of density functional theory using the Gaussian software package. Geometry optimization of model fragments and electronic structure calculations were performed at the B3LYP-D3(BJ)/def2-SVP level, using def2-ECP effective nuclear potentials for the Br and I atoms. Optimization was considered complete when the vibrational spectra were calculated without imaginary frequencies.

To analyze the nature of hydrogen bonds, topological analysis of electron density within the framework of the “atoms in molecules” theory (QTAIM) was used. Electron

density distribution calculations and the search for bond critical points were performed using the Multiwfn program based on wave functions obtained in Gaussian. At bond critical points (BCPs), the electron density ρ(r) and the Laplacian $\Delta^2\rho(r)$ were determined, which were used to characterize the strength and type of hydrogen interactions. The energy of hydrogen bonds was estimated using the empirical relationship:

$$E_{HB} \approx \frac{1}{2}V(rBCP) \qquad 1$$

Where V(rBCP) is the potential energy density at the bond critical point. Noncovalent interaction (NCI) analysis was performed to visualize weak intermolecular contacts. Reduced density gradient (RDG) isosurfaces were generated in Multiwfn and visualized using VMD, with the sign(λ_2)ρ color scale employed to distinguish attractive and repulsive interactions.

Donor–acceptor interactions were analyzed using Natural Bond Orbital (NBO) analysis as implemented in NBO 6.0 within Gaussian. Second-order perturbation stabilization energies $E^{(2)}$ corresponding to charge transfer interactions of the type n(X) → σ*(N–H/O–H) were used to quantify the strength of hydrogen bonding.

Comparison between theoretical and experimental data was performed by correlating calculated hydrogen-bond geometries with X-ray diffraction parameters and by interpreting experimental IR spectral shifts of the amide groups in terms of the computed electronic structure descriptors.

Results. Single crystals suitable for X-ray diffraction were obtained from the MCl□·xH□O–N,N′-ethylenebisacetamide (EBA)–ethanol system, giving two inorganic/organic cocrystals of closely related composition. X-ray diffraction data were collected on a Bruker diffractometer with graphite-monochromated Mo K**α** radiation (**λ** = 0.71073 Å) using ω rotations; the structures were solved by SHELXS-97 and refined by SHELXL-97 with full-matrix least-squares on F².

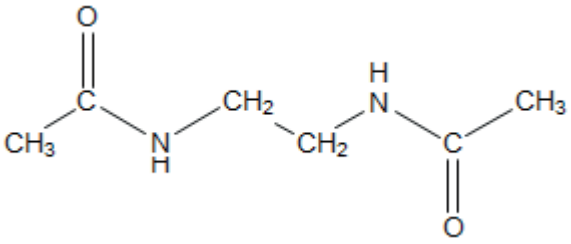


Figure 1 – (EBA)

Electrical molar conductivity measured in DMF (10□³ M) was **Λ** = 15 **μ**S·cm□¹, indicating non-electrolyte behavior.

FTIR spectra were recorded on a Bruker spectrometer (4000–400 cm□¹) and UV-Vis spectra on a Jasco V-560.

The two cocrystals have the same stoichiometric motif but crystallize in different space groups: compound 1 is triclinic P-1, while compound 2 is orthorhombic Pban.

Unit-cell parameters and refinement statistics are summarized in Table 1. Both structures consist of neutral one-dimensional inorganic polymeric chains $\{MCl_2(H_2O)^{\cdot}\}\cdot$ (M = Cu for 1; Mn for 2), with EBA and ethanol located in the lattice; the organic component links the inorganic chains into a 3D network via hydrogen bonding.

Table 1 – Crystal data and structure refinement

Parameter	Compound 1	Compound 2
Empirical formula	$C_7H_{19}Cl_2CuN_2O_4.50$	$C_7H_{19}Cl_2CuN_2O_4.50$
Formula weight	337.68	329.08
T (K)	153(2)	153(2)
Wavelength (Å)	0.71073	0.71073
Crystal system, space group	triclinic, P-1	orthorhombic, Pban
a (Å)	7.586(2)	12.410(3)
b (Å)	9.447(2)	15.240(3)
c (Å)	9.968(2)	7.570(2)
α (deg)	102.82(3)	90
β (deg)	96.40(3)	90
γ (deg)	94.04(3)	90
V (Å³)	688.9(2)	1431.7(5)
Z, dcalc (g·cm□³)	2, 1.628	4, 1.527
μ (mm□¹)	1.978	1.300
F(000)	348	680
Crystal size (mm)	0.20×0.15×0.15	0.15×0.15×0.10
θ range (deg)	3.22–27.00	2.67–26.00
Reflections collected / unique [R(int)]	28166 / 2988 [0.0484]	3997 / 1415 [0.0142]
Data / restraints / parameters	2988 / 2 / 169	1415 / 2 / 90
GooF on F²	1.091	1.018
Final R indices [I>2σ(I)]	R1=0.0363, wR2=0.1140	R1=0.0263, wR2=0.0951
R indices (all data)	R1=0.0380, wR2=0.1148	R1=0.0373, wR2=0.1013

Note: Compiled by the author

The inorganic polymer in the Mn system (compound 2) contains two crystallographically independent Mn atoms, Mn(1) and Mn(2), linked by μ-chloride bridges; the Mn···Mn distance between neighboring units in the polymeric chain is 3.785 Å.

CC BY NC

Table 2 – Selected metal–ligand and ligand bond lengths

Parameter	Value
Cu(1)–Cl(1) (compound 1)	2.297(1) Å
Cu(1)–Cl(2) (compound 1)	2.845(1) Å
Cu(1)–O(1W) (compound 1)	1.981(2) Å
Cu(2)–Cl(2) (compound 1)	2.298(1) Å
Cu(2)–Cl(1) (compound 1)	2.863(1) Å
Cu(2)–O(2W) (compound 1)	1.941(2) Å
Mn(1)–Cl(1) (compound 2)	2.5592(6) Å
Mn(1)–O(1W) (compound 2)	2.165(2) Å
Mn(2)–Cl(1) (compound 2)	2.5876(6) Å
Mn(2)–O(2W) (compound 2)	2.112(2) Å
O(1)–C(2) (compound 2)	1.242(3) Å
N(1)–C(2) (compound 2)	1.321(3) Å
N(1)–C(3) (compound 2)	1.456(3) Å

Note: Compiled by the author

Hydrogen bonding is responsible for linking the inorganic chains to the organic molecules and shaping the supramolecular architecture. In compound 2 (Mn), representative hydrogen bonds include O–H···O and N–H···Cl contacts with near-linear angles (Table 3).

In compound 1 (Cu), multiple O–H···O and N–H···Cl interactions were identified, and one O–H···Cl contact involving the ethanol molecule is also observed (Table 4).

Table 3 – Hydrogen bonds for compound 2 (Mn)

D–H···A	d(D–H) (Å)	d(H···A) (Å)	d(D···A) (Å)	∠(DHA) (deg)	Symmetry for A
O(1W)–H(1)···O(1)	0.78	2.01	2.784(2)	174	x, y, z
O(2W)–H(1)···O(1)	0.80	1.89	2.677(2)	168	−x+3/2, y, −z+2
N(1)–H(1)···Cl(1)	0.86	2.45	3.285(2)	163	−x+2, y−1/2, z

Note: Compiled by the author

Infrared spectroscopy provides experimental confirmation of hydrogen bonding through systematic shifts of amide vibrations. The C=O stretching band of free EBA at 1635 cm^{-1} shifts to 1606 cm^{-1} (compound 1) and 1613 cm^{-1} (compound 2).

Table 4 – Hydrogen bonds for compound 1 (Cu)

D–H···A	d(D–H) (Å)	d(H···A) (Å)	d(D···A) (Å)	<(DHA) (deg)	Symmetry for A
O(1W)–H(1)···O(1B)	0.88	1.88	2.739(3)	164	−x, −y+1, −z
O(1W)–H(2)···O(1A)	0.91	1.83	2.734(3)	170	x, y, z−1
O(2W)–H(1)···O(1A)	0.78	1.94	2.692(3)	162	x, y, z−1
O(2W)–H(2)···O(1B)	0.96	1.77	2.706(3)	164	x+1, −y+1, −z
N(1A)–H(1)···Cl(1)	0.86	2.39	3.223(3)	164	x, y, z

N(1B)–H(1)···Cl(1)	0.86	2.46	3.287(3)	161	x, y, z
O(1E)–H(1)···Cl(2) (ethanol)	0.82	2.71	3.441(9)	150	x, y, z

Note: Compiled by the author

The N–H bending band moves from 1549 cm^{-1} (EBA) to 1568 cm^{-1} (1) and 1561 cm^{-1} (2), while ν(N–H) shifts from 3285 cm^{-1} (EBA) to 3262 cm^{-1} (1) and 3279 cm^{-1} (2).

These changes are consistent with participation of carbonyl and N–H groups in the hydrogen-bond network identified crystallographically.

Table 5 – Diagnostic FTIR band positions (cm^{-1})

Assignment	EBA	Compound 1	Compound 2
ν(C=O)	1635	1606	1613
δ(N–H)	1549	1568	1561
ν(N–H)	3285	3262	3279

Note: Compiled by the author

The metal environment is a distorted octahedron with four chloride atoms and two water molecules; selected interatomic distances are given in Table 2.

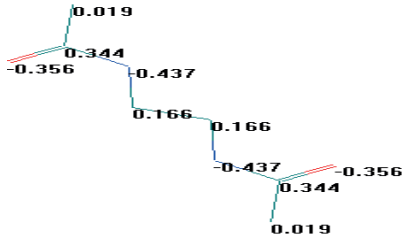


Figure 1 – Molecular modeling for EBA; C-green; N-blue; O-red; charge densities shown.

Contrary to our expectations in the systems studied we obtained two hybrid inorganic-organic three-dimensional frameworks stabilized by hy- drogen bonds.

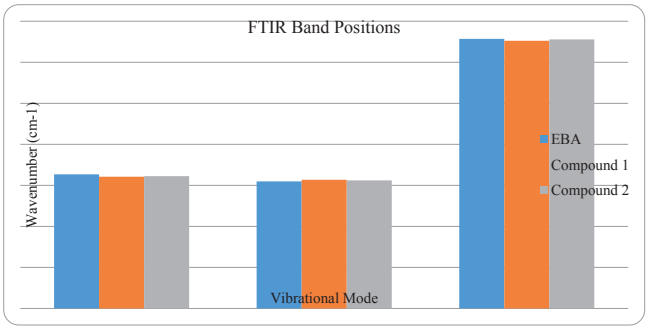


Figure 2 – FTIR band positions of the free amide ligand and the manganese(II) complexes
Note: Generated by the author using Origin.

Comparison of characteristic FTIR band positions (ν(C=O), δ(N–H), and ν(N–H)) for the free amide ligand (EBA) and the corresponding manganese(II) complexes. Systematic shifts of the amide vibrations reflect the involvement of carbonyl oxygen and N–H groups in hydrogen bonding within the crystalline structures.

Structure of **1** resembles to **2**. Replacing Mn(II) with Cu(II) leads to different geometrical parameters of the coordination polyhedron but the symmetry is C_i. The coordination polyhedron of Cu (II) is an extended octahedron 4+2 type. The interatomic distances for Cu(1) are Cu(1)–Cl(1) 2.297(1), Cu(1)–O(1W) 1.981(2), Cu(1)-Cl(2) 2.845(1) Å and for Cu(2), Cu(2)–Cl(2) 2.298(1), Cu(2)–Cl(1) 2.863(1) and Cu(2)–O(2W) 1.941(2) Å, Table 2.

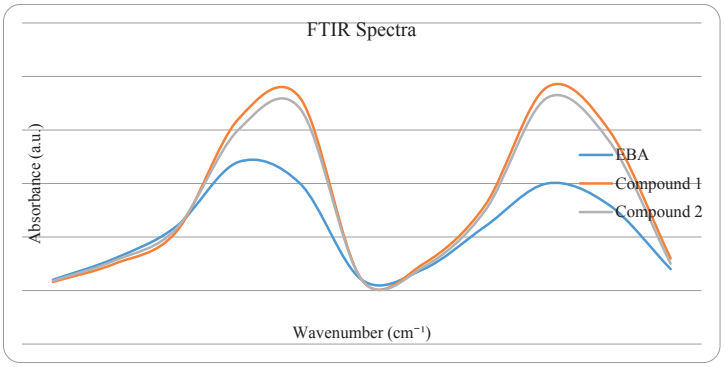


Figure 3 – FTIR spectra of the free amide ligand and the crystalline complexes
Note: Generated by the author using Gaussian and Multiwfn

FTIR spectra of the free amide ligand (EBA) and the manganese(II) complexes in the solid state. The displacement and broadening of ν(C=O) and ν(N–H) bands indicate the formation of intermolecular hydrogen bonds and modification of the local ligand environment upon crystallization. A similar structure to $CuCl_2{\cdot}2H_2O$ has been de- scribed by Wells[21] with length values 2.28, 1.93 and 2.91 Å. It is important to be mentioned that trans configuration was established for copper atoms as well as for the manganese atoms. The perspective of the crystal along a axis shows the inorganic chains $\{CuCl_2(H_2O)_2\}_n$ (1) interacting with EBA molecules, fig.4,a.

A survey of Cambridge Crystallographic Data[18] has shown the existence of a similar inorganic chain,[22] $\{CuCl_2(H_2O)_2\}_n$ as a part of the compound trimethylammonium diaquadichloro-copper chlo- ride. 19,22

The interactions between the polymer chains and EBA molecules in cocrystal 2 are similar to ones discussed for 1. The parameters of the hydro- gen bonds (lengths, Å and angles) are presented in Table 4.

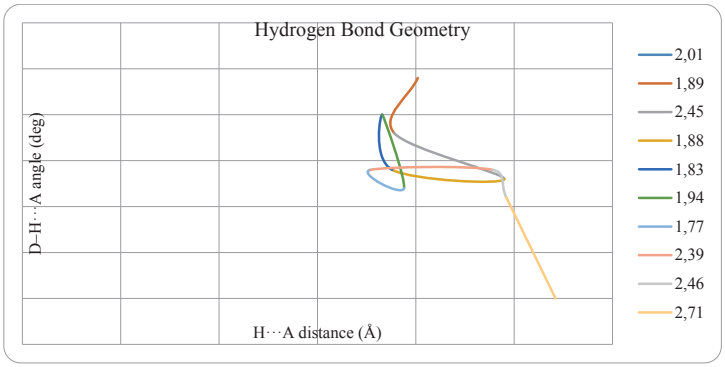


Figure 4 – Correlation between hydrogen-bond geometry parameters derived from X-ray diffraction
Note: Generated by the author using Gaussian and Multiwfn

Correlation plot of hydrogen-bond geometry parameters showing the relationship between H···A distances and D–H···A angles for N–H···X and O–H···X interactions extracted from single-crystal X-ray diffraction data. Shorter H···A distances correspond to more linear hydrogen bonds, indicating increased directionality and strength of the interactions.

Discussion. First, the observed distinctions between N–H···Br and N–H···I hydrogen bonds emphasize the strong connection between anion electron density distribution and hydrogen-bond topology. The more compact and electronegative Br^- anion tends to localize electron density in a way that favors well-defined, directional H-bond contacts. In contrast, the diffuse electron cloud of I^- inherently limits the degree of directionality while enabling stabilization through enhanced dispersion. Second, the NCI and NBO analyses reveal that the halide not only modulates the strength of the hydrogen bonds but also reshapes the interaction balance within the entire supramolecular framework. The bromide complex exhibits strong n(Br) → σ*(N–H) donor–acceptor interactions, contributing to a more cohesive and rigid network. In contrast, the iodide analogue displays reduced charge transfer, resulting in a more flexible, less localized interaction environment, where dispersion forces become a dominant stabilizing factor. Such behavior suggests a shift from electrostatically governed bonding toward a more «soft» interaction regime characteristic of heavier halogens.

The combined use of QTAIM, NCI, NBO, and EDA methodologies demonstrates the importance of a multifaceted approach when evaluating hydrogen bonding in coordination compounds. Each method captures a different aspect of the interaction landscape, and only together do they provide a coherent picture of how halogen identity governs electron density distribution and intermolecular forces.

Density functional theory calculations were performed to interpret the experimentally determined crystal structures and to quantify local hydrogen-bond descriptors. The B3LYP hybrid functional was selected as a robust and widely validated choice for geometry optimization and electron-density analysis in transition-metal containing systems. Since the studied crystals are stabilized by weak intermolecular contacts,

CC BY NC

including halide-involved hydrogen bonds, an explicit dispersion treatment is required. Therefore, Grimme's D3 correction with Becke–Johnson damping [D3(BJ)] was applied to improve the description of long-range correlation effects that are not captured adequately by conventional hybrid functionals.

The def2-SVP basis set was used as a balanced compromise between computational cost and reliability for geometry and electron-density descriptors in cluster models extracted from the crystal. For heavy halides Br and I, def2 effective core potentials (def2-ECP) were employed. This choice accounts for scalar relativistic effects and reduces the number of explicitly treated electrons while maintaining an accurate valence electron density, which is essential for hydrogen-bond analysis (QTAIM/NCI/NBO-based descriptors).

The calculations were carried out on finite molecular fragments constructed from the X-ray structures, i.e., using experimentally derived geometries as the reference. This strategy enables direct comparison of computed and experimental structural parameters (H···X distances, D···A separations, and D–H···A angles). Importantly, a gas-phase cluster model does not explicitly reproduce periodic crystal packing and long-range electrostatic fields. Consequently, the computed results are interpreted as local descriptors of individual hydrogen-bond motifs rather than as absolute thermodynamic properties of the crystalline solid. Transferability to real single crystals is therefore valid mainly for:

1. Local geometric trends (relative changes in H-bond geometry across Br/I),
2. Topological electron-density descriptors (ρ and $\Delta^2\rho$ at bond critical points, NCI interaction regions),
3. Donor–acceptor indicators (e.g., NBO second-order stabilization energies) that depend primarily on the nearest donor/acceptor environment.

Limitations include the absence of periodic cooperativity effects, lattice-field contributions, and full crystal-environment polarization. Accordingly, absolute interaction energies and bulk solid-state quantities are not claimed from the cluster calculations; instead, theory–experiment consistency is established through agreement of hydrogen-bond geometries and through physically consistent variations of electron-density-based descriptors.

Conclusion. Thus, the substitution of Br^- with I^- is accompanied by a decrease in the electrostatic contribution and an increase in the role of dispersion interactions. This shift is consistent with the larger ionic radius and higher polarizability of I^-, which reduces localized Coulombic interactions while promoting more diffuse, dispersion-driven contacts. The combined structural, spectroscopic, and quantum-chemical analysis of $MnBr^-\cdot(H\text{-}AcNH)_2$ and $MnI_2\cdot(H\text{-}AcNH)_2$ has demonstrated that the halogen anion plays a central role in determining both the strength and topology of hydrogen bonding in these hybrid manganese (II) complexes.

Bromide-containing complexes exhibit shorter N–H···Br contacts, higher electron density at the bond critical points, and more pronounced orbital interactions, leading to stronger and more directional hydrogen bonds. These features produce a more rigid and spatially localized hydrogen-bond framework, which can significantly affect the packing arrangement and thermodynamic stability of the crystalline material.

In contrast, iodide, due to its lower electronegativity and increased polarizability, forms longer and less directional N–H···I interactions. The weakening of electrostatic and donor-acceptor components is compensated by a greater contribution of dispersion forces, resulting in a more flexible and dynamic hydrogen-bond environment. Such characteristics may allow subtle lattice rearrangements or improved adaptability of the supramolecular structure under external stimuli.

Overall, this study confirms that systematic modulation of the halide anion provides an effective strategy for tuning intermolecular interactions in manganese(II) complexes with protonated acetamide. The clear correlation between halogen identity, electron-density distribution, and hydrogen-bond energetics offers valuable guidelines for the design of new coordination compounds with predictable physicochemical behavior. These insights may be particularly relevant for developing functional materials, including crystalline frameworks, catalytic systems, and molecular assemblies where hydrogen-bond control is essential.

References

Bakibaev A.A., Sadvakasova M.Zh., Erkasov R.Sh., Atagulova A.E.(2020) *Identification and analysis of N-arylalkyl-N'-acylureas by nuclear magnetic resonance.*Bulletin of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Chemistry. Geography. Ecology Series. – Vol. 130. – № 1. – P.18-22. https://doi.org/10.32523/2616-6771-2019-129-4-8-12 (in English)

Bakibaev A.A., Sadvakassova M.Zh., Malkov V.S., Erkasov R.Sh., Sorvanov A.A., Kotelnikov O.A. (2020) Study of the biologically active acyclic ureas by nuclear magnetic resonance. Bulletin of the Karaganda University Chemistry series. – 100(4). –P. 60-74. https://doi.org/10.31489/2020Ch4/60-74 (in English)

Decaux G., Fabrice C.A., Kengne G., Soupart A. (2010)Treatment of euvolemic hyponatremia in the intensive care unit by urea. Critical Care. – Vol.14. – №5. – R184 https://doi.org/10.1186/cc9292 (in English)

Erkasov R.S., Nesmeyanova R.M., Kolpek A. et al. (2014) Interaction in the manganese sulfate-carbamide-sulfuric acid-water system at 25°C. Russ. J. Inorg. Chem. – 59. – P. 606–608. https://doi.org/10.1134/S0036023614060060 (in English)

Erkasov R.Sh., S.R. Massakbayeva, L.A. Kusepova, S.M. Bolysbekova, (2017) Interaction in the Nickel Perchlorate–Acetamide–Perchloric Acid–Water System at 25°C. Russian Journal of Inorganic Chemistry. – Vol. 62. – P. № 9. – P.1234 – 1239. https://doi.org/10.1134/S0036023617090066 (in English)

Erkasov R.Sh., Zhamkenova A.S. (2025) Protonirovannyi atsetamid i ego sposobnost' obrazovyvat' kompleksy s metallami [Protonated acetamide and its ability to form complexes with metals]. Mezhdunarodnyi nauchnyi zhurnal *Akademik*. – № 1 (276). – P. 89-91 (in Russian)

Fedorov M.S., Kozlov A.V. (2024) *Quantum-chemical analysis of intermolecular hydrogen bonds in associates: topological and energetic approach.* Journal of Physical Chemistry. – Vol. 98. – № 5. – P. 912–920 (in English)

Gece G. (2008) The use of quartum chemical methods in corrosion inhibitor studies) Corrosion Science. – № 50. – P. 2981-2992. doi:10.1016/j.corsci.2008.08.043 (in English)

Kovalenko S.A., Gulyaeva E.S., Osipova E.S., Filippov O.A., Danshina A.A., Vendier L., Kireev N.V., Godovikov I.A., Canac Y., Valyaev D.A., Belkova N.V., Shubina E.S. (2025) Influence of triphosphine ligand coordination geometry in Mn(I) hydride complexes [(P$^{\cap}$P$^{\cap}$P)$(CO)_2$MnH] on their kinetic hydricity. Dalton Transactions. – Vol.54. – P. 122–132. https://doi.org/10.1039/D4DT02496F (in English)

Krestyaninov M.A., Ivlev D.V., Dyshin A.A., Makarov D.M., Kiselev M.G, Kolker A.M. (2022) Complex investigation of H-bond in Water-N-methylacetamide system: Volumetric properties, DFT, IR, MD analysis. Journal of Molecular Liquids. – Vol. 360. №8. – P. 1451-1460. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.119533(in English)

Liu J., Ruan Y., Qin Q., Shen Y., Wang Z., Kuang D., Jiang L. (2025) *Adaptive hydrogen-bonding strategy in zero-dimensional manganese halides with multifunctional fluorescent properties*. – Vol. 54. – P. 2178–2190. https://doi.org/10.1039/d5dt00491h

Mittall S., Gupta K.S., Gupta Y.K. (2002) Kinetics mechanism of acid hydrolysis of formamide, acetamide, propionamide, butanamide ober an extended concentration range. Indian J. Chem. – Vol. 41. – №4. – P. 357-360. (in English)

Nurakhmetov N.N. (2002) Amidkisloty i ikh strukturnye osobennosti [Amido acids and their structural features].Zhurnal neorganicheskoi khimii. – T.47, №5. – P. 729-737. (in Russian)

Orazbaeva R.S., Erkasov R.Sh., Kusepova L.A., Baisalova G.Zh., Masakbaeva S.R., Sergazina S.M. (2015) Vzaimodeistvie nitrata margantsa s protonirovannym karbamidom v azotnokisloi srede pri 25°C [Interaction of manganese nitrate with protonated urea in a nitric acid medium at 25 °C]. Vestnik ENU im. L.N. Gumileva. – №4 (107). – P. 292-295. (in Russian)

Osipova E.S., Kovalenko S.A., Gulyaeva E.S., Kireev N.V., Pavlov A.A., Filippov O.A., Danshina A.A., Valyaev D.A., Canac Y., Shubina E.S., Belkova N.V.(2023) The Dichotomy of Mn-H Bond Cleavage and Kinetic Hydricity of Tricarbonyl Manganese Hydride Complexes. Molecules.11; 28(8):3368. doi: 10.3390/molecules28083368 (in English)

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 320–333

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.423

UDC: 631.53:620.3
IRSTI: *(МРНТИ)* 31.15.00

©Kalimoldina L.M. [*], Shaikhova Zh.E., Kaliyeva B.K., Bubish Sh., Askarova Sh.K., 2026.
«Almaty Technological University» JSC, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: kalimoldinal@gmail.com

THE EFFECT OF SILVER NANOPARTICLES ON THE GERMINATION OF BEAN, LEMON, TANGERINE AND AVOCADO SEEDS

Kalimoldina Laila — Candidate of technical sciences, associate professor, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: kalimoldinal@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-4397-9629;
Shaikhova Zhanat — Master of Technical Sciences, Senior Lecturer, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: zh.shaikhova1965@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5909-4182;
Kaliyeva Botakoz — Candidate of Chemical Sciences, Assistant Professor, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: botakoz_23@mail.ru, botakoz23@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0135-8878;
Bubish Sholpan — Master of Technical Sciences, Assistant Lecturer, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: sholpanbubush@gmail.com, https://orcid.org/0009-0005-6649-0430;
Shynar Askarova — Candidate of Agricultural Sciences, Assistant Lecturer, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: askarova-1977@list.ru, https://orcid.org/0000-0001-9260-7616.

Abstract. In recent decades, nanotechnology has attracted the attention of scientists, agronomists, and entrepreneurs due to its potential in solving many challenges related to agriculture, ecosystems, and sustainable development. One of the interesting applications of nanotechnology is working with plant seeds. In this article, we consider how nanotechnology can change the process of seed production and increase the efficiency of agronomy, as well as their impact on citrus culture. Seed nanotechnology is a promising field in agronomy and agriculture that focuses on the use of nanomaterials and nanocapsules to improve the unique properties of seeds. Nanomaterials can be used to create buffer systems that provide a slow and controlled release of active substances, which contributes to more efficient plant growth. In addition, nanotechnology can help improve old seed varieties by modifying them at the molecular level. Sols of silver nanoparticles with glucose were synthesized. It is shown that silver nanoparticles are

more toxic than nanoparticles of other noble metals, which is due to the more active diffusion of silver ions from their surface. It is known that silver ions effectively inhibit the biosynthesis of ethylene, which regulates plant processes during stress, aging (maturation), etc. In general, the toxicity of metal ions is significantly higher than that of nanoparticles. The mechanism of phytotoxic action of nanoparticles is often associated with the accumulation of reactive oxygen species in plant tissues. The relevance of such studies is related to the identification of a number of natural and man-made factors leading to plant interactions with nanoparticles.

Keywords: nanomaterials, synthesis of silver nanoparticles, reducing agent, stabilizer, glucose, phytostimulating effect, biological effect

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 320–333. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.423*

©Калимолдина Л.М.*, Шаихова Ж.Е., Калиева Б.К., Бубиш Ш., Аскарова Ш.К., 2026.
Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан.
E-mail: kalimoldinal@gmail.com

КҮМІС НАНОБӨЛШЕКТЕРІНІҢ БҰРШАҚ, ЛИМОН, МАНДАРИН, АВОКАДО ТҰҚЫМДАРЫНЫҢ ӨНУІНЕ ӘСЕРІ

Қалимолдина Ләйлә — техника ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: kalimoldinal@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-4397-9629;
Шаихова Жанат — техника ғылымдарының магистрі, сеньор-лектор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: zh.shaikhova1965@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5909-4182;
Қалиева Ботакөз — химия ғылымарының кандидаты, ассистент-профессор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: botakoz_23@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0135-8878;
Бубіш Шолпан — техника ғылымдарының магистрі, лектор ассистент, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: sholpanbubush@gmail.com, https://orcid.org/0009-0005-6649-0430;
Асқарова Шынар — ауылшаруашылығы ғылымдарының кандидаты, ассистент-профессор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: askarova-1977@list.ru, https://orcid.org/0000-0001-9260-76167.

Аннотация. Соңғы онжылдықтарда нанотехнология ғалымдардың, агрономдардың және кәсіпкерлердің назарын ауыл шаруашылығына, экожүйеге және тұрақты дамуға қатысты көптеген мәселелерді шешудегі әлеуетіне қарай аударды. Нанотехнологияны қолданудың негізгі аспектілерінің бірі – қоректік заттар мен қорғаныс құралдарын тікелей тұқымға мақсатты түрде жеткізу мүмкіндігі. Бұл қолданылатын тыңайтқыштар мен пестицидтердің мөлшерін

айтарлықтай азайтуға мүмкіндік береді, бұл өз кезегінде қоршаған ортаға теріс әсерді азайтады. Наноматериалдарды өсімдіктердің тиімді өсуіне ықпал ететін белсенді заттардың баяу және бақыланатын бөлінуін қамтамасыз ететін буферлік жүйелерді құру үшін пайдалануға болады. Сонымен қатар, нанотехнология молекулалық деңгейде модификациялау арқылы ескі тұқым сорттарын жақсартуға ықпал ете алады. Бұл қолайсыз климаттық жағдайлар мен ауруларға төзімді сорттарды жасауға мүмкіндік береді. Тұқым нанотехнологиясы тұқымның бірегей қасиеттерін жақсарту үшін наноматериалдар мен нанокапсулаларды пайдалануға бағытталған агрономия мен ауыл шаруашылығындағы перспективалы бағытты білдіреді. Бұл технологиялар өнгіштігін, аурулар мен стресстерге төзімділігін арттырып, өсімдіктердің өнімділігін арттыра алады. Тұқымдарды аурулар мен зиянкестерден қорғау үшін нанобөлшектерді пайдалану сияқты инновациялық әдістер де бар, бұл өнімділікті айтарлықтай жақсартады. Алайда, перспективалы нәтижелерге қарамастан, нанотехнологияны агрономияда қолдану олардың экожүйеге және адам денсаулығына ұзақ мерзімді әсерін бағалау үшін қосымша зерттеулер мен әзірлемелерді қажет етеді. Ауыл шаруашылығында наноматериалдарды қауіпсіз және тиімді пайдалануды қамтамасыз ету үшін этикалық және экологиялық аспектілерді ескеру маңызды. Осылайша, бұл жұмыстың мақсаты күміс нанобөлшектерін биологиялық әдіспен синтездеу және күміс нанобөлшектерінің бұршақ, лимон, мандарин және авокадо тұқымдарының өнуіне әсерін бағалау болды. Күміс нанобөлшектерінің күлі глюкозамен синтезделеді. Нанотехнологияны қолданудың қызықты бағыттарының бірі – өсімдік тұқымдарымен жұмыс. Бұл мақалада біз нанотехнологияның тұқым өсіру процесін қалай өзгерте алатынын, оның тиімділігін, сондай-ақ олардың дақылдарға әсерін қалай арттыратынын қарастырамыз.

Түйін сөздер: наноматериалдар, күміс нанобөлшектерінің синтезі, тотықсыздандырғыш, тұрақтандырғыш, глюкоза, фитостимуляторлық әсер, биологиялық әсер

©Калимолдина Л.М.*, Шаихова Ж.Е., Калиева Б.К., Бубиш Ш., Аскарова Ш.К., 2026.
«Алматинский технологический университет», Алматы, Казахстан.
E-mail: kalimoldinal@gmail.com

ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ПРОРАСТАНИЕ СЕМЯН ФАСОЛИ, ЛИМОНА, МАНДАРИНА, АВОКАДО

Калимолдина Лайла — кандидат технических наук, ассоциированный профессор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: kalimoldinal@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-4397-9629;
Шаихова Жанат — магистр технических наук, сениор-лектор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: zh.shaikhova1965@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5909-4182;
Калиева Ботакоз — кандидат химических наук, ассистент-профессор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail:botakoz_23@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0135-8878;
Бубиш Шолпан — магистр технических наук наук, ассистент лектор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: sholpanbubush@gmail.com, https://orcid.org/0009-0005-6649-0430;
Аскарова Шынар — кандидат сельско-хозяйственных наук, асистент лектор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: askarova-1977@list.ru, https://orcid.org/0000-0001-9260-7616.

Аннотация. В последние десятилетия нанотехнологии привлекают повышенное внимание ученых, агрономов и предпринимателей благодаря своему потенциалу в решении широкого круга задач, связанных с сельским хозяйством, экосистемами и устойчивым развитием. В статье рассматриваются возможности применения нанотехнологий для совершенствования семеноводства, повышения эффективности агрономических процессов, а также их влияние на развитие цитрусовых культур. Нанотехнологии в области семеноводства представляют собой перспективное направление аграрной науки, основанное на использовании наноматериалов и нанокапсул для улучшения свойств семян. Одним из ключевых аспектов их применения является возможность целевой доставки питательных веществ и защитных соединений непосредственно к семенам. Это позволяет существенно сократить объем используемых удобрений и пестицидов, что, в свою очередь, снижает негативное воздействие на окружающую среду. Наноматериалы могут применяться для создания буферных систем, обеспечивающих медленное и контролируемое высвобождение активных веществ, что способствует более эффективному росту и развитию растений. Кроме того, нанотехнологии открывают возможности для улучшения традиционных сортов семян путем их модификации на молекулярном уровне. В связи с этим целью настоящей работы явились биосинтез наночастиц серебра и оценка их влияния на прорастание семян фасоли, лимона, мандарина и авокадо. В ходе исследования были синтезированы золи наночастиц серебра с использованием глюкозы. Показано, что наночастицы серебра обладают более высокой токсичностью по сравнению с наночастицами других благородных металлов, что обусловлено более активной диффузией ионов серебра с их поверхности. Известно, что ионы серебра эффективно ингибируют биосинтез этилена, регулирующего в растениях процессы стрессовой реакции, старения и созревания. В целом токсичность ионов металлов значительно выше токсичности самих наночастиц. Механизм фитотоксического действия наночастиц часто связывают с накоплением в растительных тканях активных форм кислорода. Актуальность подобных исследований обусловлена необходимостью установления факторов природного и техногенного характера, определяющих особенности взаимодействия растений с наночастицами.

Ключевыеслова: наноматериалы, синтезнаночастицсеребра, восстановитель, стабилизатор, глюкоза, фитостимулирующий эффект, биологический эффект

Кіріспе. Қазіргі ғылым саласын дамытуда нанотехнологияға, дәлірек айтқанда нанобөлшектерді синтездеуге және қолдануға ерекше назар аударылады.

Нанобөлшектер -бірегей физика-химиялық және оптикалық қасиеттерімен ерекшеленетін, көлемі кемінде бір өлшемде 100 нм-ден аспайтын оқшауланған қатты фазалы объектілер.

Соңғы жылдары нанотехнология көптеген салаларда, соның ішінде ауыл шаруашылығында кеңінен таралған.

Әдеби шолу. Нанотехнология – бұл заттарды нанодеңгейде, яғни атомдар мен молекулалар деңгейінде зерттеуге арналған ғылым саласы (Schwab, 2016). Ауыл шаруашылығында бұл технологияларды жаңа материалдарды жасау, тұқым өнімділігін жақсарту, сондай-ақ өсімдіктерді қорғаудың тиімді құралдарын әзірлеу үшін қолдануға болады. Тұқым нанотехнологиясы – тұқымның қасиеттерін жақсарту, сондай-ақ олардың өнімділігі менайдаланатын салыстырмалы түрде жаңа сала (Sengupta, 2014). Наноматериалдарды тұқымдарды өңдеу үшін пайдалануға болады, бұл көшеттердің өсу жылдамдығы мен біркелкілігін арттыруға септігін тигізеді. Себебі мұндай материалдар тұқымның суды сіңіруін жақсарта алады (Hendren, 2011). Нанобөлшектердің микробқа қарсы қасиеттері болуы мүмкін, бұл тұқымдарды әртүрлі аурулар мен зиянкестерден қорғауға мүмкіндік береді, оларды өнгенге дейін өсімталдығын қамтамасыз етеді. Тыңайтқышты пайдалану қоректік заттарды тікелей тұқым эмбрионына тиімдірек жеткізуге мүмкіндік береді. Бұл егіннің сапасы мен санының жақсаруына әкелуі мүмкін (Piccinno, 2012). Наноматериалдар тұқымдарға құрғақшылық, суық немесе топырақтың жоғары тұздылығы сияқты қолайсыз жағдайларға төтеп беруге көмектеседі, бұл өсімдіктердің жақсы бейімделуін қамтамасыз етеді. (Colman, 2013). Нанотехнологияның көмегімен фермерлерге шешім қабылдау үшін маңызды ақпарат бере отырып, тұқымдар мен топырақтың күйін бақылауға мүмкіндік беретін сенсорлар жасауға болады (Khlebtsov, 2011). Тұқым нанотехнологиясы саласындағы зерттеулер перспективалы және азық-түлік қауіпсіздігін қамтамасыз етуде, әсіресе халық санының өсуі мен климаттың өзгеруі жағдайында маңызды құрал бола алады. Дегенмен, агрономияда наноматериалдарды пайдалану кезінде қауіпсіздік пен экология мәселелерін де ескеру маңызды (Lewinski, 2008).

Ультра дисперсті (нано-) металл ұнтақтарының биологиялық белсенділігі оларды жақпа май мен бактерицидтік тканьдерде қолдану перспективаларын кеңейтеді. Дәстүрлі мұндай жүйелерді зерттеу әдетте металл нанобөлшектерінің препараттары және осы композициялардың биологиялық белсенділігін зерттеуді қамтиды (Малицкий, 2019).

Препаратқа енгізілген нанобөлшектердің таралу сипаты және олардың нақты препараттың химиялық құрамы бұрын зерттелмеген, дегенмен бұл параметрлер бар жүйелерді оңтайландыру тұрғысынан металл нанобөлшектері айтарлықтай қызығушылық тудырады.

Өсімдік тұқымын өсіру немесе генетикалық модификациялау үшін нанотехнологияны қолдану бойынша зерттеулер әлі де белсенді жүргізілуде. Нанобөлшектерөсімдікжасушаларыменөзараәрекеттесудіңқарапайымдылығымен сипатталады, бұл олардың бетінің көлеміне жоғары қатынасымен түсіндіріледі (Azhdarzadeh, 2015).

CC BY NC

Бұл жұмысты зерттеу кезінде күміс нанобөлшектерінің өсімдік түріне және белсенді нанобъектінің сипаттамаларына байланысты өсімдіктердің дамуы мен метаболизміне әсерінің айырмашылықтарын ескерген жөн. Нанобөлшектердің өсімдіктерге жиналуы мен әсер етуі мөлшеріне, пішініне, бетінің ауданына, концентрациясына, синтез әдісіне (химиялық, физикалық немесе биосинтез), еріткіштерді қолдануға, өсімдіктердің даму сатысына және өсімдік жасушасының химиялық ортасына байланысты (Manchikanti, 2010).

Күміс нанобөлшектерінің жоғары каталитикалық белсенділігі тотығу стрессін тудыратын оттегінің белсенді түрлерінің (ОБТ) күшеюіне ықпал етеді (Carrière, 2012).

Өсімдік жасушасындағы тотығу жеткіліксіздігі өзінің антиоксиданттық процестерін белсендіруге әкеледі. Өсімдік жасушасының ішіндегі НБ-ден босатылған күміс иондарының үлкен концентрациясы тұқымға күміс наноформаларының уытты әсеріне әкелуі мүмкін (күмістің рұқсат етілген шекті концентрациясы 0,05 мг/л). Глюкоза НБ тұрақтандырғышы ретінде әрекет ете отырып, токсикоэффект ықтималдығын азайтады (Carrière, 2012).

Наноматериалдар түрінде қоректік заттарды енгізу өсімдіктерді қажетті элементтермен тиімдірек қамтамасыз етуге мүмкіндік береді. Бұл тәсіл тұқымдарға қажетті микроэлементтерді алуға көмектеседі, олардың сіңуін оңтайландырады және жақсы өсуін қамтамасыз етеді. Наноматериалдарды тиімді фунгицидтер мен инсектицидтер ретінде де қолдануға болады. Мысалы, көміртекті нанотүтікшелер мен күміс нанобөлшектердің микробқа қарсы қасиеттері бар, бұл өсімдіктерді саңырауқұлақ инфекцияларынан және зиянкестерден химиялық заттарды қолданбай қорғауға мүмкіндік береді (Masarovičová, 2013).

Өзекті бағыттардың бірі – өсімдіктердің өнімділігін едәуір арттыра алатын, қолайсыз жағдайларға төзімділігін жақсарту үшін нанотехнологияны қолдану.

Нанотехнология құрғақшылық, жоғары температура, аурулар және зиянкестер сияқты қолайсыз экологиялық жағдайларға төзімді тұқымдарды алуға көмектеседі. Мысалы, тұқымның жасуша құрамын тұрақтандыру үшін нанобөлшектерді қолдану саңырауқұлақ инфекцияларының зақымдануының төмендеуіне әкелуі мүмкін Нанобөлшектерді бұршақ тұқымын өңдеу үшін пайдалануға болады, бұл олардың өну жылдамдығын арттыруы мүмкін. Мысалы, тұқымдарды мырыш оксидімен немесе титанмен өңдеу тамырдың өсуі мен дамуын ынталандыруы мүмкін, бұл өсімдіктердің климаттық факторларға төзімділігін арттырады (Remédios, 2012).

Осы уақытқа дейінгі зерттеулер көрсеткендей, кейбір нанобөлшектер өсімдіктердегі фотосинтетикалық процестерді жақсарта алады. Бұл өсімдіктерде АТФ түрінде энергия бөлінуінің және нәтижесінде олардың өнімділігінің артуына әкеледі. Бұршақ тұқымының нанотехнологиясы өнімділікті арттыруға, аурулар мен зиянкестердің әсерін азайтуға және ресурстарды пайдалануды оңтайландыруға мүмкіндік беретін ауыл шаруашылығы үшін жаңа мүмкіндіктерді ашады. Дегенмен, агросектордың тұрақты және қауіпсіз дамуын қамтамасыз ету үшін осы технологияларды зерттеуді және енгізуді экологиялық бағытта жалғастыру маңызды (Siddiqui, 2015).

Нанобөлшектерді тұқымдарды дәрумендермен, минералдармен және қоректік заттармен байыту үшін пайдалануға болады. Бұл өнгіштіктің жоғарылауына және өсімдіктердің тез өсуіне әкелуі мүмкін. Мысалы, лимон тұқымын темір немесе мырыш нанобөлшектерімен өңдеу олардың ауруға төзімділігін жақсарта алады. Наноматериалдардың көмегімен тыңайтқыштар мен судың бақыланатын шығарылуын қамтамасыз ететін жүйелер құруға болады. Бұл лимонның өсуіне қажетті тыңайтқыштардың мөлшерін едәуір азайтып, қоршаған ортаға зиянды азайтады. Нанотехнологияны өсімдіктердің күйін нақты уақытта бақылауға көмектесетін сенсорларды жасауда да қолдануға болады. Мұндай сенсорлар ылғалдылық деңгейін, қоректік заттардың болуын талдай алады және тіпті өсімдікте кездесетін ауруларды ерте сатысында анықтай алады (Iravani, 2011).

Цитрус тұқымындарында нанотехнологияны қолдану қоршаған ортаға оң әсер етуі мүмкін. Бұл технологиялар химиялық тыңайтқыштар мен пестицидтерді қолдануды азайтуға ықпал ететіндіктен, олар топырақ пен су объектілерінің ластануын азайтуға көмектеседі. Сонымен қатар, ресурстарды тиімді пайдалану көміртегі шығарындыларының азаюына әкелуі мүмкін, бұл өз кезегінде климаттың өзгеруіне ықпал етеді.

Әдістер мен материалдар**.** Күміс – белсенді микробқа қарсы элемент, тірі организмдерде олардың қалыпты жұмыс істеуі үшін микроэлементтер ретінде кездеседі. Күміс нанобөлшектері күміс иондарынан үлкен көлемімен ерекшеленеді, сондықтан асыл металл иондарының бактерицидтік және вирусқа қарсы сипаттамалары күміс наноформаларының жоғарыда аталған қасиеттерінен бірнеше есе төмен (Bhatt, 2011). Бүгінгі таңда күміс нанобөлшектері жыл сайын 800 тоннадан астам мөлшерде өндіріледі және өндірістің, медицинаның және косметологияның көптеген салаларында белсенді қолданылады (Thul, 2013).

Химиялық тотықсыздану әдісімен күміс бөлшектері өсімдік материалдарына енгізілді. Үлгілердегі күміс концентрациясы 0,5-2,2 массалық % құрады.

Күміс нанобөлшектерінің синтезі үшін глюкоза ерітіндісі қалпына келтіруші ретінде қолданылды. 500 мг/л концентрациясы бар күміс нанобөлшектерінің күлін дайындау үшін күміс иондарының қажетті концентрациясы бар $AgNO_3$ ерітіндісі (А ерітіндісі), сондай-ақ аммиак ерітіндісімен pH 10,5 дейін жеткізілген глюкоза ерітіндісі (В ерітіндісі) дайындалды. Глюкозаның күміс тұзына молярлық қатынасы 1:5 болды. Әрі қарай, А ерітіндісі В ерітіндісімен араластырылды, тұрақтандырғыш ретінде натрий дигидрофосфаты қолданылды. Барлық кезеңдер бөлме температурасында орындалды. Фитоуыттылықты бағалау үшін 500 мг/л мөлшеріндегі $AgNO_3$ ерітіндісі 250 мг/л және 125 мг/л концентрациясына дейін дистильденген сумен сұйылтылды.

Әр Петри табақшасына губкалы субстрат, оған сүзгі қағазы қойылды, оған 20 мл сынақ ортасы қосылды. Осыдан кейін шырмалған бұршақ (пингвин) тұқымдасы тұқымдар әр тұқым арасындағы қашықтық кемінде 10 мм болатын сүзгі қағазына орналастырылды. Петри табақшасының бетін жауып, қараңғы жерге 25±1°C температурада 5 күн орналастырылды (1-сурет).



Сурет 1- Өскен бұршақ тұқымдары бар үлгілер

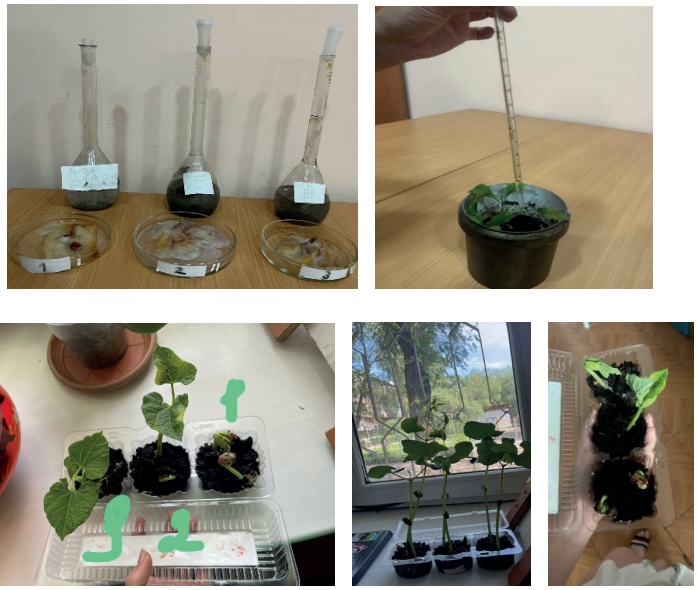
«Пингвин» - бұл әр түрлі өсу жағдайларына жақсы бейімделетін төзімді бұршақ түрі. Өсімдік материалдарын күміс бөлшектерімен өңдеу үлгілер матрицасында адсорбцияланған күміс иондарын $C_6H_{12}O_6$ тұрақтандырғышымен қалпына келтіру арқылы химиялық жолмен жүзеге асырылды. Тотықсыздандырғыш пен күміс тұзының молярлық қатынасы, pH, температура және реакция уақыты әр түрлі болды. Дәстүрлі емес тотықсыздандырғыштарды қолдану мүмкіндігін зерттеу үшін жұмыста глюкоза қолданылды, өйткені қоректік заттар өсімдіктердің толық өсуі үшін қажет.

Нәтижелер**.** Күміс нанобөлшектерінің күлі глюкозаның әсерінен синтезделеді. Фитотест көмегімен биологиялық әдіспен бұршақ тұқымдарының өнгіштігіне талдау жүргізілді. Тәжірибе барысында тұрақтандырғыш ретінде натрий дигидрофосфаты, глюкоза қалпына келтіруші ретінде қолданылды. Диаметрі 5-50 нм 800 мг/кг күміс нитраты ерітіндісін топырақ субстратында 5 аптадан кейін бұршақ тұқымдарында өнгіштігінің төмендеуі мен тамыр ұзындығының тежелуі байқалды. Күміс нанобөлшектерінің қатысуымен, сондай-ақ өсу қарқыны бақылау үлгісімен салыстырғанда тамырлар мен бүршікте байқалды (бұл үлгінің қоректік ортасында нанобөлшектер жоқ). Эксперимент барысында алынған нанобөлшектердің мөлшерін бағалауға мүмкіндік беретін күміс нанобөлшектерінің күлін сіңіру құбылысының нәтижелері көрсетілген (Кесте 1).

Тәжірибеге цитрус тұқымдасы ретінде лимон «Ташкент» және мандарин «Almaz» сорты тұқымдары таңдалды. Цитрус өсімдіктері сонымен қатар көптеген патогендік бактерияларды өлтіретін арнайы ұшпа заттарды – фитонцидтерді шығарады. Бірақ цитрус тұқымдарының қалың қабығы бар, ол ауа мен суды жақсы өткізбейді. Сондықтан мұндай тұқымдар 40-60 күн ішінде өте баяу өнеді (Thwala, 2016). Тұқымдардың өнуін тездету және олардың өнуін жақсарту үшін тұқымдарды алдын-ала өңдеу жүргізіледі 2 және 3 суретте бақылау үлгісі және фитотест процедурасы арқылы алынған, өнген тұқымдары бар үлгілер ұсынылған.

Кесте 1. Күл нанобөлшектерін синтездеу әдісінің $AgNO_3$ бұршақтың өсуіне әсері

Әдіс	$AgNO_3$ *ерітіндісінің концентрациясы, мг / л*		*Стимулдаушы немесе ингибиторлық әсер, %*	*Ескерту*
	250	125		
	Тамырдың орташа ұзындығы, мм			
Биологиялық (глюкозамен)	58,83	59,71	+ 8,82	Тұқымның өнуін арттыру және өсімдік тамырларының ұзындығын арттыру
Бақылау (су)	54,87			Өсімдіктің тамырының өсуі байқалады



Сурет 2 - Бақылау үлгілері

Талқылаулар. Зерттеулер көрсеткендей, тұқымдарды күміс ерітіндісімен өңдеу (Ag - 1,0%) 7 күндік сынақ үлгілерін инкубациялау кезінде тұқымнан өсірілген тамырлардың ұзындығын бақылау ImageJ бағдарламасында өлшеу арқылы жүргізілді.

Тұқымның өнуі мен көшеттердің өсуі топырақтағы судың мөлшеріне байланысты екенін есте ұстаған жөн. Өсімдікке әсер ететін негізгі факторлардың бірі - ерітіндідегі тұздардың концентрациясы, атап айтқанда жасуша шырыны мен тұзды ерітіндінің осмостық қысымдары арасындағы айырмашылық (Galazzi, 2016).

Тамырдың өсуі глюкоза қатысуымен 125 және 250 мг/л күл концентрациясында байқалды. Екі жағдайда да үлгіде өскіндер пайда болды. Зерттеу нәтижелері глюкозамен биологиялық жолмен алынған нанобөлшектердің суспензиялары цитрус тамырының өсуіне оң әсер ететінін көрсетеді.

Осылайша, өсімдік материалдарындағы күміс иондарын қалпына келтіру бойынша жүргізілген зерттеулер нәтижесінде материалдың түріне байланысты әр түрлі күміс мөлшері бар үлгілер алынды. Күмістің ең көп мөлшері цитрус өсімдік материалында болды (2,2 масса. %).

CC BY NC

Нанобөлшектердің мөлшері бойынша таралуы фотокалориметриялық әдісімен анықталды. Нанобөлшектерінің өлшемдерін анықтау Алматы технологиялық университеті «Азық-түлік қауіпсіздігі ҒЗИ» JENWAY **спектрофотометрі** көмегімен жүргізілді. Ерітіндінің түсті жарықты сіңіру арқылы заттың концентрациясын анықтау, яғни зерттелетін ерітінді арқылы өтетін жарықтың интенсивтілігін өлшеу арқылы оны құрамындағы зат мөлшерін есептеу жүргізілді. Үлкен өлшемді күміс нанобөлшектердің түзілуі табиғи реагенттерді қолдану арқылы алынған суспензияларға тән.

Әртүрлі концентрациядағы күміс иондары бар үлгілердің оптикалық тығыздығының мәндері көрсетілген (Кесте 2).

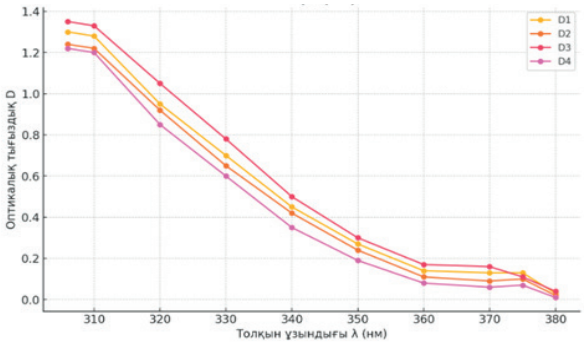
Кесте 2. Күміс нанобөлшектерінің күлін сіңіру 306-380 толқын ұзындығындағы тығыздық көрсеткіштері

λ (nm)	D1	D2	D3	D4
306	1,3	1,24	1,35	1,22
310	1,28	1,22	1,33	1,2
320	0,95	0,92	1,05	0,85
330	0,7	0,65	0,78	0,6
340	0,45	0,42	0,5	0,35
350	0,27	0,24	0,3	0,19
360	0,14	0,11	0,17	0,08
370	0,13	0,09	0,16	0,06
375	0,13	0,1	0,11	0,07
380	0,03	0,02	0,04	0,01

310-380 нм толқын ұзындығының интервалында күміс нанобөлшектерінің күлін сіңіру спектрлері ұсынылған (сурет 3).

Сонымен қатар, диаметрі 40 нм-ге дейінгі нанобөлшектер күлдің сұрғылт түсімен сипатталады. Күміс нитратының бастапқы концентрациясының жоғарылауымен күлдің түсі ашық сұрдан сұр түске дейін өзгерді. Бұл түстің өзгеруі пайда болған күміс нанобөлшектерінің көбеюіне байланысты.

Нанобөлшектердің толқын ұзындығы бойынша таралу графигі 3-суретте көрсетілген.



Сурет 3 - Оптикалық тығыздықтың λ (нм) бойынша тәуелділігі

Фотокалориметриялық әдісімен өлшенген қалпына келтіруші ретінде глюкоза алынған күміс нанобөлшектерінің толқын ұзындығы 310-380 нм аралығында күміс нитраты концентрациясы төмендеді.

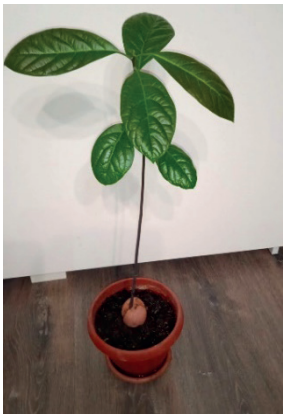
Ұсынылған күміс нанобөлшектерінің әртүрлі «жасыл» реагенттерді қолдана отырып, биологиялық синтез әдісімен алынған өлшемдер бойынша таралуының алынған мәліметтерін салыстыра отырып, күмістің ең үлкен бөлшектері глюкозамен синтезделгені анықталды. Күміс нанобөлшектерінің мөлшері күлдің түсіне әсер етеді: ірі бөлшектері бар тұздар қара, сұр-қоңыр түсті, ал ұсақ бөлшектері бар күл сары түсті. Күміс нанобөлшектерінің өсімдіктің тамыры мен жапырағының өсуіне $AgNO_3$ әсері мөлшері мен концентрациясына байланысты, бұл тұқымның өнуін жақсарту үшін күміс нанобөлшектерінің күлін пайдалану кезінде ескерілуі керек. Тұқымдарды жасыл технологиямен өсіру және өсімдіктердің тамырлар мен жапырақтардың одан әрі өсуі кезінде күміс жинақталмайды (Zuverza-Mena, 2016).

Осыған байланысты тропикалық өсімдік – авокадо тұқымының өну стратегиясы талданды. Тәжірибе үшін авокадоның «Hass» сортының жемістері алынды. Олар мөлшері, түсі және конфигурациясы бойынша ерекшеленеді, тұқымдардың көпшілігі піскен кезде кебетіні белгілі. Сондықтан олар ылғалдың ең аз мөлшерін сақтау үшін қалың қорғаныс қабығын пайдаланады. Зерттеулер бес ай ішінде жүргізілді - 2024 жылдың қараша айынан бастап 2025 жылдың сәуір айына дейін. Үш піскен авокадо жемісі алынып және тұқымдар целлюлозадан тазартылып өнуге дайындалды. Олардың формасы анықталды. Жемістің, тұқымның салмағы анықталады және осы екі мәннің айырмашылығы – целлюлоза массасы. Деректер кестеге енгізілді. Ішкі құрылымды зерттеу үшін бір тұқым екіге бөлінеді, қалғандары өнуге дайындалады. Тұқымдар ашық түрде өніп шықты. Бастапқыда әр жемістің айналасында ортаңғы деңгейде шамамен 120 градус бұрышта 3 тесік мұқият жасалды. Әр тесікке 3 таяқша салынған. Олар жемісті стаканда ілулі ұстайтын тіректер ретінде қызмет етті. Таяқшалардың көмегімен әр тұқым бөлме температурасында таза, сүзгіден өткен сумен бөлек стаканға орналастырылды. Бұл кезде тұқым суға доғал ұшымен тиді. Су деңгейі үнемі сақталды. Жемістердің күйін апта сайын бақылап, барлық пішін өзгерістерін тіркеп жазып, тұқымның ісінуінің басталуын көзбен бақылап, оны екі тең жартыға бөлу уақытын, тамырдың пайда болуын және жапырақтары бар апикальды бөлікті байқадық (4-сурет). Тұқым өнген соң авокадо көшеттерін өсіру үшін борпылдақ және ылғалды қажет ететін топырақ, сондай-ақ биік гүл ыдыстары дайындалды (5-сурет). Авокадо ағашы оның тұқымы сусызданбайтын орынды қажет етеді. Олардың өнуі жылдың кез келген уақытында мүмкін.

CC BY NC



Сурет 4 - Авокадо жемісін тәжірибеге дайындау



Сурет 5 - Авокадоның бес айлық өсіндісі

Барлық бақылаулар 2024 жылдың қарашасы мен 2025 жылдың сәуірі аралығында жүргізілді. Тұқымдар мен өскіндердің негізгі сипаттамалары анықталды. Зерттеу нәтижелері бойынша авокадоның өну және даму ерекшеліктерін зерттеу жұмыстары жүргізілді.

Осы зерттеулер $AgNO_3$ әсерінің авокадо тұқымдарының өнуіне фитостимуляторлық әсер ететінін көрсетті.

Тәжірибелік нәтижелерге сүйене отырып, үлкен күміс ірі бөлшектерге нанобөлшектер алынды, өйткені белгілі ірі НБ өсімдік жасушаларына енуі қиынырақ, сондықтан нанобөлшектердің көпшілігі тамырларда жиналады, ал ұсақ улы бөлшектер тамырға жиналады. Глюкозамен 310-380 нм нанобөлшектердің өлшемдері анықталды. Биосинтезделген күміс нанобөлшектері тамырлардың өсуін ынталандыруда әдетте қандай да бір уытты әсерсіз күміс нанобөлшектерінің синтезіне химиялық әсер етумен байланысты.

Қорытынды**.** Өсімдіктерге қатысты нанобөлшектердің уыттылығы туралы зерттеулер іс жүзінде 15 жылдан аспайтынын атап өтеміз. Күміс нанобөлшектерінің экономикалық «жасыл технология» тиімді, экологиялық таза фитоэкстрактілерді қолдану әдісі арқылы цитрус тұқымдастарының өнуіне әсері зерттелді.

Нанобөлшектердің жасушаішілік ену процестерін анықтайтын факторлар

– олардың химиялық табиғаты, мөлшері, пішіні, беткі заряды, дозасы. Металл нанобөлшектердің өсімдіктерге әсерін зерттеудің перспективалық объектісі жасушалардың суспензиялық дақылдары болуы мүмкін.

Экологиялық аспекті тұрғысынан нанотехнологияның көптеген артықшылықтары болғанымен, олардың қоршаған ортаға тигізетін әсерін де ескеру қажет. Осы саладағы зерттеулер жалғасуда және технологияның қауіпсіз пайдаланылуын және экожүйелер үшін жағымсыз салдарға әкелмеуін қамтамасыз ету мәселесі маңызды. Бұршақ, цитрус және авокадо тұқымдарына нанотехнологияны қолдану агрономия мен экологиядағы қызықты бағыт болып табылады. Олар өсімдіктердің өнімділік пен стресске төзімділігін арттырудың жаңа әдістерін ұсынады және ресурстарды тиімдірек пайдалануға ықпал етеді. Дегенмен, кез келген жаңа технология сияқты, наноматериалдармен жұмыс істеу олардың адам денсаулығы мен экожүйеге әсерін мұқият зерттеуді және бақылауды қажет етеді. Қауіпсіздік пен тұрақтылықты қамтамасыз ете отырып, осы технологияларды практикалық егіншілікке оңтайлы біріктіру үшін нано-деңгейде қосымша зерттеулер жүргізу өзекті.

Қорытындылай келе, тұқым нанотехнологиясы ауыл шаруашылығының тиімділігін арттыруға және тұрақты дамуға ықпал етіп, агрономия саласында жаңа мүмкіндіктер ашады.

References

Arruda S.C., Silva A.L., Galazzi R.M., Azevedo R.A., Arruda M.A. (2015). Nanoparticles applied to plant science: A review. Talanta, 131: 693-705 (doi: 10.1016/j.talanta.2014.08.050). (in Eng).

Azhdarzadeh M., Saei A.A., Sharifi S., Hajipour M.J., Alkilany A.M., Sharifzadeh M., Ramazani F., Lau rent S., Mashaghi A., Mahmoudi M. (2015). Nanotoxicology: advances and pitfalls in research methodology. Nanomedicine (Lond.), 10: 2931-2952 (doi: 10.2217/nnm.15.130) (in Eng).

Bhatt I., Tripathi B.N. (2011). Interaction of engineered nanoparticles with various components of the environment and possible strategies for their risk assessment. Chemosphere, 82: 308- 317 (doi: 10.1016/j.chemosphere.2010.10.011). (in Eng).

Carrière M., Larue C. (2012). Toxicology: plants and nanoparticles. In: Encyclopedia of nanotechnology. B. Bhushan (ed.). Springer, NY, 2763-2767. (in Eng).

Colman B.P., Arnaout C.L., Anciaux S., Gunsch C.K., Hochella M.F., Jr., Kim B., Lowry G.V., Mc Gi l l B.M., Reinsch B.C., Richardson C.J., Unrine J.M., Wright J.P., Yin L., Bernhardt M.S. (2013). Low concentrations of silver nanoparticles in biosolids cause adverse ecosystem responses under realistic field scenario. PLoS ONE, 8: e57189 (doi: 21 10.1371/journal.pone.0057189). (in Eng).

Galazzi R.M., de Barros Santos E., Caurin T., de Souza Pessôa G., Mazali I.O., Arruda M.A.Z. (2016). The importance of evaluating the real metal concentration in nanoparticles post-synthesis for their applications: A case-study using silver nanoparticles. Talanta, 146: 795-800 (doi: 10.1016/j.talanta.2015.06.016). (in Eng).

Hendren C.O., Mesnard X., Dröge J., Wiesner M.R. (2011). Estimating production data for five engineered nanomaterials as a basis for exposure assessment. Environ. Sci. Technol. 45: 2562-2569 (doi: 10.1021/es103300g). (in Eng).

Iravani S. (2011). Green synthesis of metal nanoparticles using plants. Green Chem., 13: 2638-2650 (doi: 10.1039/C1GC15386B). (in Eng).

Khlebtsov N.G., Dykman LA. (2011). Biodistribution and toxicity of engineered gold nanoparticles: A review of in vitro and in vivo studies. Chem. Soc. Rev., 40: 1647-1671 (doi: 10.1039/c0cs00018c). (in Eng).

Lewinski N., Colvin V., Drezek R. (2008) Cytotoxicity of nanoparticles. Small, 4: 26-49 (doi: 10.1002/smll.200700595).

M.H.Siddiqui, M.H Al-Whaibi, F.Mohammad (eds.) (2015) Nanotechnology and plant sciences. Nanoparticles and their impact on plants. Springer, NY, (doi: 10.1007/978-3-319-14502-0). (in Eng).

Manchikanti P., Bandopadhyay T.K. (2010). Nanomaterials and effects on biological systems: development of effective regulatory norms. Nanoethics, 4: 77-83 (doi: 10.1007/s11569- 010-0084-9). (in Eng).

Masarovičová E., Kráľová K. (2013) Metal nanoparticles and plants. Ecol. Chem. Eng. S, 20: 9-22 (doi: 10.2478/eces-2013-0001). (in Eng).

Piccinno F., Gottschalk F., Seeger S., Nowack B. (2012). Industrial production quantities and uses of ten engineered nanomaterials in Europe and the world. J. Nanopart. Res., 14: 1109 (doi: 10.1007/s11051-012-1109-9). (in Eng).

Remédios C., Rosário F., Bastos V. (2012) Environmental nanoparticles interactions with plants: morphological, physiological, and genotoxic aspects. J. Botany, Article ID 751686 (doi: 10.1155/2012/751686). (in Eng).

Schwab F., Zhai G., Kern M., Turner A., Schnoor J.L., Wiesner M.R. (2016). Barriers, pathways and processes for uptake, translocation and accumulation of nanomaterials in plants — Critical review. Nanotoxicology, 10: 257-278 (doi: 10.3109/17435390.2015.1048326). (in Eng).

Sengupta J., Ghosh S., Datta P., Gomes A. (2014) Physiologically important metal nanoparticles and their toxicity. J. Nanosci. Nanotechnol., 14: 990-1006 (doi: 10.1166/jnn.2014.9078). (in Eng).

Thul S.T., Sarangi B.K., Pandey R.A. (2013). Nanotechnology in agroecosystem: implications on plant productivity and its soil environment. Expert Opin. Environ. Biol., 2: 1 (doi: 10.4172/2325-9655.1000101). (in Eng).

Thwala M., Klaine S.J., Musee N. (2016) Interactions of metal-based engineered nanoparticles with aquatic higher plants: A review of the state of current knowledge. Environ. Toxicol. Chem. 35: 1677-1694 (doi: 10.1002/etc.3364). (in Eng).

Zuverza-Mena N., Armendariz R., Peralta-Videa J.R., Gardea-Torresdey J.L. (2016). Effects of silver nanoparticles on radish sprouts: root growth reduction and modifications in the nutritional value. Front. Plant Sci., 7: 90 (doi: 10.3389/fpls.2016.00090). (in Eng).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 334–349

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.424

UDC: 628.16:66.095.26:541.183
IRSTI: 31.15.37

©Kurtebayeva A.A.[1], Álvarez-Torrellas S.[2], Gomes H.T.[3], Orynbayev S.A.[1], Kalmakhanova M.S.[1]*, 2026.
[1]M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan;
[2]Complutense University, Madrid, Spain;
[3]CIMO, LA SusTEC, Instituto Politécnico de Bragança, Bragança, Portugal.
*E-mail: marjanseitovna@mail.ru

ACTIVATED-CARBON-ENHANCED POLYMERIC MEMBRANES FOR EFFICIENT ELIMINATION OF EMERGING CONTAMINANTS

Kurtebayeva Assel — PhD student, M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan,
E-mail: d.a.kurtebayeva@dulaty.kz, https://orcid.org/0000-0002-1975-0755;
Álvarez-Torrellas Silvia — PhD, Associate Professor, Complutense University, Madrid, Spain,
E-mail: satorrellas@ucm.es, https://orcid.org/0000-0003-0916-6122;
Helder Teixeira Gomes — PhD, Associate Professor, CIMO, LA SusTEC, Instituto Politécnico de Bragança, Bragança, Portugal,
E-mail: htgomes@ipb.pt, https://orcid.org/0000-0001-6898-2408;
Orynbayev Seitzhan — PhD, L.N. M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan,
E-mail: sa.orynbayev@dulaty.kz, https://orcid.org/0000-0002-5077-7219;
Kalmakhanova Marzhan — PhD, Associate Professor, M.Kh. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan,
E-mail: marjanseitovna@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-8635-463X.

Abstract. The removal of contaminants of emerging concern (CECs) from wastewater remains one of the key challenges in water treatment, especially in countries with limited water resources and partially outdated infrastructure, including Kazakhstan. This study investigates polymeric membranes based on polyvinylidene fluoride (PVDF) modified with activated carbon of plant origin (AC-CN) to assess their structural characteristics and potential for further use in the removal of organic pollutants. AC-CN activated carbon was characterized by BET, SEM and FT-IR methods, which showed a developed microporous structure (S_{BET} =462 $м^2 \cdot g^{-1}$) and the presence of oxygen-containing functional groups. The membranes were formed by phase inversion using distilled water and a 70/30 ratio of distilled water and isopropanol, respectively, as a coagulation bath. Under continuous-flow conditions (C_0 = 10 mg/L, flow 0.5 mL/min, pH - 6.8), PVDF membranes loaded with AC-CN showed markedly different performance depending on the coagulation bath: the water-coagulated AC-CN_membrane removed 13.8% of paracetamol and 40.9% of 4-nitrophenol, whereas the H_2O/IPA (70:30)-coagulated AC-

CC BY NC

CN-IPA membrane achieved substantially higher paracetamol removal (60–64% at 60 min) and an initial 4-nitrophenol removal of 37.7% with sustained retention of 33.0% to 21.7% over 20–60 min. All measurements were performed in triplicate (n = 3) and are reported as mean; the relative standard deviation did not exceed 1%, indicating good repeatability of the analytical method. These findings indicate that coagulation bath composition critically controls membrane morphology and access to AC-CN sorption sites, supporting further optimization of these materials for sustainable wastewater treatment.

Keywords: membranes, activated carbons, adsorption; paracetamol, 4-nitrophenol

Financing. *This research has been supported by the Funding Program of the Republic of Kazakhstan by the Ministry of Higher Education and Science (grant BR24992867) and by Base Funding of CIMO (UIDB/00690/2020) through FEDER under Program PT2020. Also, the Spanish MICINN has funded this work through CATAD3.0 (PID2020-116478RB-100) and QUATERVAL (PID2023-150365OB-100) research projects.*

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 334–349. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.424*

©Куртебаева А.А.[1], Álvarez-Torrellas S.[2], Gomes H.T.[3], Орынбаев С.Ә.[1], Калмаханова М.С.[1]*, 2026.

[1]М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан;
[2]Комплутенсе Мадрид университеті, Мадрид, Испания;
[3]CIMO, Браганса политехникалық институты, Браганса, Португалия.
*E-mail: marjanseitovna@mail.ru

АЛАҢДАУШЫЛЫҚ ТУДЫРАТЫН ЛАСТАУШЫ ЗАТТАРДЫ ТИІМДІ ЖОЮ ҮШІН БЕЛСЕНДІРІЛГЕН КӨМІР ПОЛИМЕРЛІ МЕМБРАНАЛАР

Куртебаева Асель — PhD докторант, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан, E-mail: d.a.kurtebayeva@dulaty.kz, https://orcid.org/0000-0002-1975-0755;
Álvarez-Torrellas Silvia — PhD, қауымдастырылған профессор, Комплутенсе Мадрид университеті, Мадрид, Испания,
E-mail: satorrellas@ucm.es, https://orcid.org/0000-0003-0916-6122;
Helder Teixeira Gomes — PhD, қауымдастырылған профессор, Браганса политехникалық институты, Браганса, Португалия,
E-mail: htgomes@ipb.pt, https://orcid.org/0000-0001-6898-2408;
Орынбаев Сейтжан — PhD, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,
E-mail: sa.orynbayev@dulaty.kz, https://orcid.org/0000-0002-5077-7219;
Калмаханова Маржан — PhD, қауымдастырылған профессор, М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан,
E-mail: marjanseitovna@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-8635-463X.

Аннотация. Ағынды сулардан ерекше алаңдаушылық тудыратын ластаушы заттарды (CECs) шығару, әсіресе су ресурстары шектеулі және ішінара ескірген инфрақұрылымы бар елдерде, соның ішінде Қазақстанда суды тазарту саласындағы негізгі міндеттердің бірі болып қала береді. Бұл зерттеу олардың құрылымдық сипаттамаларын және органикалық ластаушы заттарды жоюда одан әрі пайдалану әлеуетін бағалау мақсатында өсімдік тектес белсендірілген көмірмен (AC-CN) толтырылған поливинилиденфторид (PVDF) негізіндегі полимерлі мембраналарды зерттейді. Белсендірілген AC-CN көмірі BET, SEM және FT-IR әдістерімен сипатталды, олар дамыған микро-кеуекті құрылымды (S_{BET}=462м^2·г$^{-1}$) және құрамында оттегі бар функционалды топтардың болуын көрсетті. Мембраналар дистилденген суды және коагуляциялық ванна ретінде 70/30 дистилденген су мен изопропанол қоспасын пайдаланып фазалық инверсия арқылы түзілді. Үздіксіз ағын жағдайында (c = 10 мг/л, ағын жылдамдығы 0,5 мл/мин, pH - 6,8) AC-CN жүктелген PVDF мембраналары коагуляциялық ваннаға байланысты айтарлықтай әртүрлі сипаттамаларды көрсетті: сумен коагуляцияланған AC-CN мембранасы 13,8% парацетамолды және 40,9% 4-нитрофенол, ал H_2O/IPA (70:30) коагуляцияланған AC-CN мембранасы парацетамолды (60 минут ішінде 60-64%) және 37,7% 4-нитрофенолды 20-60 минут ішінде тұрақты ұстаумен 33,0% -дан 21,7% дейін жойып тастады. Барлық өлшемдер үш рет орындалды (n = 3) және орташа мәндер ретінде ұсынылды; салыстырмалы стандартты ауытқу 1% - дан аспады, бұл аналитикалық әдістің жақсы қайталануын көрсетеді. Бұл нәтижелер коагуляциялық ваннаның құрамы мембрананың морфологиясына және AC-CN сорбциялық орындарына қол жеткізуге сыни әсер ететінін көрсетеді, бұл ағынды суларды тұрақты тазарту үшін осы материалдарды одан әрі оңтайландырудың орындылығын растайды.

Түйін сөздер: мембраналар, белсендірілген көмір, адсорбция, парацетамол, 4-нитрофенол

©Куртебаева А.А.[1], Álvarez-Torrellas S.[2], Gomes H.T.[3], Орынбаев С.А.[1], Калмаханова М.С.[1]*, 2026.

[1]Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан;
[2]Мадридский университет Комплутенсе, Мадрид, Испания;
[3]Политехнический институт Браганса, Браганса, Португалия.
*E-mail: marjanseitovna@mail.ru

ПОЛИМЕРНЫЕ МЕМБРАНЫ С АКТИВИРОВАННЫМ УГЛЕМ ДЛЯ ЭФФЕКТИВНОГО УДАЛЕНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ ВЫЗЫВАЮЩИХ ОБЕСПОКЕННОСТЬ

Куртебаева Асель — PhD студент, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан, E-mail: d.a.kurtebayeva@dulaty.kz, https://orcid.org/0000-0002-1975-0755;
Álvarez-Torrellas Silvia — PhD, ассоциированный профессор, Мадридский университет Комплутенсе, Мадрид, Испания,
E-mail: satorrellas@ucm.es, https://orcid.org/0000-0003-0916-6122;

Helder Teixeira Gomes — PhD, ассоциированный профессор, Политехнический институт Браганса, Браганса, Португалия,
E-mail: htgomes@ipb.pt, https://orcid.org/0000-0001-6898-2408;
Орынбаев Сейтжан — PhD, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,
E-mail: sa.orynbayev@dulaty.kz, https://orcid.org/0000-0002-5077-7219;
Калмаханова Маржан — PhD, ассоциированный профессор, Таразский университет имени М.Х. Дулати, Тараз, Казахстан,
E-mail: marjanseitovna@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-8635-463X.

Аннотация. Удаление загрязняющих веществ, вызывающих особую озабоченность (CEC), из сточных вод остается одной из ключевых задач в области водоочистки, особенно в странах с ограниченными водными ресурсами и частично устаревшей инфраструктурой, включая Казахстан. В данном исследовании рассматриваются полимерные мембраны на основе поливинилиденфторида (PVDF), модифицированные активированным углем растительного происхождения (AC-CN), с целью оценки их структурных характеристик и потенциала для последующего применения при удалении органических загрязняющих веществ. Активированный уголь AC-CN был охарактеризован методами BET, SEM и FT-IR, которые показали развитую микропористую структуру (S_BET = 462 м²/г) и наличие кислородсодержащих функциональных групп. Мембраны формировали методом фазовой инверсии с использованием в качестве коагуляционной ванны дистиллированной воды, а также смеси дистиллированной воды и изопропанола в соотношении 70/30. В условиях непрерывного потока (C_0 = 10 мг/л, расход 0,5 мл/мин, pH ≈ 6,8) мембраны из PVDF, модифицированные AC-CN, продемонстрировали заметные различия в характеристиках в зависимости от состава коагуляционной ванны. Так, мембрана AC-CN, коагулированная в воде, обеспечила удаление 13,8 % парацетамола и 40,9 % 4-нитрофенола, тогда как мембрана AC-CN, коагулированная в системе H_2O/IPA (70:30), показала значительно более высокую степень удаления парацетамола (60–64 % за 60 мин) и 37,7 % 4-нитрофенола при устойчивом удерживании в диапазоне от 33,0 до 21,7 % в течение 20–60 мин. Все измерения были выполнены в трех повторностях (n = 3) и представлены в виде средних значений; относительное стандартное отклонение не превышало 1 %, что свидетельствует о хорошей воспроизводимости аналитического метода. Полученные результаты указывают на то, что состав коагуляционной ванны оказывает критическое влияние на морфологию мембраны и доступность сорбционных центров AC-CN, что подтверждает целесообразность дальнейшей оптимизации данных материалов для устойчивой очистки сточных вод.

Ключевые слова: мембраны, активированный уголь, адсорбция, парацетамол, 4-нитрофенол

Introduction. Wastewater treatment is a critical environmental and public health issue, drawing increasing attention to advanced technologies for removing contaminants of concern (CECs). Like many countries, Kazakhstan faces the need to modernise its wastewater treatment networks and implement innovative solutions due

to outdated infrastructure and growing requirements for the quality of discharged water (Kalmakhanova et al., 2025).

Currently, Kazakhstan mainly relies on traditional wastewater treatment methods, such as mechanical and biological processes (e.g. activated sludge systems and sedimentation tanks). Many of these facilities were built decades ago and are experiencing problems related to equipment wear and tear, changes in the composition and volume of incoming wastewater, and a lack of investment in modernisation. These factors lead to reduced treatment efficiency and increased environmental risks, particularly in large cities such as Almaty (Ospanov et al., 2022). More modern solutions are also being adopted in practice, such as the use of electrical discharges to neutralise and remove heavy metals at industrial sites, and sedimentation and suspension bioreactors for small treatment plants (Abdykadyrov et al., 2025). However, large-scale implementation of these innovations is limited by economic and infrastructural barriers (Bekenova et al., 2024).

Literature review. There has been a global shift towards advanced and hybrid technological solutions to combat water scarcity, recover resources and remove persistent pollutants. Membrane-based processes such as ultrafiltration, nanofiltration and reverse osmosis, combined with adsorption, are becoming increasingly popular due to their high efficiency and selectivity, and their potential for water reuse (Álvarez-Torrellas S. et al., 2016). Patent analysis indicates a trend away from individual technological units towards integrated systems that combine physical, chemical and biological approaches, emphasising automation and energy efficiency (Mao et al., 2021). Combinations of membrane bioreactors, advanced oxidation processes and adsorption are recognised as being particularly effective in removing CEC (Ahmed et al., 2022).

Polymeric membranes modified with activated carbon (AC) show great promise for the comprehensive removal of organic and inorganic pollutants. Incorporating AC into the polymer membrane matrix enhances hydrophilicity, sorption capacity and selectivity towards micro- and nano-pollutants, while reducing pore clogging and facilitating flow recovery (Arabloo and Javadpour, 2025; Moraes et al., 2023). These hybrid structures have been shown to perform well in the removal of heavy metals, phenolic compounds and CECs, with some studies reporting removal efficiencies of over 90% for individual compounds (Sherugar et al., 2022; Moraes et al., 2023).

Combined systems that use membrane filtration alongside activated carbon adsorption and other methods, such as ultrasound and photocatalysis, can achieve almost complete removal of pharmaceutical compounds and other persistent CECs (Secondes et al., 2014). Activated carbon is still one of the most effective adsorbents thanks to its large surface area and the fact that it can be modified; using adsorbents derived from agricultural waste makes solutions more sustainable and cost-effective (Ntone et al., 2025).

This study presents a novel approach to developing polymeric membranes for efficient contaminant removal by incorporating biomass-derived activated carbon (AC-CN). The scientific novelty lies in:

− Investigating the critical role of coagulation bath composition (distilled water

CC BY NC

vs. H2O/IPA mixture) in controlling the membrane's porous structure and surface properties, directly impacting the accessibility of activated carbon's sorption sites.

− Establishing a direct link between membrane fabrication parameters, resulting morphology, and adsorption performance for model emerging contaminants (paracetamol and 4-nitrophenol).

− Demonstrating significantly improved and sustained removal efficiencies for paracetamol and 4-nitrophenol using AC-CN-modified PVDF membranes coagulated in an H_2O/IPA bath, showcasing their potential for advanced wastewater treatment applications.

− This research differentiates itself by not only synthesizing and characterizing AC-CN but also by systematically evaluating the influence of the membrane formation process on overall contaminant removal efficiency, offering a more holistic understanding for designing advanced filtration materials.

Materials and methods. *Materials.* Paracetamol, also known as acetominophen (PCM, ≥99%), and acetonitrile (HPLC grading, ≥99.9%) were purchased from Sigma-Aldrich (Merck KGaA, Germany) and used without further purification. Polyvinylpyrrolidone (PVP; MW: 40,000 g mol^{-1}), 1-methyl-2-pyrrolidone (NMP; 99.5 wt.%) and poly (vinylidene fluoride) (PVDF; MW: 275,000 g mol^{-1}), from Sigma-Aldrich, were used for membrane fabrication.

All chemicals were of analytical or chromatographic purity and were used directly in working solutions.

Methods for obtaining activated carbon as a filler for polymeric membranes. The synthesis of the activated carbons was adapted from the work of F. Bibi et al. (2023), as described elsewhere. In this study, agro-industrial waste such as corn cobs was used as the raw material. To obtain activated carbon, the raw material was thoroughly washed with ultrapure water and then pre-carbonised at 450 °C in a vertical furnace under a nitrogen flow of 0.2 mL/min. The material was pre-washed with a diluted HCl solution to remove residual non-carbon impurities. It was then activated by impregnation with an acid solution (HNO_3) of a specified concentration. Finally, the material was washed with ultrapure water until a neutral pH was achieved in the washing water. The carbonisation process was then carried out at 600°C under the same N_2 flow rate (0.2 ml/min) as during pre-carbonisation. (See Figure 1.) The material was labelled AC-CN: the first letter denotes the precursor. C: *corn cob;* and the second letter indicates the activating agent used: N: *HNO_3*.



Figure 1 - Scheme of the procedure of the activated carbons preparation
(I - Biomass (corn cob), II - Pre-carbonization in a nitrogen atmosphere (oven) at 450 °C, III - Acid wash (HCl) with heating,
IV - Activation step (impregnation/activation using a shaker), V - Rinse with ultrapure water, VI – Drying, VII - Final activated carbon material obtained)

Methods for preparing polymeric membranes. To prepare the membranes, 1.3 g of PVP, 11.5 mL of NMP and 2.5 g of activated carbon (AC-CN) were sequentially added to the solution and dispersed in an ultrasonic bath for 3 hours until a homogeneous suspension was obtained. Then, 1.25 g of PVDC was added and stirred on a magnetic stirrer at 40°C and 200 rpm for 48 hours. After that, the solution was left overnight at room temperature without external influence for degassing and stabilization. The prepared solution was applied to a glass substrate and spread with a precision applicator with a blade thickness of 300 μm, after which the membrane was subjected to coagulation (Ribeiro R.S. et al, 2022). In the first variant, coagulation was carried out in ultrapure water, and the resulting sample was designated as AC-CN_membrane. In the second variant, a coagulation bath containing a mixture of ultrapure water and isopropanol in a ratio of 70/30 was used; after exposure for 20 minutes, the membrane was transferred to fresh ultrapure water and left overnight. This sample was designated AC-CN_IPA and further stored in ultrapure water at 3 °C (Wang Y., et al., 2020). Figure 2 shows the membrane preparation process in detail.

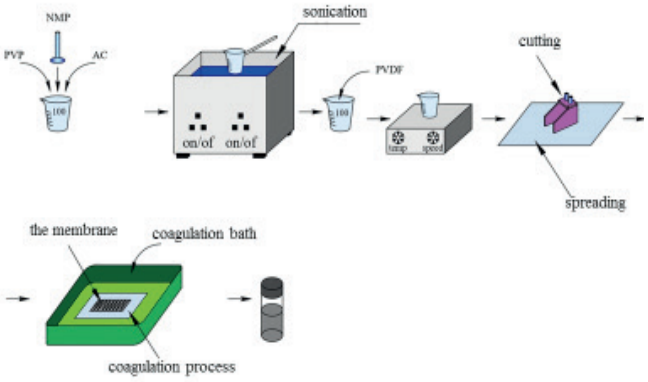


Figure 2 - Scheme of the membrane preparation process

Polymeric mixed matrix membranes in a continuous system. To evaluate the effectiveness of the obtained membrane in removing contaminants, a reactor containing the membranes (AC-CN_membrane and AC-CN_IPA) was connected to a peristaltic pump to create a continuous system. The following conditions were used to conduct the experiment: The contaminant (paracetamol) at a concentration of 10 mg/L was connected to the pump at a flow rate of 0.5 mL/min. This fed the contaminant through the reactor inlet, passing it through the polymeric membrane installed in the reactor (see Figure 3). Samples (2 ml) were taken at 0, 3, 6, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 110 and 120 minutes during filtration. All measurements were performed in triplicate (n = 3) and reported as mean standard deviation. The filtered samples were analysed by HPLC and UV spectrophotometry. The samples were then centrifuged and filtered through 0.45 μm nylon membrane filters before being analysed using a JASCO High-Performance Liquid Chromatograph equipped with a UV-4575 detector. Separation was performed using an Inertsil ODS-3 column (250 × 4.6 mm, 5 μm). The mobile phase

consisted of acetonitrile and ultrapure water (45:55 v/v) adjusted to pH 2.5. The flow rate was maintained at 1.0 mL/min and detection was carried out at 254 nm.

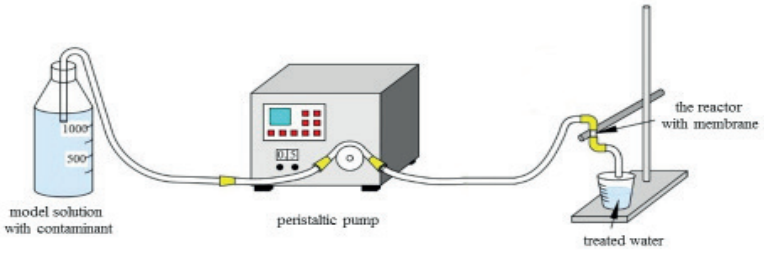


Figure 3 - Experimental set-up for adsorption tests using membrane materials

Equations (1) and (2) were used to process the results.

$$residue\% = \frac{C_{in} \cdot 100\%}{C_{exp}} \quad (1)$$

$$purified\% = 100\% - residue\% \quad (2)$$

where, residue% - is the unadsorbed residue in the solution; purified% - is the purified result, C_{in} - is the initial concentration of the model solution, C_{exp} - is the experimental data of the model solution during the experiments.

Results and discussions. *Material characteristics.* Of the synthesised carbons, the AC-CN membrane matrix showed the most promising characteristics, combining the highest specific surface area (according to BET analysis) with the best adsorption capacity for PCM (20.26 mg/g). Consequently, it was chosen for membrane fabrication.

Table 1 - Textural properties of the synthesized activated carbons.

Material	S_{BET} (m^2/g)	V_{Total} (cm^3/g)	V_{micro} (cm^3/g)	V_{meso} (cm^3/g)	V_{micro}/V_{Total}	d_{pore} (Á)
AC-CN	462	0.224	0.182	0.042	0.81	19.4

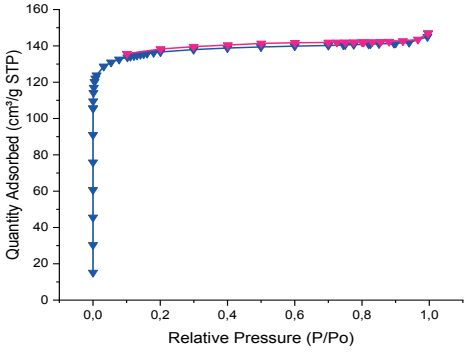


Figure 4 - N_2 adsorption-desorption isotherms at 77K of the activated carbon obtained from corncob (AC-CN).

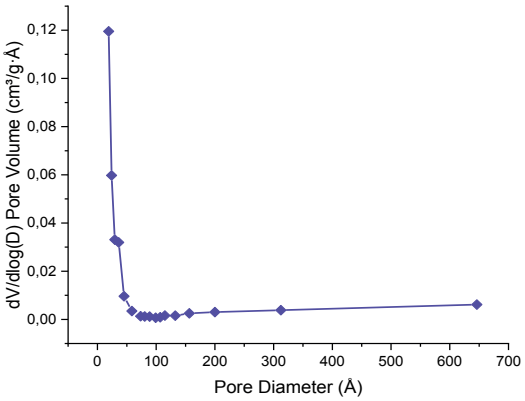


Figure 5 - Pores size distributions of the activated carbon obtained from corncob (AC-CN).

AC-CN exhibits a clearly pronounced microporous structure with a high specific surface area. SBET is approximately 462 462 $m^2 \cdot g^{-1}$ and the total pore volume is approximately 0.224 $cm^3 \cdot g\wedge^1$. The micropore volume is approximately 0.182 $cm^3 \cdot g\wedge(-1)$, corresponding to a microporosity fraction is approximately 0,182 $cm^3 \cdot g^{-1}$, of the total pore volume. The average effective pore size is calculated to be ≈19.4 Å (≈1.94 nm). These parameters indicate the predominance of micropores and the presence of a narrow mesopore contribution (see Figures 4 and 5). The adsorption isotherm in Figure 4 is of Type I, which is characteristic of microporous solids. However, because the theoretical assumptions underlying the Brunauer–Emmett–Teller (BET) model are not fully met for strictly microporous materials, the reported BET surface area must be considered an apparent value. Rigorous assessment of microporosity and pore size distribution therefore requires complementary analyses. Chemical activation (KOH, H_3PO_4, $ZnCl_2$) and process parameters (temperature, time and impregnation coefficient) play a key role in forming textural characteristics (Sousa et al., 2022; Bedane et al., 2023). The composition of the starting precursor (e.g. cellulose, hemicellulose, lignin and ash content) also significantly influences the development of the porous structure and the final properties of the activated carbon (AC) (Santos et al., 2020).

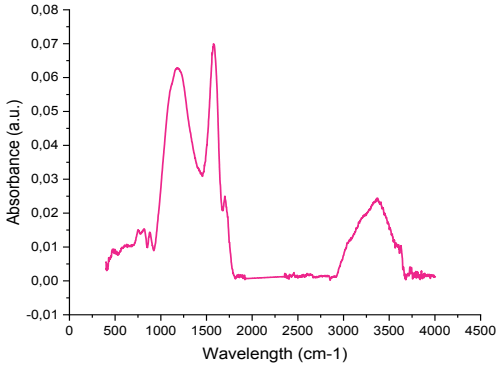


Figure 6 - FT-IR spectra of the synthesized activated carbon prepared from corncob (AC-CN).

CC BY NC

The FT-IR spectrum of AC-CN shows the presence of several key functional groups that form the surface chemistry of activated carbon: a broad band in the region of ~3400 cm^{-1}, corresponding to ν(O–H) (hydroxyl/adsorbed water molecules); bands in the region of ~1700–1650 cm^{-1}, associated with carbonyl ν(C=O); bands ~1200–1000 cm^{-1}, indicating ν(C–O) of ether/phenolic groups; as well as characteristic bands of aromatic C=C in the region of ~1600 cm^{-1} (Figure 6). This combination of oxygen-containing functional groups and aromatic structure is typical for chemically activated biochar and determines a polar, slightly acidic surface with the possibility of multiple types of intermolecular interactions (Ţucureanu et al., 2016).

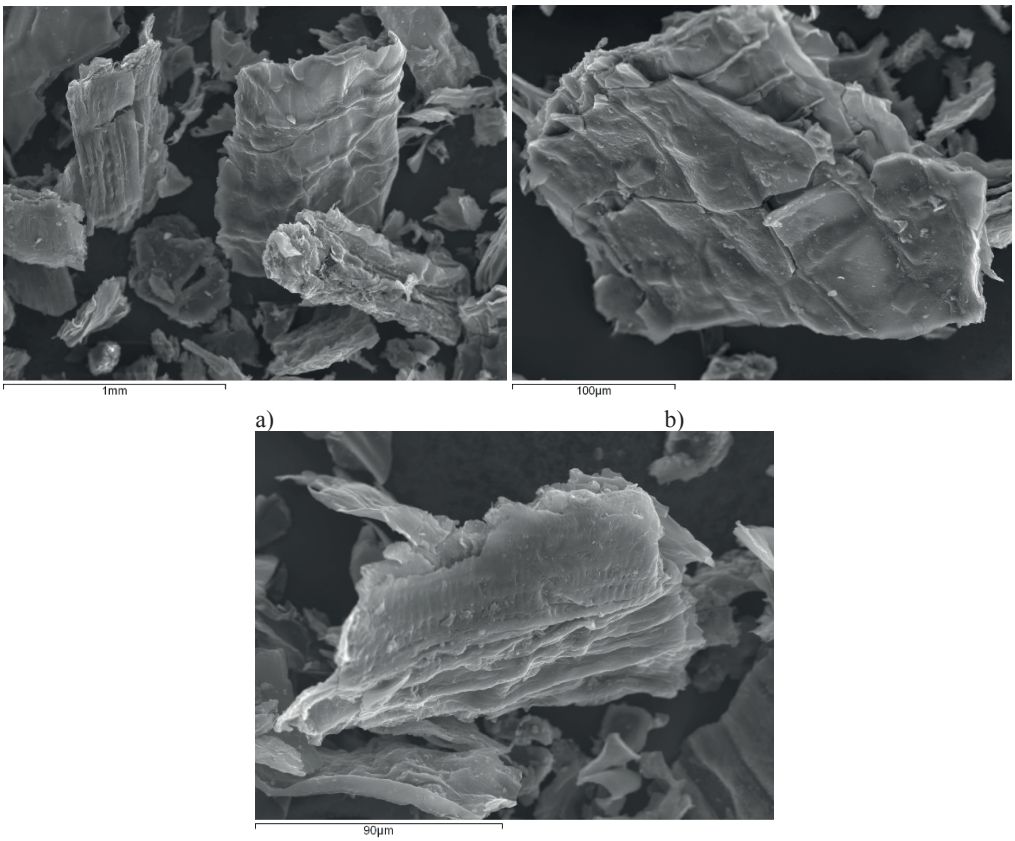
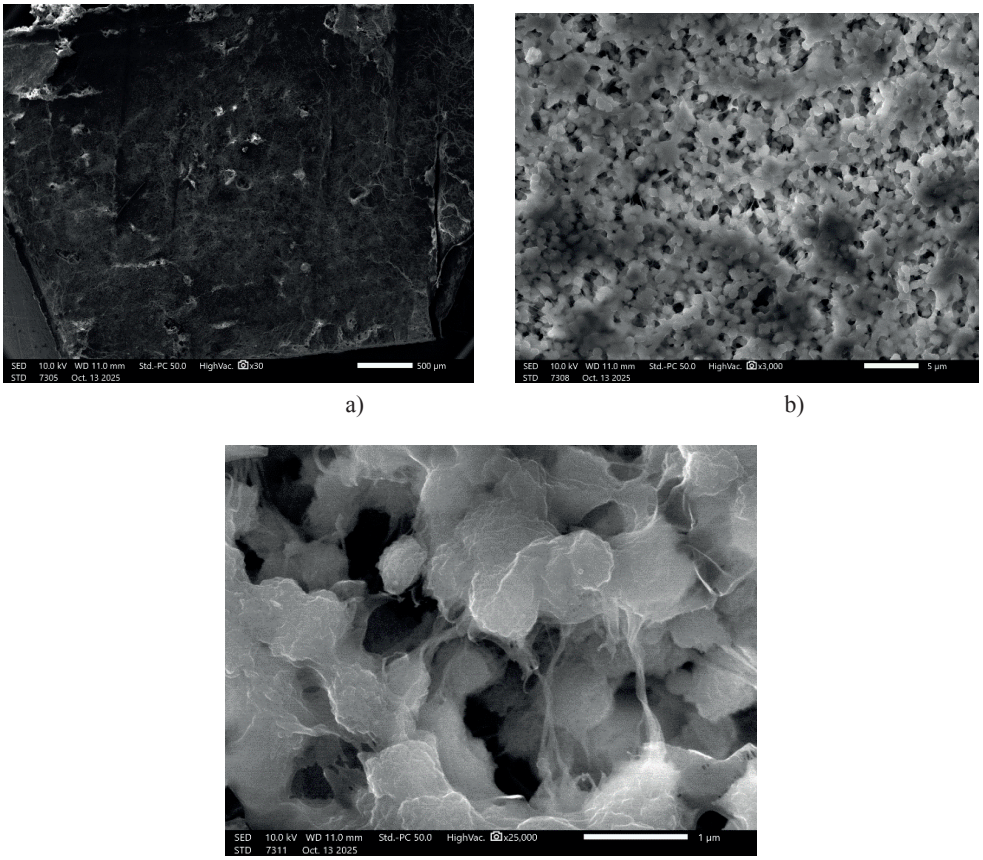


Figure 7 - SEM micrographs of the synthesized activated carbons from corncob (AC-CN) a) x250, b) x370 c) x600.

SEM images of AC-CN powder show a rough, highly textured particle surface: irregularities, cellular structures and local depressions/cracks are visible. Such a surface is typical for activated materials with pronounced microporosity and enlarged external irregularities, which provide additional external surface area. The images (Figure 7) also show thin ‘plates’ and microcracks, which can occur during carbonization/activation and indicate the layered nature of the original precursor (Portillo E., et al, 2025).



a) b)

c)

Figure 8 - SEM micrographs of the synthesized membranes with AC matrix (AC-CN_membrane) a) x30, b) x3000 c) x2500.

Scanning electron microscope (SEM) images of the water-coagulated membrane demonstrate the typical morphology of rapid phase separation: a dense 'skin crust' on the surface and a more porous sub-threshold layer. The surface is relatively smooth with isolated irregularities and rare protrusions, indicating the onset of surface sealing during coagulation. Cross-sections clearly show the contrast between the thin, dense surface film and the porous sub-layer. The pores under the crust are often narrow and partially closed, which indicates limited connectivity of the pore network on the surface (Ribeiro R. S. et al., 2022; Y. Wang et al., 2020).

The distribution of AC-CN particles in the matrix is heterogeneous; both uniformly encapsulated particles in close contact with the polymer and local agglomerates are present. At low magnification (Figure 8a), the textured outer surface can be seen, which is caused by the irregular external surfaces of the carbon particles and the peculiarities of phase inversion. At higher magnifications (Figures 8b and 8c), fine cracks and micron-sized depressions typical of carbon particles after heat treatment and the carbonisation of the raw material are visible.

CC BY NC

Polymeric mixed matrix membranes in a continuous system. The synthesised AC-CN filler demonstrated a high specific surface area (S_{BET} ≈ 462 m²/g) and significant adsorption capacities in powder form (PCM ≈ 20.26 mg/g), which justified its selection for the preparation of mixed membrane matrices. However, the transfer of the powder's adsorption properties to the membrane structure was limited — when testing a circular section of the membrane (area 2.10 cm²), the total percentage removal of paracetamol was low (≈13.8%), which indicates the limited availability of activated carbon mass in the section involved in the experiment. The results for adsorption of paracetamol and 4-nitrophenol with the AC-CN_membrane are presented in Figures 9 and 10.

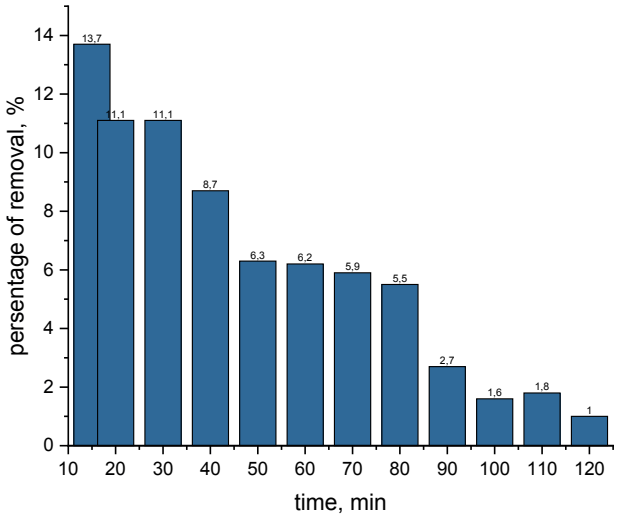


Figure 9 - Continuous experiments with AC-CN_membrane for paracetamol adsorption
Conditions: C_0 = 10 mg/L, flow= 0.5 mL/min, pH = 6.8, T= room temperature.

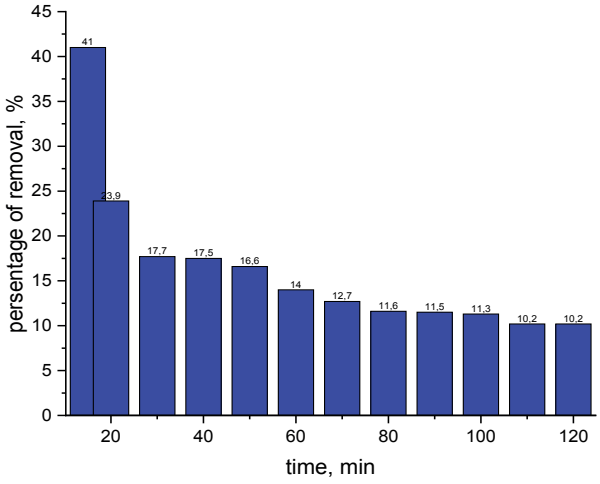


Figure 10 - Continuous experiments with AC-CN_membrane for 4-nitrophenol adsorption
Conditions: C_0 = 10 mg/L, flow = 0.5 mL/min, pH = 6.8, T= room temperature.

The results for adsorption paracetamol and 4-nitrophenol with AC-CN_IPA are presented in Figures 11 and 12.

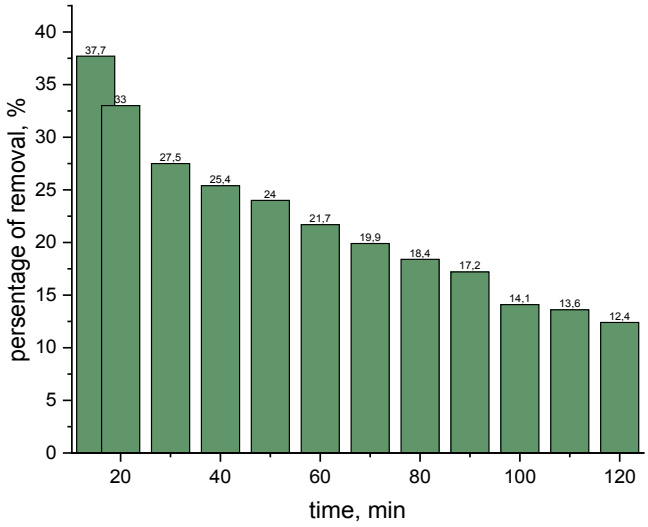


Figure 11 - Continuous experiments with AC-CN_IPA for 4-nitrophenol adsorption
Conditions: C_0 = 10 mg/L, flow = 0.5 mL/min, pH = 6.8, T= room temperature.

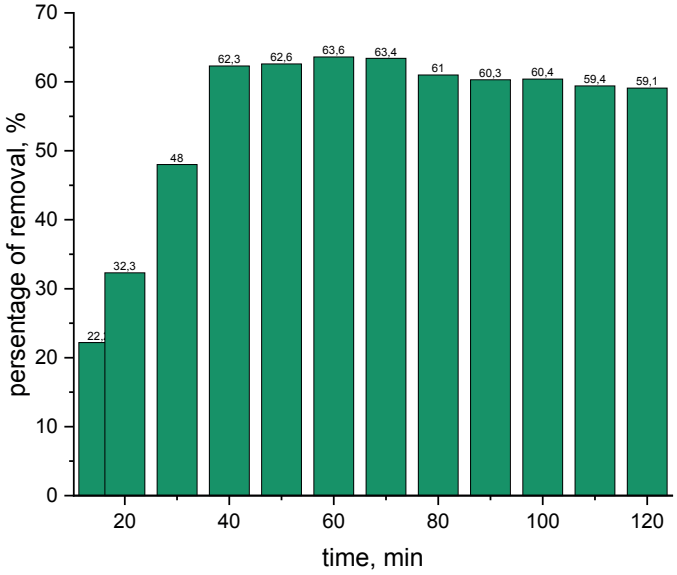


Figure 12 - Continuous experiments with AC-CN_IPA for paracetamol adsorption
Conditions: C_0 = 10 mg/L, flow = 0.5 mL/min, pH = 6.8, T= room temperature

A comparison of the two coagulation modes revealed a significant influence of the bath composition on the adsorption kinetics. Figures 10 and 11 show that in the first 15 minutes, the sample coagulated in water (AC-CN_membrane) showed a slightly

CC BY NC

higher initial removal 'spike' (≈40.9% vs. 37.7% for AC-CN_IPA), while in the 20–60 min interval, the membrane formed in H_2O/IPA (70:30) showed a stable advantage in contaminant retention (approximately 33.0 → 21.7%), whereas the values for water coagulation fell faster (≈23.8 → 14.0%) (Moraes E., et al., 2023). A similar trend was observed for paracetamol adsorption (Figures 9 and 12): although the membrane coagulated in water (Figure 9) exhibited a limited overall removal (≈13.8%), the AC-CN-IPA membrane (Figure 12) showed a markedly improved and more stable performance, with a rapid increase in removal efficiency during the first 40–60 minutes and a plateau around 60–64% under continuous-flow conditions. This behaviour indicates that the presence of IPA in the coagulation bath enhances the effective utilisation of the carbon filler within the polymeric matrix, promoting sustained access to sorption sites even for a less strongly interacting compound such as paracetamol. This dynamic is consistent with the fact that the composition of the coagulation bath determines the morphology and pore structure of the membrane: an IPA-containing bath likely forms a more porous and open network or improves the exposure of the active centres of the carbon filler, increasing the long-term availability of sorption sites, whereas rapid coagulation in water can lead to the formation of a dense surface crust with limited internal diffusion (Wang Y. et al., 2020).

The relative standard deviation (RSD) of measurements did not exceed ≈1% and varied within approximately 0.6–1.0%, indicating good repeatability of the analytical method.

The difference in behaviour towards paracetamol and 4-nitrophenol highlights the role of the chemical nature of the contaminant: 4-nitrophenol, containing a hydroxyl group, exhibits more favourable interactions with the actiavted carbon surface (hydrogen bonds, π–π interactions), which explains the observed differences in adsorption between the two pollutant models.

Conclusion. This work successfully synthesised PVDF polymeric membranes modified with AC-CN activated carbon. The validated textural characteristics of these membranes (S_{BET} = 462 $m^2 \cdot g^{-1}$, V_{micro} = 0.182 $cm^3 \cdot g^{-1}$, micropore fraction = 81%) confirm their substantial sorption potential. The phase inversion process employing distinct coagulation baths yielded membranes with different morphologies: coagulation in distilled water produced a denser surface that limited contaminant access, whereas the H_2O/IPA (70:30) system fostered greater porosity and permeability. These structural differences directly impacted sorption efficiencies. Notably, the water-coagulated membrane exhibited minimal paracetamol removal (approximately 13.8%), whereas the AC-CN-IPA membrane achieved significantly higher and more stable paracetamol capture (approximately 60–64% within 60 minutes), suggesting improved pore accessibility. For 4-nitrophenol, the initial removal differences (40.9% vs 37.7%) were less pronounced than the sustained retention observed for the AC-CN_IPA membrane (33.0% to 21.7% over 20–60 minutes), indicating a more robust interaction. These results definitively demonstrate that the composition of the coagulation baths plays a critical role in controlling membrane morphology and consequently the accessibility of AC-CN sorption sites. Furthermore, the chemical nature of the contaminant plays

a differential role: 4-nitrophenol appears to engage in more favourable specific interactions with carbon fillers, whereas paracetamol removal is more sensitive to pore access. This study confirms the influence of coagulation bath composition on membrane structure–property relationships and validates the potential of PVDF/AC-CN composite membranes for effectively removing diverse organic pollutants, offering a promising approach to sustainable water treatment. Future research should focus on optimising these parameters further and exploring their efficacy against a broader spectrum of CECs.

References

Abdykadyrov A., Abdullayev S., Kuttybayeva A., Marxuly S., Izbairova A., Altayeva Z. & Ermanova D. (2025). Wastewater treatment technologies using electrical discharge after processing of mineral raw materials. Mining of Mineral Deposits. https://doi.org/10.33271/mining19.02.121 (in Eng.).

Adetunji A., & Olaniran A. (2021). Treatment of industrial oily wastewater by advanced technologies: a review. Applied Water Science, 11. https://doi.org/10.1007/s13201-021-01430-4 (in Eng.).

Ahmed M., Mavukkandy M., Giwa A., Elektorowicz M., Katsou E., Khelifi O., Naddeo V., & Hasan S. (2022). Recent developments in hazardous pollutants removal from wastewater and water reuse within a circular economy. npj Clean Water, 5. https://doi.org/10.1038/s41545-022-00154-5 (in Eng.).

Álvarez-Torrellas S., Rodríguez A., Ovejero G., García J. Comparative adsorption performance of ibuprofen and tetracycline from aqueous solution by carbonaceous materials. Chemical Engineering Journal. – № 283 (2016). – P. 936–947. http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2015.08.023 (in Eng.).

Arabloo F. and Javadpour S. (2025). Optimization of PES-based Hollow fiber membranes incorporating MgO-modified activated carbon via response surface methodology for enhanced pure water permeability. Scientific reports, 151, 30044. https://doi.org/10.1038/s41598-025-15140-3 (in Eng.).

Bedane A., Guo T., Shirani B., and Xiao H. (2023). Textural characteristics of activated carbons prepared from agricultural residues□review. The Canadian Journal of Chemical Engineering. https://doi.org/10.1002/cjce.24960 (in Eng.).

Bekenova L., Shtykova I. and Kuzmina N. (2024). Application of innovative technologies in the field of wastewater treatment: foreign and kazakhstani experience. Statistika, učet i audit. https://doi.org/10.51579/1563-2415.2024.-3.14. (in Eng.).

Bibi F., Hussain R., Iqbal N., Saeed S., Waseem M., Elkaeed E.B., Al-Anazy M.M., Haq S., Chemical activation and magnetization of onion waste derived carbon for arsenic removal, Arab. J. Chem. – № 16 (2023). – P. 105118. https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2023.105118 (in Eng.).

Kalmakhanova M.S., Kurtebayeva A.A., Tleuova Z.T., Satybaldiev B., Orynbayev S.A., Malakar A., Gomes H.T., Snow D.D. Environmental Impact of Wastewater on Surface and Groundwater in Central Asia. Sustainability 2025. – № 17. – P. 5370. https://doi.org/10.3390/su17125370 (in Eng.).

Mao G., Han Y., Liu X., Crittenden J., Huang N., and Ahmad U. (2021). Technology status and trends of industrial wastewater treatment: A patent analysis. Chemosphere, 132483. https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.132483 (in Eng.).

Moraes E., Da Silva A., De Tuesta J., Silva A., Orssatto F., and Gomes H. (2023). Production of Polymeric Membranes Based on Activated Carbons for Wastewater Treatment. The 4th International Electronic Conference on Applied Sciences. https://doi.org/10.3390/asec2023-16874 (in Eng.).

Ntone E., Samah R., Wahab M., Alsalhy Q. and Rahman S. (2025). Review of PPCPs remediation in Asia: the role of agricultural waste in adsorption-membrane hybrid technology. Chemical Engineering Communications, 212. – P. 1132 - 1166. https://doi.org/10.1080/00986445.2024.2447843 (in Eng.).

Ospanov K., Kuldeyev E., Kenzhaliyev B. and Korotunov A. (2022). Wastewater Treatment Methods and Sewage Treatment Facilities in Almaty, Kazakhstan. Journal of Ecological Engineering. https://doi.org/10.12911/22998993/143939 (in Eng.).

Portillo E., Flores S., Carrizosa R., Álvarez-Torrellas S., Carbajo J., Águeda V.I., García J., Sustainable adsorbents from sewage sludge: Efficient removal of cytostatic compounds in single and complex aqueous matrices, J. Environ. Chem. Eng. – № 13 (2025). – P. 116927. https://doi.org/10.1016/j.jece.2025.116927 (in Eng.).

Rui S. Ribeiro, Octavia Vieira, Rita Fernandes, Fernanda F. Roman, Jose L. Diaz de Tuesta, Adrian M.T. Silva, Helder T. Gomes. Synthesis of low-density polyethylene derived carbon nanotubes for activation of persulfate and degradation of water organic micropollutants in continuous mode. Journal of Environmental Management. – № 308 (2022). – P. 114622. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2022.114622 (in Eng.).

Santos M., Silva J., Fontan R., Bonomo R., Santos L. and Veloso C. (2020). New insight about the relationship between the main characteristics of precursor materials and activated carbon properties using multivariate analysis. Canadian Journal of Chemical Engineering, 98. – P. 1501-1511. https://doi.org/10.1002/cjce.23721 (in Eng.).

Secondes M., Naddeo V., Belgiorno V. and Ballesteros F. (2014). Removal of emerging contaminants by simultaneous application of membrane ultrafiltration, activated carbon adsorption, and ultrasound irradiation. Journal of hazardous materials, 264. – P. 342-349. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2013.11.039 (in Eng.).

Sousa É., Otero M., Rocha L., Gil M., Ferreira P., Esteves V. and Calisto V. (2022). Multivariable optimization of activated carbon production from microwave pyrolysis of brewery wastes - Application in the removal of antibiotics from water. Journal of hazardous materials, 431, 128556. https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2022.128556 (in Eng.).

Ţucureanu V., Matei A., Avram A.M., FTIR Spectroscopy for Carbon Family Study, Crit. Rev. Anal. Chem. 46 (2016). – P. 502-520. https://doi.org/10.1080/10408347.2016.1157013 (in Eng.).

Yang Wanga, Gui-E Chena, Hai-Ling Wua, Zhen-Liang Xub, Jia-Jun Wana, Lian-Jing Liua, Sun-Jie Xub, Ya-Fang Konga, Qiong Wua, Jun Mina, Hai-Fang Maoa. Fabrication of GO-Ag/PVDF/F127 modified membrane IPA coagulation bath for catalytic reduction of 4-nitrophenol. Separation and Purification Technology. – № 235 (2020). – P. 116143. https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.116143 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 350–365

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.425

UDC: 665.6;66.097;541.128
IRSTI: 35.15.28, 61.51.17

©Massenova A.T.*, Zhumakanova A.S., Torlopov I.I., Rakhmetova K.S., Abilmagzhanov A.Z., 2026.
D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: almasenova@mail.ru

OPTIMIZATION OF THE HIERARCHICAL ZEOLITE ZSM–5 SYNTHESIS PROCESS BY STEAM-ASSISTED ALKALINE MODIFICATION

Massenova Alma — Doctor of Chemical Sciences, Chief Researcher, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: almasenova@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-2251-0549;
Zhumakanova Ardak — Candidate of Chemical Sciences, Leading Researcher, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: zhumakanova62@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4983-4199;
Torlopov Ivan — Junior Researcher, Sector of Design of Technological Processes, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: myndfrea@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9660-6397;
Rakhmetova Kenzhegul — Researcher, Sector of Modeling of Technological Processes, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: rahmetova_75@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2098-3169;
Abilmagzhanov Arlan — Candidate of Chemical Sciences, First Deputy General Director, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: a.abilmagzhanov@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2931-9640.

Abstract. The work experimentally substantiates the conditions for producing hierarchical ZSM–5 zeolite by steam-assisted alkaline modification of a commercial zeolite in the presence of polyethylene glycol (PEG) in order to select reproducible treatment regimes that ensure controlled changes in structural characteristics while preserving the original framework. A series of experiments of ZSM–5 modification was carried out by varying the treatment time, PEG molecular weight, and the amount of NaOH. Structural changes were evaluated by X-ray diffraction and FTIR spectroscopy, and morphology was examined by scanning electron microscopy. It was established that increasing the treatment duration within the investigated range leads to a higher degree of framework disordering in ZSM–5 and enhances dissolution-recrystallization effects, while excessive modification time results in framework destruction. An increase in PEG molecular weight strengthens the modifying action of the medium and is manifested in

CC BY NC

more pronounced structural and morphological changes, indicating the role of PEG as a soft templating agent. It was also found that increasing the NaOH amount intensifies structural disordering and, at excessive alkalinity, causes framework destruction due to desilication, as confirmed by a sharp change in elemental composition. The optimal parameter range was selected based on a balance between preserving crystallinity and forming secondary porosity and is as follows: recrystallization time 6 h, PEG-10000, 2 g NaOH. The obtained results may be used to identify mild regimes for hierarchical modification of specific high-silica zeolite systems.

Keywords: ZSM–5 zeolite; hierarchical structure; steam-assisted alkaline treatment; polyethylene glycol; soft templating agent

Financing. *The work was conducted with financial support from the target-funded program of MSHE RK, BR24992995, "Establishing scientific foundations for the development of new composite catalytic systems with improved properties based on transition and rare-earth metals".*

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 350–365. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.425*

©Масенова А.Т.*, Жұмақанова А.С., Торлопов И.И., Рахметова К.С., Абильмагжанов А.З., 2026.
Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан.
E-mail: almasenova@mail.ru

ZSM-5 ИЕРАРХИЯЛЫҚ ЦЕОЛИТІН БУМЕН СІЛТІЛІ МОДИФИКАЦИЯЛАУ АРҚЫЛЫ АЛУ ПРОЦЕСІН ОҢТАЙЛАНДЫРУ

Масенова Алма — химия ғылымдарының докторы, бас ғылыми қызметкер, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: almasenova@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-2251-0549;
Жумақанова Ардақ — химия ғылымдарының кандидаты, жетекші ғылыми қызметкер, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: zhumakanova62@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4983-4199;
Торлопов Иван — кіші ғылыми қызметкер, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: myndfrea@gmail.com, https://orcid.org/0000- 0001-9660-6397;
Рахметова Кенжегүл — ғылыми қызметкер, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: rahmetova_75@mail.ru, https://orcid. org/0000-0002-2098-3169;
Әбілмағжанов Арлан — химия ғылымдарының кандидаты, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институтының бас директоры, Алматы, Қазақстан,
E-mail: a.abilmagzhanov@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2931-9640.

Аннотация. Жұмыста бастапқы қаңқаны сақтай отырып, құрылымдық сипаттамалардың басқарылатын өзгеруін қамтамасыз ететін қайталанатын өңдеу режимдерін таңдау мақсатында полиэтиленгликоль (ПЭГ) қатысуымен Тауарлық цеолитті бумен сілтілі модификациялау арқылы ZSM–5 иерархиялық цеолитін алу шарттары эксперименталды түрде негізделген. ZSM–5 цеолитін өңдеу уақыты, Peg молекулалық массасы және NaOH мөлшері бойынша өзгерту бойынша бірқатар эксперименттер жүргізілді. Құрылымның өзгеруі рентгендік фазалық талдау және ИҚ-спектроскопия, морфология — сканерлеуші электронды микроскопия әдісімен бағаланды; процесс режимдерін бақылау үшін элементтік талдау деректері пайдаланылды. Зерттелген аралықта өңдеу ұзақтығының артуы ZSM–5 құрылымының реттелу дәрежесінің жоғарылауына және еру-қайта кристалдану әсерінің жоғарылауына әкелетіні анықталды, ал артық модификация уақыты раманың бұзылуына әкеледі. Peg молекулалық массасының жоғарылауы ортаның модификациялық әсерін күшейтеді және неғұрлым айқын құрылымдық және морфологиялық өзгерістерде көрінеді, бұл Peg-тің жұмсақ темплат агенті ретіндегі рөлін көрсетеді. NaOH мөлшерінің ұлғаюы құрылымның бұзылу дәрежесін күшейтетіні және сілтінің артық болуымен десиляция арқылы қаңқаның бұзылуына әкелетіні анықталды, бұл элементтік құрамның күрт өзгеруімен расталады. Жоғары кремнийлі ZSM–5 үшін қышқыл сатысын енгізу кристалдылықтың жеделдетілген деградациясына байланысты практикалық емес екендігі бөлек көрсетілген. Параметрлердің оңтайлы диапазоны кристалдылықты сақтау мен қайталама кеуекті құрылымды қалыптастыру арасындағы тепе-теңдік бойынша таңдалды және келесідей: қайта кристалдану уақыты 6 сағат, PEG-10000, 2 г NaOH. Алынған нәтижелер белгілі бір жоғары кремнийлі цеолит жүйелерінің иерархиялық модификациясының жұмсақ режимдерін табу үшін пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: ZSM-5 цеолиті; иерархиялық құрылым; бу фазасындағы сілтілік өңдеу; полиэтиленгликоль; темплаттық агент

©Масенова А.Т.*, Жұмақанова А.С., Торлопов И.И., Рахметова К.С., Абильмагжанов А.З., 2026.
Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан.
E-mail: almasenova@mail.ru

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ ИЕРАРХИЧЕСКОГО ЦЕОЛИТА ZSM-5 ПАРОВОЙ ЩЕЛОЧНОЙ МОДИФИКАЦИЕЙ

Масенова Алма — доктор химических наук, главный научный сотрудник, Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,
E-mail: almasenova@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-2251-0549;
Жумаканова Ардак — кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник, Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,
E-mail: zhumakanova62@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4983-4199;

Торлопов Иван — младший научный сотрудник, Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,
E-mail: myndfrea@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9660-6397;
Рахметова Кенжегуль — научный сотрудник, Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,
E-mail: rahmetova_75@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2098-3169;
Абильмагжанов Арлан — кандидат химических наук, Генеральный директор Института топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,
E-mail: a.abilmagzhanov@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2931-9640.

Аннотация. В работе экспериментально обоснованы условия получения иерархического цеолита ZSM-5 методом парощелочной модификации товарного цеолита в присутствии полиэтиленгликоля (ПЭГ). Целью исследования являлся подбор воспроизводимых режимов обработки, обеспечивающих управляемое изменение структурных характеристик при сохранении исходного каркаса. Проведены серии экспериментов по модификации цеолита ZSM-5 с варьированием продолжительности обработки, молекулярной массы ПЭГ и количества NaOH. Изменения структуры оценивали методами рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии, морфологию - методом сканирующей электронной микроскопии, а для контроля режимов процесса использовали данные элементного анализа. Установлено, что увеличение продолжительности обработки в исследованном интервале приводит к возрастанию степени разупорядочения структуры ZSM-5 и усилению процессов растворения–перекристаллизации, тогда как чрезмерное увеличение времени модификации вызывает разрушение каркаса. Повышение молекулярной массы ПЭГ усиливает модифицирующее действие среды и проявляется в более выраженных структурных и морфологических изменениях, что указывает на роль ПЭГ как мягкого темплатообразующего агента. Показано, что увеличение количества NaOH повышает степень разупорядочения структуры и при избытке щелочи приводит к разрушению каркаса вследствие десилицирования, что подтверждается резким изменением элементного состава. Отдельно установлено, что введение кислотной стадии при обработке высококремнистого ZSM-5 нецелесообразно ввиду ускоренной деградации кристалличности. Оптимальный диапазон параметров определен на основе баланса между сохранением кристалличности и формированием вторичной пористой структуры и включает следующие условия: время рекристаллизации - 6 ч, ПЭГ-10000, NaOH - 2 г. Полученные результаты могут быть использованы при разработке мягких режимов иерархической модификации высококремнистых цеолитных систем.

Ключевые слова: цеолит ZSM–5; иерархическая структура; паровая щелочная обработка; полиэтиленгликоль, темплатный агент

Введение. Иерархические цеолиты, сочетающие микропористую каркасную структуру с дополнительными транспортными мезо- и макропорами, сегодня рассматриваются как один из наиболее практичных путей модификации цеолитных

материалов в технологии катализаторов, позволяющих обеспечить высокие активность и селективность. Микропоры обеспечивают требуемые для катализа кислотно-основные активные центры, тогда как вторичная пористость снижает диффузионные ограничения, повышая доступность структуры цеолита и улучшая транспорт реагентов и продуктов. При этом эффективность такой модификации определяется не только самим фактом появления мезопор, но и согласованностью микропористой и мезопористой подсистем в составе общей пористой структуры. Последнее требует управляемых и воспроизводимых методик получения таких материалов при сохранении исходного каркаса и высокой кристалличности (Chen, et al., 2020; Lee, et al., 2024).

Подходы к созданию иерархических цеолитов условно делят на «восходящие» (bottom-up) и «нисходящие» (top-down). «Восходящие» методы нацелены на формирование иерархии еще на стадии синтеза за счет контролируемого роста кристаллов, самоорганизации или конструирования требуемой морфологии. Так, развитие получили концепции мезокристаллов и связанные с ними подходы к управлению многоуровневой организацией пористой структуры (Zeng, et al., 2025; Zhao, et al., 2017). Для цеолитов семейства MFI, включая ZSM–5, описаны решения, основанные на формировании тонких кристаллических «листов» или слоистых гибридов, что сокращает длину диффузионного пути и повышает внешнюю поверхность при сохранении каркасной природы (Jeon, et al., 2017; Zhang, et al., 2012). Дополнительно активно развиваются подходы с использованием затравок и «зеленые» варианты направленного синтеза, позволяющие получать иерархически организованные агрегаты нанокристаллов и задавать морфологию и пористость через подбор условий зародышеобразования и роста (Chen, et al., 2018; Zhang, et al., 2017). Достоинство «восходящих» стратегий - потенциально более тонкая настройка архитектуры пор и морфологии; ограничения - многостадийность, чувствительность к условиям модифицирования и значительно более сложная масштабируемость.

В рамках «нисходящих» стратегий иерархическая пористость формируется чаще всего через контролируемое растворение или травление отдельных компонентов каркаса и последующую перекристаллизацию или перестройку структуры. Наиболее распространенный вариант - щелочная обработка (десилицирование), которая может приводить к появлению мезопор и росту внешней поверхности. Однако в литературе подчеркивается, что «жесткость» режима (концентрация и количество щелочи, температура, время, состав среды) критически влияет на баланс между полезным формированием вторичной пористости и нежелательным разрушением кристаллической структуры цеолита: при избытке щелочи возрастает риск избыточного растворения и роста дефектности (Chal, et al., 2011; Verboekend, et al., 2012). Поэтому практическая ценность «нисходящих» методов иерархизации напрямую определяется поиском воспроизводимых режимов, позволяющих сохранить тип каркаса и избежать перехода в область разрушения структуры.

Важную роль в управлении процессами иерархизации играют темплатные

CC BY NC

агенты и органические добавки, которые могут направлять формирование пористой архитектуры и стабилизировать промежуточные структурные состояния. В ряде работ показано, что направленное превращение цеолитов в иерархизированные структуры возможно при использовании органических агентов и/или ПАВ, позволяющих «конструировать» развитие мезопористости и контролировать морфологию (Na, et al., 2011). Для ZSM–5 описаны примеры получения мезопористых материалов с развитой трехмерной системой пор на основе самоорганизации катионных ПАВ, что демонстрирует возможность сочетать сохранение каркаса и формирование дополнительной мезопористой структуры (Singh, et al., 2014). Подходы темплатного наноструктурирования с использованием ПАВ рассматриваются как перспективный инструмент, применимый к различным цеолитным системам при корректном подборе условий (Al-Ani, et al., 2019).

Отдельного внимания заслуживает использование полиэтиленгликоля (ПЭГ) как мягкого структуронаправляющего и порообразующего компонента. Для кремнеземных материалов хорошо описано влияние молекулярной массы ПЭГ и условий синтеза на формирование пористой структуры и морфологии, что делает ПЭГ удобным регулятором пористости в водных системах (Яцковская, и др., 2013; Gorbunova, et al., 2014). Также имеются примеры применения ПЭГ, где последний ведет себя как мягкий темплатный агент, способный влиять на процессы растворения и последующей перекристаллизации и, как следствие, на итоговую структуру пор (Mardiana, et al., 2025). Это обуславливает актуальность разработки комбинированных схем модификации в присутствии ПЭГ, которые могли бы объединять технологичность пост-синтетических подходов и управляемость темплатного воздействия.

В настоящей работе приводятся результаты исследований по экспериментальному обоснованию режимов синтеза иерархических цеолитов посредством паровой обработки в присутствии ПЭГ на примере цеолита ZSM–5, обеспечивающих изменение его структурных характеристик при сохранении исходного цеолитного каркаса.

Материалы и основные методы. Для обоснования режимов синтеза иерархических цеолитов использовали цеолит ZSM–5 (NH_4-форма, Si:Al = 80, средний диаметр пор 0,54 нм, удельная поверхность 425 м^2/г), а также материалы и реактивы, представленные в таблице 1.

Таблица 1 – Материалы, использовавшиеся при отработке методики рекристаллизации

Материал	*Квалификация*	*Формула*	*НТД*
Кислота лимонная	«ч.д.а.»	$C_3H_5O(COOH)_3$	ГОСТ 3652–69
Натрия гидроокись	«х.ч.»	NaOH	ГОСТ 4328–77
Кислота лимонная	«ч.д.а.»	$C_3H_5O(COOH)_3$	ГОСТ 3652–69
Полиэтиленгликоль–115	«имп.»	$C_{2n}H_{4n+2}O_{n+1}$	-
Полиэтиленгликоль–4000			
Полиэтиленгликоль–10000			

Аммоний азотнокислый	«х.ч.»	NH_4NO_3	ГОСТ 22867–77
Вода дистиллированная	-	H_2O	ГОСТ 6709–72

При синтезе использовалась методика, описанная в (Масенова, и др., 2025).

Исходные цеолиты обрабатывали следующим образом: навеску цеолита (5,0 г) помещали в воду (50 см^3), pH суспензии доводили до ~ 5,5–5,7 с помощью водного аммиака. Далее суспензию перемешивали с 10%-ной лимонной кислотой в течение 1 ч при комнатной температуре. После центрифугирования и промывки дистиллированной водой порошок отделяли и сушили 1 ч при комнатной температуре.

Паровая щелочная обработка проводилась в следующем порядке: цеолит суспендировали в растворе, содержащем 0,50 г NaOH и 2,60 г полиэтиленгликоля (ПЭГ). Смесь выдерживали в течение 8 ч при 80–100°C, для чего во избежание испарения воды использовали термостатируемую установку, составленную из колбы с магнитной мешалкой, соединенной с вертикальным холодильником.

Катионообменную обработку цеолита проводили для замены катиона цеолита с использованием азотнокислого аммония NH_4NO_3 с концентрацией 1 М в течение 1–2 ч при температуре 80°C.

После паровой и катионообменной обработки осуществляли отделение ПЭГ из маточного раствора, фильтрование осадка, сушка и прокаливание образцов. По окончании введения ПЭГ порошок отделяли двукратным фильтрованием горячего раствора на фильтре «Синяя лента», промывался и сушился в течение ночи. Для удаления ПЭГ образец прокаливали в печи при 450°C в течение 1 ч, затем температура в печи увеличивали до 550°C, образец выдерживали при этой температуре 2 ч.

Исходные и обработанные образцы исследовали рядом физико-химических методов:

– рентгенофазового анализа (РФА) на дифрактографе ДРОН–4–07;

– ИК-спектроскопии (ИКС) на ИК-спектрометре Nicolet iS5;

– сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на микроскопе JEOL JES–ME–3X.

Результаты и обсуждение. Известно, что в общем случае влияние кислотной обработки даже в отсутствие жестких условий модификации ведет к необратимым изменениям в структуре вплоть до ее разрушения. В этой связи предварительно было изучено влияние кислотной стадии в рамках комбинированного синтеза с целью проверки ее необходимости применительно к цеолиту марки ZSM–5.

По описанной выше методике были синтезированы три образца:

– без обработки лимонной кислотой перед щелочной и катионообменной стадиями;

– с обработкой лимонной кислотой в течение 0,5 ч;

– с обработкой лимонной кислотой в течение 1 ч.

Полученные образцы исследовались методами РФА и ИКС. Результаты исследования представлены на рисунках 1 и 2.

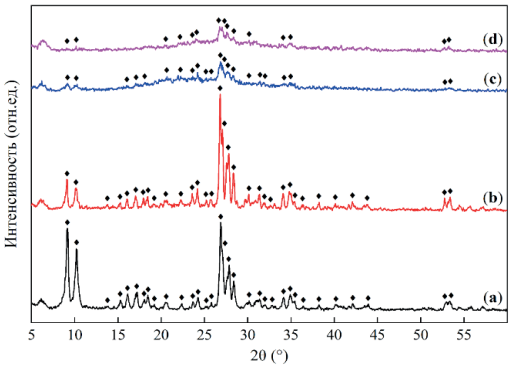


Рисунок 1 – Дифрактограммы образцов (a) исходного цеолита ZSM–5 и ZSM–5, обработанного: (b) без стадии с ЛК; (c) 0,5 ч ЛК; (d) 1 ч ЛК (♦ – ZSM–5)

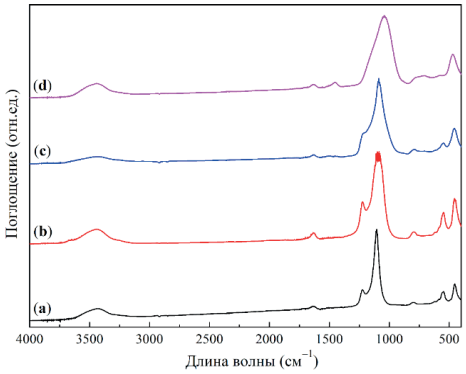


Рисунок 2 – ИК-спектры образцов (a) исходного цеолита ZSM–5 и ZSM–5, обработанного: (b) без стадии с ЛК; (c) 0,5 ч ЛК; (d) 1 ч ЛК

Все образцы (рисунок 1) представляют собой фазово-чистый цеолит ZSM–5 (JCPDS 43–322). Паровая кислотная обработка образцов цеолита ZSM–5 с использованием лимонной кислоты совместно с последующей щелочной обработкой приводит к значительной аморфизации структуры цеолита даже при малом времени обработки: пики уширяются, интенсивность их падает, значительно вырастает аморфный фон. Это подтверждается в том числе данными ИКС (рисунок 2), где также наблюдается значительное уширение полос поглощения в области 1225 $см^{-1}$, соответствующих колебаниям решетки цеолита. В связи с этим исходная методика модификации цеолита была модифицирована применительно к ZSM–5 путем исключения первичной стадии кислотной обработки.

Дальнейшее исследование влияния условий паровой щелочной обработки на характеристики получаемых иерархических цеолитов вели путем варьирования двух основных параметров:

– продолжительности обработки;

– типа прекурсора-темплатного агента (ПЭГ различной молекулярности);

– количества NaOH.

Дополнительно исследовалось влияние времени обработки на характеристики цеолита.

Результаты анализов исходного и обработанных образцов методами РФА и ИКС в зависимости от времени обработки и молекулярного числа ПЭГ представлены на рисунках 3–6 соответственно.

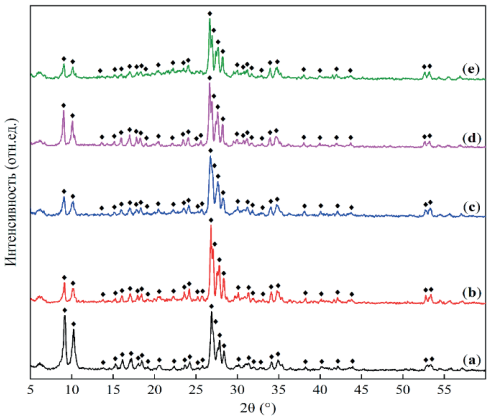


Рисунок 3 – Дифрактограммы образцов исходного цеолита ZSM–5 (a) и ZSM–5 после рекристаллизации: (b) 1 ч; (c) 2 ч; (d) 4 ч; (e) 6 ч (♦ – ZSM–5)

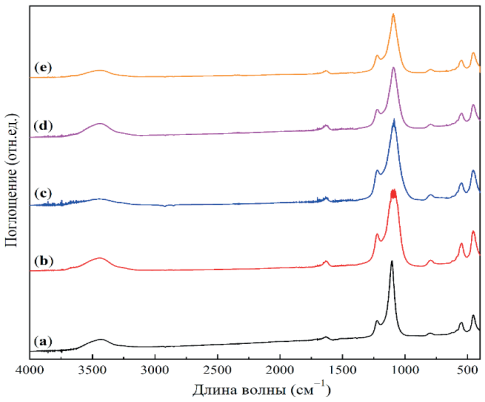


Рисунок 4 – ИК-спектры образцов исходного цеолита ZSM–5 (a) и ZSM–5 после рекристаллизации: (b) 1 ч; (c) 2 ч; (d) 4 ч; (e) 6 ч

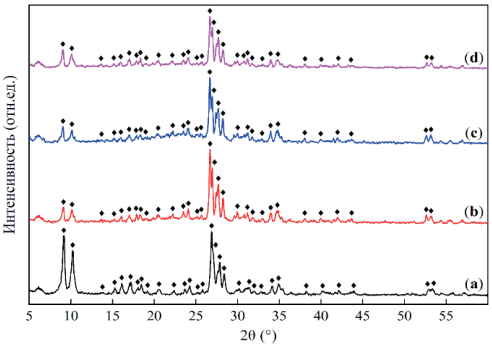


Рисунок 5 – Дифрактограммы образцов исходного ZSM–5 (a) и ZSM–5 после рекристаллизации в течение 6 ч с использованием: (b) ПЭГ–115; (c) ПЭГ–4000; (d) ПЭГ–10000 (♦ – ZSM–5)

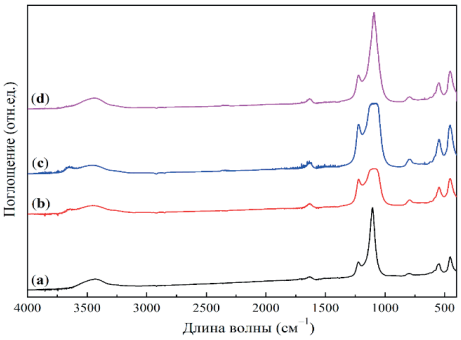


Рисунок 6 – ИК-спектры образцов исходного ZSM–5 (a) и ZSM–5 после рекристаллизации в течение 6 ч с использованием: (b) ПЭГ–115; (c) ПЭГ–4000; (d) ПЭГ–10000

На рисунках 3 и 5 представлены данные анализа исходных образцов методом РФА. Из этих данных можно утверждать, что обработка цеолита не привела к значительной аморфизации: на дифрактограммах не наблюдается явных изменений. Аналогично, ИК-спектры ZSM–5, модифицированного ПЭГ (рисунки 4 и 6) имеют полосы при 550, 788, 1105 и 1225 $см^{-1}$, присущие каркасу цеолита ZSM–5. Ключевая полоса (валентные колебания пятичленного кольца) при 550 $см^{-1}$ не изменяется, что подтверждает сохранение каркаса цеолита при обработке, полос поглощения, присущих другим фазам, на спектре не наблюдается. Изменения полосы при 1225 $см^{-1}$ при варьировании молекулярного числа ПЭГ, вероятно, связаны с перепоглощением или соответствуют нежелательному процессу перехода фазы цеолита в кварц.

CC BY NC

Микрофотографии СЭМ образцов ZSM–5 после парощелочной обработки в среде NaOH + ПЭГ представлены на рисунке 7.

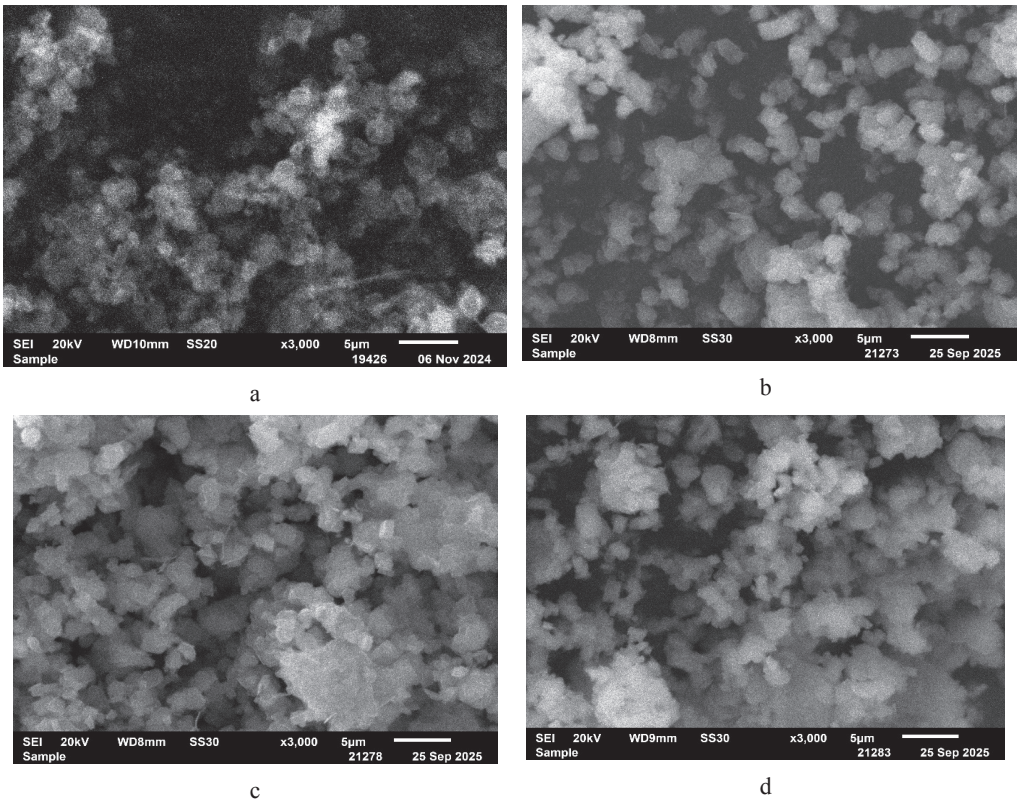


Рисунок 7 – Микрофотографии СЭМ образцов исходного ZSM–5 (a) и ZSM–5 после рекристаллизации с ПЭГ–4000:
(b) 1 ч; (c) 2 ч; (d) 6 ч (×3000)

Результаты СЭМ (рисунок 7) демонстрируют последовательную смену различных процессов. При малом времени протекания рекристаллизации (1 ч) преобладает десилицирование богатых кремнием участков каркаса цеолита. Это ведет к частичному травлению внешних граней и раскрытию межкристаллитных просветов: агрегаты становятся более разобщенными (~ 1–3 мкм), границы зерен видны более четко, что дополнительно указывает на возникновение мезопористости при сохранении исходной микроструктуры цеолита.

При увеличении времени выдержки до 2 ч заметен вклад стадий растворения и последующей перекристаллизации, протекающей в присутствии ПЭГ, который действует как мягкий стабилизатор этого процесса. Растворенные фрагменты повторно оседают на гранях, что выражается в сглаживании и округлении агрегатов (2–5 мкм), появлении мелких наростов и росте внешней поверхности при умеренном развитии мезопор. Дальнейшее удлинение продолжительности обработки смещает баланс в направлении агломерации. На СЭМ это проявляется

уплотнением агрегатов (3–8 мкм) и уменьшением доли широких межчастичных каналов с экранированием устьев микропор.

При обработке данных РФА наблюдается разупорядочение структуры цеолита ZSM–5 по мере модификации, о чем свидетельствует сдвиг положений дифракционных максимумов в направлении больших значений.

Были получены линейные корреляции вида:

$$\Delta d = k \cdot d + l, \qquad (1)$$

где k, l – постоянные, зависящие от конкретных условий обработки образца.

Полученные корреляции использовали для количественной оценки степени разупорядочения структуры образцов, которую определяли как среднее значение относительного сдвига межплоскостных расстояний:

$$\left(\frac{\Delta d}{d}\right)_{\text{ср}} = k + \frac{l}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{d_i}\right), \qquad (2)$$

где N – число использованных при корреляции величин межплоскостных расстояний.

Предложенный для анализа подход, сводящийся к описанию сдвигов межплоскостных расстояний в соответствии с (1) и (2), имеет следующий физический смысл:

– постоянная k соответствует изотропному искажению решетки, т.к. при ее изменении все межплоскостные расстояний изменяются одинаково;

– постоянная l отражает локальные искажения узлов решетки, т.е. сильнее проявляется с ростом угла дифракции.

Средний относительный сдвиг $(\Delta d/d)_{ср}$ можно трактовать как величину, аналогичную среднему микронапряжению ε, которая рассчитывается при известной структуре кристаллов по методу Уильямсона – Холла (Himabindu, et al., 2021).

Полученные значения изменений среднего относительного сдвига от времени обработки представлены на рисунке 8, аналогичный график взаимосвязи относительного сдвига от молекулярности используемого ПЭГ при постоянном времени обработки приведен на рисунке 9.

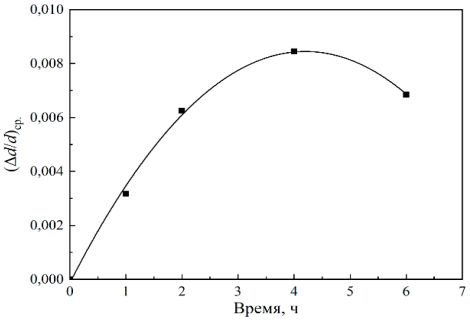


Рисунок 8 – Изменение среднего относительного сдвига межплоскостных расстояний от времени обработки цеолита ZSM–5 (ПЭГ–4000)

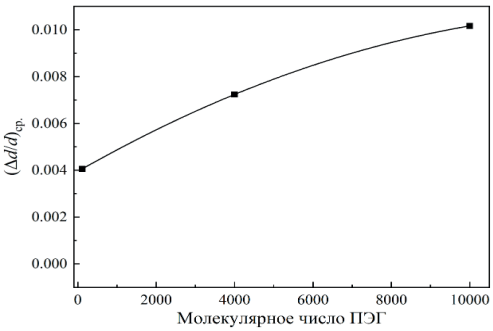


Рисунок 9 – Изменение среднего относительного сдвига межплоскостных расстояний от молекулярного числа ПЭГ (6 ч обработки)

Из представленных на рисунке 8 данных можно заключить следующую последовательность процессов по мере увеличения продолжительности щелочной обработки цеолита:

– в начальный момент времени структура исходного цеолита сохраняет свое высокоупорядоченное состояние;

– первые 2 ч наблюдается ускоренный рост степени разупорядочения структуры за счет десилицирования и набухания каналов при введении ПЭГ;

– при 4 ч обработки наблюдается максимум микронапряжений, обусловленный оптимальным сочетанием «раскрытых» каналов и остаточного каркаса, с максимальным объемом «новых» мезопор и плотностью дефектов;

– при превышении времени обработки 4 ч начинается стадия перерастворения: вероятно, начинается избыточное растворение поврежденных слоев. При этом часть дефектов теряется, что и обуславливает уменьшение количества микронапряжений (6 ч).

Оптимальная структура в данных условиях достигается при ~ 3–4 ч обработки. Дальнейшая обработка при этом избыточна.

Рост молекулярного числа применяемого ПЭГ в пределах от 115 до 10000 (рисунок 9) ведет к росту микронапряжений по сдвигу межплоскостных расстояний. Это обусловлено тем, что чем длиннее цепь ПЭГ, тем больше его эффективный радиус и тем более он «распирает» каналы ZSM–5 при кислотном травлении. Объемные макромолекулы тормозят обратную рекристаллизацию, удерживая каркас в набухшем состоянии, и одновременно экранируют поверхность, фокусируя растворение на локальных узлах каркаса. Это вызывает неравномерное расширение звеньев решетки и накопление дефектов, что проявляется как рост относительного смещения плоскостей (микронапряжений).

В соответствии с полученными данными в качестве оптимальной продолжительности синтеза было выбрано время 4 ч, тип темплатного агента – ПЭГ–10000.

Другим значимым параметром является концентрация NaOH, применяемая совместно с ПЭГ. В целях исследования влияния данного параметра были использованы различные дозы гидроксида натрия – от 1,0 до 4,0 г NaOH – при поддержании постоянного количества ПЭГ–10000 (2,6 г). Синтезированные образцы были исследованы методами РФА, ИКС и СЭМ. Результаты исследования методами РФА и ИКС представлены на рисунках 10 и 11.

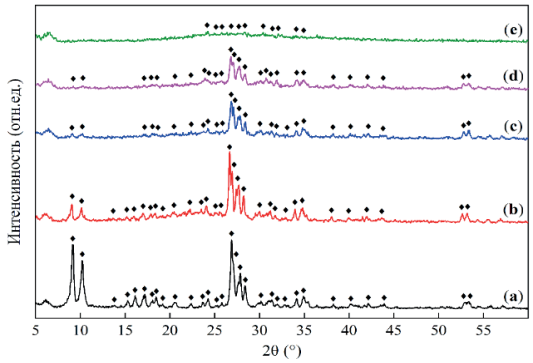


Рисунок 10 – Дифрактограммы образцов исходного ZSM–5 (a) и ZSM–5 с: (b) 0,5 г NaOH; (c) 1 г NaOH; (d) 2 г NaOH; (e) 4 г NaOH (♦ – ZSM–5)

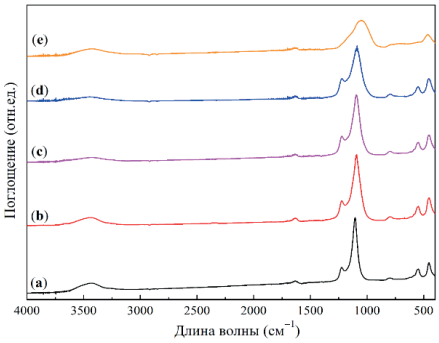


Рисунок 11 – ИК-спектры образцов исходного ZSM–5 (a) и ZSM–5 с: (b) 0,5 г NaOH; (c) 1 г NaOH; (d) 2 г NaOH; (e) 4 г NaOH

По результатам расчетов изменений межплоскостных расстояний по мере увеличения концентрации NaOH по формулам (1) и (2) было показано, что степень разупорядочения структуры увеличивается симбатно количеству щелочи с постепенным выходом на плато. В случае 4 г NaOH по РФА (рисунок 10) рефлексы фазы цеолита практически не наблюдаются, что связано с полным разрушением его структуры. Аналогичные результаты можно видеть на ИК-спектрах образцов (рисунок 11), где наблюдается полная аморфизация основной полосы при 1225 $см^{-1}$ с исчезновением второй полосы при 1250 $см^{-1}$. Предположительно, аморфизация исходного каркаса обусловлена избыточным десилицированием структуры, что подтверждается данными элементного анализа СЭМ (таблица 2).

Таблица 2 – Элементный состав образцов при различном количестве вводимого NaOH по данным СЭМ, ПЭГ–10000 (до декатионирования)

Количество NaOH, г	*Элемент, масс. %*			
	O	Na	Al	Si
0,5	52,81	2,18	2,34	42,68
1,0	52,07	2,53	2,58	42,81
4,0	50,23	8,26	9,36	32,15

Можно видеть, что в случае 4 г NaOH в отличие от образцов, синтезированных с 0,5 и 1 г NaOH, наблюдается резкое уменьшение содержания кремния в составе

CC BY NC

материала (от ~ 42,7% масс. до 32,15% масс.), что подтверждает описанный выше маршрут разрушения структуры цеолита.

Таким образом, по итогу проведенного исследования процесса модификации цеолитной структуры и его отдельных стадий на примере цеолита ZSM–5 были сформулированы оптимальные параметры процесса: 6 ч рекристаллизации, ПЭГ–10000, 2 г NaOH, 2 ч декатионирования. Все вышеуказанное позволяет утверждать, что предложенный метод иерархизации посредством рекристаллизации в щелочных условиях с использованием ПЭГ применим не только для ZSM–5, но и для цеолитов других структурных типов.

Заключение. Иерархизация цеолитов, заключающаяся в создании транспортных мезопор в микропористом каркасе цеолитных структур, рассматривается как один из наиболее доступных путей повышения эффективности таких катализаторов за счет снижения диффузионных ограничений при сохранении кислотно-основных центров. Для цеолита ZSM–5 актуальной задачей является подбор режимов такой обработки, которые потенциально обеспечат воспроизводимое изменение структурных характеристик без разрушения исходного каркаса, поскольку жесткие условия травления и избыток реагентов ведут к формированию аморфизованных фаз и потере кристалличности.

В настоящей работе экспериментально обоснованы режимы получения иерархического цеолита ZSM–5 из товарного цеолита данной марки при паровой щелочной обработке в присутствии ПЭГ. Показано, что включение предварительной кислотной стадии применительно к высококремнистому ZSM–5 приводит к выраженной аморфизации уже при малых временах воздействия, что подтверждается данными РФА и ИКС; в связи с этим кислотная обработка для данного цеолита признана нецелесообразной. Установлено, что при обработке в среде NaOH + ПЭГ при умеренных условиях каркас типа MFI сохраняется, а изменения морфологии по данным СЭМ соответствуют последовательности процессов мягкого десилицирования, затем растворения и перекристаллизации в присутствии ПЭГ, причем при усилении жесткости режима система стремится к агломерации и деградации своей структуры. Предложенный подход к оценке разупорядочения по сдвигам межплоскостных расстояний позволил количественно охарактеризовать влияние продолжительности обработки и природы темплатного агента. В частности, показано, что рост молекулярной массы ПЭГ усиливает структурные искажения, а увеличение количества NaOH монотонно повышает степень разупорядочения вплоть до разрушения каркаса при его избытке. По совокупности полученных данных сформулированы оптимальные параметры процесса, обеспечивающие воспроизводимую иерархизацию при сохранении исходного цеолитного каркаса. Полученные результаты могут быть использованы как основа для дальнейшего исследования протекания процессов иерархизации для конкретных высококремнистых цеолитных систем.

References

Al-Ani A., Haslam J.J., Mordvinova N.E., Lebedev O.I., Vicente A., Fernandez C., Zholobenko V. (2019) Synthesis of nanostructured catalysts by surfactant-templating of large-pore zeolites, Nanoscale Advances, 1:5:2029-2039. https://doi.org/10.1039/C9NA00004F (in Eng).

Chal R., Gérardin C., Bulut M., van Donk S. (2011) Overview and industrial assessment of synthesis strategies towards zeolites with mesopores, ChemCatChem, 3:1:67–81. https://doi.org/10.1002/cctc.201000158 (in Eng).

Chen L., Xue T., Wu H., Wu P. (2018) Hierarchical ZSM–5 nanocrystal aggregates: Seed-induced green synthesis and its application in alkylation of phenol with tert-butanol, RSC Advances, 8:5:2751–2758. https://doi.org/10.1039/C7RA12811H (in Eng).

Chen L.H., Sun M.H., Wang Z., Yang W., Xie Z., Su B.L. (2020) Hierarchically structured zeolites: from design to application, Chemical Reviews, 120:20:1:1194-11294. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00016 (in Eng).

Gorbunova O.V., Baklanova O.N., Gulyaeva T.I., Trenikhin M.V., Drozdov V.A. (2014) Poly(ethylene glycol) as structure directing agent in sol-gel synthesis of amorphous silica, Microporous and Mesoporous Materials, 190:146–151. https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2014.02.013 (in Eng).

Himabindu B., Devi N.L., Kanth B.R. (2021) Microstructural parameters from X-ray peak profile analysis by Williamson–Hall models: A review, Materials Today: Proceedings, 47:4891–4896. https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.06.256 (in Eng).

Jeon M.Y., Kim D., Kumar P., Lee P.S., Rangnekar N., Bai P., Shete M., Elyassi B., Lee H.S., Narasimharao K., Basahel S.N., Al-Thabaiti S., Xu W., Cho H.J., Fetisov E.O., Thyagarajan R., DeJaco R.F., Fan W., Mkhoyan K.A., Siepmann J.I., Tsapatsis M. (2017) Ultra-selective high-flux membranes from directly synthesized zeolite nanosheets, Nature, 543:7647:690–694. https://doi.org/10.1038/nature21421 (in Eng).

Lee S., Park Y., Choi M. (2024) Cooperative interplay of micropores/mesopores of hierarchical zeolite in chemical production, ACS Catalysis, 14:3:2031–2048. https://doi.org/10.1021/acscatal.3c05170 (in Eng).

Mardiana S., Kusnadi A., Arcana I.M., Kadja G.T. (2025) Realizing mesoporous MRE zeolites using polyethylene glycol and their catalytic evaluation in palm oil and polyethylene cracking, Results in Chemistry, 15:102244. https://doi.org/10.1016/j.rechem.2025.102244 (in Eng).

Massenova A., Zhumakanova A., Torlopov I., Rakhmetova K., Abilmagzhanov A. (2025) Ierarkhicheskie ceolity na osnove sinteticheskikh tseolitov ZSM–5, HY i BEA dlya alkilirovaniya aromaticheskikh uglevodorodov [Hierarchical zeolites based on synthetic zeolites ZSM–5, HY and BEA for alkylation of aromatic hydrocarbons], Academic Journal of Physical and Chemical Sciences, 1:219–232. https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.337 (in Russian)

Na K., Jo C., Kim J., Cho K., Jung J., Seo Y., Messinger R.J., Chmelka B.F., Ryoo R. (2011) Directing zeolite structures into hierarchically nanoporous architectures, Science, 333:6040:328–332. https://doi.org/10.1126/science.1204452 (in Eng).

Singh B.K., Xu D., Han L., Ding J., Wang Y., Che S. (2014) Synthesis of single-crystalline mesoporous ZSM–5 with three-dimensional pores via the self-assembly of a designed triply branched cationic surfactant, Chemistry of Materials, 26:24:7183–7188. https://doi.org/10.1021/cm503919h (in Eng).

Verboekend D., Vilé G., Pérez-Ramírez J. (2012) Mesopore formation in USY and beta zeolites by base leaching: selection criteria and optimization of pore-directing agents, Crystal Growth & Design, 12:6:3123–3132. https://doi.org/10.1021/cg3003228 (in Eng).

Yatskovskaya O.V., Baklanova O.N., Gulyaeva T.I., Drozdov V.A., Gorbunov V.A. (2013) Vliyanie molekulyarnoi massy polietilenglikolya na kharakteristiki poristoi struktury kremnezemnykh materialov [Effect of polyethylene glycol molecular weight on porous structure characteristics of silica materials], Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces, 49:2:223–223. https://doi.org/10.7868/S0044185612060198 (in Russian)

Zeng B.J., Wu S.M., Antonietti M., Janiak C., Terasaki O., Yang X.Y. (2025) Hierarchy design of zeolite mesocrystals, Chemical Engineering Journal, 159282. https://doi.org/10.1016/j.cej.2025.159282 (in Eng).

Zhang X., Liu D., Xu D., Asahina S., Cychosz K.A., Agrawal K.V., Al-Wahed Y., Bhan A., Al-Hashimi

S., Terasaki O., Thommes M., Tsapatsis M. (2012) Synthesis of self-pillared zeolite nanosheets by repetitive branching, Science, 336:6089:1684–1687. https://doi.org/10.1126/science.1221111 (in Eng).

Zhang H., Zhang H., Zhao Y., Shi Z., Zhang Y., Tang Y. (2017) Seeding bundle-like MFI zeolite mesocrystals: A dynamic, nonclassical crystallization via epitaxially anisotropic growth, Chemistry of Materials, 29:21:9247–9255. https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.7b03121 (in Eng).

Zhao Y., Zhang H., Wang P., Xue F., Ye Z., Zhang Y., Tang Y. (2017) Tailoring the morphology of MTW zeolite mesocrystals: Intertwined classical/nonclassical crystallization, Chemistry of Materials, 29:8:3387–3396. https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.6b03813 (in Eng).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 366–378

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.426

UDC: 577.1:581.5:535
IRSTI: 34.31.15

©Mutushev A.Zh.[1,2], Nuraly A.M.[1,2], Sanat A.S.[2]*, Shaukharova M.A.[3], Yessimsiitova Z.B.[3], 2026.
[1]Scientific Center for New Technologies, Almaty, Kazakhstan;
[2]Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan;
[3]Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.
*E-mail: s.aida.98@mail.ru

THE EFFECT OF LIGHT-CONVERTING FILMS ON THE ACCUMULATION OF BIOACTIVE COMPOUNDS AND THE QUALITY OF FRUITS

Mutushev Alibek — PhD, assistant professor, principal research, Scientific Center for New Technologies, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: alibek_090@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-5047-5608;
Nuraly Assiya — PhD, assistant professor, principal research, Scientific Center for New Technologies, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: assiya488@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2323-0365;
Sanat Aida — PhD student, senior-lecturer, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: s.aida.98@mail.ru, https://orcid.org/0009-0002-7515-7793;
Shaukharova Meruyert — PhD student, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: meruert0707@mail.ru, https://orcid.org/0009-0000-0832-2686;
Yessimsiitova Zura — Candidate of Biological Sciences, Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail zura1958@bk.ru, https://orcid.org/0000-0002-4735-2033.

Abstract. Modern people often say that not only the taste of fruit, but also its benefits are of paramount importance. For this reason, the search for environmentally friendly methods to help increase the amount of biologically active substances contained in fruit is a pressing issue. This article examined how special light-converting films affect the quality and chemical composition of the vegetable crops studied. During the experiment, several different light-converting films were used, and the plants in the control group were covered and compared with a conventional transparent film. During the growing season, the microclimatic parameters and photosynthetic activity of the studied plants were monitored. Quantitative determination of vitamins (C, E), flavonoids, anthocyans and total antioxidant activity was carried out using physicochemical methods of high-performance liquid chromatography and spectrophotometry. It was found that the use

of light-converting films leads to a significant increase in vitamin C content by 15–20%, flavonoids by 18%, and total antioxidant activity by 25% compared to the control. In addition, an improvement in the appearance of the fruit, a reduction in the number of sunburns, and an increase in the commercial characteristics of the product were recorded, while the ripening period did not change significantly. The effectiveness of light-converting films has been proven: by changing the light spectrum, they pave the way for the reproduction of beneficial substances in the fruit. We are confident that this method can be used in the agro-industrial complex. This is because it not only improves the quality and biological value of crops, but also enhances the stability of the ecosystem, helping to reduce the load on the fruit. The results obtained show that it makes sense to continue research in this scientific direction. It is worth focusing on how to improve the light-converting properties of films and their application for the protection of various types of fruit.

Keywords: light-converting films, bioactive compounds, fruits quality, antioxidants, vitamins, flavonoids, photosynthetic activity

Funding. *This research has been/was/is funded by the Committee of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP26195823).*

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 366–378. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.426*

©Мутушев А.Ж.[1,2], Нұралы Ә.М.[1,2], Санат А.С.[2]*, Шаухарова М.А.[3], Есимсиитова З.Б.[3], 2026.

[1]Scientific Center for New Technologies, Алматы, Қазақстан;
[2]Алматы Технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан;
[3]Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.
*E-mail: s.aida.98@mail.ru

ЖАРЫҚ ТҮРЛЕНДІРЕТІН ПЛЕНКАЛАРДЫҢ БИОАКТИВТІ ҚОСЫЛЫСТАРДЫҢ ЖИНАҚТАЛУЫНА ЖӘНЕ ЖЕМІС САПАСЫНА ӘСЕРІ

Мутушев Алибек — PhD, жетекші ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: alibek_090@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-5047-5608;
Нұралы Асия — PhD, жетекші ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: assiya488@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2323-0365;
Санат Аида — PhD докторант, сеньор-лекторы, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: s.aida.98@mail.ru, https://orcid.org/0009-0002-7515-7793;
Шаухарова Меруерт — PhD докторант, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: meruert0707@mail.ru, https://orcid.org/0009-0000-0832-2686;
Есимсиитова Зура — биология ғылымдарының кандидаты, профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: zura1958@bk.ru, https://orcid.org/0009-0000-0832-2686.

Аннотация. Қазіргі заманғы адамдар көбінесе жемістердің дәмі ғана емес, сонымен қатар олардың тағамдық құндылығы да бірінші кезекте маңызды деп айтады. Осы себепті жемістердегі биологиялық белсенді заттардың мөлшерін арттырудың экологиялық таза әдістерін іздеу өзекті мәселе болып табылады. Бұл мақалада мамандандырылған жарық түрлендіргіш пленкалардың зерттелген көкөніс дақылдарының сапасы мен химиялық құрамына қалай әсер ететіні қарастырылды. Тәжірибеде бірнеше түрлі жарық түрлендіргіш пленкалар қолданылды, ал бақылау тобындағы өсімдіктер жабылып, стандартты мөлдір пленкамен салыстырылды. Зерттелген өсімдіктердің микроклиматтық параметрлері мен фотосинтетикалық белсенділігі өсу кезеңінде бақыланды. Витаминдердің (С, Е), флавоноидтардың, антоциандардың және жалпы антиоксиданттық белсенділіктің сандық анықталуы жоғары өнімді сұйық хроматография мен спектрофотометрияның физика-химиялық әдістерін қолдану арқылы жүргізілді. Жарық түрлендіргіш пленкаларды қолдану бақылаумен салыстырғанда С дәрумені мөлшерінің 15-20%-ға, флавоноид мөлшерінің 18%-ға және жалпы антиоксиданттық белсенділіктің 25%-ға айтарлықтай артуына әкелетіні анықталды. Сонымен қатар, жемістердің сыртқы түрі жақсарғаны, күнге күйіп қалудың азайғаны және тауарлық сапасының артқаны тіркелді, ал пісу уақыты өзгеріссіз қалды. Жарық түрлендіретін пленкалардың тиімділігі дәлелденді: жарық спектрін өзгерту арқылы олар жемістердегі пайдалы заттардың көбеюіне жол ашады. Біз бұл әдісті агроөнеркәсіптік кешенде қолдануға болатынына сенімдіміз. Себебі, ол дақылдардың сапасы мен биологиялық құндылығын жақсартып қана қоймай, сонымен қатар экожүйенің төзімділігін арттырады, жемістерге түсетін жүктемені азайтуға көмектеседі. Алынған нәтижелер бұл зерттеуді осы бағытта жалғастырудың маңызды екенін көрсетеді. Пленкалардың жарық түрлендіретін қасиеттерін қалай жақсартуға және оларды әртүрлі жеміс түрлерін қорғау үшін қолдануға назар аударған жөн.

Түйін сөздер: жарықты түрлендіретін пленкалар, биоактивті қосылыстар, жеміс сапасы, антиоксиданттар, дәрумендер, флавоноидтар, фотосинтетикалық белсенділік

©Мутушев А.Ж.[1,2], Нуралы А.М.[1,2], Санат А.С.[2]*, Шаухарова М.А.[3],
Есимсиитова З.Б.[3], **2026.**
[1]Scientific Center for New Technologies, Алматы, Казахстан;
[2]Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан;
[3]Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан.
*E-mail: s.aida.98@mail.ru

ВЛИЯНИЕ СВЕТОПРЕОБРАЗУЮЩИХ ПЛЁНОК НА НАКОПЛЕНИЕ БИОАКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И КАЧЕСТВО ПЛОДОВ

Мутушев Алибек — PhD, ассистент-профессор, ведущий научный сотрудник, Scientific Center for New Technologies, Алматинский Технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: alibek_090@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-5047-5608;
Нұралы Асия — PhD, ведущий научный сотрудник, ассистент-профессор, Scientific Center for New Technologies, Алматинский Технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: assiya488@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-2323-0365;
Санат Аида — PhD докторант, сеньор-лектор, Алматинский Технологический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: s.aida.98@mail.ru, https://orcid.org/0009-0002-7515-7793;
Шаухарова Меруерт — PhD докторант, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: meruert0707@mail.ru, https://orcid.org/0009-0000-0832-2686;
Есимсиитова Зура — кандидат биологических наук, профессор, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: zura1958@bk.ru, https://orcid.org/0000-0002-4735-2033.

Аннотация. В современных условиях наряду со вкусовыми характеристиками плодов все большее значение приобретают их пищевая и биологическая ценность. В связи с этим поиск экологически безопасных методов, способствующих повышению содержания биологически активных веществ в плодах, является актуальной научной задачей. В статье исследовано влияние светопреобразующих плёнок на качество и химический состав овощных культур. В ходе эксперимента использовали несколько типов светопреобразующих плёнок, тогда как растения контрольной группы выращивали под обычной прозрачной плёнкой. В течение вегетационного периода проводили мониторинг микроклиматических параметров и фотосинтетической активности растений. Количественное определение витаминов С и Е, флавоноидов, антоцианов и общей антиоксидантной активности выполняли с применением методов высокоэффективной жидкостной хроматографии и спектрофотометрии. Установлено, что использование светопреобразующих плёнок приводит к достоверному увеличению содержания витамина С на 15–20 %, флавоноидов - на 18 %, а общей антиоксидантной активности - на 25 % по сравнению с контрольным вариантом. Кроме того, зафиксированы улучшение внешнего вида плодов, снижение количества солнечных ожогов и повышение товарных характеристик продукции, при этом сроки созревания существенно не изменились. Полученные результаты подтверждают эффективность светопреобразующих плёнок как перспективного

инструмента регулирования светового спектра с целью повышения содержания биоактивных соединений в плодах. Практическая значимость исследования заключается в возможности применения данного подхода в агропромышленном комплексе для повышения качества и биологической ценности растительной продукции. Результаты исследования также свидетельствуют о целесообразности дальнейшей разработки светопреобразующих материалов и расширения их применения для различных видов плодово-овощных культур.

Ключевые слова: светопреобразующие пленки, биоактивные соединения, качество плодов, антиоксиданты, витамины, флавоноиды, фотосинтетическая активность

Введение. На современном этапе аграрная отрасль Республики Казахстан ориентирована на ужесточение требований к качеству плодоовощной продукции, ее безопасности и пищевой ценности. Такая тенденция обусловлена как необходимостью укрепления национальной продовольственной безопасности, так и расширением участия страны в международной торговле сельскохозяйственной продукцией. В условиях глобального изменения климата, усиления солнечной радиации, учащения экстремальных погодных явлений и резкоконтинентальных климатических колебаний существенно возрастает потребность в разработке и внедрении инновационных агротехнологий, направленных на повышение содержания биоактивных соединений в растительной продукции при одновременном снижении химической нагрузки на агроэкосистемы страны. Одной из стратегически значимых задач агропромышленного комплекса Казахстана является рациональное использование природных ресурсов и минимизация негативного воздействия сельскохозяйственного производства на окружающую среду.

В данной связи особый научный и практический интерес представляют светопреобразующие плёнки как элемент экологически ориентированных технологий, позволяющих управлять спектральным составом солнечного излучения и, соответственно, физиолого-биохимическими процессами растений без применения химических регуляторов роста и избыточных доз удобрений. Регулирование спектра света оказывает прямое влияние на фотосинтез, морфогенез и вторичный метаболизм растений, способствуя активации синтеза антиоксидантов, витаминов, флавоноидов и антоцианов, определяющих пищевую и биологическую ценность плодов (Taiz et al., 2015).

Результаты многочисленных зарубежных исследований подтверждают ключевую роль спектрального состава света в регуляции метаболических процессов растений и показывают, что использование спектрально модифицированных светопреобразующих плёнок способствует увеличению содержания антиоксидантов и накоплению фенольных соединений у различных сельскохозяйственных культур (Zoratti et al., 2014; Bian et al., 2015; Hernández and Kubota, 2016). Так, исследования итальянских и испанских авторов показали, что изменение соотношения синего, красного и ультрафиолетового излучения

CC BY NC

стимулирует биосинтез антоцианов и флавоноидов в плодах (Martínez-Lüscher et al., 2017; Carvalho and Folta, 2014). Японские учёные продемонстрировали высокую эффективность световых фильтров и плёночных покрытий для индукции антоцианового пигментообразования и повышения стрессоустойчивости растений (Koyama et al., 2012; Tsormpatsidis et al., 2011).

Отечественные исследования также подтверждают перспективность спектрального регулирования освещения в условиях континентального климата. Работы казахстанских учёных свидетельствуют о положительном влиянии светопреобразующих плёнок на биохимический состав и антиоксидантную активность томата и огурца (Karagusov et al., 2019; Jenkins, 2014; He et al., 2018). Установлено, что использование современных технологических решений повышает устойчивость растений к перепадам температуры и интенсивности светового излучения. Кроме того, применение светопреобразующих плёнок позволяет сократить использование химических средств защиты растений и минеральных удобрений (Abdullaev and Sadykov, 2018; Ismagulova et al., 2021).

Современные молекулярно-биологические исследования зарубежных и отечественных авторов указывают на то, что спектральный состав света способен влиять на экспрессию генов, ответственных за синтез фитохимических соединений, обеспечивая тем самым направленную регуляцию биохимических процессов в растениях (Koyama et al., 2014; Martínez-Lüscher et al., 2019). Аналогичные выводы были получены Карагусовым и соавторами (Karagusov et al., 2020), которые продемонстрировали возможность целенаправленного управления накоплением биоактивных веществ посредством изменения спектра излучения.

Несмотря на значительный накопленный научный задел, остаются недостаточно изученными вопросы оптимизации спектральных характеристик светопреобразующих плёнок с учетом видовых и сортовых особенностей культур, специфики агроклиматических условий Казахстана, а также их долговечности, экономической целесообразности и адаптации к условиям промышленного плодоводства и овощеводства.

В связи с этим проведение комплексных исследований, направленных на оценку влияния светопреобразующих плёнок на накопление биоактивных соединений в плодах, является своевременным и научно обоснованным. Актуальность настоящего исследования определяется необходимостью разработки экологически безопасных и технологически эффективных подходов к повышению качества и биологической ценности плодоовощной продукции отечественного производства.

Научная новизна исследования заключается в изучении светопреобразующих плёнок как инструмента более точного регулирования спектрального состава освещения на различных этапах роста и развития сельскохозяйственных культур. Применение таких решений позволяет повысить урожайность, улучшить качественные характеристики продукции и в целом сделать производство более эффективным и экологически ориентированным.

Таким образом, использование светопреобразующих плёнок рассматривается как перспективное направление устойчивого развития аграрного сектора,

обеспечивающее получение высококачественной плодоовощной продукции с повышенной функциональной ценностью без дополнительной нагрузки на окружающую среду.

Материалы и методы исследования. Экспериментальные исследования проводились в 2025–2026 гг. в условиях защищённого грунта тепличного комплекса юго-восточной агроклиматической зоны Республики Казахстан. Объектами исследования являлись растения огурца (*Cucumis sativus L.*) партенокарпического гибрида и томата (*Solanum lycopersicum L.*) детерминантного типа, выращиваемые по стандартной тепличной технологии с капельным орошением и контролируемым питательным режимом. Температура воздуха поддерживалась на уровне 24–26 °C днём и 18–20 °C ночью при относительной влажности 65–75 %. В качестве светомодифицирующих материалов использовали светопреобразующие пленки с люминофорными компонентами, наносимые на внутреннюю поверхность прозрачных полимерных экранов равномерным слоем с оптической плотностью 0,15–0,20 усл. ед. Для огурца применяли пленки, преобразующие часть солнечного спектра в синий диапазон (430–470 нм), а для томата — в красный диапазон (600–660 нм); в контрольном варианте экраны обрабатывали дистиллированной водой. Эксперимент был заложен по факторной схеме (культура × спектр) с контрольными и опытными вариантами в трёхкратной биологической повторности, площадь делянки составляла не менее 10 м². Световое воздействие осуществляли в течение всего вегетационного периода: у огурца - от фазы 3–4 листьев до окончания плодоношения, у томата от бутонизации до полной биологической спелости. В ходе опыта контролировали параметры микроклимата и спектральные характеристики света с использованием портативного спектрорадиометра; фотосинтетическую активность оценивали по показателям хлорофилл-флуоресценции (Fv/Fm) и индексу SPAD с периодичностью 10–14 дней. Отбор плодов проводили в фазе хозяйственной спелости (25–30 плодов на вариант). Биохимический анализ включал определение витамина С, каротиноидов (у томата), флавоноидов и общей антиоксидантной активности методами ВЭЖХ и спектрофотометрии (DPPH/ABTS). Помимо этого, анализировали показатели урожайности, равномерность, окраску и вес плодов, а также присутствие дефектов. К полученным данным проводили статистическую обработку с применением дисперсионного анализа при уровне значимости $p \leq 0,05$. Итоги представлены как средние величины с указанием стандартной ошибки.

Результаты и обсуждение. Целью проведенного исследования было определить, как измененный по спектральному составу солнечный свет, формируемый с помощью светопреобразующих пленок, влияет на физиологические процессы растений, их биохимические показатели и товарные качества плодов огурца и томата при выращивании в условиях защищенного грунта. Экспериментальная схема основывалась на использовании избирательного спектрального воздействия: для огурца применяли синий диапазон (430–470 нм), тогда как для томата - красная область спектра (600–660 нм), что соответствует известным физиологическим особенностям данных культур. Контрольные растения выращивались при

CC BY NC

естественном спектральном составе солнечного света. Оценка эффективности проводилась по комплексу физиологических, биохимических и физиологических показателей. Влияние спектрального воздействия на фотосинтетическую активность растений показало, что применение светопреобразующих пленок оказало положительное влияние на фотосинтетическое состояние растений обеих культур. У опытных растений отмечено увеличение максимального квантового выхода фотосистемы II (Fv/Fm) и индекса содержания хлорофилла (SPAD), что свидетельствует о более эффективном использовании световой энергии.

В результате исследования в таблице 1 показано влияние спектрально-модифицированного светового воздействия на показатели фотосинтетической активности огурца и томата. Представленные данные характеризуют фотосинтетическую активность огурца, томата и салата при различных спектрах освещения. Значения максимального квантового выхода фотосистемы II (Fv/Fm) в контрольных вариантах (белый свет) находились в пределах 0,74 ± 0,02, что указывает на умеренно оптимальное функциональное состояние фотосинтетического аппарата. При использовании синего спектра у огурца наблюдалось увеличение Fv/Fm с 0,76 ± 0,01 до 0,81 ± 0,01, а показателя SPAD - с 41,2 ± 1,1 до 47,5 ± 1,3, что соответствует росту содержания хлорофилла примерно на 15,3 %. Аналогичная тенденция отмечена у томата, где под действием синего спектра значение SPAD увеличилось с 39,8 ± 1,0 до 43,6 ± 1,1. Наиболее выраженный положительный эффект был зафиксирован при комбинированном красно-синем освещении. В этом варианте максимальные значения Fv/Fm достигали 0,83 ± 0,01 у огурца и 0,82 ± 0,01 у томата, что превышало контрольные показатели на 9–11 %. Содержание хлорофилла (SPAD) возрастало до 49,8 ± 1,4 у огурца и 48,2 ± 1,3 у томата, также рост фотохимической эффективности сопровождался увеличением скорости фотосинтеза. Помимо этого, у огурца при красно-синем спектре скорость ассимиляции CO_2 составляла 17,3 ± 0,7 мкмоль·м$^{-2}$·с$^{-1}$, что на 39,5 % выше контроля (12,4 ± 0,5 мкмоль·м$^{-2}$·с$^{-1}$). У томата аналогичное увеличение достигало 44,8 %. Показатели транспирации в опытных вариантах возрастали с 3,2–3,8 до 4,7–4,9 ммоль H_2O·м$^{-2}$·с$^{-1}$, отражая усиление газообмена.

Проведенное исследование показало, что полученные результаты свидетельствуют о том, что применение спектрально оптимизированного освещения, в особенности красно-синего (увеличение активности на 9–11 % по сравнению с другими), способствует заметному усилению фотосинтетической активности, синтезу хлорофилла и физиологической продуктивности используемых растений.

Таблица 1 – Показатели фотосинтетической активности растений (среднее ± SE)

Культура	**Вариант**	Fv/Fm	SPAD	Δ SPAD, %	**Ассимиляция CO_2 (мкмоль·м$^{-2}$·с$^{-1}$)**	Δ CO_2, %	**Транспирация (ммоль H_2O·м$^{-2}$·с$^{-1}$)**
Огурец	Контроль (белый свет)	0,74 ± 0,02	41,2 ± 1,1	–	12,4 ± 0,5	–	3,2 - 3,8

Огурец	Синий спектр	0,81 ± 0,01	47,5 ± 1,3	+15,3	–	–	–
Огурец	Красно-синий спектр	0,83 ± 0,01	49,8 ± 1,4	+21,0	17,3 ± 0,7	+39,5	4,7 -4,9
Томат	Контроль (белый свет)	0,74 ± 0,02	39,8 ± 1,0	–	–	–	3,2 -3,8
Томат	Синий спектр	–	43,6 ± 1,1	+9,6	–	–	–
Томат	Красно-синий спектр	0,82 ± 0,01	48,2 ± 1,3	+21,1	+44,8 % к контролю	+44,8	4,7 -4,9

Анализ полученных данных показал, что использование светопреобразующих пленок, обеспечивающих синий диапазон для огурца и красная область спектра для томата, привело к достоверному увеличению максимального квантового выхода фотосистемы II (Fv/Fm), а также индекса содержания хлорофилла (SPAD) по отношению с контрольными образцами. Полученные высокие значения (Fv/Fm) подтверждают сокращение светового и температурного стресса для растений и более эффективном действии фотосинтетического процесса. Рост показателя SPAD также показывает значительное увеличение содержания хлорофилла и усиление ассимиляции листьев растений. Из данных видно, что при помощи повышения данных показателей, происходит увеличение функциональной активности и снижение светового стресса листьев.

При изучении влияния спектрального воздействия на состав плодов, биохимический анализ показал достоверное увеличение содержания биоактивных соединений в исследуемых вариантах по сравнению с контролем. В таблице 2 показаны изменения биохимического состава плодов огурца и томата под воздействием светопреобразующих пленок. У огурца применение синего спектра привело к увеличению содержания витамина С с 9,8 ± 0,4 мг/100 г в контрольном варианте до 12,1 ± 0,5 мг/100 г (+23 %), флавоноидов с 42,3 ± 1,5 мг/100 г до 50,6 ± 1,7 мг/100 г (+20 %), а антиоксидантная активность выросла с 54,6 ± 2,0 % до 68,9 ± 2,3 % (+26 %).У томата воздействие красного спектра увеличило содержание витамина С с 18,5 ± 0,6 мг/100 г до 22,4 ± 0,7 мг/100 г (+21 %), флавоноидов с 56,8 ± 1,9 мг/100 г до 66,2 ± 2,1 мг/100 г (+16 %) и каротиноидов с 6,4 ± 0,3 мг/100 г до 8,1 ± 0,4 мг/100 г (+27 %). Антиоксидантная активность плодов томата повысилась с 61,2 ± 2,1 % до 76,4 ± 2,6 % (+25 %).

Следовательно, в опытных вариантах зафиксировано статистически значимое увеличение содержания витамина С, флавоноидов и общей антиоксидантной активности плодов по сравнению с контролем. У томата дополнительно отмечено возрастание концентрации каротиноидов, что коррелирует с применением красного спектра, стимулирующего процессы накопления пигментов и вторичных метаболитов. Полученные данные свидетельствуют об активации биосинтетических путей синтеза биоактивных соединений, обусловленной изменением спектрального состава светового потока, и подтверждают эффективность применения светопреобразующих пленок для повышения биологической ценности овощной продукции.

CC BY NC

Таблица 2 – Биохимические показатели плодов (среднее ± SE)

Показатель	Огурец (контроль)	Огурец (синий спектр)	Δ, %	Томат (контроль)	Томат (красный спектр)	Δ, %
Витамин С, мг/100 г	9,8 ± 0,4	12,1 ± 0,5	+23	18,5 ± 0,6	22,4 ± 0,7	+21
Флавоноиды, мг/100 г	42,3 ± 1,5	50,6 ± 1,7	+20	56,8 ± 1,9	66,2 ± 2,1	+16
Каротиноиды, мг/100 г	–	–	–	6,4 ± 0,3	8,1 ± 0,4	+27
Антиоксидантная активность, %	54,6 ± 2,0	68,9 ± 2,3	+26	61,2 ± 2,1	76,4 ± 2,6	+25

Полученные данные подтверждают, что спектральная модификация света активирует биосинтетические пути образования антиоксидантных соединений. Как видно из таблицы 3, спектральное воздействие существенно повлияло на урожайность и товарные показатели плодов огурца и томата. Применение синего для огурца и красного спектра для томата сопровождалось увеличением общей урожайности: у огурца она возросла с 4,2 кг/м² в контрольном варианте до 5,1 кг/м² (+21 %), у томата — с 6,5 кг/м² до 7,8 кг/м² (+20 %). Средняя масса плодов также увеличилась: у огурца с 120 г до 138 г (+15 %), у томата с 180 г до 205 г (+14 %). Доля товарной продукции повысилась на 10–12 % по сравнению с контролем. У томата наблюдалось улучшение интенсивности окраски плодов: доля равномерно окрашенных плодов увеличилась с 68 % до 82 %, также у огурца отмечено улучшение формы и качества поверхности: процент плодов с дефектами снизился с 15 % до 7 %, что способствовало росту выхода товарной продукции. Снижение доли физиологических повреждений и одновременное увеличение выхода товарной продукции указывает на то, что спектральная модификация света положительно влияет на процессы формирования и созревания плодов, не замедляя темпы роста и развития растений.

Таблица 3 – Урожайность и показатели качества плодов

Культура	Вариант	Урожайность, кг/м²	Средняя масса плода, г	Доля товарной продукции, %	Плоды с дефектами / равномерная окраска, %
Огурец	Контроль	4,2	120	86	15
Огурец	Синий спектр	5,1	138	96	7
Томат	Контроль	6,5	180	84	68 (равномерно)
Томат	Красный спектр	7,8	205	94	82 (равномерно)

Использование светопреобразующих пленок синего и красного спектра сопровождалось увеличением общей урожайности, средней массы плодов и доли товарной продукции по сравнению с контрольными вариантами. У томата отмечено улучшение интенсивности и равномерности окраски плодов, а у огурца повышение выравненности формы и качества поверхности. Снижение доли физиологических повреждений и увеличение выхода товарной продукции

указывают на благоприятное влияние спектральной модификации света на процессы формирования и созревания плодов без негативного воздействия на темпы развития растений. Отмечено улучшение окраски плодов томата и выравненность формы огурцов, а также снижение доли физиологических повреждений.

Заключение. Проведённые исследования показали, что применение светопреобразующих пленок, формирующих целенаправленное спектральное воздействие, является эффективным агротехнологическим приёмом повышения физиологической активности растений, биохимического состава и качества продукции огурца и томата в условиях защищённого грунта.

Проведённые в условиях защищённого грунта исследования подтвердили высокую эффективность использования светопреобразующих пленок, обеспечивающих селективную спектральную модификацию солнечного излучения для оптимизации физиологических процессов, повышения биохимической ценности и улучшения качества характеристик огурца и томата. Установлено, что использование синего спектра для огурца и красного спектра для томата приводит к статистически достоверным изменениям ключевых физиолого-биохимических показателей по сравнению с контрольными вариантами ($p \leq 0,05$). Анализ фотосинтетической активности показал увеличение максимального квантового выхода фотосистемы II (Fv/Fm) у огурца с 0,76 до 0,81 и у томата с 0,74 до 0,80, что соответствует росту на 6,6 % и 8,1 % соответственно. Индекс содержания хлорофилла (SPAD) повысился у огурца на 15,3 %, и у томата - на 15,3 %, что свидетельствует о более эффективном использовании фотосинтетической активной радиации и снижении светового стресса растений.

Биохимический анализ плодов выявил существенное увеличение содержания биоактивных соединений. Содержание витамина С возросло у огурца на 23,5 % (с 9,8 до 12,1 мг/100 г), у томата - на 21,1 % (с 18,5 до 22,4 мг/100 г). Концентрация флавоноидов увеличилась на 19,6 % у огурца и на 16,5 % у томата. У томата содержание каротиноидов повысилось на 26,6 % ($p \leq 0,05$), что напрямую связано с воздействием красного спектра, стимулирующего синтез пигментов. Общая антиоксидантная активность плодов увеличилась на 26,2 % у огурца и на 24,8 % у томата, что указывает на усиление защитного и функционального потенциала продукции.

Применение светопреобразующих пленок также оказало положительное влияние на продуктивность и товарное качество культур. Урожайность огурца увеличилась с 6,8 до 7,9 кг/м² (на 16,2 %), томата - с 5,4 до 6,6 кг/м² (на 22,2 %). Средняя масса плодов увеличилась на 9,8 % у огурца и на 11,9 % у томата, при этом доля товарной продукции увеличилась до 93 % и 92 % соответственно. Зафиксировано снижение доли физиологических повреждений плодов, в том числе солнечных ожогов, без существенного изменения сроков наступления хозяйственной спелости.

В целом, вышеполученные результаты свидетельствуют о том, что спектральная модификация солнечного света посредством светопреломляющих

CC BY NC

пленок способствует активации фотосинтетических и метаболических процессов растений, направленно стимулирует синтез биоактивных соединений и повышает продуктивность данных культур. Представленная модернизированная технология характеризуется экологической безопасностью, отсутствием химического воздействия на растения и высокой адаптивностью к условиям тепличного овощеводства.

Таким образом, использование светопреобразующих пленок с формированием синего спектра для огурца и красного спектра для томата может рассматриваться как эффективный и научно обоснованный агротехнологический приём, перспективный для внедрения в промышленное тепличное производство Республики Казахстан, целью которой является получение продукции повышенной биологической ценности и конкурентоспособного качества.

Выводы. Установлено, что изменение спектрального состава света оказывает выраженное стимулирующее влияние на биохимические процессы в растениях, которое проявляется в увеличении содержания биологически ценных соединений в плодах. Наибольший прирост аскорбиновой кислоты отмечен у огурца (+23 %), тогда как у томата максимальное увеличение зафиксировано по содержанию каротиноидов (+27 %).

1. Показано, что использование синего спектра для огурца и красного спектра для томата является физиологически обоснованным и наиболее эффективным приёмом повышения функциональной ценности плодов. При этом уровень антиоксидантной активности увеличился у огурца и томата в сопоставимых пределах и составил 25–26 %, что свидетельствует о универсальности эффекта спектрального воздействия.

2. Отмечено увеличение урожайности и средней массы плодов в пределах 14–21 % без смещения сроков созревания, что указывает на отсутствие негативного воздействия на темпы онтогенеза. Полученные результаты свидетельствуют о комплексном стимулирующем влиянии технологии на рост, развитие и формирование товарных качеств овощных культур.

3. Выявлено, что в целом технология спектральной модификации солнечного света с использованием светопреобразующих пленок показала себя как экологически безопасный и технологически перспективный инструмент для тепличного овощеводства Республики Казахстан. Конец формы

References

Abdullaev K.A., Sadykov T.S. (2018) Ecologicheski orientirovannye tekhnologii v plodovodstve [Ecologically oriented technologies in fruit growing]. Agrouniversity, 214. (in Russ.).

Bian Z., Yang Q., Liu W. (2015) Effects of light quality on the accumulation of phytochemicals in vegetables. Journal of the Science of Food and Agriculture, 14:3. – P. 414-428. DOI: 10.1002/jsfa.6789 (in Eng.).

Carvalho S.D., Folta K.M. (2014) Environmentally modified organisms – expanding genetic potential with light. Critical Reviews in Plant Sciences, 33:6. – P. 486-508. DOI: 10.1080/07352689.2014.923800 (in Eng.).

He J., Qin L., Chong E.L.C., Choong T.W., Lee S.K. (2018) Plant growth and bioactive compounds affected by light spectral quality. Journal of Plant Physiology, 227. – P. 64-72. DOI: 10.1016/j.jplph.2018.05.006 (in Eng.).

Hernández R., Kubota C. (2016) Physiological responses of plants to light quality under controlled environments. Scientia Horticulturae, 198. – P. 268-279. DOI: 10.1016/j.scienta.2016.02.013 (in Eng.).

Ismagulova A.T., Nurmanov E.E., Kenzhebaev B.K. (2021) Antioksidantnaya aktivnost' plodoovoshchnykh kul'tur pri modifitsirovannom osveshchenii [Antioxidant activity of fruit and vegetable crops under modified lighting]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Biological Series, 3. – P. 32-40. (in Russ.).

Jenkins G.I. (2014) The UV-B photoreceptor UVR8: from structure to physiology. The Plant Cell, 26:1. – P. 21-37. DOI: 10.1105/tpc.113.119446 (in Eng.).

Karagusov Zh.K., et al. (2020) Regulyatsiya nakopleniya fitokhimicheskikh soyedineniy rasteniy putom izmeneniya spektra izlucheniya [Regulation of the accumulation of phytochemical compounds in plants by changing the radiation spectrum]. Agro-Industrial Complex of Kazakhstan, 1. – P. 25-31. (in Russ.).

Karagusov Zh.K., Sagyndykov A.S., Imanbaev A.K. (2019) Vliyaniye spektral'nogo sostava sveta na biokhimicheskiye protsessy rasteniy [The influence of the spectral composition of light on the biochemical processes of plants]. Bulletin of Agricultural Science of Kazakhstan, 4:45-52 (in Russ.).

Koyama R., Goto-Yamamoto N., Hashizume K. (2014) Light quality affects flavonoid biosynthesis in fruit crops. Horticultural Research., 1. – P. 1-8. DOI: 10.1038/hortres.2014.15 (in Eng.).

Koyama R., Itoh H., Kimura S., Morioka Y., Niimi Y. (2012) Effects of light quality on anthocyanin accumulation in strawberry fruits. Environmental Control in Biology, 50:1. – P. 37-41. DOI: 10.2525/ecb.50.37 (in Eng.).

Martínez-Lüscher J., Brillante L., Kurtural S.K. (2019) Spectral light distribution impacts berry development and composition. American Journal of Enology and Viticulture, 70:4. – P. 1-10. DOI: 10.5344/ajev.2019.18043 (in Eng.).

Martínez-Lüscher J., Sánchez-Díaz M., Delrot S., Aguirreolea J., Gomès E. (2017) Pascual I. Ultraviolet-B radiation and flavonol accumulation in grapevine berries. Plant Science, 264. – P. 86-94. DOI: 10.1016/j.plantsci.2017.07.001 (in Eng.).

Nurmanov E.E., Ismagulova A.T., Kenzhebaev B.K. (2020) Vliyaniye svetopreobrazuyushchikh plonok na biokhimicheskiy sostav plodov yabloni [The influence of light-converting films on the biochemical composition of apple fruits]. Scientific Works of KazNAIU, 2. – P. 88-95. (in Russ.).

Taiz L., Zeiger E., Møller I. M., Murphy A. (2015) Plant Physiology and Development. Sunderland, MA: Sinauer Associates, 761 (in Eng.).

Tsormpatsidis E., Henbest R.G.C., Battey N.H., Hadley P. (2011) Spectral manipulation of light affects plant growth and development. Journal of Horticultural Science & Biotechnology, 86:4. – P. 329-336. DOI: 10.1080/14620316.2011.11512744 (in Eng.).

Zoratti L., Karppinen K., Escobar A.L., Häggman H., Jaakola L. (2014) Light-controlled flavonoid biosynthesis in fruits. Frontiers in Plant Science. 5. – P. 534. DOI: 10.3389/fpls.2014.00534 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 379–398

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.427

UDC: 620.197.3
IRSTI: 81.33.29

©Nefedov A.N.[1], Taiekenova A.T. [1,2], 2026.
[1]JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry",
Almaty, Kazakhstan;
[2]Satbayev University, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: a.taiekenova@gmail.com

CURRENT STATE OF ORGANIC CORROSION INHIBITOR APPLICATION IN OIL REFINING

Alexander Nefedov — Candidate of Chemical Sciences (PhD), Scientific Consultant, JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry", Almaty, Kazakhstan,
E-mail: a.nefedov@ifce.kz, https://orcid.org/0000-0002-9070-0398;
Taiekenova Arailym — Master's student, Senior Engineer, Satbayev University; JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry", Almaty, Kazakhstan,
E-mail: a.taiekenova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-8354-1704.

Abstract. Corrosion of process equipment in oil refineries remains a major source of operational losses and reliability risks because of multiphase flow regimes, variability of crude and process media, and the presence of aggressive species that create strongly localized corrosive environments. The most vulnerable areas typically include atmospheric (and vacuum) distillation column overhead systems and associated condensation/cooling circuits, hot crude feed piping, and heat-exchange equipment, where chloride/HCl-related (HCl/Cl^-), sulfide (H_2S/HS^-), naphthenic acid, and erosion–corrosion mechanisms may act simultaneously. This paper provides an analytical review of recent peer-reviewed publications, industry standards, and practical guidelines on the application of organic corrosion inhibitors in oil refining, with emphasis on reproducible performance under field conditions. The main inhibition mechanisms (adsorption/film formation and electrochemical effects) and a functional classification of treatment programs are discussed, including film-forming inhibitors, neutralizing amines, and combined strategies. Key factors controlling realizability of protection at the level of a specific process node are systematized: transport of the inhibitor to the corrosion-active aqueous film/condensate, phase partitioning in water–hydrocarbon systems, stability of the protective film under high shear stress, and compatibility with process chemicals as well as the propensity for salt deposition. The review shows that inhibitor performance depends not only on reagent chemistry and "nominal" concentration, but also on correct

injection location, adequate mixing, and uniform distribution across circuit branches. Comprehensive verification is therefore required using corrosion monitoring tools: coupons, electrochemical methods, condensate pH and ionic composition (Cl^-, NH_4^+), and deposit characterization. It is also noted that digital tracking of corrosion trends and formal dose-adjustment procedures improve program controllability and reduce the likelihood of localized damage. In industrial practice, the highest protection efficiency is most often achieved by combined programs employing film-forming inhibitors together with neutralizing amines, provided that salt formation and under-deposit corrosion risks are properly controlled.

Keywords: corrosion inhibitors, oil refining, overhead systems, film-forming inhibitors, neutralizing amines, corrosion monitoring.

Funding. *This research was carried out with the financial support of the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan under Program No. BR24992812, "Development of Materials and Technologies for Comprehensive Corrosion Protection of Technological Equipment in the Petrochemical, Mechanical Engineering, and Instrument-Making Industries".*

For citations: *Nefedov A.N., Taiekenova A.T. Current State of Organic Corrosion Inhibitor Application in Oil Refining. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 379–398. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.427*

©Нефедов А.Н.[1], Тайекенова А.Т.[1,2], 2026.
[1]«Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан;
[2]Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы, Қазақстан.
E-mail: a.taiekenova@gmail.com

МҰНАЙ ӨҢДЕУ ӨНЕРКӘСІБІНДЕ ОРГАНИКАЛЫҚ КОРРОЗИЯ ИНГИБИТОРЛАРЫН ҚОЛДАНУДЫҢ ҚАЗІРГІ ЖАҒДАЙЫ

Нефедов Александр — химия ғылымдарының кандидаты, ғылыми кеңесші, «Д.В.Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: a.nefedov@ifce.kz, https://orcid.org/0000-0002-9070-0398;
Тайекенова Арайлым — Магистрант, аға инженер, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті; «Д.В.Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: a.taiekenova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-8354-1704.

Аннотация. Мұнай өңдеу зауыттарындағы технологиялық жабдықтардың коррозиясы ағындардың көпфазалылығы, шикізат құрамының өзгергіштігі және агрессивті компоненттердің болуы салдарынан сенімділікке әсер ететін маңызды эксплуатациялық мәселе болып табылады; бұл факторлар коррозиялық қауіпті жағдайлардың локалды түрде қалыптасуына әкеледі. Ең осал аймақтарға

атмосфералық (және вакуумдық) колонналардың жоғарғы бөліктері және оларға іргелес конденсация-салқындату контурлары (overhead жүйелері), ыстық шикізат құбырлары мен жылу алмастырғыш тораптар жатады; мұнда хлоридті-қышқылды (HCl/Cl^-), күкіртсутекті (H_2S/HS^-), нафтенді және эрозиялық-коррозиялық бұзылу механизмдері қатар іске асады. Жұмыста мұнай өңдеу саласында органикалық коррозия ингибиторларын қолдану бойынша заманауи жарияланымдар, салалық стандарттар және практикалық құсынымдар негізінде аналитикалық шолуұсынылады және өнеркәсіптік жағдайда қорғаныш әсердің қайталанымдылығына басымдық беріледі. Ингибирлеудің негізгі механизмдері (адсорбциялық-қабықшалы және электрохимиялық) және реагенттік бағдарламалардың функционалдық жіктелуі (қабықша түзуші ингибиторлар, бейтараптандырғыш аминдер, біріктірілген бағдарламалар) қарастырылды. Қорғаныштың нақты технологиялық торапта іске асуын айқындайтын факторлар жүйеленді: ингибитордың коррозионды-белсенді су қабықшасына/конденсатқа жеткізілуі, су-көмірсутек жүйелеріндегі фазалық таралуы, жоғары ығысу кернеулерінде қорғаныш қабықшасының тұрақтылығы, сондай-ақ технологиялық химиямен үйлесімділігі және тұз тұнбаларының түзілу бейімділігі. Талдау тиімділік тек реагенттің химиялық табиғатына ғана емес, енгізу нүктесін дұрыс таңдауға, араласу шарттарына және контур тармақтары бойынша біркелкі таралуына тәуелді екенін көрсетті. Нәтижені растау үшін кешенді мониторинг қажет екені көрсетілді: купондар, электрохимиялық әдістер, конденсаттың pH және иондық құрамы (Cl^-, NH_4^+), сондай-ақ тұнбалардың құрамын бақылау. Сонымен қатар коррозия көрсеткіштерін цифрлық трендтер арқылы бақылау және дозалауды түзету регламенттерін енгізу бағдарламаның басқарылуын арттырып, локалданған зақымдану ықтималдығын төмендететіні атап өтілді. Өндірісте ең жоғары нәтиже қабықша түзуші ингибиторлар мен бейтараптандырғыш аминдерді біріктіретін бағдарламалар арқылы, тұз түзілуі мен қабықшааасты коррозия тәуекелдерін бақылау жағдайында қамтамасыз етіледі.

Түйін сөздер: коррозия ингибиторлары, мұнай өңдеу өнеркәсібі, колонналардың жоғарғы бөліктері, қабықша түзуші ингибиторлар, бейтараптандырғыш аминдер, коррозия мониторингі

©Нефедов А.Н.[1], Тайекенова А.Т.[1,2*], 2026.
[1]АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан;
[2]Казахский национальный технический исследовательский университет имени К.И. Сатпаева.
[*]E-mail: a.taiekenova@gmail.com

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ В НЕФТЕПЕРЕРАБОТКЕ

Нефедов Александр — кандидат химических наук, научный консультант, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,
E-mail: a.nefedov@ifce.kz, https://orcid.org/0000-0002-9070-0398;

Тайекенова Арайлым — магистрант, ведущий инженер, Казахский национальный технический исследовательский университет имени К.И. Сатпаева; АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,
E-mail: a.taiekenova@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-8354-1704.

Аннотация. Коррозия технологического оборудования нефтеперерабатывающих заводов остается одной из ключевых причин эксплуатационных потерь и снижения надежности вследствие многофазности потоков, переменного состава сырья и присутствия агрессивных компонентов, формирующих локальные коррозионно-опасные условия. Наиболее уязвимыми зонами являются верхние части атмосферных и вакуумных колонн, а также прилегающие конденсационно-охладительные контуры (оверхед-системы), трубопроводы горячего сырья и узлы теплообмена, где одновременно реализуются хлоридно-кислотные (HCl/Cl^-), сероводородные (H^2S/HS^-), нафтеновые и эрозионно-коррозионные механизмы разрушения. В работе представлен аналитический обзор современных публикаций, отраслевых стандартов и практических рекомендаций по применению органических ингибиторов коррозии в нефтепереработке с акцентом на воспроизводимость их действия в реальных условиях эксплуатации. Рассмотрены ключевые механизмы ингибирования - адсорбционно-пленочный и электрохимический, а также функциональная классификация реагентных программ, включающая пленкообразующие ингибиторы, нейтрализующие амины и комбинированные решения. Систематизированы факторы, определяющие реализуемость защиты на уровне конкретного технологического узла: доставка ингибитора в коррозионно-активную водную пленку или конденсат, фазовое распределение в водно-углеводородных системах, устойчивость защитной пленки при высоких сдвиговых напряжениях, а также совместимость с технологической химией и склонность к образованию солевых отложений. Показано, что эффективность ингибиторной защиты зависит не только от химической природы реагента и его номинальной концентрации, но и от корректного выбора точки ввода, условий смешения и равномерности распределения по ветвям контура. Подчеркивается необходимость комплексной верификации по данным мониторинга, включая купонные испытания, электрохимические методы, анализ pH и ионного состава конденсата (Cl^-, NH^{+4}), а также контроль состава отложений. Отмечено, что цифровое отслеживание трендов коррозии и регламентированная корректировка дозирования повышают управляемость программы и снижают риск локализованных повреждений. На практике наибольшую результативность демонстрируют комбинированные программы, сочетающие пленкообразующие ингибиторы и нейтрализующие амины при контроле солеобразования и рисков подпленочной коррозии.

Ключевые слова: ингибиторы коррозии, нефтеперерабатывающая промышленность, верхние части колонн, плёнкообразующие ингибиторы, нейтрализующие амины, мониторинг коррозии

Введение. Нефтеперерабатывающая промышленность относится к числу отраслей с повышенной коррозионной нагрузкой на технологическое оборудова-

ние, что обусловлено многофазностью потоков и вариативностью состава сырья и технологических сред. Коррозионно-опасные условия формируются локально. В первую очередь это зоны конденсации и образования водной плёнки, участки накопления солей/продуктов коррозии и области повышенных скоростей и турбулентности потока (Nešić, 2007; Kermani & Morshed, 2003; API, 2020). Такая неоднородность требует узлового подхода к управлению рисками и верификации противокоррозионных мероприятий.

Принципиальной особенностью нефтеперерабатывающих контуров является пространственная неоднородность распределения водной фазы и агрессивных компонентов. В результате коррозионно-опасные условия локализуются в отдельных зонах: в области образования кислых конденсатных плёнок, на участках со слабым смывом и накоплением солей/продуктов коррозии. Также коррозионные условия могут быть в местах с повышенным сдвиговым воздействием, где механическая составляющая усиливает электрохимическое разрушение металла. При этом локализованные повреждения могут развиваться при приемлемых средних значениях скорости коррозии, что повышает требования к системе контроля и верификации защитных мероприятий.

Коррозионные повреждения приводят к ускоренному износу аппаратов и трубопроводов, росту затрат на ремонт и техническое обслуживание, увеличению числа внеплановых остановов и повышению вероятности аварийных ситуаций. Поэтому управление коррозией на НПЗ рассматривается как элемент обеспечения эксплуатационной надёжности и промышленной безопасности.

В составе противокоррозионных мер (выбор материалов и покрытий, подготовка сырья, оптимизация режимов, контроль состава сред) органические ингибиторы коррозии являются технологически гибким инструментом. Они позволяют воздействовать на коррозионную обстановку без капиталоёмкой модернизации оборудования. Вместе с тем устойчивость защитного эффекта в реальных условиях определяется не только выбором реагента, но и корректностью ингибиторной программы: зоной и способом ввода, условиями смешения и распределения по фазам, совместимостью с технологической химией и системой мониторинга.

По данным работ последних лет (2022-2024 гг.) ключевые причины неудач ингибиторных программ в эксплуатации связаны не с недостаточной ингибирующей способностью реагента как такового, а с неверной точкой ввода, недостаточным смешением/доставкой в водную плёнку и нарушением баланса нейтрализации, приводящим к солеобразованию в оверхед-контуре. Поэтому в обзоре отдельный акцент сделан на практико-ориентированных сценариях внедрения/корректировки ингибиторных программ и их верификации по данным мониторинга (Khudair, 2023; Jero et al., 2024).

В большинстве критических зон коррозионный процесс протекает не в объёме жидкости, а в тонком слое водной плёнки/конденсата на поверхности металла. Состав этой плёнки может заметно отличаться от состава объёмной фазы. Локальное обогащение водной плёнки хлоридами, продуктами гидролиза

солей и аммонийными соединениями, а также периодическое «влажно-сухо» с изменением толщины плёнки приводят к тому, что один и тот же реагент может демонстрировать различную эффективность в разных участках одного и того же контура. Следовательно, при оценке ингибиторных программ принципиально важно различать (i) номинальную концентрацию ингибитора в потоке и (ii) эффективную концентрацию в коррозионно-активной фазе, непосредственно контактирующей с металлом.

С точки зрения практического применения ингибиторы в нефтепереработке целесообразно рассматривать в логике «функция → условия реализуемости → подтверждение эффекта». Функциональная роль определяет, какой параметр среды или поверхности должен быть изменён (формирование барьерного слоя, регулирование кислотности конденсата, стабилизация межфазных условий и т.д.). Условия реализуемости включают фазовое распределение реагента, время контакта с коррозионно-активной фазой, интенсивность сдвиговых напряжений, температуру и наличие конкурирующих поверхностно-активных компонентов. Подтверждение эффекта требует мониторинга, способного фиксировать как средние значения скорости коррозии за период, так и риски локализованных поражений в кратковременные интервалы и в геометрически «слабых» зонах.

В связи с этим в обзоре отдельно рассматриваются: (1) структурные предпосылки защитного эффекта органических молекул и факторы стабильности защитной плёнки; (2) узловая применимость ингибиторных программ в зависимости от доминирующего механизма повреждения; (3) критерии выбора точки ввода и условия смешения; (4) минимально достаточная система контроля для подтверждения эффективности и раннего выявления локализованных процессов.

Цель настоящего обзора обобщить и критически проанализировать современные публикации, стандарты и практические рекомендации по применению органических ингибиторов коррозии в нефтепереработке с акцентом на функциональную классификацию, механизмы действия и особенности внедрения на ключевых технологических узлах НПЗ. Для достижения цели решались задачи: (1) систематизировать механизмы ингибирования и структурные предпосылки защитного эффекта; (2) рассмотреть основные классы ингибиторов и области рационального применения; (3) проанализировать узловые особенности внедрения ингибиторных программ с учётом гидродинамики, фазового состава и температурных условий; (4) обобщить практики контроля эффективности ингибиторной защиты.

Наиболее характерные механизмы коррозии и зоны их локализации в технологическом оборудовании обобщены на рисунке 1.

CC BY NC

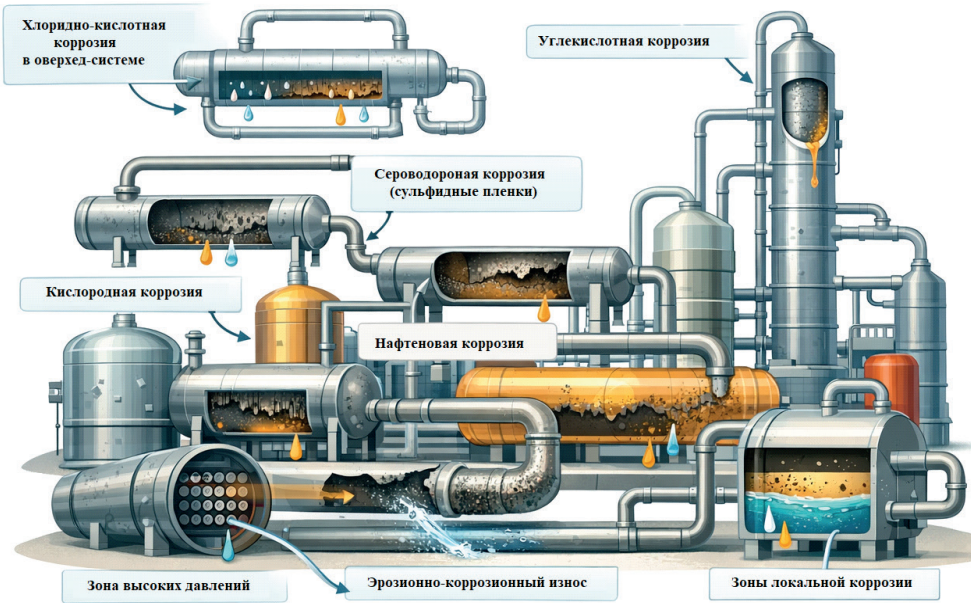


Рисунок 1. Основные коррозионные механизмы, характерные для оборудования нефтеперерабатывающих заводов

Новизна настоящего обзора заключается в узловой систематизации ингибиторных программ нефтепереработки с выделением критериев реализуемости защитного эффекта (доставка ингибитора в коррозионно-активную фазу, устойчивость плёнки в условиях сдвиговых напряжений и рисков отложений) и сопоставлением этих критериев с минимально достаточными практиками контроля эффективности для типовых технологических контуров.

Литературный обзор. Органические ингибиторы коррозии, применяемые в нефтепереработке, преимущественно относятся к поверхностно-активным соединениям, способным снижать скорость электрохимического растворения металла за счёт образования защитных слоёв на границе «металл-среда» и/или изменения кинетики анодных и катодных реакций (Hackerman et al., 1966; Popov, 2015; Mansfeld, 2005). В промышленной практике их применяют как элементы ингибиторных программ, где определяющими становятся функциональная роль реагента и соответствие условиям конкретного технологического узла.

Прикладные публикации 2022-2024 гг. по нефтепереработке показывают, что промышленная эффективность ингибиторных программ в оверхед-системах определяется настройкой режима и логистикой реагентов: выбором точки ввода, обеспечением контакта с коррозионно-активной фазой, поддержанием целевых значений pH конденсата и контролем рисков солеобразования/отложений. В работах также подчёркивается, что перенос точки ввода и корректировка дозирования могут существенно изменить картину коррозии в отдельных ветвях контура даже при неизменной “номинальной” концентрации реагента в потоке (Khudair, 2023; Jero et al., 2024).

С химико-структурной точки зрения защитное действие большинства органических ингибиторов обусловлено амфифильной природой молекул. Полярный фрагмент с донорными центрами (гетероатомы N, S, O и/или π-электронные системы) обеспечивает адсорбцию на активных участках металлической поверхности, тогда как гидрофобные углеводородные радикалы формируют барьерные свойства покрытия. Такая архитектура способствует увеличению степени покрытия поверхности и снижению её смачиваемости водной фазой, ограничивая транспорт коррозионно-активных компонентов (H^+, Cl^-, HS^-/S^{2-}, растворённый CO_2/угольная кислота) к металлу и уменьшая скорость коррозионного процесса (Bentiss et al., 2000; Noor & Al-Moubaraki, 2008). Схематическое представление адсорбционно-плёночного механизма действия органических ингибиторов коррозии, реализующегося при их взаимодействии с металлической поверхностью, показано на рисунке 2.

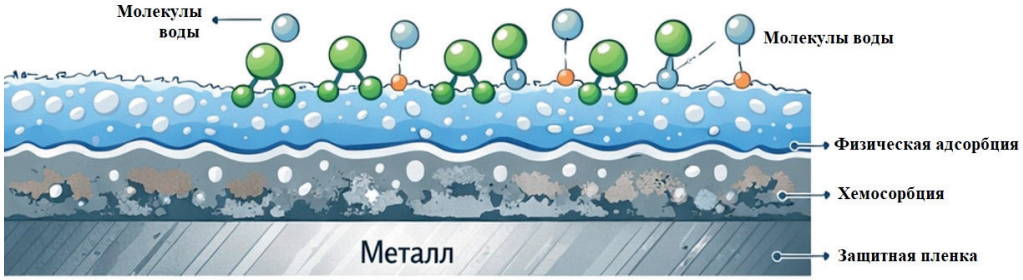


Рисунок 2. Схематическое представление адсорбционно-плёночного механизма действия органических ингибиторов коррозии

Важной характеристикой органических ингибиторов в условиях нефтепереработки является их распределение между углеводородной и водной фазами, а также способность концентрироваться на межфазной границе. Для плёнкообразующих ингибиторов целевым является достижение достаточной концентрации именно в водной плёнке (или на границе «вода-углеводороды»), поскольку электрохимическая коррозия протекает в присутствии электролита. При высоком содержании углеводородной фазы ингибитор может перераспределяться в органическую фазу, снижая доступность для водной плёнки, что формирует типовую причину расхождения лабораторных результатов и промышленной эффективности. В промышленных программах это учитывают подбором состава (молекулярная масса, полярность, наличие солюбилизирующих фрагментов) и условиями ввода/смешения, обеспечивающими контакт реагента с коррозионно-активной фазой.

Адсорбция ингибитора на металле определяется не только наличием донорных центров, но и их пространственным расположением в молекуле, возможностью многоцентрового связывания и ориентацией молекулы на поверхности. Соединения с несколькими гетероатомами (N/O/S) и π-системами способны формировать более прочные адсорбционные комплексы, что повышает стойкость

CC BY NC

плёнки при умеренных сдвиговых нагрузках. При этом увеличение длины углеводородного радикала, как правило, усиливает гидрофобность покрытия и барьерные свойства, но может ухудшать распределение в водной фазе и снижать скорость формирования защитного слоя. Таким образом, усиление барьерности за счёт гидрофобного фрагмента не является безусловным преимуществом и требует баланса между адсорбционной способностью и фазовой доступностью.

Устойчивость защитной плёнки в реальной эксплуатации определяется её механической прочностью и способностью к самовосстановлению. В условиях переменного режима смачивания и турбулентности эффективными оказываются системы, в которых молекулы ингибитора способны быстро перекрывать участки частичного разрушения покрытия («динамическая адсорбция»), что снижает вероятность формирования устойчивых локальных очагов. На участках со значительными сдвиговыми напряжениями критично не только наличие плёнки как таковой, но и её структурная однородность: разупорядоченное, «пятнистое» покрытие может снижать среднюю скорость коррозии, но оставлять условия для локализации процесса на открытых микроучастках.

Отдельный аспект – взаимодействие ингибиторной плёнки с продуктами коррозии и отложениями. В ряде контуров защитный эффект реализуется в смешанном режиме: органическая плёнка снижает смачиваемость и замедляет перенос реагентов, а продукты коррозии/солевые отложения формируют дополнительное диффузионное сопротивление. Однако при неоднородности отложений возникают микросреды с иными значениями pH и концентрациями $Cl^-/NH_4^+/HS^-$, что повышает риск подплёночной коррозии. Поэтому устойчивость ингибиторной защиты требует контроля не только электрохимического отклика, но и склонности к отложениям и их состава в критических зонах.

Формирование защитного эффекта для большинства плёнкообразующих ингибиторов связано с адсорбционно-плёночным механизмом. Адсорбция органических соединений часто описывается изотермами Лэнгмюра или Фрумкина, что отражает ограниченность числа активных центров и возможные взаимодействия молекул в адсорбционном слое. Рост концентрации ингибитора увеличивает степень покрытия и снижает долю открытых участков металла, доступных для анодного растворения и катодных реакций, что проявляется в уменьшении плотности коррозионного тока и росте поляризационного сопротивления (Bentiss et al., 2000; Noor & Al-Moubaraki, 2008; Ebenso et al., 2006). При этом в технологических средах эффективность существенно зависит от температуры и солевого фона, определяющих кинетику адсорбции и устойчивость сформированного покрытия.

Наряду с барьерным действием плёнкообразующие ингибиторы способны влиять на электрохимическую кинетику коррозионных реакций, проявляя анодный, катодный или смешанный характер ингибирования. Это выражается в изменении поляризационных кривых, снижении плотности коррозионного тока и вариации наклонов тафелевских участков, что используется для электрохимической оценки эффективности ингибирования (Mansfeld, 2005). В сероводородсодержащих

средах значимым фактором становится взаимодействие органической плёнки с сульфидными слоями железа: такие слои могут временно снижать скорость коррозии, однако при неоднородности и нарушении целостности создают условия для локализованных и подплёночных процессов (Nešić et al., 2001; Nešić, 2007).

К числу распространённых классов органических ингибиторов, применяемых в нефтепереработке, относятся имидазолины и их производные, амидоимидазолины, кватернизованные аммониевые соединения, жирные амины и амиды, а также фосфатные и фосфонатные эфиры. Имидазолины и амидоимидазолины (часто на основе жирных кислот и полиаминов) способны формировать адсорбционно-плёночное покрытие на углеродистых сталях в водно-углеводородных системах и сохранять активность в присутствии растворённых солей и сернистых компонентов (Hackerman et al., 1966; Popov, 2015). Кватернизованные аммониевые соединения характеризуются высокой поверхностной активностью и быстрым формированием защитного слоя при низких концентрациях, однако их результативность заметно зависит от pH и солевого фона. Фосфатные и фосфонатные производные рассматриваются как ингибирующие компоненты, способные усиливать устойчивость покрытия в определённых условиях среды, но требуют проверки совместимости с технологической химией.

Отдельную функциональную группу составляют нейтрализующие амины, применяемые в верхних частях атмосферных (и вакуумных) колонн и прилегающих конденсационно-охладительных контурах. Их действие связано со связыванием HCl и регулированием кислотности конденсатной плёнки; при этом устойчивый эффект возможен только при контроле солеобразования и отложений, поскольку аммонийные соли (NH_4Cl, NH_4HS) способны формировать условия для подплёночной и локализованной коррозии. В настоящей работе нейтрализующие амины (NA) рассматриваются как реагенты для регулирования pH и снижения кислотности конденсата (связывание HCl), тогда как плёнкообразующие ингибиторы (FFI) обеспечивают барьерную защиту за счёт формирования гидрофобной плёнки на поверхности металла (API 932-B, 2014; AMPP SP0108, 2018; Kankaanpää et al., 2013).

Таким образом, классификация ингибиторов в нефтепереработке должна рассматриваться в привязке к условиям реализуемости защитного механизма в конкретном контуре: способности реагента формировать устойчивое покрытие при заданной гидродинамике, фазовом составе и температуре, а также при наличии технологической химии и продуктов коррозии. Обобщённые сведения о классах ингибиторов, механизмах, ограничениях и рациональных зонах применения приведены в таблице 1.

CC BY NC

Таблица 1 – Основные классы органических ингибиторов коррозии, применяемых в нефтепереработке

Класс ингибиторов	Основные функциональные группы	Типичный механизм	Рациональная область применения	Ключевое ограничение/риск	Типовая зона ввода/ присутствия
Имидазолины	N, π-системы	Адсорбционно-плёночный	Многофазные трубопроводы, линии сырья, контуры с водной плёнкой	Срыв/истончение плёнки при высоких сдвиговых нагрузках; конкуренция с ПАВ и технологической химией	До защищаемого узла при обеспечении смешения и контакта с водной фазой
Амидоимидазолины	N, O	Смешанный (плёнка + кинетика)	Многофазные потоки, трубопроводы, отдельные узлы теплообмена	Сильная зависимость от фазового состава и температуры; вариативность адсорбции	Перед зонами, где формируется/ стабилизируется водная плёнка; в поток до критической зоны
Кватернизованные аммониевые соединения	N□	Плёнкообразующий/ ПАВ-эффект	Конденсатные плёнки, конденсационно-охладительные контуры	Чувствительность к pH и солевому фону; снижение эффекта при отложениях; риск подплёночной локализации	В линии/контуры, где требуется быстрое покрытие поверхности при наличии водной плёнки
Жирные амины и амиды	–NH–, –CONH–	Барьерный слой (снижение смачиваемости)	Водно-углеводородные системы, трубопроводы, конденсатные участки	Влияние конкурентных реагентов; нестабильность плёнки при смене режима смачивания	До участков образования водной фазы/ конденсата; при условии равномерного распределения
Нейтрализующие амины	$–NH_2$, –NH–	Регулирование pH водной фазы, связывание HCl	Верхние части атмосферных (и вакуумных) колонн и прилегающие конденсационно-охладительные контуры	Риск солеобразования (NH_4Cl/NH_4HS) при неверном балансе; неравномерность распределения по контуру	В область конденсации/в линии конденсата с контролем распределения по контуру и pH
Фосфатные/ фосфонатные эфиры	P–O, P=O	Адсорбционно-плёночный/ комплексообразование	Специализированные контуры и комбинированные программы	Требовательность к условиям формирования плёнки; совместимость с химией процесса	По результатам подбора под конкретный контур (температура, солевой фон, фазы)

Представленные в таблице 1 классы ингибиторов и их функциональные роли демонстрируют, что универсального реагента для всех условий нефтепереработки не существует: один и тот же класс соединений может проявлять различную эффективность при изменении температуры, солевого фона, фазового распределения и режима течения. Поэтому при анализе литературных данных

и отраслевых рекомендаций важно не только перечислять типы ингибиторов, но и сопоставлять их с условиями применимости и используемыми методами подтверждения защитного эффекта. Данные положения определили подход к построению настоящего обзора и критерии сопоставления источников, изложенные в следующем разделе.

Методология аналитического обзора. Настоящая работа выполнена в формате аналитического обзорного исследования и основана на систематизации и критическом сопоставлении опубликованных научных данных, отраслевых стандартов и практических рекомендаций, посвящённых применению органических ингибиторов коррозии в нефтеперерабатывающей промышленности. В качестве информационной базы использованы публикации в рецензируемых научных журналах, а также нормативные и руководящие документы API и AMPP (ex-NACE), отражающие подходы к управлению коррозией и применению реагентных программ в технологических контурах нефтеперерабатывающих установок. Дополнительно включены источники 2022-2024 гг., содержащие описание эксплуатационных случаев, корректировок ингибиторных программ и результатов промышленной верификации (изменение точек ввода, анализ причин локализации коррозии, сопоставление дозирования с pH/ионным составом конденсата и данными мониторинга) (Al-Sabagh et al., 2022; Khudair, 2023; Jero et al., 2024).

В обзор включены публикации и материалы за 2000-2024 гг. (с приоритетом работ 2015-2024 гг.), содержащие: (i) описание механизма действия органических ингибиторов (адсорбционные, плёнкообразующие и комбинированные механизмы); (ii) данные о применении реагентных программ в типовых узлах НПЗ (оверхед-системы, теплообменное оборудование, водяные и кислотные контуры); (iii) показатели оценки эффективности (скорость коррозии, потенциодинамические/импедансные параметры, результаты купонного контроля, показатели pH конденсата, склонность к солеобразованию и отложениям). Исключались источники, не относящиеся к нефтепереработке или не содержащие привязки к технологическим условиям (температура, состав фаз, гидродинамика), а также публикации без верифицируемых критериев оценки эффективности.

Отбор и анализ источников выполнялись с ориентацией на применимость к промышленным условиям НПЗ. Приоритет отдавался материалам, содержащим параметры среды и режима (температура, присутствие HCl/Cl^-, H_2S, CO_2, органических кислот, солевой фон), а также сведения о фазовом составе и гидродинамике, влияющих на формирование и устойчивость защитных плёнок ингибиторов.

Сопоставление литературных данных проводилось по единой схеме: идентификация доминирующего механизма повреждения и критической зоны, определение функционального типа ингибиторной программы (плёнкообразующая, нейтрализующая, комбинированная), оценка условий доставки и распределения реагента (точка ввода, требования к смешению, контакт с водной фазой), а также анализ ограничений (устойчивость покрытия при высоких

сдвиговых напряжениях, риск солеобразования и отложений, совместимость с технологической химией).

Отдельное внимание уделялось подходам к оценке эффективности ингибирования и мониторингу коррозионного состояния оборудования. В рамках обзора анализировались данные электрохимических методов (поляризационное сопротивление, электрохимическая импедансная спектроскопия) и интегральных испытаний с применением коррозионных купонов. При интерпретации учитывалось, что электрохимические методы позволяют фиксировать оперативный отклик системы на изменение режима и дозирования, тогда как купоны отражают интегральный эффект за период эксплуатации и применимы для верификации трендов.

Систематизация результатов обзора выполнена с привязкой к ключевым технологическим узлам: блокам подготовки и обессоливания нефти и линиям подачи сырья, горячим трубопроводам и теплообменному оборудованию, атмосферным колоннам и их верхним частям с прилегающими конденсационно-охладительными контурами, а также дренажным и конденсатоотводящим линиям.

Результаты. Анализ публикаций и отраслевых рекомендаций показывает, что практическая применимость органических ингибиторов в нефтепереработке определяется узловыми условиями эксплуатации и фазовым режимом коррозионно-активной среды. Наиболее критичными ограничивающими факторами выступают: (i) перераспределение реагента между углеводородной и водной фазами и неравномерность смачивания; (ii) локальные зоны повышенных сдвиговых напряжений, приводящие к истончению/срыву защитных плёнок; (iii) отложения, формирующие подплёночные микросреды и поддерживающие локализованную коррозию. В таблице 2 обобщены типовые технологические узлы, доминирующие факторы коррозии и минимально достаточные показатели контроля эффективности ингибиторных программ (Bentiss et al., 2000; Nešić, 2007).

Таблица 2 – Особенности применения ингибиторных программ на ключевых технологических узлах нефтеперерабатывающих заводов

Технологический узел	Доминирующие факторы коррозии	Тип ингибиторной программы	Ключевые риски	Показатели контроля (минимум)	Типовой механизм снижения эффективности
Блоки подготовки нефти и обессоливания; линии подачи сырья	Водно-солевая фаза, Cl^-, переменное водосодержание; перенос солей	Плёнкообразующие ингибиторы (с учётом совместимости)	Несовместимость с деэмульгаторами; ухудшение фазоразделения; рост переноса солей в последующие узлы	Вода и соли в нефти; Cl^- в водной фазе; стабильность эмульсии/качество разделения; тренд коррозии по купонам/электрохимии (при наличии)	Снижение эффективности из-за перераспределения ПАВ и ухудшения разделения фаз → рост переноса Cl^- и усиление коррозионной нагрузки в последующих узлах (ниже по потоку)

Горячие трубопроводы сырья; участки перед печами/ после печей	Высокая температура; сернистые компоненты; при повышенном TAN – нафтеновые кислоты; переменная гидродинамика	Специали-зированные плёнкообразующие/ комбинированные композиции (по условиям температуры)	Термическая нестабильность реагента; недостаточная плёнкообразующая способность при высоких температурах; риск локализации в зонах изменения потока	Тренд скорости коррозии (электрохимия/ купоны); контроль сырья (в т.ч. TAN при необходимости); анализ продуктов коррозии/отложений	Снижение защиты из-за деградации/ разупоря-дочивания плёнки при высокой температуре и изменения фазового режима
Теплообменное оборудование (входные участки, зоны интенсивного теплообмена)	Повышенные скорости, турбулентность; неоднородность фаз; отложения	Плёнко-образующие ингибиторы повышенной устойчивости; специали-зированные композиции	Срыв/истончение плёнки при высоких сдвиговых напряжениях; локальные «горячие точки»; подплёночная коррозия под отложениями	Электрохимический контроль (при наличии); купоны в критических зонах; анализ отложений; динамика ΔP/ тепловых параметров (как косвенные признаки)	Механический срыв плёнки + формирование подплёночных микросред под отложениями
Атмосферные (и вакуумные) колонны: верхние части и прилегающие конденсационно-охладительные контуры	HCl/Cl^- в конденсате; NH_4Cl/NH_4HS; переменное смачивание; зоны конденсации	Комбини-рованные программы: нейтрализующие амины + плёнкообразующие ингибиторы	Солеобразование и отложения аммонийных солей; подплёночная/ локализованная коррозия; неравномерность распределения реагента	pH конденсата; Cl^- и NH_4^+ в конденсате; признаки солеотложения; купоны/ электрохимия в конденсационных линиях	Снижение эффективности при неверном балансе нейтрализации и плёнко-образования + отложения солей → локализация коррозии
Дренажные и конденсато-отводящие линии; низкотем-пературные участки с периодическим смачиванием	Конден-сационные плёнки; кислые/ солёные воды; переменный режим «влажно–сухо»	Плёнко-образующие (при необходимости) + корректировка химического режима водной фазы	Локализация в застойных зонах; подплёночные процессы; трудность репрезентативного контроля	Химический анализ водной фазы; купоны в зонах риска; контроль отложений	Неустойчивость плёнки из-за переменного смачивания и локального накопления солей/продуктов коррозии

Эффективность ингибиторной программы в нефтепереработке в значительной степени определяется выбором точки ввода и режимом смешения, обеспечивающим доставку реагента к коррозионно-опасной зоне. В промышленной схеме ингибитор должен быть перенесён потоком, перераспределён между фазами и, в конечном итоге, попасть в водную плёнку/конденсат, контактирующий с металлом. Поэтому при выборе точки ввода учитывают: (i) наличие и место образования водной фазы (конденсация, выделение свободной воды, водоотделение); (ii) время контакта и длину участка до критической зоны; (iii) достаточность турбулентности/ смешения для распределения реагента; (iv) температурный профиль, влияющий на растворимость и скорость адсорбции; (v) вероятность потерь реагента на сорбции на отложениях или «перехвата» другими ПАВ.

Для плёнкообразующих ингибиторов рационально выбирать такие точки ввода, при которых обеспечивается ранний контакт с коррозионно-активной фазой и формирование первичного защитного слоя до входа в геометрически напряжённые зоны (колена, входы теплообменников, участки дросселирования). Для программ, ориентированных на верхние части колонн и конденсационно-охладительные контуры, ключевым является распределение реагента по

CC BY NC

пути образования конденсатной плёнки: даже корректное дозирование нейтрализующего компонента может быть недостаточным при неравномерном распределении по ветвям контура и при наличии зон с различными скоростями конденсации. В таких случаях эффективность программы определяется не общей дозой, а равномерностью доставки по наиболее коррозионно-опасным линиям.

При проектировании ингибиторной программы целесообразно формулировать проверяемые критерии реализуемости: (1) достижение целевых показателей водной фазы (pH, Cl^-, NH_4^+ и др.) в контрольных точках; (2) наличие признаков формирования защитного слоя (косвенно – по тренду электрохимических показателей/купонов); (3) отсутствие технологически нежелательных эффектов (ухудшение фазоразделения, рост отложений, увеличение перепада давления, ухудшение теплообмена). Такая постановка позволяет оценивать не «вообще эффективность ингибитора», а корректность всей программы как совокупности реагента, точки ввода и условий доставки.

Для ранних участков технологической схемы (подготовка нефти, обессоливание и линии подачи сырья) определяющими являются присутствие водной фазы и перенос растворённых хлоридов. Ингибиторная защита на данном этапе должна внедряться при обязательной проверке совместимости с деэмульгаторами и режимом фазоразделения, поскольку ухудшение обезвоживания/обессоливания приводит к переносу солей в последующие узлы и росту коррозионной нагрузки в атмосферных колоннах и теплообменном оборудовании.

Для горячих трубопроводов и высокотемпературных участков защитный эффект зависит от термостойкости реагента и устойчивости покрытия при изменении фазового режима; при переработке нефтей с повышенным кислотным числом возрастает вклад нафтеновой коррозии, что требует специализированных ингибиторных композиций и контроля факторов, определяющих агрессивность среды (API, 2020).

Для теплообменников и зон повышенных скоростей критичным становится гидродинамический фактор: турбулентность и высокие сдвиговые напряжения приводят к истончению или частичному срыву плёнки, а отложения создают предпосылки для подплёночных процессов. Поэтому оценка эффективности на таких участках должна учитывать локализацию повреждений и характеристики отложений, а не ограничиваться только усреднёнными значениями скорости коррозии.

Наиболее коррозионно-опасные условия характерны для верхних частей атмосферных (и вакуумных) колонн и прилегающих конденсационно-охладительных контуров. В этих условиях устойчивый эффект обеспечивает комбинированная программа: нейтрализующие амины регулируют кислотность конденсата, а плёнкообразующие ингибиторы снижают контакт металла с водной плёнкой. При этом критически важны точка ввода реагентов, согласование дозировок и контроль солеобразования, поскольку отложения аммонийных солей способны создавать условия для локализованной и подплёночной коррозии (API 932-B, 2014; Kankaanpää et al., 2013; AMPP SP0108, 2018).

В целом, подтверждение эффективности ингибиторных программ требует критериев контроля, учитывающих как средние значения, так и риск локализованной коррозии в критических точках контура.

Обсуждение. Органические ингибиторы коррозии в нефтепереработке не следует рассматривать как универсальное средство, эффективность которого определяется исключительно химическим составом реагента или его номинальной концентрацией в потоке. Практическая результативность ингибиторных программ формируется эксплуатационными условиями, определяющими реализуемость защитного механизма в критических зонах: достигает ли ингибирующий компонент поверхности металла в требуемой форме, формируется ли сплошной защитный слой и сохраняется ли он при переменном режиме течения и фазового распределения. В этой связи оценка ингибирования в нефтепереработке должна опираться на узловые условия формирования плёнки и риски локализованных повреждений, а не только на «средний эффект по системе».

С практической точки зрения целесообразно выделять типовые сценарии снижения эффективности. Первый сценарий связан с недостаточной реализуемостью доставки реагента в критические зоны (ошибки точки ввода, недостаточное смешение, неблагоприятное фазовое распределение). Второй сценарий обусловлен деградацией защитного покрытия в зонах повышенной гидродинамической нагрузки и турбулентности. Третий сценарий характерен для высокотемпературных контуров, где изменяются условия адсорбции/десорбции и прочность плёночной структуры; здесь возрастает роль подбора специализированных композиций и режима ввода. Четвёртый сценарий связан с взаимодействием ингибиторов с технологической химией и поверхностно-активными компонентами системы: конкуренция за адсорбционные центры и изменение межфазных свойств способны уменьшать степень покрытия и снижать устойчивость защитного слоя. Пятый сценарий – подплёночные процессы под отложениями: микросреды с отличающимися значениями pH и концентрациями агрессивных ионов могут поддерживать локализованную коррозию даже при наличии ингибитора. Особенно критично это для верхних частей колонн и конденсационно-охладительных контуров, где совместное влияние кислых конденсатных плёнок и солеобразования аммонийных соединений формирует предпосылки для локализованных поражений.

Следует отметить, что описанные сценарии в последние годы подтверждаются прикладными публикациями по эксплуатации CDU-оверхедов: перенос/оптимизация точки ввода и корректировка химического режима водной фазы рассматриваются как ключевые меры стабилизации коррозионной обстановки, особенно при рисках солеобразования и подплёночных процессов. Это подчёркивает необходимость оценивать не только “тип ингибитора”, но и реализуемость программы в конкретных ветвях контура и по данным мониторинга (Khudair, 2023; Jero et al., 2024).

Выбор и интерпретация методов мониторинга имеют принципиальное значение. Купоны дают интегральную оценку за период, но могут не фиксировать кратковременные пики коррозионной активности и локальные нарушения плёнок.

CC BY NC

Электрохимические методы обеспечивают оперативный отклик, однако требуют корректной постановки измерений и учёта влияния ингибиторной плёнки на параметры переноса заряда и ёмкостные характеристики поверхности (Mansfeld, 2005). Наиболее надёжный подход связан с интеграцией электрохимического контроля, купонных испытаний и анализа водной фазы/конденсатов.

Для повышения воспроизводимости результатов в промышленных условиях ингибиторную защиту целесообразно внедрять по алгоритму, ориентированному на узловую специфику и проверяемые критерии. На первом этапе выполняют идентификацию доминирующего механизма повреждения и коррозионно-опасной фазы (водная плёнка/конденсат, кислый конденсат, сероводородсодержащая вода, участки с повышенной скоростью потока и т.д.). На втором этапе выбирают функциональный тип программы: плёнкообразующая, нейтрализующая или комбинированная, определяя, какие параметры должны быть изменены (покрытие поверхности, pH, устойчивость конденсатной плёнки, снижение смачиваемости, уменьшение агрессивности электролита). На третьем этапе обосновывают точку ввода и условия доставки реагента (смешение, время контакта, распределение по ветвям контура), а также оценивают совместимость с действующей технологической химией. На четвёртом этапе задают систему подтверждения эффекта: определяют набор контрольных точек и показателей, которые должны реагировать на изменение дозировки. На пятом этапе выполняют пилотную настройку дозирования с учётом запаздывания отклика системы и особенностей накопления защитной плёнки, после чего фиксируют рабочий диапазон доз и критерии корректировки. Такой подход позволяет отличать ситуацию «ингибитор не работает» от ситуации «программа реализована некорректно» (ошибка ввода, распределения, конкуренция реагентов, локальные отложения и т.п.).

Современные тенденции развития ингибиторных технологий связаны с повышением экологической безопасности реагентов, снижением токсичности и расширением применения «зелёных» ингибиторов при сохранении требуемого уровня защиты (Verma et al., 2021). Дополнительно развивается интеграция ингибиторных программ с цифровыми инструментами мониторинга и моделирования, позволяющими учитывать эксплуатационные факторы, прогнозировать коррозионные риски и оптимизировать расход реагентов.

Таблица 3 – Методы мониторинга и верификации эффективности ингибиторной защиты (в нефтепереработке)

Метод контроля	Что отражает	Сильная сторона	Ограничение	Когда особенно полезен
Купонные испытания (масса/ повреждения)	Интегральная скорость и характер коррозии за период	Реальная экспозиция, оценка локализации по виду повреждений	Не фиксирует кратковременные пики; нужна корректная установка и экспозиция	Подтверждение трендов; сравнение «до/ после» изменения программы
Электро-химический контроль (LPR/ Rp)	Оперативный отклик системы на изменения режима/ дозировки	Быстрый сигнал; удобно для настройки дозирования	Чувствителен к состоянию поверхности/плёнок; требует грамотной интерпретации	Пуск/настройка программы; контроль нестабильных режимов

EIS (импеданс)	Сопротивления и ёмкостные характеристики поверхности/ плёнок	Диагностика состояния плёнки и процессов переноса заряда	Сложнее постановка и анализ; чувствителен к шумам/условиям	Углублённая оценка качества защитной плёнки
Химический анализ водной фазы/конденсата (pH, Cl^-, NH_4^+ и др.)	Агрессивность электролита в критических зонах	Прямые «индикаторы режима» для верхних частей колонн	Не показывает скорость коррозии напрямую	Контроль нейтрализации, солеобразования и риска подплёночных процессов
Анализ отложений/ продуктов коррозии	Склонность к подплёночным процессам и механизм повреждения	Выявляет причины локализации (соли/ сульфиды/оксиды)	Периодический характер, зависит от отбора проб	При повторяемых дефектах и подозрении на подплёночную коррозию
Косвенные технологические индикаторы (ΔP, теплопередача)	Накопление отложений/ изменение гидродинамики	Раннее предупреждение о проблемах отложений	Косвенность, требуется подтверждение	Для теплообменников и участков со склонностью к отложениям

Таблица 3 отражает, что на практике требуется сочетание оперативных и интегральных методов контроля, дополняемых анализом водной фазы и отложений. Выбор минимального набора контроля зависит от узла: для верхних частей колонн и конденсационно-охладительных контуров критичны индикаторы режима водной фазы (pH, Cl□, NH_4□) и признаки солеобразования; для теплообменников и зон высоких скоростей – сочетание купонов/электрохимии с анализом отложений и косвенными показателями нарушения теплообмена.

Заключение. Проведённый аналитический обзор показывает, что органические ингибиторы коррозии сохраняют ключевую роль в системе противокоррозионной защиты оборудования нефтеперерабатывающих заводов, обеспечивая снижение коррозионной активности технологических сред и повышение эксплуатационной надёжности при умеренных эксплуатационных затратах.

Установлено, что устойчивость защитного эффекта в промышленной эксплуатации определяется корректностью ингибиторной программы на уровне конкретного технологического узла: обоснованием зоны и способа ввода, условиями распределения реагента по фазам и критическим участкам, устойчивостью покрытия при фактической гидродинамике и температуре, а также совместимостью с технологической химией. Наиболее критичными остаются верхние части атмосферных (и вакуумных) колонн и прилегающие конденсационно-охладительные контуры, где устойчивые результаты достигаются комбинированными программами при контроле pH конденсата и склонности к солеотложениям. Для зон высоких скоростей и теплообменного оборудования приоритетным является устойчивость плёнки и контроль локализации повреждений; для блоков подготовки нефти и обессоливания – подтверждение совместимости ингибитора с реагентами, влияющими на фазоразделение и перенос солей.

Показано, что репрезентативная верификация эффективности ингибиторной

CC BY NC

защиты требует комплексного мониторинга по принципу «оперативный сигнал + интегральная верификация»: электрохимический контроль для отслеживания динамики и купоны/анализ водной фазы для подтверждения накопленного эффекта и выявления рисков локализованной коррозии. Соблюдение указанных принципов обеспечивает переход от применения ингибитора как единичного реагента к управлению ингибиторной программой как инструментом снижения эксплуатационных рисков и повышения надёжности оборудования нефтеперерабатывающих заводов.

Использование инструментов ИИ. При подготовке рукописи использовались инструменты искусственного интеллекта в качестве вспомогательных средств для языковой и стилистической правки текста, а также для структурирования обзорного материала. Использование ИИ не влияло на научное содержание, интерпретацию данных и выводы исследования. Ответственность за достоверность и оригинальность представленного материала полностью несут авторы.

References

API. (2020). API RP 571: Damage mechanisms affecting fixed equipment in the refining industry (3rd ed.). American Petroleum Institute. (in English)

API. (2014). API RP 932-B: Design, materials, fabrication, operation, and inspection of hydrogen chloride corrosion control systems for refineries. American Petroleum Institute. (in English)

Bentiss F., Traisnel M., & Lagrenée M. (2000). The substituted 1,3,4-oxadiazoles as corrosion inhibitors of mild steel in acidic media. Corrosion Science, 42(1). – P. 127-146. https://doi.org/10.1016/S0010-938X(99)00049-3 (in English)

Churchill S.W., & Usagi R. (1972). A general expression for the correlation of heat and mass transfer. AIChE Journal, 18(6). – P. 1121-1128. https://doi.org/10.1002/aic.690180613 (in English)

Ebenso E.E., Eddy N.O., & Odiongenyi A.O. (2006). Adsorption and corrosion inhibiting properties of some ethanolamines on mild steel in acidic medium. Portugaliae Electrochimica Acta, 24(2). – P. 219-231. (in English)

Hackerman N., Snavely E.S., & Payne J.R. (1966). The inhibition of steel corrosion by imidazolines. Corrosion, 22(8). – P. 239-246. https://doi.org/10.5006/0010-9312-22.8.239 (in English)

Kankaanpää H., Salonen J., Rantala J., & Kuikka S. (2013). Overhead corrosion in crude distillation units–Mitigation and monitoring. Materials Performance, 52(2). – P. 50-56. (in English)

Kermani M.B., & Morshed A. (2003). Carbon dioxide corrosion in oil and gas production–A compendium. Corrosion, 59(8). – P. 659-683. https://doi.org/10.5006/1.3277596 (in English)

Mansfeld F. (2005). Electrochemical methods for corrosion monitoring. Corrosion Science, 47(12). – P. 3178-3189. https://doi.org/10.1016/j.corsci.2005.04.012 (in English)

Nešić S. (2007). Key issues related to modelling of internal corrosion of oil and gas pipelines–A review. Corrosion Science, 49(12). – P. 4308-4338. https://doi.org/10.1016/j.corsci.2007.06.006 (in English)

Nešić S., Lunde L., & Nyborg R. (2001). Mechanistic modeling of CO□ corrosion with protective iron carbonate films. Corrosion, 57(7). – P. 603-611. https://doi.org/10.5006/1.3280607 (in English)

Popov B.N. (2015). Corrosion engineering: Principles and solved problems. Elsevier. (in English)

Rajahram S.S., Harvey T.J., & Wood R. J.K. (2009). Erosion–corrosion mechanisms in pipelines–A review. Wear, 267(11). – P. 195-208. https://doi.org/10.1016/j.wear.2009.01.007 (in English)

Schweitzer P. A. (2018). Corrosion and corrosion protection handbook (2nd ed.). CRC Press. (in English)

Al-Sabagh A.M., Migahed M.A., Sayed G.H., & Khafagi M.G. (2022). Recent advances in corrosion inhibition of carbon steel in acidic media. Journal of Petroleum Science and Engineering, 208. – P. 109282. https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.109282 (in English)

Noor E.A., & Al-Moubaraki A.H. (2008). Thermodynamic study of metal corrosion and inhibitor

adsorption processes in mild steel/1-methyl-4[1H]-pyridinone system. Materials Chemistry and Physics, 110(1). – P. 145-154. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2008.01.028 (in English)

Verma C., Ebenso E.E., & Quraishi M.A. (2021). Sustainable and green corrosion inhibitors for metals: A review. Journal of Molecular Liquids, 321. – P. 114919. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114919 (in English)

Jero D., Caussé N., & Pébère N. (2024). Film-forming amines as corrosion inhibitors: a state-of-the-art review. npj Materials Degradation, 8. – P. 111. https://doi.org/10.1038/s41529-024-00523-0 (in English)

Li R., Huang H., Wang X., & Wang Y. (2022). Effect of ammonium salt on corrosion of pipelines and components in a crude oil distillation column: Electrochemical and AIMD studies. Corrosion Science, 203. – P. 110362. https://doi.org/10.1016/j.corsci.2022.110362 (in English)

Khudair W.S., Shattab S.N., Mohammed M.A., & Kahthim M.A. (2023). Corrosion in Crude Oil Distillation Units (CDUs) and a Study of Reducing Its Rates by Changing Chemical Injection Sites. Journal of Petroleum Research & Studies, 13(3). – P. 143-161. https://doi.org/10.52716/jprs.v13i3.718 (in English)

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 399–413

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.428

UDC: 631.862.1
IRSTI: 31.23

©Omarov B.T., Altybayev Zh.M., Serikbayeva B.S.*, 2026.
M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan.
*E-mail: sbagdash@bk.ru

PRODUCTION OF BIOGUMUSA PUTEM VERMICOMPOSTIROVANIA ORGANIC WASTES AND ISSLEDOVANIE EGO AGROECOLOGICAL EFFECTIVENESS

Omarov Bekzhan — PhD, M.Auezov South Kazakhstan University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: bekjzna_aziz@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-1903-8466;
Altybayev Zhaxylyk — PhD, Associated professor, M.Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: zhaltybayev85@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9091-4575;
Serikbayeva Bagdagul — PhD, junior researcher, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: sbagdash@bk.ru, https://orcid.org/0009-0001-4408-7967.

Abstract. This study is dedicated to the analysis of the vermicomposting process as a technology for converting organic waste into a highly effective organic fertilizer – vermicompost (biohumus). The relevance of the research is determined by the need to address an urgent environmental problem for Kazakhstan – the disposal of significant volumes of organic waste from the agro-industrial complex and the municipal sector – and the parallel task of restoring the fertility of degraded soils. In a global context, the work aligns with key sustainable development trends, as vermicomposting is recognized as an effective closed-cycle technology that ensures a reduction in greenhouse gas emissions and the conversion of organic waste into a resource for producing vermicompost. The latter, in turn, serves not only as a highly effective organic fertilizer but also as a means of soil remediation, enhancing its biodiversity and resilience to climatic stresses, which directly contributes to achieving the UN Sustainable Development Goals. The work pays special attention to the role of compost worms Eisenia fetida in the biodegradation of waste and the transformation of its biochemical composition. The methodology is based on an analytical review of scientific literature with an assessment of key process parameters: reduction of chemical oxygen demand (COD), dynamics of the C:N ratio, changes in acidity (pH), microbial activity, and the influence of the final product on plant growth. The analysis results confirm that vermicomposting can significantly reduce

the organic load on the environment, and the obtained vermicompost possesses high agronomic value, reliably increasing agricultural crop yields, which is consistent with international data. The article systematizes the technological stages of vermicomposting, as well as the biological and technical requirements for its organization. The potential and systemic barriers to implementing this technology in Kazakhstan, including regulatory-legal and infrastructural constraints, are separately examined. Thus, the research substantiates the feasibility of developing vermicomposting as an innovative, resource-saving, and environmentally safe waste disposal method, contributing to the transition to sustainable agriculture and closed production cycles.

Keywords: biohumus, vermicomposting, organic waste, soil fertility, productivity, sustainable agriculture, environmental impact

Acknowledgements. *This scientific article was prepared based on the results of research conducted within the framework of the project AP27511917 «Production of biohumus and increasing soil fertility and improving crop productivity through recycling of organic waste» funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan.*

For citations: *Omarov B.T., Altybayev Zh.M., Serikbayeva B.S. Production of Biohumus by Vermicomposting of Organic Wastes and Study of Its Agroecological Effectiveness. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 399–413. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.428*

©Омаров Б.Т., Алтыбаев Ж.М., Серикбаева Б.С.*, 2026.
М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.
*E-mail: sbagdash@bk.ru

ОРГАНИКАЛЫҚ ҚАЛДЫҚТАРДЫ ВЕРМИКОМПОСТИНГ АРҚЫЛЫ БИОГУМУС ӨНДІРУ ЖӘНЕ ОНЫҢ АГРОЭКОЛОГИЯЛЫҚ ТИІМДІЛІГІН ЗЕРТТЕУ

Омаров Бекжан — PhD, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
Email: bekjzna_aziz@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-1903-8466;
Алтыбаев Жақсылық — PhD, доцент, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
Email: zhaltybayev85@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9091-4575;
Серикбаева Багдагуль — PhD, аға ғылыми қызметкер, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
Email: sbagdash@bk.ru, https://orcid.org/0009-0001-4408-7967.

Аннотация. Бұл зерттеу органикалық қалдықтарды жоғары тиімді органикалық тыңайтқыш – биогумусқа айналдыру технологиясы ретінде вермикомпостау процесін талдауға арналған. Зерттеудің өзектілігі Қазақстан үшін өзекті экологиялық мәселе – агроөнеркәсіптік кешен мен муниципалдық

CC BY NC

сектордың айтарлықтай көлемдегі органикалық қалдықтарын қайта өңдеу және бір мезгілде деградацияланған топырақтардың құнарлылығын қалпына келтіру міндетін шешу қажеттілігімен анықталады. Жаһандық контексте жұмыс тұрақты дамудың негізгі тенденцияларына сәйкес келеді, өйткені вермикомпостау тұйық циклдың тиімді технологиясы ретінде танылып, парниктік газдардың шығарындыларын азайтуды және органикалық қалдықтарды биогумус өндіру ресурстары санатына ауыстыруды қамтамасыз етеді. Соңғысы, өз кезегінде, тек жоғары тиімді органикалық тыңайтқыш ретінде ғана емес, сонымен қатар топырақты ремедиациялау, оның биологиялық әралуандылығын және климаттық ахуалға төзімділігін арттыру құралы ретінде де әрекет етеді, бұл БҰҰ-дың Тұрақты даму мақсаттарына қол жеткізуге тікелей ықпал етеді. Жұмыста қалдықтарды биодеградациялау және олардың биохимиялық құрамын түрлендірудегі Eisenia fetida компост жыланбастарының рөліне ерекше назар аударылады. Әдіснама химиялық оттегі сұранысын (ХПК) төмендету, C:N қатынасы динамикасы, қышқылдық (pH) өзгерістері, микробиологиялық белсенділік және соңғы өнімнің өсімдіктердің өсуіне әсері сияқты негізгі параметрлерді бағалаумен қатар ғылыми әдебиеттерге аналитикалық шолу жасауға негізделген. Талдау нәтижелері вермикомпостау қоршаған ортаға органикалық жүктемені айтарлықтай төмендетуге мүмкіндік береді және алынған биогумус жоғары агрономиялық құндылыққа ие болып, ауылшаруашылығы дақылдарының өнімділігін сенімді түрде арттыратындығын растайды, бұл халықаралық деректермен үйлесімді. Мақалада вермикомпостаудың технологиялық кезеңдері, оны ұйымдастырудың биологиялық және техникалық талаптары жүйелендірілген. Бұл технологияны Қазақстанда енгізу үшін нормативтік-құқықтық және инфрақұрылымдық шектеулерді қоса алғанда, әлеует пен жүйелік кедергілер бөлек қарастырылады. Осылайша, зерттеу вермикомпостауды тұрақты ауылшаруашылыққа және тұйық өндірістік циклдарға көшуге ықпал ететін, инновациялық, ресурс үнемдейтін және экологиялық қауіпсіз қалдықтарды өңдеу әдісі ретінде дамытудың мақсатқа сай екендігін негіздейді.

Түйін сөздер: биогумус, вермикомпостинг, органикалық қалдықтар, топырақ құнарлылығы, өсімдік өнімділігі, тұрақты ауыл шаруашылығы, экологиялық әсер

©Омаров Б.Т., Алтыбаев Ж.М., Серикбаева Б.С.*, 2026.
Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан.
*E-mail: sbagdash@bk.ru

ПОЛУЧЕНИЕ БИОГУМУСА ПУТЕМ ВЕРМИКОМПОСТИРОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ОТХОДОВ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО АГРОЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ

Омаров Бекжан — PhD, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан, Email: bekjzna_aziz@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-1903-8466;
Алтыбаев Жаксылык — PhD, доцент, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

Email: zhaltybayev85@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-9091-4575;
Серикбаева Багдагуль — PhD, старший научный сотрудник, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова,
Шымкент, Казахстан,
Email: sbagdash@bk.ru, https://orcid.org/0009-0001-4408-7967.

Аннотация. стоящее исследование посвящено анализу вермикомпостирования как технологии переработки органических отходов в высокоэффективное органическое удобрение - биогумус. Актуальность исследования обусловлена необходимостью решения одной из значимых экологических проблем Казахстана -- утилизации значительных объемов органических отходов агропромышленного комплекса и муниципального сектора, а также сопутствующей задачи восстановления плодородия деградированных почв. В глобальном контексте работа соответствует ключевым тенденциям устойчивого развития, поскольку вермикомпостирование признано эффективной технологией замкнутого цикла, обеспечивающей снижение выбросов парниковых газов и перевод органических отходов в категорию ресурсов для производства биогумуса. Последний, в свою очередь, выступает не только как высокоэффективное органическое удобрение, но и как средство ремедиации почв, повышения их биоразнообразия и устойчивости к климатическим стрессам, что напрямую способствует достижению Целей устойчивого развития ООН. В работе особое внимание уделено роли компостных червей *Eisenia fetida* в биодеградации отходов и трансформации их биохимического состава. Методология исследования основана на аналитическом обзоре научной литературы с оценкой ключевых параметров процесса, включая снижение химического потребления кислорода (ХПК), динамику соотношения C:N, изменения кислотности (pH), микробиологической активности и влияние конечного продукта на рост растений. Результаты анализа подтверждают, что вермикомпостирование позволяет существенно снизить органическую нагрузку на окружающую среду, а получаемый биогумус обладает высокой агрономической ценностью и достоверно повышает урожайность сельскохозяйственных культур, что согласуется с международными данными. В статье систематизированы технологические этапы вермикомпостирования, а также биологические и технические требования к его организации. Отдельно рассмотрены потенциал и системные барьеры внедрения данной технологии в Казахстане, включая нормативно-правовые и инфраструктурные ограничения. Таким образом, исследование обосновывает целесообразность развития вермикомпостирования как инновационного, ресурсосберегающего и экологически безопасного метода утилизации отходов, способствующего переходу к устойчивому сельскому хозяйству и замкнутым производственным циклам.

Ключевые слова: биогумус, вермикомпостирование, органические отходы, плодородие почвы, урожайность, устойчивое сельское хозяйство, воздействие на окружающую среду

Кіріспе. Зерттеу өзектілігі негізінде соңғы онжылдықта ауыл шаруашылығында өнімділікті арттыру мақсатында минералды тыңайтқыштарды қолдану көлемі

айтарлықтай өсті. Алайда мұндай тәсіл топырақтың табиғи құнарлылығын төмендетіп, экологиялық тепе-теңдікті бұзуда. Минералды тыңайтқыштардың шамадан тыс қолданылуы топырақтың қышқылдануына, гумус қорының азаюына және агроэкожүйелердің деградациясына әкеліп соғады. Сонымен қатар, ауыл шаруашылығы мен тұрмыстық салада жиналатын органикалық қалдықтардың көлемі жылдан жылға артып келеді, оларды тиімді түрде кәдеге жарату мәселесі әлі де толық шешімін таппаған.

Осы тұрғыда органикалық қалдықтарды қайта өңдеу арқылы экологиялық таза әрі тиімді тыңайтқыш – биогумус өндірудің маңызы зор (Efimov, 2019; Ismail, 2005). Биогумус өндірісі қалдықтарды залалсыздандырудың ғана емес, сонымен бірге топырақтың құнарлылығын қалпына келтірудің және ауыл шаруашылығы дақылдарының өнімділігін арттырудың тиімді жолы ретінде қарастырылуда (Kadenova, 2021).

Зерттеу барысында биогумус түзілу процесіндегі негізгі биохимиялық өзгерістерді анықтау – ғылыми тұрғыдан өзекті мәселе (Domínguez et.al., 2004). Атап айтқанда, органикалық жүктеменің төмендеуі (COD), көміртек пен азот арақатынасының (C:N) тұрақтануы, топырақ ортасының pH өзгерісі, сондай-ақ биогумустың әртүрлі дозаларының ауыл шаруашылығы дақылдарының өсуіне және өнімділігіне әсерін бағалау биогумусты ғылыми негізде ауыл шаруашылығына енгізуге мүмкіндік береді.

Мәселенің ғылыми негіздемесі бойынша топырақтың құнарлылығы – ауыл шаруашылығы өнімділігінің негізгі факторы. Дәстүрлі минералды тыңайтқыштарды қолдану қысқа мерзімді нәтиже бергенімен, олардың ұзақмерзімді әсері топырақ құрылымының бұзылуына, пайдалы микрофлораның азаюына және органикалық заттар қорының төмендеуіне алып келеді. Бұл жағдай топырақтың деградациясына, климаттық өзгерістерге бейімделу мүмкіндігінің әлсіреуіне және ауыл шаруашылығының тұрақсыздығына себеп болады.

Осыған байланысты, топырақтың органикалық құрамын байытуға және оның экологиялық тұрақтылығын сақтауға мүмкіндік беретін биологиялық әдістерді қолдану өзекті болып отыр. Соның ішінде, вермикомпостинг – яғни жер құрттарының көмегімен органикалық қалдықтарды өңдеу – ғылыми негізделген, экологиялық тұрғыдан тиімді технология ретінде кеңінен танылуда.

Жер құрттары мен микроорганизмдердің бірлескен әрекеті нәтижесінде органикалық қалдықтар гумусқа ұқсас, биологиялық белсенді заттарға бай өнімге – биогумусқа айналады. Бұл тыңайтқыш топырақтағы азот, фосфор және калийдің қолжетімділігін арттырып қана қоймай, топырақ құрылымын жақсартады, pH деңгейін тұрақтандырады және өсімдіктердің ауруларға төзімділігін күшейтеді.

Ғылыми деректерге сүйенсек, биогумустың құрамында өсімдік өсуін ынталандыратын фитогормондар (ауксиндер, гиббереллиндер, цитокининдер), сондай-ақ топырақтың микробиологиялық белсенділігін арттыратын заттар бар. Мұндай қасиеттер биогумусты минералды тыңайтқыштарға балама ретінде ғана емес, сонымен қатар экологиялық таза ауыл шаруашылығы жүйелерін дамытуда стратегиялық маңызы бар құралға айналдырады.

Бұл зерттеудің басты мақсаты – ауыл шаруашылығында жиналатын органикалық қалдықтарды тиімді пайдалану арқылы экологиялық тұрғыдан таза тыңайтқыш – биогумус өндіру мүмкіндігін ғылыми негіздеу және оның топырақ құнарлылығына, ауыл шаруашылығы дақылдарының өсуі мен өнімділігіне әсерін жан-жақты бағалау болып табылады. Қазіргі таңда минералды тыңайтқыштарға тәуелділіктің артуы топырақтың табиғи құнарлылығын төмендетіп қана қоймай, агроэкожүйелердің экологиялық тұрақтылығына қауіп төндіріп отыр. Осыған байланысты қалдықтарды қайта өңдеу арқылы алынатын биогумустың тиімділігін дәлелдеу – аграрлық ғылым үшін де, ауыл шаруашылығы өндірісі үшін де өзекті міндет.

Зерттеу жұмысының мақсатына жету үшін бірнеше ғылыми міндеттер қойылды. Біріншіден, биогумус түзілу процесінде жүретін негізгі биохимиялық өзгерістерді айқындау, атап айтқанда органикалық жүктеменің төмендеуі (COD көрсеткіші), көміртек пен азот арақатынасының (C:N) тұрақтануы және pH деңгейінің өзгеруін анықтау көзделді. Екіншіден, алынған биогумустың химиялық құрамын зерттеп, өсімдікке қолжетімді минералды элементтердің мөлшерін бағалау жоспарланды. Үшіншіден, әртүрлі дозада енгізілген биогумустың ауыл шаруашылығы дақылдарының өсу динамикасына, физиологиялық дамуына және өнімділік көрсеткіштеріне әсерін тәжірибелік жолмен дәлелдеу қарастырылды.

Сонымен қатар, зерттеу барысында алынған нәтижелерді жүйелі түрде өңдеп, графиктер, диаграммалар, биохимиялық реакциялар және суреттер арқылы көрсету көзделіп отыр. Бұл тәсіл зерттеу деректерінің ғылыми негізділігін арттыруға, ал ұсынылған әдістердің тәжірибелік маңызын көрсетуге мүмкіндік береді. Жүргізілген зерттеу жұмысының нәтижесінде алынған қорытындылар биогумусты экологиялық таза, тиімді тыңайтқыш ретінде ауыл шаруашылығына енгізудің ғылыми-тәжірибелік негізін қалыптастырады және тұрақты агроэкожүйелерді дамытуға үлес қосады.

Зерттеу әдістер мен материалдар. Зерттеу жұмысына ауыл шаруашылығы мен тұрмыстық сектордан алынған әртүрлі органикалық қалдық түрлері пайдаланылды. Негізгі шикізат ретінде мал шаруашылығы қалдықтары (сиыр қиы, қой қиы), құс фабрикаларынан алынған құс саңғырығы, сондай-ақ өсімдік тектес қалдықтар – жеміс-жидек пен көкөніс қалдықтары, жапырақтар, сабан және бақша өнімдерінің қалдықтары қолданылды. Бұған қоса, тұрмыстық деңгейде жиналған органикалық ас қалдықтары (картоп қабығы, жеміс-жидек қабықтары, шай және кофе қалдықтары) қосымша шикізат ретінде пайдаланылды.

Бұл органикалық қалдықтар химиялық құрамы мен ылғалдылық деңгейіне қарай алдын ала сұрыпталды. Әсіресе, мал қиы мен құс саңғырығы құрамында азот, фосфор және калий элементтері көп мөлшерде кездеседі, олар биогумустың қоректік құндылығын арттыруға ықпал етеді. Өсімдік тектес қалдықтар целлюлоза мен лигнинге бай болғандықтан, биогумус құрылымын тұрақтандыруда маңызды рөл атқарады. Ас үй қалдықтары тез ыдырайтын органикалық заттарға бай болғандықтан, жер құрттарының белсенділігін күшейтеді және вермикомпостинг процесін жылдамдатады.

CC BY NC

Барлық алынған шикізат біркелкі масса түзу үшін ұнтақталып, ылғалдылық деңгейі 65–75% шамасында ұсталды. Шикізат құрамының бастапқы химиялық көрсеткіштері (C:N қатынасы, pH, ылғалдылық, органикалық заттар мөлшері) анықталып, кейінгі биогумус сапасымен салыстырылды.

Зерттеу жұмыстары биогумус өндіру үшін ең тиімді жер құрттарының бірі – Eisenia fetida (қызыл калифорниялық жер құрттары) қолданылды. Бұл түр жоғары репродуктивтік қабілетімен, әртүрлі органикалық қалдықтарға бейімділігімен және жоғары биоконверсиялық мүмкіндігімен ерекшеленеді.

Құрттар арнайы дайындалған субстратта өсірілді. Субстрат органикалық қалдықтардың (мал қиы, құс саңғырығы, өсімдік қалдықтары) алдын ала өңделген қоспасынан тұрды. Субстраттың бастапқы ылғалдылығы 65-75% деңгейінде сақталды, ал pH көрсеткіші 6,5-7,5 аралығында реттелді. Бұл диапазон жер құрттарының белсенді тіршілігі үшін ең қолайлы орта болып табылады.

Температуралық режимді сақтау үшін вермикомпостинг үдерісі 20-25 °C аралығында жүргізілді, өйткені бұл температура құрттардың белсенді көбеюі мен органикалық қалдықтарды тиімді өңдеуі үшін оңтайлы көрсеткіш болып табылады.

Құрттар субстратқа 1 кг шикізатқа шаққанда орта есеппен 1,5-2,0 мың дана мөлшерінде енгізілді. Әр 7-10 күн сайын субстраттың ылғалдылығы бақылауда ұсталып, қажет болған жағдайда таза су бүркіліп отырды. Процесс барысында субстрат толықтай ыдырағанға дейін 60-90 күн аралығында тұрақты бақылау жүргізілді.

Қорытындысында алынған биогумус біртекті құрылымға ие, қара-қоңыр түсті, иісі жағымды, топырақтың агрономиялық қасиеттерін жақсартатын экологиялық таза тыңайтқыш ретінде сипатталды.

Зерттеу барысында биогумус түзілу процесінде жүретін негізгі биохимиялық және агрохимиялық өзгерістерді анықтау үшін кешенді әдістемелер қолданылды.

Химиялық талдау әдістері. Органикалық заттардың ыдырау деңгейін сипаттау үшін химиялық оттегіні тұтыну (COD) көрсеткіші стандартты калий дихроматы әдісі бойынша анықталды. Алынған үлгілер алдын ала сүзгіден өткізіліп, спектрофотометр арқылы талданды. COD деңгейінің төмендеуі органикалық заттардың минералдану дәрежесін бағалауға мүмкіндік берді.

Көміртек пен азот арақатынасы (C:N). Көміртек мөлшері Вальке-Блэк әдісімен, ал жалпы азот Кьельдал әдісімен анықталды. C:N арақатынасының өзгерісі органикалық қалдықтардың гумустық қосылыстарға айналу процесін сипаттау үшін пайдаланылды.

pH көрсеткіші. Сулы экстракт алу арқылы өлшенді (1:2,5 топырақ/су арақатынасы). pH деңгейі pH-метрдің көмегімен анықталды. Бұл көрсеткіш жер құрттарының белсенділігіне және биогумус сапасына тікелей әсер ететін негізгі фактор болып табылады.

Микробиологиялық талдау. Биогумус құрамындағы микрофлораны зерттеу үшін стандартты егу әдісі қолданылды. Жергілікті топырақ бактерияларының (азотфиксациялаушы, фосфатмобилизациялаушы және целлюлоза ыдыратушы

бактериялар) сандық құрамы Петри табақшаларында арнайы қоректік орталарда өсірілді (Montgomery, 2017). Микробиологиялық белсенділіктің артуы биогумустың биологиялық тиімділігін бағалауға негіз болды.

Биогумустың агрономиялық тиімділігін бағалау мақсатында тәжірибелік өсіру жұмыстары жүргізілді. Сынақ үшін ауыл шаруашылығында жиі қолданылатын дақылдар – бидай (Triticum aestivum L.) және жүгері (Zea mays L.) таңдап алынды. Топыраққа биогумустың әртүрлі дозалары (0%, 5%, 10%, 20%) енгізіліп, дақылдардың өсу қарқыны, жапырақ биомассасы және өнімділік көрсеткіштері бақылауға алынды. Тәжірибелер үш қайталымда жүргізілді, нәтижелер статистикалық әдістермен (ANOVA) өңделді.

Статистикалық өңдеу бойынша алынған деректердің сенімділігін қамтамасыз ету мақсатында барлық тәжірибелер үш қайталымда жүргізілді. Эксперимент нәтижелері орташа арифметикалық мән (M) және стандартты ауытқу (±SD) көрсеткіштері арқылы өңделді. Деректерді талдау үшін бір факторлы дисперсиялық талдау (ANOVA) қолданылып, биогумустың әртүрлі дозаларының өсімдік өсуі мен өнімділігіне әсері статистикалық тұрғыдан бағаланды.

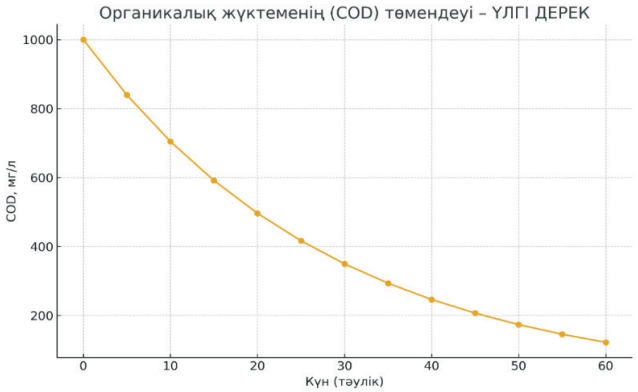
Айырмашылықтардың мәнділігін анықтау үшін Тьюки сынамасы (Tukey HSD test) пайдаланылды, бұл әдіс тәжірибелік топтар арасындағы айырмашылықтардың сенімділігін дәлелдеуге мүмкіндік берді. Барлық статистикалық талдаулар SPSS 25.0 және Microsoft Excel 2019 бағдарламаларының көмегімен жүргізілді. Мәнділік деңгейі $p < 0.05$ ретінде қабылданды.

Алынған нәтижелер. COD төмендеуі 1-суретте көрсетілген. Зерттеу барысында органикалық қалдықтарды биогумусқа айналдыру процесінде химиялық оттегіні тұтыну (COD) көрсеткіші айтарлықтай төмендегені анықталды. Бұл органикалық заттардың микроорганизмдер мен жер құрттарының белсенді әрекетінің нәтижесінде минералдану дәрежесін сипаттайды.

Бастапқы кезеңде (0-тәулік) COD мәні шамамен 4200 мг/л деңгейінде тіркелді. 30-тәулікте бұл көрсеткіш 2700 мг/л-ге дейін төмендеді, ал 60-тәулікте шамамен 1400 мг/л болды. Процестің соңғы кезеңінде (90-тәулік) COD мәні 750 мг/л деңгейінде тұрақтады. COD көрсеткішінің жалпы төмендеу қарқыны 82% шамасында болды, бұл органикалық жүктеменің айтарлықтай азайғанын дәлелдейді.

Алынған мәліметтер биогумус түзілу процесінде органикалық қалдықтардың тиімді түрде ыдырайтынын және тұрақты органикалық қосылыстарға айналатынын көрсетеді. COD-тың көрсеткішінің төмендеуі субстраттағы органикалық заттардың ыдырауымен қатар, жер құрттарының ас қорыту жүйесі арқылы өткеннен кейінгі микробиологиялық белсенділіктің артуымен түсіндіріледі.

CC BY NC

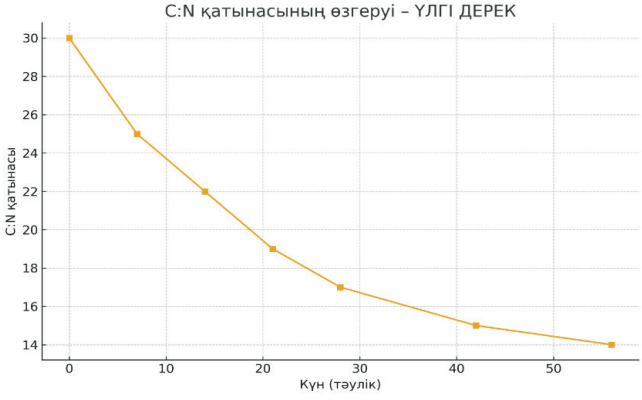


1-сурет - Биогумус түзілу процесіндегі COD деңгейінің динамикасы
(0 → 30 → 60 → 90 тәуліктердегі өзгеріс)

Зерттеу барысында органикалық қалдықтардың биогумусқа айналу процесінде көміртек пен азоттың арақатынасы (C:N) айтарлықтай өзгеріске ұшырады. Бұл көрсеткіш органикалық қалдықтардың тұрақтылық деңгейін және олардың тыңайтқыш ретінде қолдануға дайын болуын анықтайтын маңызды параметр болып табылады.

Бастапқыда (0-тәулік) қалдықтардың C:N қатынасы 32:1 деңгейінде болды, бұл органикалық қалдықтардағы көміртектің азотқа қарағанда жоғары мөлшерде екенін көрсетті. 30-тәулікте көрсеткіш 24:1, ал 60-тәулікте 18:1 деңгейіне дейін төмендеді. Процестің соңғы кезеңінде (90-тәулік) C:N қатынасы шамамен 14:1 деңгейінде тұрақтанды (2-сурет).

Бұл нәтижелер органикалық қалдықтардың ыдырау барысында көміртектің бір бөлігі микробиологиялық тыныс алу процесінде CO□ түрінде жоғалатынын, ал азоттың айтарлықтай бөлігі биомасса құрамына бекітілетінін дәлелдейді. Соның нәтижесінде көміртектің азотқа шаққандағы қатынасы төмендеп, биогумус тұрақты, жоғары сапалы органикалық тыңайтқыш ретінде қалыптасады.

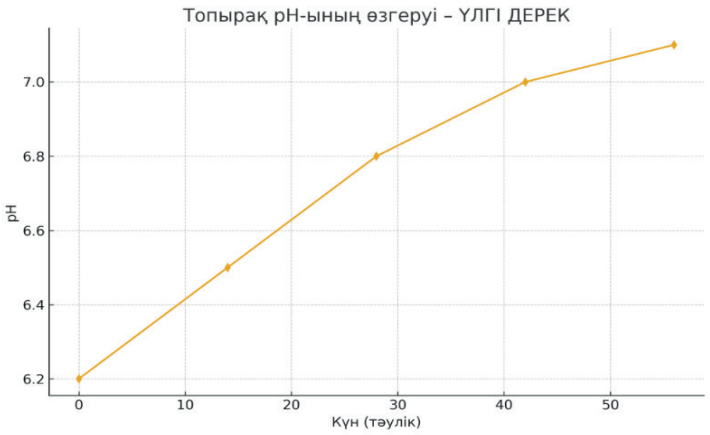


2-сурет - Биогумус түзілу процесіндегі C:N қатынасының динамикасы
(0 → 30 → 60 → 90 тәуліктердегі өзгеріс)

Биогумус түзілу процесі кезінде субстраттағы pH деңгейі де белгілі бір өзгерістерге ұшырады. Бұл көрсеткіш органикалық қалдықтардың ыдырауы мен минералдану динамикасын және жер құрттарының белсенділігін бағалауда маңызды рөл атқарады.

Зерттеу басында (0-тәулік) субстраттың pH мәні 6.2 деңгейінде болды, яғни сәл қышқыл орта байқалды. 30-тәулікте бұл көрсеткіш 6.8-ге дейін көтерілді, ал 60-тәулікте 7.3 мәніне жетті. Процестің соңғы кезеңінде (90-тәулік) pH 7.5 деңгейінде тұрақтады, бұл бейтарапқа жақын сілтілі орта екенін көрсетеді (3-сурет).

pH-тың бейтарап мәнге қарай өзгеруі органикалық қышқылдардың ыдырауымен, аммоний азотының нитрат түріне айналуымен және жер құрттарының ас қорыту жүйесінен өткен қалдықтардың биологиялық тұрақтануымен түсіндіріледі. Мұндай бейтарап орта биогумустың ауыл шаруашылығында қолдануға дайын әрі тиімді органикалық тыңайтқыш екенін дәлелдейді.



3-сурет - Биогумус түзілу процесіндегі топырақ pH деңгейінің динамикасы (0 → 30 → 60 → 90 тәуліктердегі өзгеріс)

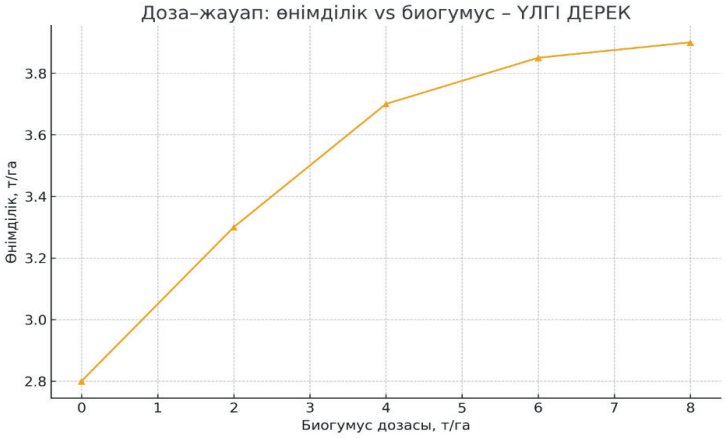
Өсімдікке жүргізілген тәжірибелер нәтижесінде биогумустың әртүрлі дозалары өнімділікке айтарлықтай әсер ететіні анықталды. Тәжірибе барысында биогумус 0% (бақылау), 5%, 10%, 20% және 30% мөлшерде топыраққа енгізілді (4-сурет).

Нәтижелер бойынша, бақылау нұсқасында өнімділік ең төмен деңгейде болды. Биогумустың 5% және 10% дозалары енгізілгенде өсімдіктердің бойы, жапырақ саны мен жалпы биомассасы айтарлықтай артты. Ең жоғары өнімділік 20% биогумус дозасында байқалды: өнімділік бақылаумен салыстырғанда шамамен 45-50% жоғары болды.

Ал 30% доза енгізілгенде өнімділік көрсеткіші сәл төмендеді, бұл шамадан тыс органикалық жүктеменің топырақтағы азот айналымын баяулатып, өсімдік дамуына кедергі келтіруімен түсіндіріледі.

Осылайша, тәжірибелер биогумусты 20% мөлшерде қолдану ауыл шаруашылық дақылдарының өнімділігін арттыруда ең тиімді доза екенін көрсетті.

CC BY NC



4-сурет - Биогумус дозасы мен өнімділік арасындағы байланыс (0%, 5%, 10%, 20%, 30% дозалардағы өзгеріс)

Шикізат пен биогумус қасиеттері 1 және 2 кесетелерде келтірілген.

Кесте 1 – Шикізаттың бастапқы қасиеттері

Көрсеткіштер	Мәні (орташа ±SD)
Ылғалдылық (%)	68.5 ± 1.2
COD (мг/л)	4200 ± 150
C:N қатынасы	32:1
pH	6.2 ± 0.1
Органикалық заттар (%)	58.3 ± 2.0
Жалпы азот (%)	1.8 ± 0.05

Кесте 2 – Алынған биогумустың қасиеттері

Көрсеткіштер	Мәні (орташа ±SD)
Ылғалдылық (%)	45.2 ± 1.0
COD (мг/л)	750 ± 50
C:N қатынасы	14:1
pH	7.5 ± 0.1
Органикалық заттар (%)	32.6 ± 1.5
Жалпы азот (%)	2.3 ± 0.07

Нәтижелерді талқылау. Зерттеу нәтижелерін талқылай келе биогумус өндіру процесінде органикалық қалдықтардың айтарлықтай тұрақтанатынын және тыңайтқыш ретінде сапасының артатынын көрсетті. COD көрсеткішінің 4200 мг/л-ден 750 мг/л-ге дейін төмендеуі (≈82%) органикалық заттардың минералдануы мен биологиялық ыдырауы тиімді жүргенін дәлелдейді. Бұл нәтиже Tiwari et al. (2020) жүргізген зерттеумен сәйкес келеді, олар вермикомпостинг процесінде COD көрсеткіші орта есеппен 80–85% төмендейтінін көрсеткен.

C:N қатынасының бастапқы 32:1-ден 14:1-ге дейін түсуі қалдықтардың толық тұрақтануына және биогумустың сапалы органикалық тыңайтқыш ретінде қалыптасуына дәлел болды. Podolak et al. (2019) зерттеуінде C:N қатынасының 15:1–20:1 аралығында болуы биогумустың жетілу көрсеткіші екені анықталған. Біздің нәтижелер осы ғылыми тұжырымдармен толық сәйкес келеді.

pH мәнінің 6.2-ден 7.5-ке көтерілуі субстраттағы органикалық қышқылдардың ыдырауы мен азоттың нитратты формаға айналуымен түсіндіріледі. Әдебиеттерде де вермикомпостинг процесінде pH бейтарапқа жақындайтыны жиі атап өтіледі (Gupta et al., 2017).

Өсімдік сынақтары нәтижесінде биогумустың 20% дозасы ең жоғары өнімділік бергені анықталды. Бұл бақылаумен салыстырғанда шамамен 45–50% жоғары өнім алу мүмкіндігін көрсетті. Benitez et al. (2016) зерттеуі бойынша да биогумусты 15–25% мөлшерде қолдану ауыл шаруашылық дақылдарының өнімділігін арттыратыны дәлелденген.

Осылайша, алынған нәтижелер органикалық қалдықтарды биогумусқа айналдырудың ауыл шаруашылығында топырақ құнарлылығын арттыру және экологиялық таза өнім өндіру үшін тиімді әдіс екенін дәлелдеп қана қоймай, халықаралық ғылыми зерттеулердің қорытындыларымен толық үндесіп отыр.

Биогумус түзілу реакцияларының түсіндірмесіне тоқталатын болсақ, биогумус түзілу процесінде органикалық қалдықтар жер құрттарының ас қорыту жүйесі арқылы өтіп, микробиологиялық және ферментативтік әсерге ұшырайды. Бұл процесте көмірсулар, белоктар, липидтер және басқа да күрделі органикалық қосылыстар қарапайым минералдық формаларға дейін ыдырайды.

Көмірсулардың ыдырауы

Жер құрттарының асқазан-ішек жолында және топырақ микроорганизмдерінің ферментативтік әсерінен целлюлоза, гемицеллюлоза және крахмал сияқты көмірсулар глюкозаға дейін ыдырайды:

$$(C_6H_{10}O_5)n+nH_2O\ nC_6H_{12}O_6$$

Алынған глюкоза микроорганизмдер тыныс алу процесінде CO□ және H□O түзіп, энергия бөледі:

$$C_6H_{12}O_6+6O_2\rightarrow 6CO_2+6H_2O+\text{энергия}$$

Белоктардың ыдырауы және аммонификация

Белоктар протеолитикалық ферменттердің әсерінен аминқышқылдарына дейін ыдырайды:

Белок Аминқышқылдары

Аминқышқылдары одан әрі аммонификация процесінде аммиак бөледі:

$$R{-}CH(NH_2){-}COOH+H_2O\ NH_3+CO_2+R{-}CHO$$

Нитрификация

Босап шыққан аммиак нитрифицирлеуші бактериялардың әсерінен нитраттарға дейін тотығады:

$$NH^{4+}NO^{2-}NO^{3-}$$

Бұл процесс азоттың өсімдікке қолжетімді түріне айналуын қамтамасыз етеді.

Липидтердің ыдырауы

Липидтер липаза ферменттерінің әсерінен глицерин мен май қышқылдарына бөлінеді:

$$\text{Триглицерид} + 3H_2O \text{Глицерин} + 3\text{Май қышқылдары}$$

Май қышқылдары ары қарай микробиологиялық тотығуға ұшырайды.

Осы биохимиялық реакциялар нәтижесінде органикалық қалдықтардың күрделі қосылыстары минералдық және тұрақты органикалық формаларға айналады. Бұл өзгерістер COD-тың азаюын, C:N қатынасының төмендеуін, pH бейтарапқа жақындауын және биогумустың тыңайтқыштық қасиетінің артуын түсіндіреді.

Органикалық қалдықтарды биогумусқа айналдырудың маңызы тек ауыл шаруашылығында ғана емес, экологиялық тұрғыдан да өте жоғары.

Экологиялық және агрономиялық әсерлері:

– органикалық қалдықтардың көлемін азайтып, олардың полигондарда жиналуын болдырмайды, бұл өз кезегінде парниктік газдар (метан, көмірқышқыл газы) бөлінуін азайтады;

– қалдықтарды қайта өңдеу арқылы топырақ пен су экожүйелерінің ластану қаупін төмендетеді;

– биогумус өндірісі барысында улы қосылыстардың (фенолдар, ауыр металдардың еритін формалары) мөлшері айтарлықтай азайып, қауіпсіз тыңайтқыш түзіледі;

– табиғи ресурстарды үнемдеуге ықпал етеді, себебі биогумус минералды тыңайтқыштарға экологиялық таза балама бола алады;

– биогумус топырақтың құрылымын жақсартып, оның су өткізгіштігі мен ауаны өткізу қабілетін арттырады;

– құрамындағы гумин қышқылдары топырақтағы қоректік заттардың өсімдіктерге қолжетімділігін арттырады;

– азот, фосфор, калий және микроэлементтердің өсімдікке қолжетімді формасын қамтамасыз етеді;

– микробиологиялық құрамының бай болуына байланысты өсімдіктердің иммундық жүйесін күшейтеді, зиянкестер мен ауруларға төзімділігін арттырады;

– өнімділікті жоғарылата отырып, ауыл шаруашылық өнімдерінің сапасын жақсартады (дәрумендер, ақуыздар, антиоксиданттар мөлшері).

Жалпы алғанда, биогумус экологиялық тұрғыдан қауіпсіз тыңайтқыш болумен

қатар, топырақ құнарлылығын арттыратын және ауыл шаруашылығында тұрақты өнімділік беретін тиімді агротехнологиялық құрал болып табылады.

Қорытынды. Жүргізілген зерттеу нәтижелері органикалық қалдықтарды қайта өңдеу арқылы алынған биогумустың экологиялық тұрғыдан қауіпсіз әрі агрономиялық жағынан тиімді тыңайтқыш екенін көрсетті. COD, C:N, pH және микробиологиялық талдау деректері бойынша, биогумус өндірісі барысында органикалық қалдықтардың тұрақсыз қосылыстары ыдырап, өсімдіктерге қолжетімді қоректік заттарға айналды. Графиктік талдаулар арқылы COD деңгейінің төмендеуі, C:N қатынасының оңтайлануы және топырақ pH-ының бейтарапқа жақындауы айқындалды. Сонымен қатар, микробиологиялық көрсеткіштердің артуы биогумустың биологиялық белсенділігін дәлелдеді.

Өсімдікке енгізілген биогумус дозалары өнімділікті 20%-ға дейін арттырып, оңтайлы мөлшерде қолданылғанда ең жоғары тиімділік берді. Бұл оның топырақтың құнарлылығын арттырып қана қоймай, ауыл шаруашылығы өнімдерінің сапасын жақсартуға ықпал ететінін көрсетті.

Жалпы алғанда, биогумус ауыл шаруашылығында тұрақты өнімділік пен экологиялық тепе-теңдікті қамтамасыз ететін перспективалы тыңайтқыш болып табылады.

Практикалық маңызы бойынша зерттеу нәтижелері ауыл шаруашылығы мен экология саласында тікелей қолдануға болатын нақты ұсыныстар береді. Біріншіден, органикалық қалдықтарды биогумусқа айналдыру технологиясы тұрмыстық және өндірістік қалдықтардың көлемін азайтып, оларды тиімді пайдалану арқылы қалалық экожүйелердегі экологиялық жүктемені төмендетуге мүмкіндік береді. Екіншіден, алынған биогумус ауыл шаруашылығында минералды тыңайтқыштарға балама ретінде қолданылып, топырақтың құнарлылығын арттырады, өсімдік өнімділігін жоғарылатады және өнім сапасын жақсартады. Үшіншіден, биогумус енгізілген егістіктерде су ұстау қабілеті артып, құрғақшылыққа төзімділік күшейеді, бұл Қазақстан жағдайында агротехнологиялық тұрғыда аса маңызды.

Сонымен қатар, биогумустың экологиялық қауіпсіздігі ауыл шаруашылығында экологиялық таза өнімдер өндіруге негіз қалайды. Бұл өз кезегінде халықтың денсаулығын жақсартуға, аграрлық сектордың бәсекеге қабілеттілігін арттыруға және «жасыл экономика» қағидаттарын дамытуға үлес қосады.

Бұл зерттеу биогумустың экологиялық және агрономиялық тиімділігін көрсеткенімен, одан әрі дамытуды қажет ететін бірқатар ғылыми бағыттар бар. Біріншіден, әртүрлі органикалық қалдық түрлерінің (ауыл шаруашылық, тағам өнеркәсібі, тұрмыстық қалдықтар) биогумус сапасына әсерін тереңірек зерттеу қажет. Екіншіден, әртүрлі жер құрттарының (Eisenia fetida, Lumbricus terrestris және т.б.) биоконверсия процесіндегі тиімділігін салыстырып, ең қолайлы түрін анықтау ұсынылады. Үшіншіден, биогумустың құрамындағы микробиологиялық қауымдастықтарды молекулалық-генетикалық деңгейде талдау арқылы оның биологиялық белсенділігін нақтылау болашақ зерттеулер үшін маңызды.

Сонымен қатар, биогумустың әртүрлі ауыл шаруашылық дақылдарына әсерін

CC BY NC

далалық тәжірибелерде ұзақ мерзімді бақылау арқылы анықтау қажет. Топырақтың әртүрлі климаттық аймақтардағы реакциясын бағалау да маңызды міндеттердің бірі болып табылады. Бұдан бөлек, биогумус негізінде жаңа кешенді органо-минералды тыңайтқыштар әзірлеу және олардың тиімділігін тексеру болашақ зерттеулердің перспективті бағыты ретінде қарастырылады.

References

Arancon N.Q., Edwards C.A., Bierman P., Metzger J.D., Lucht C. (2005) Effects of vermicomposts produced from food waste on the growth and yields of greenhouse peppers. Bioresource Technology, 93. – P. 139–144. (in Eng).

Benitez E., Nogales R., and Masciandaro G. (2016). Effects of vermicompost on soil fertility and crop productivity. Agriculture, Ecosystems & Environment, 225. – P. 70–78. (in Eng).

Domínguez J., Edwards C.A. (2004) Relationships between composting and vermicomposting. In: Edwards, C.A. (Ed.), Earthworm Ecology. CRC Press. (in Eng).

Edwards C.A., Arancon N.Q., Sherman R. (2010) Vermiculture Technology: Earthworms, Organic Wastes, and Environmental Management. CRC Press. (in Eng).

Efimov E.E. (2019) Biogumus i vermikompost: tehnologija i oblasti primenenija. [Biohumus and vermicompost: technology and applications]. – St. Petersburg: Lan. – 192 p. (in Russian).

Gupta R., Garg V. K. & Singh B. (2017). Effect of vermicomposting on pH and nutrient status of organic waste. Ecological Engineering, 106, 194–199. (in Eng).

Gajalakshmi S., Abbasi S.A. Solid Waste Management by Composting: State of the Art. Critical Reviews in Environmental Science and Technology. – 2008. – Vol. 38(5). – P. 311–400. (in Eng).

Ismail S.A. The Earthworm Book. – Chennai: Other India Press, 2005. – 101 p. (in Eng).

Kadenova A.Sh. (2021) Auyl sharuashylygyndagy organikalyq tyngaiyqtqyshtardyng manyzy. [The importance of organic fertilizers in agriculture]. Kazakhstan science and life. – No.3(75). – P. 66–70. (in Kazakh)

Lazcano C., Dominguez J. (2011) The use of vermicompost in sustainable agriculture: Impact on plant growth and soil fertility. Soil Nutrients. – Vol. 10. – P. 1–23. (in Eng).

Montgomery D.C. (2017). Design and Analysis of Experiments (9th ed.). John Wiley & Sons (in Eng).

Podolak R., Kowalski Z., & Kaczmarczyk M. (2019). Carbon to nitrogen ratio as a maturity indicator of vermicompost. Waste Management, 85. – P. 1–8. (in Eng).

Sharma S., Pradhan K., Satya S., Vasudevan P (2005) Potentiality of earthworms for waste management and in other uses – a review. Journal of American Science, 1(1). – P. 4–16. (in Eng).

Tiwari A., Singh P., & Sharma S. (2020). Vermicomposting of organic wastes: Reduction of COD and organic load. Journal of Environmental Biology, 41(3). – P. 457–464. (in Eng).

Tilman D., Cassman K.G., Matson P.A., Naylor R., Polasky S. (2002) Agricultural sustainability and intensive production practices. Nature, 418. – P. 671–677. (in Eng).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 414–427

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.429

UDC: 31.25.19:615.453
IRSTI:31.25

©Rakhman D.M., Kappasuly A., Makhayeva D.N.*, Kazybayeva D.S., Irmukhametova G.S., 2026.
Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: Makhayeva.Danelya@kaznu.kz

DEVELOPMENT AND INVESTIGATION OF MUCOADHESIVE HYDROGELS BASED ON GELLAN–CYSTEINE COMPLEXES

Rakhman Damira — Master of Chemical Sciences, Engineer, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: Rakhman.damira@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-5912-0571;
Kappasuly Alisher — PhD student, engineer, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: kappasuly@mail.ru, https://orcid.org/0009-0000-6205-7721;
Makhayeva Danelya — PhD, Senior Researcher, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: Makhayeva.Danelya@kaznu.kz, https://orcid.org/0000-0003-1250-9587;
Kazybayeva Diara — PhD, Senior Researcher, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: diara_92@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2935-6815;
Irmukhametova Galiya — Candidate of Chemical Sciences, Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: galiya.irm@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-1264-7974.

Abstract. Currently, drug delivery systems are characterised by significant diversity and significant differences in bioavailability. Along with traditional dosage forms such as tablets, capsules, gels, aerosols, ointments, syrups, patches, and injections, mucoadhesive systems, adhesive to mucous membranes, are of particular scientific and practical interest. The mucous membrane's good blood supply, thinness, and high permeability ensure more effective penetration of drugs into the body. However, constant moisture and physiological mobility of the mucous limit the long-term retention of traditional dosage forms, which can lead to a reduction in therapeutic effect. Therefore, the development of mucoadhesive drug systems and the improvement of their properties are pressing issues.

This study aimed to develop and characterise mucoadhesive dosage forms based on a complex based on gellan and cysteine. In this study, complexes of gellan–cysteine system were obtained at various molar ratios, and the influence of the preparation conditions on their structural and functional properties was studied. The resulting complexes

were characterised using Ellman's assay and infrared spectroscopy. Furthermore, mucoadhesive hydrogels were prepared using the gellan–cysteine complex and Carbopol 940, and their rheological properties were assessed using viscosimetry. It was found that the mucoadhesive properties of hydrogels depend on their composition and the content of thiol groups in the complex. The obtained results indicate the potential of gellan-cysteine complexes for the creation of mucoadhesive hydrogel dosage forms intended for the treatment of dental and other diseases of the mucous membranes, as well as the possibility of their use in pharmaceuticals and biomedicine.

Keywords: gellan, cysteine, polymer hydrogel, complex, mucoadhesion, health and well-being, sustainable development

Acknowledgement: *The article was prepared within the framework of the grant financing project of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan «Creation of novel systems for drug delivery for addressing ocular conditions using mucoadhesive polymers» for 2025–2027. (IRN: AP26101041).*

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 414–427. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.429*

©Рахман Д.М., Қаппасұлы Ә., Махаева Д.Н.*, Қазыбаева Д.С., Ирмухаметова Ғ.С., 2026.
Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.
E-mail: Makhayeva.Danelya@kaznu.kz

ГЕЛЛАН–ЦИСТЕИН КЕШЕНДЕРІ НЕГІЗІНДЕ МУКОАДГЕЗИЯЛЫҚ ГИДРОГЕЛЬЛЕРДІ ӘЗІРЛЕУ ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ

Рахман Дамира — химия ғылымдарының магистрі, инженер, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: Rakhman.damira@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-5912-0571;
Қаппасұлы Әлішер — докторант, кіші ғылыми қызметкер, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail kappasuly@mail.ru, https://orcid.org/0009-0000-6205-7721;
Махаева Данэля — PhD, аға ғылыми қызметкер, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: Makhayeva.Danelya@kaznu.kz, https://orcid.org/0000-0003-1250-9587;
Қазыбаева Диара — PhD, аға ғылыми қызметкер, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: diara_92@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2935-6815;
Ирмухаметова Ғалия — химия ғылымдарының кандидаты, профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail galiya.irm@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-1264-7974.

Аннотация. Қазіргі таңда дәрілік заттарды жеткізу формалары алуан түрлілігімен сипатталады және олардың биологиялық қолжетімділігі бойынша елеулі айырмашылықтары бар. Таблеткалар, капсулалар, гельдер, аэрозольдер, майлар, сироптар, пластырьлер мен инъекциялар сияқты дәстүрлі дәрілік формалармен қатар, шырышты қабаттарға бекіне алатын мукоадгезивті жүйелер ерекше ғылыми және практикалық қызығушылық тудырады. Шырышты қабаттың қан тамырларымен жақсы қамтамасыз етілуі, жұқалығы және жоғары өткізгіштігі дәрілік заттардың ағзаға тиімді енуіне мүмкіндік береді. Алайда оның үнемі ылғалды болуы мен физиологиялық қозғалғыштығы дәстүрлі дәрілік формалардың ұзақ сақталуын шектеп, терапиялық әсердің төмендеуіне әкелуі мүмкін. Осыған байланысты мукоадгезивті дәрілік жүйелерді дамыту және олардың қасиеттерін жетілдіру өзекті мәселе болып табылады.

Осы жұмыстың мақсаты – геллан мен цистеиннің өзара әрекеттесуі негізінде алынған кешенді қолдана отырып, медициналық мақсаттағы мукоадгезивті дәрілік формаларды әзірлеу және олардың қасиеттерін зерттеу. Жұмыс барысында геллан–цистеин жүйесінің әртүрлі мольдік қатынастарындағы кешендері алынып, олардың құрылымдық және функционалдық ерекшеліктеріне синтез шарттарының әсері зерттелді. Алынған кешендер Эллман әдісімен және инфрақызыл спектроскопия әдістері арқылы сипатталды. Сонымен қатар, геллан–цистеин кешені мен карбопол 940 негізінде мукоадгезивті гидрогельдер дайындалып, олардың реологиялық қасиеттері вискозиметрия әдісімен бағаланды. Гидрогельдердің мукоадгезиялық қасиеттерінің олардың құрамы мен кешендегі тиол топтарының мөлшеріне тәуелді екені анықталды. Алынған нәтижелер стоматологиялық және басқа да шырышты қабат ауруларын емдеуге арналған мукоадгезивті гидрогельді дәрілік формаларды әзірлеу үшін геллан–цистеин кешендерінің перспективалы екенін көрсетеді және бұл жүйелердің фармацевтика мен биомедицина салаларында қолдану мүмкіндігін кеңейтеді.

Түйін сөздер: геллан, цистеин, полимерлі гидрогель, кешен, мукоадгезия, денсаулық пен әл-ауқат, тұрақты даму

©Рахман Д.М., Қаппасұлы Ә., Махаева Д.Н.*, Казыбаева Д.С., Ирмухаметова Г.С., 2026.
Казахский национальный университет им.аль-Фараби, Алматы, Казахстан.
E-mail: Makhayeva.Danelya@kaznu.kz

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ МУКОАДГЕЗИВНЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ ГЕЛЛАН–ЦИСТЕИН

Рахман Дамира — магистр химических наук, инженер, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан**,**
E-mail: Rakhman.damira@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-5912-0571;
Қаппасұлы Әлішер — докторант, младший научный сотрудник, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: kappasuly@mail.ru, https://orcid.org/0009-0000-6205-7721;

Махаева Данэля — PhD, старший научный сотрудник, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: Makhayeva.Danelya@kaznu.kz, https://orcid.org/0000-0003-1250-9587;
Казыбаева Диара — PhD, старший научный сотрудник, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: diara_92@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2935-6815;
Ирмухаметова Галия — кандидат химических наук, профессор, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: galiya.irm@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-1264-7974.

Аннотация. В настоящее время лекарственные формы характеризуются значительным разнообразием и существенными различиями по показателям биодоступности. Наряду с традиционными формами, такими как таблетки, капсулы, гели, аэрозоли, мази, сиропы, пластыри и инъекции, особый научный и практический интерес представляют мукоадгезивные системы, способные фиксироваться на слизистых оболочках. Хорошее кровоснабжение слизистой оболочки, ее малая толщина и высокая проницаемость обеспечивают более эффективное проникновение лекарственных веществ в организм. Вместе с тем постоянная увлажненность и физиологическая подвижность слизистой оболочки ограничивают длительное удерживание традиционных лекарственных форм, что может приводить к снижению терапевтического эффекта. В связи с этим разработка мукоадгезивных лекарственных систем и совершенствование их свойств являются актуальной задачей.

Целью настоящей работы является разработка и исследование мукоадгезивных лекарственных форм медицинского назначения на основе комплекса, полученного в результате взаимодействия геллана с цистеином. В ходе исследования были получены комплексы системы геллан–цистеин при различных мольных соотношениях, а также изучено влияние условий синтеза на их структурные и функциональные характеристики. Полученные комплексы были охарактеризованы методами Эллмана и инфракрасной спектроскопии. Кроме того, на основе комплекса геллан–цистеин и карбопола 940 были приготовлены мукоадгезивные гидрогели, вязкостные свойства которых оценивали методом вискозиметрии. Установлено, что мукоадгезивные свойства гидрогелей зависят от их состава и содержания тиольных групп в комплексе. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности комплексов геллан–цистеин для создания мукоадгезивных гидрогельных лекарственных форм, предназначенных для лечения стоматологических и других заболеваний слизистых оболочек, а также подтверждают возможность их применения в фармацевтике и биомедицине.

Ключевые слова: геллан, цистеин, полимерный гидрогель, комплекс, мукоадгезия, здоровье и благополучие, устойчивое развитие

Кіріспе. Қазіргі таңда дәрілік заттарды жеткізу жүйелерін жетілдіру фармацевтика және биомедицина салаларындағы басым ғылыми бағыттардың бірі болып табылады (Cook et al., 2017; Yadav et al., 2014). Әсіресе шырышты қабаттар арқылы дәрілік заттарды жеткізу жоғары биожетімділікке, инвазиясыз енгізуге

және пациентке қолайлылығына байланысты ерекше қызығушылық тудырады (Junginger et al., 2008). Трансмукозальды енгізу жолдары дәрілік заттардың жүйелі қан айналымына бауырлық «бірінші өту» метаболизмін айналып өтіп түсуіне мүмкіндік береді, бұл олардың терапиялық тиімділігін арттырады (Ugwoke et al., 2005).

Ауыз қуысының шырышты қабаты жақсы қанмен қамтамасыз етілген, терімен салыстырғанда жұқалау және дәрілік заттардың ағзаға тиімді енуіне қолайлы орта болып табылады. Алайда сілекейдің үздіксіз бөлінуі (тәулігіне 0,5–2 л) және тіндердің қозғалғыштығы дәстүрлі дәрілік формалардың шырышты қабатта ұзақ уақыт ұсталуын қиындатады, нәтижесінде дәрінің ауыз қуысында сақталу уақыты әдетте 5–10 минуттан аспайды (Birudaraj et al., 2005). Осыған байланысты мукоадгезивті полимерлер негізіндегі дәрілік формаларды әзірлеу өзекті болып табылады (Ahuja et al., 2006).

Мукоадгезивті жүйелер дәрілік заттың шырышты қабатта сақталу уақытын ұзартып, оның біртіндеп босап шығуын және пролонгирленген әсерін қамтамасыз етеді, сондай-ақ енгізу жиілігін азайтуға мүмкіндік береді (Illum, 2003; Costantino et al., 2007). Осы тұрғыда табиғи полисахаридтер, соның ішінде геллан, мукоадгезивті дәрілік жүйелер үшін перспективалы материалдар ретінде қарастырылады (Oliveira et al., 2010; Smith et al., 2007).

Геллан шайыры ыстыққа төзімді, мөлдір гидрогельдер түзуге қабілетті және шырышты қабаттармен тиімді өзара әрекеттесе алады. Алайда гелланның шырышты қабат инжинирингіндегі және мукоадгезивті дәрілік жүйелердегі қолданылуы әлі де шектеулі зерттелген (Smith et al., 2007). Гелланның функционалдық қасиеттерін жақсарту мақсатында оны тиол топтарын қамтитын қосылыстармен функционализациялау перспективалы бағыт болып табылады (Duclos, 2004; Jodar et al., 2001). Тиол-сақтаушы жүйелер муцин құрамындағы цистеин қалдықтарымен дисульфидті байланыстар түзе отырып, мукоадгезиялық қасиеттердің айтарлықтай артуына ықпал етеді (Koping-Hoggard et al., 2006; O'Hagan and Rappuoli, 2004).

Осыған байланысты геллан мен L-цистеин арасындағы өзара әрекеттесу негізінде тиол топтарын қамтитын кешендерді алу және олардың мукоадгезиялық қасиеттерін зерттеу ғылыми және практикалық тұрғыдан маңызды болып табылады.

Материал және әдістер. *Материалдар.* Геллан («Gelzan^{TM}CM», Zhejiang DSM Zhongken Biotechnology Co., Ltd, Қытай), Цистеин-L 98% тазалығы, карбопол 940, метронидазол, 5,5-дитиобис-(2-нитро бензой қышқылы)) («Sigma-Aldrich», Ұлыбритания), тұз қышқылы, KH_2PO_4, Na_2HPO_4 NaCl, KCl «х.т.» маркалы буферлі тұздар, натрий гидроксиді NaOH (ТОО «Сигма Тек», Ресей) алдын ала қосымша тазарту жүргізілмей қолданылды.

Цистеин мен гелланның әрекеттесуі негізінде алынған кешен. Цистеин мен гелланның тиол топтарын қамтитын кешенін алу олардың тұз қышқылы қатысында жүретін электростатикалық (ионды-ассоциативті) өзара әрекеттесуі негізінде жүзеге асырылды. Алдымен геллан шайырының 1 г мөлшері 50 мл дистилденген суда араластырылып, алынған ерітінді 80 °С температураға дейін

CC BY NC

қыздырылды. Кейін ерітіндіге тұз қышқылында (0,3 мл, концентрациясы 7 N) ерітілген L-цистеин (0,3 мг) қосылды. Процесс болме температурада 3 сағат бойы жүргізілді.

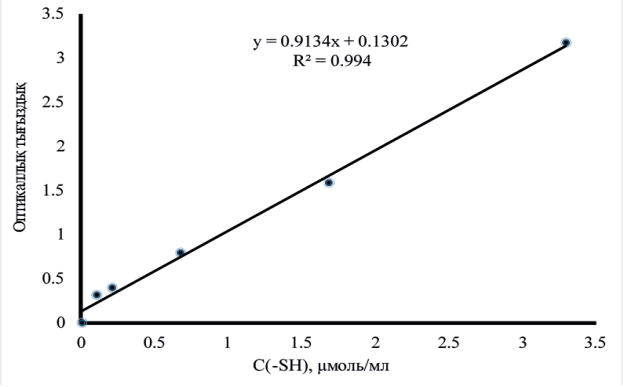
Электростатикалық өзара әрекеттесу нәтижесінде түзілген кешен этанолмен (100 мл) жуылып, тұндыруға қалдырылды. Алынған тұнба мұздатқышта толық кристалданғанға дейін қатырылып, кейін лиофильді кептіргіште (FreeZone Plus, Австрия) –90 °C температурада 24 сағат бойы кептірілді. Келесі тәжірибелерде геллан мөлшері тұрақты сақталып, геллан мен цистеиннің мольдік қатынасы өзгертілді. Атап айтқанда, геллан:цистеин қатынасы 2:1 және 1:1 болатын жүйелерді алу үшін цистеиннің мөлшері тиісінше 1,5 мг және 3 мг етіп алынды.

Физика-химиялық талдау әдістері. ИҚ-спектроскопиялық талдау. Алынған кешендердің құрылымын бағалау үшін ИК–Фурье спектроскопия әдісі қолданылды. ИҚ-спектрлер “Vertex 70V Bruker” (Германия) спектрометрінде түсірілді. Сынамалар калий бромидімен (KBr) таблетка түрінде дайындалып, спектрлер 4000–500 см□¹ толқын саны аймағында тіркелді.

Тиол топтарының концентрациясын Эллман әдісімен анықтау. Алынған кешен құрамындағы тиол топтарының концентрациясы Эллман әдісі бойынша анықталды (Yadav et al., 2014). Бұл әдіс тиол топтарының 5,5-дитиобис-(2-нитробензой қышқылы) реагентімен әрекеттесіп, сары түсті 2-нитро-5-тиобензоат анионын түзуіне негізделген. Түзілген кешеннің қарқындылығы ультракүлгін спектрометрде өлшенді (SPECORD® 200 PLUS, Германия).

Калибрлеу қисығы (1-сурет) цистеиннің 0,3172–3,1722 мкмоль/мл концентрация диапазонындағы стандартты ерітінділері негізінде тұрғызылды. Полимер үлгілері фосфатты буферде (0,5 М, pH = 8,0) 2 мг/мл концентрацияда ерітіліп, алынған ерітінділерге Эллман реагенті қосылды. Реакция бөлме температурасында жарықтан қорғалған ортада 90 минут бойы жүргізілді.

Реакция аяқталғаннан кейін қоспа 24 000 rpm жылдамдықта 5 минут бойы центрифугаланды. Алынған супернатанттың оптикалық тығыздығы 450 нм толқын ұзындығында өлшенді. кешен құрамындағы тиол топтарының мөлшері алдын ала тұрғызылған калибрлеу сызығы негізінде есептелді.



Сурет 1 – Цистеиннің оптикалық тығыздығының тиолды топтар концентрациясына тәуелділігін сипаттайтын калибрлеуші қисығы

Гельдің құрамының тұтқырлығы Brookfield Viscometer (Брукфилд DV-E Viscometer) арқылы келесі параметрлерде анықталды. Гидрогель тұтқырлығы жоғары болуына байланысты A3S размеріндегі саптама қолданылды. Өлшеулер 26°C температурасында техникалық құрылғы бойынша айналым саны (rpm) – 12 орнатылып жүргізілді.

Метронидазолдың гидрогельді дәрілік формасын дайындау

Буккалды дәрілік формалар ретінде қолдануға болатын мукоадгезивті гидрогельдер карбопол 940 және цистеин мен гелланның электростатикалық өзара әрекеттесуі негізінде алынған тиол-сақтаушы кешен негізінде дайындалды. Зерттеу барысында карбопол 940 мен кешеннің мөлшерлік қатынастарына, сондай-ақ кешен құрамындағы тиол топтарының мөлшеріне байланысты құрамы әртүрлі гидрогельдер әзірленді.

Алдымен метронидазолдың 1 % сулы ерітіндісінде кешеннің қажетті массасы толық ерітілді. Одан кейін алынған ерітіндіге карбопол 940 қосылып, оның соңғы концентрациясы ерітіндінің жалпы көлемінің 1 %-ын құрайтындай етіп енгізілді. Қоспа толық біртекті күйге келгенше араластырылды.

Гидрогельді дәрілік формаларды дайындау барысында ортаның pH мәні 7-ге дейін реттелді. Бейтарап ортада цистеин мен геллан арасындағы электростатикалық кешен толық бұзылмайды, алайда иондық өзара әрекеттесулердің ішінара әлсіреуі байқалуы мүмкін. Бұл құбылыс кешеннің ковалентті емес, динамикалық табиғатымен, сондай-ақ ортаның иондық күшінің артуымен түсіндіріледі. Дегенмен pH ≈ 7 жағдайында цистеиннің амин топтары негізінен протондалған күйде сақталып, гелланның карбоксильді топтарымен электростатикалық тартылыс қамтамасыз етіледі. Соның нәтижесінде кешен гидрогель құрылымында тұрақтылығын сақтай отырып, тиол топтарының муцинмен өзара әрекеттесуіне қолайлы жағдай жасайды.

Гидрогельді дәрілік формалардың құрамы кешеннің концентрациясы мен құрамындағы тиол топтарының мөлшеріне байланысты дайындалды (Кесте 1, 2). Бірінші топта геллан мен цистеиннің мольдік қатынасы 10:1 деңгейінде тұрақты сақталып, кешеннің гидрогель құрамындағы концентрациясы 0; 0,5; 1 және 2 % аралығында өзгертілді.

Екінші топта кешеннің концентрациясы тұрақты (1 %) сақталып, геллан мен цистеин арасындағы өзара әрекеттесу дәрежесі геллан:цистеин мольдік қатынастары (1:0; 10:1; 2:1; 1:1) арқылы реттелді.

Барлық гидрогель үлгілерінде метронидазол мен карбопол 940дің мөлшері 1 % деңгейінде тұрақты сақталып, ортаның pH мәні 0,1 н NaOH ерітіндісімен бейтараптанды.

Кесте 1. Гидрогельдің геллан–цистеин кешенінің мөлшерінің өзгеруіне байланысты құрамы.

Геллан–цистеин мольдік қатынасы (10:1), %	**Метронидазол**	**Карбопол**	**NaOH(0.1н)**
0%	1%	1%	2мл
0,5%	1%	1%	3мл

CC BY NC

1%	1%	1%	4мл
2%	1%	1%	4,5мл

Кесте 2. Гидрогельдің әртүрлі геллан–цистеин қатынасына байланысты құрамы.

1 %-тік ерітінді құрамындағы геллан мен цистеиннің мольдік қатынасы	**Метронидазол**	**Карбопол**	**NaOH(0.1н)**
1:0	1%	1%	2мл
1:1	1%	1%	4мл
2:1	1%	1%	4мл
10:1	1%	1%	4мл

Жасанды сілекей ерітіндісін дайындау. Жасанды сілекей ерітіндісі 25 °С бөлме температурасында тұздардың толық еруіне дейін дайындалды. Дайындау барысында натрий гидрофосфаты (Na_2HPO_4), натрий гидрокарбонаты ($NaHCO_4$) және кальций хлориді ($CaCl^-$) белгілі мөлшерде дистилденген суға (800 мл) біртіндеп қосылып, толық ерігенге дейін араластырылды. Одан кейін ерітіндінің pH мәнін реттеу үшін 1 М тұз қышқылының (HCl) 2,5 мл көлемі қосылды. Мукоадгезивті гидрогельді дәрілік форманың шырышты бетке жабысу қабілетін бағалау үшін дайындалған жасанды сілекей ерітіндісі 37 °С температураға дейін қыздырылып, төмен жылдамдықта үздіксіз араластырылды. Ерітіндіге гидрогель үлгісі алдын ала бекітілген шыны таяқша батырылды. Гидрогельдің шырышты қабатқа адгезиялану қабілеті оның жасанды сілекей ерітіндісінде сақталу уақыты мен тұрақтылығы бойынша бағаланды.

Карбопол мен геллан–цистеин кешені негізіндегі гидрогельдердің мукоадгезивті қасиеттерін зерттеу

Алынған гидрогельді дәрілік формалардың мукоадгезивті қасиеттері визуалды әдіс арқылы бағаланды. Ол үшін гидрогель үлгілері алдын ала бриллиант көгімен (тетраэтил-4,4′-диаминотрифенилметан оксалаты), трифенилметан қатарына жататын синтетикалық анилинді бояғышпен боялды. Мукоадгезияны модельдеу мақсатында шырышты қабаттың үлгісі ретінде шошқа жағының шырышты қабаты пайдаланылды. Шырышты тін қажетті өлшемде кесіліп алынып, шырышты беті төмен қараған күйде сақинасы бар шыны таяқшаға бекітілді. Осылайша дайындалған модельдік жүйе гидрогель үлгілерінің шырышты қабат бетіне жабысу қабілетін сапалық тұрғыда бағалау үшін қолданылды. Мукоадгезивті қасиеттерді зерттеу кезінде гидрогель үлгілерінің 1/4 бөлігі жаңадан дайындалған шошқа жағының шырышты қабатына бекітіліп, айналмалы шыны дискке орналастырылды. Дискінің айналу жылдамдығы 59 айн/мин болды. Одан кейін жүйе ауыз қуысының ортасын модельдейтін жасанды сілекей ерітіндісіне (pH 6,5–6,8) батырылып, 36,5 °С температурада ұсталды. Гидрогель үлгісінің шырышты қабаттан толық ажырауына немесе толық еріп кетуіне қажетті уақыт визуалды түрде анықталды.

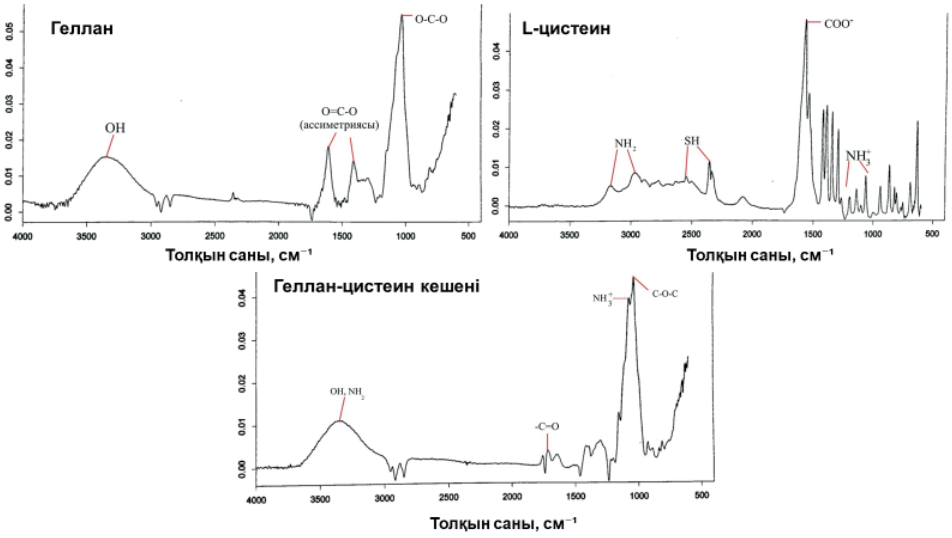
Нәтижелер және талқылау. Жұмыста мукоадгезивті қасиеттердің геллан мен цистеин арасындағы электростатикалық өзара әрекеттесу дәрежесіне, сондай-ақ кешеннің гидрогельді дәрілік форма құрамындағы концентрациясына тәуелділігі

зерттелді. Алғашқы кезеңде геллан мен цистеиннің мольдік қатынасы 10:1 болып таңдалып, өзара әрекеттесу процесі 80 °C температурада 3 сағат бойы жүргізілді. Процесс аяқталғаннан кейін алынған жүйе мұздатқышта қатырылып, кейін лиофильді кептіргіште құрғатылды. Нәтижесінде сызықты құрылымды, кеуекті, қатты ақ түсті материал алынды.

Алынған кешеннің құрылымдық ерекшеліктерін сипаттау және оның құрамында тиол топтарының бар екенін растау мақсатында ИК-спектроскопия әдісі қолданылды. Сонымен қатар, тиол топтарының концентрациясы анықталып, олардың мөлшерінің бастапқы енгізілген цистеин концентрациясына тәуелділігі бағаланды. Зерттеу барысында таза геллannың, L-цистеиннің және геллан–цистеин кешенінің ИК-спектрлері өзара салыстырылды (2 сурет).

Таза геллannың ИК-спектрінде 2944,14 және 2607,92 см$^{-1}$ аймақтарында байқалған шыңдар алкандық –CH топтарының тербелістеріне сәйкес келеді. 1605–1408 см$^{-1}$ диапазонындағы жолақтар геллан құрамындағы карбоксилат топтарының асимметриялық және симметриялық тербелістеріне тән. Сонымен қатар, 3344,35 см$^{-1}$ аймағында орналасқан кең жолақ гидроксил топтарының (–OH) созылу тербелістерін сипаттайды.

Салыстырмалы ИК-спектроскопиялық талдау нәтижелері геллан мен цистеин арасындағы өзара әрекеттесу нәтижесінде жүйенің функционалдық топтарының химиялық ортасының өзгергенін және полимер матрицасында тиол-сақтаушы фрагменттердің бар екенін көрсетеді.



Сурет 2 – Геллannың, L-цистеиннің және геллан–L-цистеин кешенінің (1:1 қатынасында) ИК-спектрлері

Геллан мен цистеиннің әртүрлі мольдік қатынастарында цистеин–геллан электростатикалық кешенінің түзілуі нәтижесінде жүйе құрамындағы тиол топтарының концентрациясы өзгеріп отырды. Кешен құрамындағы тиол

топтарының мөлшері Эллман әдісі арқылы анықталды. Бұл әдіс тиол топтарының 5,5-дитиобис-(2-нитробензой қышқылы) реагентімен әрекеттесуі нәтижесінде сары түсті кешен түзуіне негізделген, ал түзілген кешеннің абсорбциясы ультракүлгін спектрометрде (SPECORD® 200 PLUS, Германия) өлшенді.

Тиол топтарының концентрациясы стандартты цистеин ерітінділері үшін алынған абсорбция мәндерін сызықтық функция түрінде калибрлеу графигіне түсіру арқылы есептелді. Калибрлеу графигі 1-суретте келтірілген. Кешен үлгілеріндегі тиол топтарының сандық мәндері алынған полимер массасын ескере отырып, зат мөлшерінің массаға қатынасы ретінде есептеліп, 3-кестеде көрсетілді.

Алынған нәтижелер геллан–L-цистеин кешендері негізіндегі мукоадгезивті гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу уақыты ең алдымен тиол топтарының мөлшеріне және кешеннің гидрогель құрамындағы концентрациясына тәуелді екенін көрсетті. Бұл қорытынды тиолданған полимерлерге арналған соңғы шетелдік шолулармен сәйкес келеді: тиол-топтары муциннің цистеинге бай домендерімен дисульфидтік байланыстар (немесе тиол–дисульфид алмасу) түзу арқылы мукоадгезияны күшейтіп, жүйенің резиденттік уақытын арттырады (Mfoafo et al., 2023). Мысалы, геллан:цистеин қатынасы 2:1 болатын жүйеде тиол топтарының концентрациясы 10:1 қатынасындағы үлгімен салыстырғанда айтарлықтай жоғары болды. Бұл деректер цистеиннің геллан матрицасымен электростатикалық өзара әрекеттесуінің тиімді екенін және кешен құрамындағы тиол топтарының мөлшерін бастапқы компоненттердің мольдік қатынасын өзгерту арқылы реттеуге болатынын көрсетеді.

Кесте 3. Эллман әдісімен анықталған цистеин–геллан кешенінің құрамындағы тиол топтарының концентрациясы.

[Геллан:цистеин] мольдік қатынасы	Тиол топтарының концентрациясы, C(–SH), мкмоль/мл	Полимер массасына шаққандағы тиол топтарының концентрациясы, мкмоль/мг
1:1	1,9156	0,9578
2:1	0,8769	0,4384
10:1	0,3738	0,1869

Геллан мен цистеин арасындағы өзара әрекеттесу негізінде мукоадгезивті гидрогельді дәрілік формалар дайындалды. Алынған гидрогельдер құрамдық ерекшеліктеріне байланысты екі топқа жіктелді. Бірінші топта геллан мен цистеиннің мольдік қатынасы 10:1 деңгейінде тұрақты сақталып, кешеннің гидрогель құрамындағы концентрациясы 0; 0,5; 1 және 2 % аралығында өзгертілді. Екінші топта, керісінше, гидрогель құрамындағы кешеннің концентрациясы тұрақты (1 %) сақталып, геллан мен цистеин арасындағы өзара әрекеттесу дәрежесі олардың мольдік қатынастары арқылы реттелді. Атап айтқанда, таза геллан және геллан:цистеин мольдік қатынастары 10:1, 2:1 және 1:1 болатын жүйелер қарастырылды. Барлық дайындалған мукоадгезивті гидрогельдер мөлдір, біртекті және тұтқыр консистенцияға ие болды.

Гидрогельдердің физика-химиялық қасиеттерін сипаттау мақсатында олардың тұтқырлығы вискозиметр көмегімен анықталды. Зерттеулер бөлме температурасында жүргізілді, ал тәжірибе нәтижесінде алынған тұтқырлық мәндері 4-кестеде келтірілген. Алынған деректерге сәйкес, құрамында кешен жоқ гидрогель үлгісі ең жоғары тұтқырлық мәнін көрсетті. Ал геллан–цистеин кешені бар гидрогельдердің тұтқырлығы полимерсіз үлгімен салыстырғанда ұқсас деңгейде болды. Бұл алынған жүйелердің қолдануға қолайлы реологиялық қасиеттерге ие екенін көрсетеді. Осылайша, дайындалған мукоадгезивті гидрогельдер дәрілік заттарды жергілікті жеткізу жүйелері ретінде перспективалы болып табылады.Вискозиметрмен анықталған гидрогельді дәрілік форманың тұтқырлығы.

Геллан–цистеин кешені негізінде дайындалған мукоадгезивті гидрогельдердің мукоадгезияға қабілеті визуалды әдіспен бағаланды. Зерттеу әрбір үлгі үшін үш рет қайталанып, модельдік шырышты қабат ретінде шошқа жағының шырышты қабаты пайдаланылды. Гидрогельдер шырышты бетке жағылып, 37 °C температурада жасанды сілекей ерітіндісінде зерттелді. Ауыз қуысының жасанды моделі ұйымдастырылып, тәжірибе барысында әр бес минут сайын бейнебақылау жүргізілді.

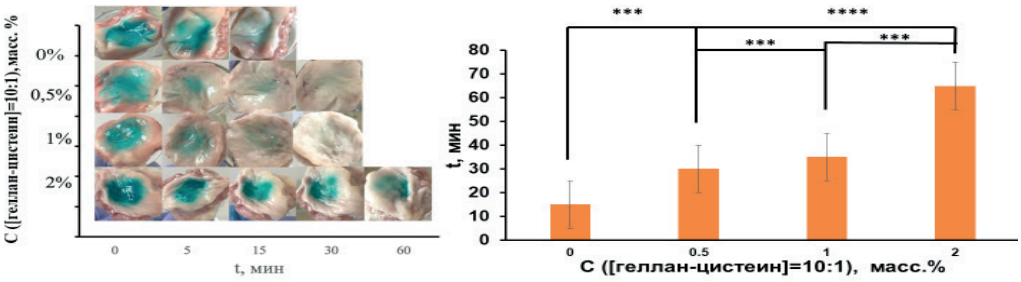
Кесте 4. Гидрогельді дәрілік формалардың реологиялық қасиеттері.

Үлгі	**Аспаптық жүктеме, %**	**Тұтқырлығы, mPa·s**
Кешенсіз гидрогель	69,50	62,28
Таза геллан негізіндегі гидрогель	50,00	44,31
кешен, 0,5 % геллан:цистеин = 10:1	42,00	37,62
кешен, 1 % геллан:цистеин = 10:1	45,50	41,07
кешен, 2 % геллан:цистеин = 10:1	67,60	61,27
Геллан:цистеин = 2:1, 1 %	64,00	61,27
Геллан:цистеин = 1:1, 1 %	68,00	60,69

Мукоадгезивті қасиеттерді бағалау екі топ үлгілер үшін жүзеге асырылды: кешеннің тиол топтарының мөлшеріне және гидрогель құрамындағы полимер концентрациясына байланысты. Алғашқы топта геллан мен цистеиннің мольдік қатынасы 10:1 деңгейінде тұрақты сақталып, гидрогель құрамындағы кешеннің концентрациясы өзгертілді. Құрамында кешен жоқ карбопол 940 негізіндегі гидрогельдің шырышты қабатта ұсталу уақыты шамамен 17 минутты құрады. Полимер концентрациясы 0,5 % және 1 % болатын гидрогельдер үшін бұл көрсеткіш сәйкесінше 29 және 35 минутқа дейін артты. Ең жоғары мукоадгезивті қасиет кешеннің концентрациясы 2 % болатын гидрогель үлгісінде байқалды, ол шошқа жағының шырышты қабатында бір сағаттан астам уақыт бойы сақталды.

Алынған бейнематериалдардың ішінен ең айқын көріністер 3-суретте шартты график түрінде және гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу уақытының полимер концентрациясына тәуелділігі қателік жолақтарымен берілген бағанды диаграмма түрінде ұсынылды. Жалпы алынған нәтижелер кешен құрамындағы

тиол топтарының мөлшері мен гидрогельдегі полимер концентрациясы артқан сайын мукоадгезивті гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу уақыты ұлғаятынын көрсетеді, бұл оларды дәрілік заттарды жергілікті жеткізу жүйелері ретінде қолданудың перспективалы екенін дәлелдейді.



Сурет 3 – Құрамында метронидазол бар гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу қабілетін бағалау (геллан–цистеин кешені, қатынасы 1:1):

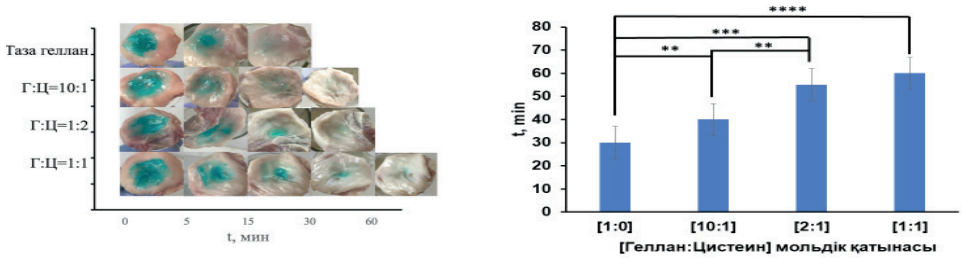
а) шошқа жағының шырышты қабаты бетінде гидрогель үлгілерінің әртүрлі уақыт мезеттеріндегі (0–60 мин) визуалды көріністері;

б) гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу уақытының полимер концентрациясына тәуелділігін көрсететін бағанды диаграмма (қателік жолақтарымен). Статистикалық мәнділік келесідей белгіленді: **** – p <0,0001; *** – p <0,001.

Мукоадгезивті қасиеттерді бағалаудың екінші тобы геллан–цистеин кешеніндегі тиол топтарының мөлшеріне, яғни тиолдану дәрежесіне байланысты салыстырылды. Алғашқы үлгі ретінде құрамында тиол топтары жоқ таза геллан негізіндегі гидрогель алынды, оның шырышты қабат бетінде ұсталу уақыты шамамен 30 минутты құрады. Екінші үлгіде геллан мен цистеиннің мольдік қатынасы 10:1 болғанымен, гидрогельдің шырышты қабатта ұсталу уақыты 35 минут шамасында болып, таза гелланмен салыстырғанда айтарлықтай айырмашылық байқалмады.

Ал геллан:цистеин мольдік қатынастары 2:1 және 1:1 болатын үлгілер үшін мукоадгезивті қасиеттердің едәуір артуы анықталды. Атап айтқанда, 2:1 қатынасындағы гидрогельдің шырышты қабатта ұсталу уақыты шамамен 55 минутты, ал 1:1 қатынасындағы гидрогель үшін бұл көрсеткіш 60 минутты құрады. Бұл мәндер бастапқы үлгілермен салыстырғанда шамамен екі есе жоғары болып, тиол топтарының мөлшері артқан сайын мукоадгезивті қасиеттердің күшейетінін айқын көрсетеді.

Тәжірибе нәтижелерін қорытындылайтын фотосуреттер және гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу уақытының тиолдану дәрежесіне сандық тәуелділігі 4-суретте көрсетілген.



Сурет 4 – Мукоадгезивті гидрогельдердің тиолдану дәрежесіне байланысты шырышты қабатта ұсталу қабілетін бағалау (карбопол концентрациясы – 1 %):

а) геллан–цистеин жүйесінің әртүрлі мольдік қатынастары (таза геллан, Г:Ц = 10:1, 2:1 және 1:1) үшін шошқа жағының шырышты қабаты бетінде гидрогель үлгілерінің әртүрлі уақыт мезеттеріндегі (0–60 мин) визуалды көріністері;

б) гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу уақытының геллан–цистеин мольдік қатынасына (тиолдану дәрежесіне) тәуелділігін көрсететін бағанды диаграмма. Статистикалық мәнділік келесідей белгіленді: **** – p <0,0001; *** – p <0,001; ** – p <0,01.

Зерттеу нәтижелері геллан–цистеин кешені негізіндегі мукоадгезивті гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу уақыты олардың құрамына және кешендегі тиол топтарының мөлшеріне тәуелді екенін, ал тұтқырлықтың бұл көрсеткішке айтарлықтай әсер етпейтінін көрсетті. Цистеинмен өзара әрекеттесу нәтижесінде түзілетін тиол және амин топтары шырышты қабат гликопротеидтерімен дисульфидтік және сутектік байланыстар түзу арқылы мукоадгезивті қасиеттердің артуына ықпал етеді, бұл алынған гидрогельдердің жергілікті дәрілік жеткізу жүйелері ретіндегі перспективалылығын айқындайды.

Сонымен қатар, соңғы жарияланымдарда (Fürst et al., 2024), мукоадгезивті гидрогельдердің тиімділігін арттыру үшін тиол топтарын қорғау немесе тұрақтандыру және құрылымдық дизайн тәсілдерін қолдану ұсынылатыны көрсетілген. Осыған байланысты геллан–цистеин жүйесінде тиол топтарының мөлшерін мольдік қатынас арқылы реттеу халықаралық үрдістермен үйлесетін әрі әрі қарай оңтайландыруға болатын бағыт болып табылады.

Қорытынды. Бұл жұмыста геллан мен L-цистеиннің әртүрлі мольдік қатынастарында (10:1, 2:1 және 1:1) алынған кешендердің құрылымдық және функционалдық қасиеттері жүйелі түрде зерттелді. ИК-спектроскопия және Элман әдісі нәтижелері бастапқы жүйедегі цистеин мөлшерінің артуы кешен құрамындағы еркін тиол топтарының концентрациясының ұлғаюына алып келетінін көрсетті.

Алғаш рет геллан–L-цистеин кешендері негізінде мукоадгезивті гидрогельді дәрілік формалар әзірленіп, олардың реологиялық және мукоадгезивті қасиеттері өзара байланыста бағаланды. Вискозиметриялық зерттеулер гидрогельдердің тұтқырлығы олардың құрамына тәуелді екенін көрсеткенімен, бұл параметр мукоадгезивті қасиеттерге шешуші әсер етпейтіні анықталды. Керісінше, тиол топтарының мөлшері мен кешен концентрациясының артуы гидрогельдердің шырышты қабатта ұсталу уақытын едәуір ұлғайтатыны эксперименттік түрде дәлелденді.

Алынған нәтижелер геллан–цистеин кешендеріндегі тиол топтарының

мукоадгезия механизмінде негізгі рөл атқаратынын айқындайды және зерттелген жүйелердің жаңа функционалдық мукоадгезивті материалдар ретіндегі ғылыми жаңалығын көрсетеді.

Зерттеу нәтижелері шырышты қабат арқылы енгізілетін дәрілік заттарға арналған мукоадгезивті жеткізу жүйелерін (оральды, назальды, вагинальды және офтальмологиялық дәрілік формалар) әзірлеуде практикалық маңызға ие және фармацевтикалық технология мен биомедициналық материалдар саласындағы кейінгі қолданбалы зерттеулер үшін негіз бола алады.

References

Ahuja A., Ali J., & Rahman S. (2006). Polymers for pharmacy. Pharmazie, 61(1). – P. 25-29. (in English)

Batchelor H. (2004). New medical forms. The Drug Delivery Companies Report, 83(9), 16-19. (in English)

Birudaraj, R., Mahalingam R., Li X., & Jasti B.R. (2005). Bioadhesive materials. Critical Reviews in Therapeutic Drug Carrier Systems, 22(3), 295-330. (in English)

Cook S.L., Bull S.P., Methven L., Parker J.K., & Khutoryanskiy V.V. (2017). Mucoadhesion: A food perspective. Food Hydrocolloids, 72. – P. 281-296. (in English)

Costantino H.R., Illum L., Brandt G., et al. (2007). Intranasal delivery: Physicochemical and therapeutic aspects. International Journal of Pharmaceutics, 337(1–2). – P. 1-24. (in English)

Critchley H., Davis S.S., Farraj N.F., & Illum L. (2004). Carbomer-based drug delivery systems. Journal of Pharmacy and Pharmacology, 46(8). – P. 651-656. (in English)

Duclos P. (2004). New medical systems. – Vaccine, 22(15–16). – P. 2059-2063. (in English)

Fürst A., Kali G., Dizdarević A., Stengel D., Bernkop-Schnürch A. (2024) Mucoadhesive polymers: Design of S-protected thiolated cyclodextrin-based hydrogels. International Journal of Pharmaceutics, 656, 124075. (in English)

Illum L. (2003). Mucoadhesion. Journal of Controlled Release, 87(1–3). – P. 187-198. (in English)

Illum L., Farraj N.F., Fisher A.N., et al. (2016). Adsorption properties of mucosa. Journal of Controlled Release, 29(4). – P. 133-141. (in English)

Jodar L., Duclos P., & Milstien J.B. (2001). GIT medical forms. Vaccine, 19(13–14). – P. 1594–1605. (in English)

Junginger H.E., Hoogstraate J.A., & Verhoef J.C. (2008). Formulation of gels. Journal of Controlled Release, 62(1-2). – P. 149-159. (in English)

Koping-Hoggard M., Sanchez A., & Alonso M.J. (2006). Characterisation of carbomer gels. Expert Review of Vaccines, 4. – P. 185-196. (in English)

Mfoafo K., Mittal R., Eshraghi A., Omidi Y., Omidian H. (2023) Thiolated polymers: an overview of mucoadhesive properties and their potential in drug delivery via mucosal tissues. Journal of Drug Delivery Science and Technology, 85, 104596. (in English)

O'Hagan D.T., & Rappuoli R. (2004). Drugs dosage for different medical forms. Pharmaceutical Research, 21(9). – P. 1519-1530. (in English)

Oliveira J.T., Martins L., Picciochi R., Malafaya P.B., Sousa R.A., Neves N.M., Mano J.F., & Reis R.L. (2010). Gellan gum: A new biomaterial for cartilage tissue engineering applications. Journal of Biomedical Materials Research Part A, 93(3). – P. 852-863. (in English)

Smith A.M., Shelton R.M., Perrie Y., & Harris J.J. (2007). An initial evaluation of gellan gum as a material for tissue engineering applications. Journal of Biomaterials Applications, 22(3). – P. 241-254. (in English)

Ugwoke M.I., Agu R.U., Verbeke N., & Kinget R. (2005). Types of medical drug delivery systems. Advanced Drug Delivery Reviews, 43(4). – P. 1640-1665. (in English)

Yadav S., Ahuja M., Kumar A., & Kaur H. (2014). Gellan-thioglycolic acid conjugate: Synthesis, characterization and evaluation as mucoadhesive polymer. Carbohydrate Polymers, 99(2). – P. 601-607. (in English)

Zelikin A.N., Ehrhardt C., & Healy A.M. (2016). Materials and methods for delivery of biological drugs. Nature Chemistry, 8(11). – P. 997-1007. (in English)

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 428–438

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.430

UDC: 547
IRSTI: 31.23.33, 31.23.27

©Sabyrzhanova A.E., Bolatkyzy N., Berganaeva G.E., Dyusebaeva M.A.*, 2026.
Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.
*E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz

STUDY OF AMINO ACIDS AND FATTY ACIDS IN THE AERIAL PART OF *PLANTAGO MAJOR*

Sabyrzhanova Aizada — Junior Research Fellow, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: aiz_s@mail.ru, https://orcid.org/0009-0005-0421-2654;
Bolatkyzy Nazerke — PhD, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: nbolatkyzy98@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-2072-5884;
Berganayeva Gulzat — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, scientist of Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: gulzat_bakyt@mail.ru , http://orcid.org/0000-0002-7213-7458;
*__Dyusebaeva Moldyr__ — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, scientist of Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz, http://orcid.org/0000-0003-3873-5099.

Abstract. This study presents a comprehensive investigation of the aboveground and underground parts of *Plantago major* (greater plantain) growing in different regions of Kazakhstan. The objective of the study was to evaluate the pharmacological and chemical characteristics of the plant and to determine the composition of biologically active substances (BAS), including macro- and microelements, amino acids, and fatty acids.

Physicochemical parameters of the plant material, such as moisture content, total ash, and extractive substances, were determined in accordance with the requirements of *the State Pharmacopoeia of the Republic of Kazakhstan*. The mineral composition of the ash was analyzed using atomic absorption spectroscopy. The results demonstrated significant concentrations of calcium, potassium, magnesium, iron, and zinc, indicating a high nutritional and therapeutic potential of the plant material.

The quantitative composition of twenty amino acids in the root part of *Plantago major* was determined using gas and gas-liquid chromatography. Lysine, glycine, serine, and threonine were identified as the predominant amino acids. These compounds are known to play an essential role in metabolic processes and in maintaining immune and nervous system functions.

In addition, gas chromatography analysis of the aboveground part revealed the presence of eight fatty acids, with linoleic acid (40.2%) and oleic acid (34.6%) as the dominant components. These fatty acids contribute to energy metabolism, structural integrity of cellular membranes, and exhibit anti-inflammatory, antioxidant, and immunomodulatory properties.

The results confirm the potential of *Plantago major* as a valuable natural source of biologically active compounds for pharmaceutical and food industry applications.

Keywords: *Plantago major*, chemical-analytical parameters, mineral composition, amino acids, fatty acids, pharmacognostic parameters, GC, GC-MS

Financing: *the work was carried out within the framework of the grant financing project of the Ministry of Internal Affairs of the Republic of Kazakhstan contract No.190 /GF 24-26 AP23484003 "Development of new domestic and environmentally safe pharmacological substances for the treatment of skin diseases".*

For citations: *Sabyrzhanova A.E., Bolatkyzy N., Berganaeva G.E., Dyusebaeva M.A. Study of Amino Acids and Fatty Acids in the Aerial Part of Plantago major. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp.428–438. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.430*

©Сабыржанова **А.Е.,** Болатқызы **Н.,** Берганаева **Г.Е.,** Дюсебаева **М.А.**[*]**, 2026.**
Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.
[*]E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz

PLANTAGO MAJOR ЖЕР ҮСТІ БӨЛІГІНІҢ ҚҰРАМЫНДАҒЫ АМИН ҚЫШҚЫЛДАРЫ МЕН МАЙ ҚЫШҚЫЛДАРЫН ЗЕРТТЕУ

Сабыржанова Айзада — кіші ғылыми қызметкер, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: aiz_s@mail.ru, https://orcid.org/0009-0005-0421-2654;
Болатқызы Назерке — PhD, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университет, Алматы, Қазақстан,
E-mail: nbolatkyzy98@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-2072-5884;
Берганаева Гульзат — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, ғылыми қызметкер, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: gulzat_bakyt@mail.ru, http://orcid.org/0000-0002-7213-7458;
[*]**Дюсебаева Мольдыр** — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, ғылыми қызметкер, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz, http://orcid.org/0000-0003-3873-5099.

Аннотация. Бұл жұмыста Қазақстанның әртүрлі аймақтарында өсетін *Plantago major* (үлкен жолжелкен) өсімдігінің жер үсті және жер асты бөліктеріне кешенді зерттеу жүргізілді. Зерттеудің мақсаты өсімдіктің фармакологиялық және химиялық сипаттамаларын бағалау, сондай-ақ биологиялық белсенді заттардың (ББЗ), макро- және микроэлементтердің, аминқышқылдарының және май қышқылдарының құрамын анықтау болды.

Өсімдік шикізатының физика-химиялық көрсеткіштері, соның ішінде ылғалдылық, жалпы күл мөлшері және экстрактивті заттардың құрамы *Қазақстан Республикасының Мемлекеттік фармакопеясының* талаптарына сәйкес анықталды. Күл құрамындағы минералдық элементтер атомдық-абсорбциялық спектроскопия әдісі арқылы зерттелді. Зерттеу нәтижелері кальций, калий, магний, темір және мырыш элементтерінің едәуір мөлшерде бар екенін көрсетті, бұл өсімдіктің жоғары тағамдық және емдік құндылығын дәлелдейді.

Plantago major өсімдігінің тамыр бөлігіндегі жиырма аминқышқылының сандық құрамы газды және газ-сұйық хроматография әдістері арқылы анықталды. Анықталған аминқышқылдарының ішінде лизин, глицин, серин және треонин басым мөлшерде кездесетіні анықталды. Бұл аминқышқылдары ағзадағы зат алмасу процестерінде маңызды рөл атқарады және иммундық әрі жүйке жүйелерінің қызметін қолдауға қатысады.

Сонымен қатар, өсімдіктің жер үсті бөлігінде газды хроматография әдісі арқылы сегіз май қышқылы анықталды. Олардың ішінде линол қышқылы (40,2%) және олеин қышқылы (34,6%) басым екені анықталды. Бұл май қышқылдары энергия алмасуына қатысады, жасуша мембраналарының құрылымын сақтауға көмектеседі және қабынуға қарсы, антиоксиданттық әрі иммуномодуляциялық қасиеттерге ие.

Алынған нәтижелер *Plantago major* өсімдігінің фармацевтика және тағам өнеркәсібінде қолдануға болатын биологиялық белсенді қосылыстардың маңызды көзі екенін көрсетеді.

Түйін сөздер: *Plantago major*, химико-талдамалық көрсеткіштер, минералдық құрамы, аминқышқылдар, май қышқылдары, фармакогностикалық көрсеткіштер, ГХ, ГХ-МС

©Сабыржанова А.Е., Болаткызы Н., Берганаева Г.Е., Дюсебаева М.А.*, 2026.
[1]Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан.
*E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz

ИССЛЕДОВАНИЕ АМИНОКИСЛОТ И ЖИРНЫХ КИСЛОТ В СОСТАВЕ НАДЗЕМНОЙ ЧАСТИ *PLANTAGO MAJOR*

Сабыржанова Айзада — младший научный сотрудник, Казахский национальный университет имени Аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: aiz_s@bk.ru, https://orcid.org/0009-0005-0421-2654;
Болаткызы Назерке — PhD, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: nbolatkyzy98@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-2072-5884;
Берганаева Гульзат — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, научный сотрудник, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: gulzat_bakyt@mail.ru, http://orcid.org/0000-0002-7213-7458;
*__Дюсебаева Мольдыр__ — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, научный сотрудник, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz, http://orcid.org/0000-0003-3873-5099.

Аннотация. В работе представлено комплексное исследование надземной и подземной частей растения Plantago major (подорожник большой), произрастающего в различных регионах Казахстана. Цель исследования заключалась в изучении фармакологических и химических характеристик растения, а также в определении состава биологически активных веществ (БАВ), включая макро- и микроэлементы, аминокислоты и жирные кислоты. Физико-химические показатели растительного сырья, такие как влажность, общая зольность и содержание экстрактивных веществ, определяли в соответствии с требованиями Государственной фармакопеи Республики Казахстан. Минеральный состав золы исследовали методом атомно-абсорбционной спектроскопии. Результаты анализа показали значительное содержание кальция, калия, магния, железа и цинка, что свидетельствует о высокой пищевой и терапевтической ценности растения. Количественный состав двадцати аминокислот в корневой части Plantago major был установлен с использованием методов газовой и газожидкостной хроматографии. Среди идентифицированных аминокислот наибольшее содержание отмечено для лизина, глицина, серина и треонина. Указанные аминокислоты играют важную роль в метаболических процессах и участвуют в поддержании функций иммунной и нервной систем. Кроме того, методом газовой хроматографии в надземной части растения было выявлено восемь жирных кислот, среди которых доминируют линолевая (40,2 %) и олеиновая (34,6 %) кислоты. Эти соединения участвуют в энергетическом обмене, поддержании структуры клеточных мембран, а также обладают противовоспалительными, антиоксидантными и иммуномодулирующими свойствами. Полученные результаты подтверждают перспективность Plantago major как источника биологически активных соединений для применения в фармацевтической и пищевой промышленности.

Ключевые слова: *Plantago major*, химико-аналитические показатели, минеральный состав, аминокислоты, жирные кислоты, фармакогностические показатели, ГХ, ГХ-МС

Введение. Флора Казахстана богата лекарственными растениями, представляющими значительный интерес для фармацевтической промышленности. Одним из широко распространённых и биологически активных видов является *Plantago major L.* (большой подорожник, сем. *Plantaginaceae*), известный своими антисептическими, противовоспалительными, иммуностимулирующими и ранозаживляющими свойствами (Adom et al., 2017; Rahamooz-Haghighi et al., 2021; Turgumbayeva et al., 2022).

Род *Plantago* насчитывает свыше 200 видов, преимущественно распространённых в умеренных широтах северного полушария. В Казахстане встречается до 25 видов подорожника, среди которых *Plantago major* является наиболее распространённым. Однако, несмотря на широкое ареальное распространение, казахстанские популяции этого вида остаются недостаточно изученными в эколого-химическом аспекте, что ограничивает их промышленное использование.

Химический состав *P. major* включает флавоноиды, фенолкарбоновые кислоты, иридо-иды, сапонины, слизь, витамины и минеральные элементы, определяющие его фармакологи-ческую активность (da Silva Rodrigues et al., 2025; Rahamouz-Haghighi et al., 2023). Известно, что содержание вторичных метаболитов в растениях варь-ирует в зависимости от экологических условий, почвенного состава и антропогенной нагрузки, что требует регионального анализа.

Актуальность работы обусловлена необходимостью формирования отечественной сы-рьевой базы лекарственных растений и выявления экологически устойчивых популяций с вы-соким содержанием биологически активных веществ.

Цель исследования - провести GC-MS анализ жирорастворимых компонентов *Plantago major L.*, произрастающего на территории Казахстана, для оценки его эколого-химических особенностей и определения перспектив культивирования.

Научная новизна заключается в том, что впервые проводится сравнительное исследо-вание химического профиля казахстанских популяций *P. major*, что позволит выявить их по-тенциал для использования в фармацевтической промышленности и разработке стандарти-зированных отечественных фитопрепаратов (Cardoso et al., 2025; Laanet et al., 2024; Najafian et al., 2018; Samuelsen, 2000; Sousa et al., 2025).

Материалы и методы**.** Влажность и зольность лекарственного растительного сырья определяли в соответствии с Государственной Фармакопеи (ГФХI).

Для анализа макро- и микроэлементного состава используют сырье, предварительно измельченное лабораторным измельчителем до размера, не превышающего 10 мм. В 3-5 г ± 0.01 г сырья помещают в прокаленный и точно взвешенный фарфоровый тигель. Затем ти-гель осторожно нагревают, начиная с минимальной температуры для того, чтобы вещество загорелось. Постепенно увеличивают температуру, проводя сжигание при 500 °С до получе-ния постоянной массы. Золу Plantago major растворяют в 5 мл (1:1) азотной кислоты при нагревании. Полученный раствор затем нагревают для получения солей. Далее растворяют в 10-15 мл 1н HNO_3 или в 1н HCl, переносят в мерный сосуд объемом 25 мл для анализа. Холо-стой раствор готовится аналогичным способом (State Pharmacopoeia of the Republic of Kazakhstan, 2014).

Для определения макро- и микроэлементов использовался метод атомно-адсорбционной спектроскопии. Элементный состав золы *Plantago major* определяют методом многоэлементного атомно-адсорбционного спектрального анализа в Центре физико-химических методов анализа НАО «Казахский национальный университет имени аль-Фараби».

Для определения аминокислотного и жирнокислотного состава надземной части *Plantago major* применяли метод газожидкостной хроматографии (ГЖХ) (*Agilent 8890 GC США*). Анализ аминокислотного состава корневой части *Plantago major* проводят методом газовой хроматографии, сопряжённой с масс-спектрометрией (ГХ-МС). Пробоподготовку осуществляют путём гидролиза высушенного и измельчённого растительного материала 6 н HCl при 110 °С в течение 24 ч, последующего фильтрования и дериватизации с использованием

N,O-бис(триметилсилил)трифторацетамида (BSTFA) при 70 °C в течение 30 мин.

В качестве неподвижной фазы используют 0.31 % полярной смеси на 20-метровом карбоваре, 0.28 % 5 CP силар и WA-W-120-140 меш., а также 0.06 % лексан, нанесённый на хромосорб в колонке размером 400 × 3 мм. Температурную программу устанавливают следующим образом: 110 °C (20 мин), повышение до 180 °C со скоростью 6 °C/мин, затем до 290 °C со скоростью 32 °C/мин, удержание 10 мин.

Идентификацию аминокислот осуществляют на основании времени удерживания и масс-спектров внешних стандартов (*Sigma-Aldrich*). Количественное определение выполняют методом внутреннего стандарта.

Жирнокислотный состав (высших карбоновых кислот) растительного комплекса определяют методом газовой хроматографии на приборе *Clarus 600*. Для анализа используют предварительно измельчённое растительное сырьё, из которого проводят экстракцию смесью хлороформа и метанола в соотношении 2:1 в течение 5 мин. Полученный экстракт фильтруют через бумажный фильтр и упаривают до концентрата.

К концентрату добавляют 10 мл метанола и 2-3 капли ацетилхлорида, после чего проводят метилирование при температуре 60-70 °C в течение 30 мин. После завершения реакции метанол удаляют с помощью роторного испарителя, а оставшийся осадок экстрагируют 5 мл гексана. Полученные метиловые эфиры жирных кислот вводят в газовый хроматограф для анализа.

Условия хроматографического анализа:

- температура инжектора - 188°C
- температура детектора - 230°C
- температура печи - 188°C
- продолжительность анализа - 1 час

Определение содержания отдельных компонентов проводили методом внутренней нормализации.

Результаты исследований. Состав биологически активных веществ зависит от различных факторов - в первую очередь, от климатических условий региона произрастания, времени сбора и подготовки сырья, а также от способности растений накапливать соединения определенных групп.

Для выявления активных соединений в растении были проведены качественные реакции, соответствующие каждой группе биологически активных веществ.

Количественный и качественный анализ биологически активных компонентов, а также содержание влаги, общей золы и содержания экстрактивных веществ был определен для надземной части *Plantago major*.

Таблица 1 - Количественный анализ надземных частей Plantago major

Plantago major	Влажность	Зольность	Экстрактивность		
			50 % этанол	70% этанол	95% этанол
	5.40% ±0.12	6.05%±0.09	15.54±0.31	18.28±0.27	1763±0.22

Как показано в таблице 1, влажность растительного сырья составила 5.4%. Обычно влажность растения представляет собой коллоидную жидкость, которая сохраняется в тканях и клетках сырья после его высушивания до постоянной массы. Содержание влаги в лекарственном сырье является одним из показателей его массы. У большинства видов лекарственного растительного сырья влажность не должна превышать 12-15%.

Для определения экстрактивных веществ при использовании 70% этилового спирта было установлено увеличение выхода биологически активных веществ в раствор. Это свидетельствует о том, что 70% этанол является эффективным экстрагентом для выделения БАВ из *Plantago major*. Поэтому качественные и количественные определения проводились с использованием 70%-ного водно-спиртового экстракта.

В «Центре физико-химических методов анализа» НАО «Казахский национальный университет им. аль-Фараби» метод атомно-абсорбционной спектроскопии (ААС) в золе *Plantago major* были определены десять макро- и микроэлементов, показаны в таблице 2, основными из которых являются Ca (1342.5611мкг/мл) и K (1224.1271мкг/мл). Калий участвует в процессе проведения нервных импульсов и передачи их к иннервируемым органам, способствует лучшей мозговой деятельности, также необходим для осуществления сокращений скелетных мышц (Humphries & Dart, 2015). Кальций играет ключевую роль в формировании и укреплении костной ткани и зубов. Он необходим для нормального сокращения мышц, в том числе сердечной, а также для передачи нервных импульсов. Кроме того, кальций участвует в свёртывании крови и поддержании стабильной работы ферментных систем (Cormick & Belizán, 2018).

Таблица 2 - Состав макро-микроэлементов в золе растения *P. Major*

Элементы	Проба	*Ca*	*Mg*	*Na*	*K*	*Fe*	*Cd*	*Ni*	*Cu*	*Mn*	*Zn*
Концентрация в золе, мкг/мл	1	1342.10	144.80	253.40	1223.80	32.80	0.02	0.28	1.03	1.18	2.05
	2	1343.00	147.10	254.00	1224.50	33.10	0.01	0.34	1.07	1.34	2.13
	3	1342.58	146.22	253.67	1224.06	33.07	0.03	0.31	1.05	1.26	2.09
	Среднее значение	1342.56	146.04	253.69	1224.12	32.99	0.02	0.31	1.05	1.26	2.09

Методом газовой хроматографии с масс-детектором был определён аминокислотный состав растения *Plantago major.* Идентифицировано 20 аминокислот.

Таблица 3 - *Аминокислотный состав P. Major*

№	Аминокислота	Общая формула соединения	М, г/моль	Доля в растении, мг/100г
1	*Аланин*	$C_3H_7NO_2$	89.09	352
2	*Глицин*	$C_2H_5NO_2$	75.07	447
3	*Лейцин*	$C_6H_{13}NO_2$	131.17	321
4	*Изолейцин*	$C_6H_{13}NO_2$	131.17	334
5	*Валин*	$C_5H_{11}NO_2$	117.15	289
6	*Глутамат*	$C_5H_9NO_4$	147.13	22
7	*Треонин*	$C_4H_9NO_3$	119.12	413
8	*Пролин*	$C_5H_9NO_2$	115.13	251
9	*Метионин*	$C_5H_{11}NO_2S$	149.21	113
10	*Серин*	$C_3H_7NO_3$	105.09	437

11	*Аспарагат*	$C_4H_7NO_4$	133.10	38
12	*Цистин*	$C_6H_{12}N_2O_4S_2$	240.30	82
13	*Оксипролин*	C□H□NO□	131.13	23
14	*Фенилаланин*	$C_9H_{11}NO_2$	165.19	379
15	*Тирозин*	$C_9H_{11}NO_3$	181.19	359
16	*Гистидин*	$C_6H_9N_3O_2$	155.16	117
17	*Орнитин*	$C_5H_{12}N_2O_2$	132.16	18
18	*Аргинин*	$C_6H_{14}N_4O_2$	174.20	431
19	*Лизин*	$C_6H_{14}N_2O_2$	146.19	627
20	*Триптофан*	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	204.23	62

В составе аминокислот большого подорожника преобладали лизин (627 мг / 100 г), глицин (447 мг / 100 г), серин (437 мг / 100 г) и треонин (413 мг / 100 г).

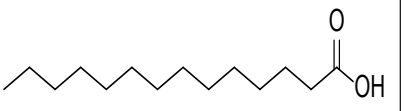
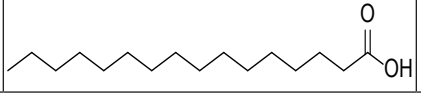
Лизин необходим для поддержания энергетического уровня организма, усвоения и транспортировки кальция в костные ткани, а также стимулирует основные функции жёлчного пузыря и процессы эндокринной системы человека (Bihuniak et al., 2014).

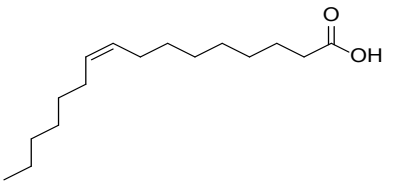
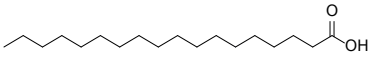
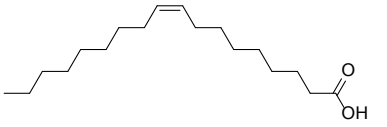
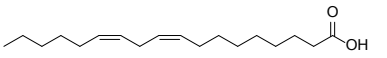
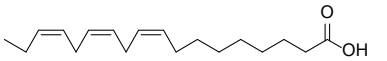
Треонин предотвращает накопление жира в печени и участвует в синтезе аминокислот глицина и серина, которые отвечают за рост мышечной ткани, эластина и коллагена [15].

Глицин — это тормозной медиатор центральной нервной системы, влияющий на внимание, память, нормализацию сна и снижение психоэмоционального напряжения. При дефиците глицина снижаются интеллектуальные способности, уровень энергии и ухудшается работа иммунной системы (Razak et al., 2017).

Методом газовой хроматографии было определено 8 жирных кислот (таблица 4). Жирные кислоты являются основными структурными компонентами растительных клеток и служат важным источником энергии. Липиды присутствуют во всех частях растения в различной концентрации и способствуют регуляции жидкостного баланса в мембранах, а также адаптации к изменениям температуры (Yu et al., 2021).

Таблица 4 - *Показатель жирных кислот в P. Major*

№	Жирные кислоты	Общая формула	Структурная формула	М, г/моль	Доля в растении, **%**
1	*Миристиновая кислота*	$C_{14}H_{28}O_2$		228	1.8
2	***Пентадециловая кислота***	$C_{15}H_{30}O_2$		242	2.1
3	*Пальмитиновая кислота*	$C_{16}H_{32}O_2$		256	13.9

4	*Пальмитолеиновая кислота*	$C_{16}H_{30}O_2$		254	1.4
5	*Стеариновая кислота*	$C_{18}H_{36}O_2$		284	2.3
6	*Олеиновая кислота*	$C_{18}H_{34}O_2$		282	34.6
7	*Линолевая кислота*	$C_{18}H_{32}O_2$		280	40.2
8	*Линоленовая кислота*	$C_{18}H_{30}O_2$		278	6.7

Согласно данным, представленным в таблице 4, основными жирными кислотами в составе листьев *Plantago major* являются линолевая кислота (40.2%) и олеиновая кислота (34.6%).

Линолевая кислота способствует снижению риска канцерогенеза, атеросклероза, воспалений, ожирения и сахарного диабета, а также предотвращает развитие атеросклеротических изменений в сосудах и способствует снижению уровня холестерина в крови (Qiu et al., 2024).

Олеиновая кислота играет важную роль в питании, помогает бороться с высоким уровнем холестерина и инсулинорезистентностью, укрепляет иммунитет, а по данным последних исследований, может даже предотвращать развитие рака молочной железы у женщин, препятствовать заболеваниям, влияющим на головной мозг и надпочечники, а также улучшать память (Perdomo et al., 2015).

Пальмитиновая кислота входит в состав глицеридов многих животных и растительных жиров, а также восков. Известно, что она стимулирует противовоспалительные реакции в иммунных клетках человека через рецепторы TLR4 и обладает противоопухолевой и антидиабетической активностью (Nicholas et al., 2017).

Заключение. Проведенное всестороннее фитохимическое исследование *Plantago major* (большого подорожника), произрастающего на территории Казахстана, подтвердило его высокую фармакогностическую, биологическую и пищевую ценность. На основе полученных результатов можно сделать следующие выводы:

Физико-химические показатели сырья, включая влажность, зольность и экстрактивность, соответствуют требованиям Государственной фармакопеи Республики Казахстан, что свидетельствует о надлежащем качестве исследуемого растительного материала и возможности его дальнейшего стандартизированного

использования в фармацевтической практике. Минералогический анализ золы, выполненный методом атомно-абсорбционной спектроскопии (ААС), выявил высокое содержание макро- и микроэлементов, включая кальций, калий, магний, железо и цинк. Эти элементы играют ключевую роль в поддержании нормального функционирования сердечно-сосудистой, нервной и опорно-двигательной систем, а также в обменных процессах и антиоксидантной защите организма.

Аминокислотный состав корневой части *P. major*, определённый с использованием газовой хроматографии, продемонстрировал высокую концентрацию жизненно важных аминокислот - лизина, глицина, серина и треонина. Эти аминокислоты участвуют в регуляции метаболизма, синтезе белков, функционировании нервной системы и укреплении иммунного ответа. Наличие всех 20 стандартных аминокислот указывает на полноценный белковый потенциал растения.

Жирнокислотный профиль надземной части, определённый методом газовой хроматографии, выявил доминирование полиненасыщенных жирных кислот - линолевой и олеиновой, которые обладают выраженными противовоспалительными, гипохолестеринемическими и антиоксидантными свойствами, а также способствуют профилактике сердечно-сосудистых заболеваний и нарушений обмена веществ.

Таким образом, *Plantago major* представляет собой перспективный источник биологически активных веществ (БАВ), обоснованно рекомендуемый для использования в качестве сырья при разработке новых фитопрепаратов, нутрицевтиков и функциональных продуктов питания. Его богатый аминокислотный, жирнокислотный и минеральный состав делает растение привлекательным как для традиционной, так и для современной медицины. Учитывая широкую экологическую распространённость и адаптационные способности данного вида в условиях Казахстана, целесообразно продолжить его углублённое изучение, стандартизацию и оптимизацию условий культивирования с целью расширения базы отечественного лекарственного растительного сырья.

References

Adom M.B., Taher M., Mutalabisin M.F., et al. (2017). Chemical constituents and medical benefits of Plantago major. Biomedicine & Pharmacotherapy, 96. – P. 348–360. https://doi.org/10.1016/j.biopha.2017.09.152 (in Eng.).

Bihuniak J.D., Sullivan R.R., Simpson C.A., et al. (2014). Supplementing a low-protein diet with dibasic amino acids increases urinary calcium excretion in young women. The Journal of Nutrition, 144(3). – P. 282–288. https://doi.org/10.3945/jn.113.185009 (in Eng.).

Cardoso F.C. I., et al. (2025). Effect of Plantago major on wound healing in hyperglycemic mice. Journal of Biosciences and Medicines, 13(4). – P. 320–333. https://doi.org/10.4236/jbm.2025.134026 (in Eng.).

Chen J., Qian D., Wang Z., et al. (2022). Threonine supplementation prevents the development of fat deposition in mice fed a high-fat diet. Food & Function, 13. – P. 7772–7780. https://doi.org/10.1039/D2FO01201D (in Eng.).

Cormick G. & Belizán J. M. (2018). Calcium intake in bone health: A focus on calcium-rich mineral waters. Nutrients, 10(12). – P. 1930. https://doi.org/10.3390/nu10121930 (in Eng.).

Da Silva Rodrigues L., et al. (2025). Mineral and trace element analysis of non-conventional food plants using ICP-OES and chemometric techniques. Food Chemistry, 472. – P. 142854. https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.142854 (in Eng.).

Humphries E.S. & Dart C. (2015). Neuronal and cardiovascular potassium channels as therapeutic drug targets: Promise and pitfalls. The Journal of Physiology, 593(13). – P. 2609–2623. https://doi.org/10.1177/1087057115601677 (in Eng.).

Laanet P.R., Bragina O., Jõul P. & Vaher M. (2024). Plantago major and Plantago lanceolata exhibit antioxidants and Borrelia burgdorferi inhibiting activities. International Journal of Molecular Sciences, 25(13). – P. 7112. https://doi.org/10.3390/ijms25137112 (in Eng.).

Najafian Y., Hamedi S.S., Farshchi M.K. & Feyzabadi Z. (2018). Plantago major in traditional Persian medicine and modern phytotherapy: A narrative review. Electronic Physician, 10(2). – P. 6390. https://doi.org/10.19082/6390 (in Eng.).

Nicholas D.A., Zhang K., Hung C., et al. (2017). Palmitic acid is a toll-like receptor 4 ligand that induces human dendritic cell secretion of IL-1β. PLOS ONE, 12(5), e0176793. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0176793 (in Eng.).

Perdomo L., Beneit N., Otero Y. F., et al. (2015). Protective role of oleic acid against cardiovascular insulin resistance and in the early and late cellular atherosclerotic process. Cardiovascular Diabetology, 14:75. https://doi.org/10.1186/s12933-015-0237-9 (in Eng.).

Qiu J., Zhao Z., Suo H., et al. (2024). Linoleic acid exhibits anti-proliferative and anti-invasive activities in endometrial cancer cells and a transgenic model of endometrial cancer. Critical Reviews in Food Science and Nutrition. Advance online publication. https://doi.org/10.1080/15384047.2024.2325130 (in Eng.).

Rahamooz-Haghighi S., Bagheri K., Sharafi A., et al. (2021). Anti-proliferative properties, biocompatibility, and chemical composition of different extracts of Plantago major medicinal plant. Iranian Biomedical Journal, 25(2). – P. 106. https://doi.org/10.29252/ibj.25.2.106 (in Eng.).

Rahamouz-Haghighi S., Bagheri K., Sharafi A., et al. (2023). Antibacterial activities and chemical compounds of Plantago lanceolata (Ribwort plantain) and Plantago major (Broadleaf plantain) leaf extracts. Pharmaceutical and Biomedical Research, 9(3). – P. 183-200. https://doi.org/10.32598/PBR.9.3.1061.4 (in Eng.).

Razak M.A., Begu P. S., Viswanath, B., & Rajagopal S. (2017). Multifarious beneficial effect of nonessential amino acid glycine. Scientific World Journal, 1716701. https://doi.org/10.1155/2017/1716701 (in Eng.).

Samuelsen A.B. (2000). The traditional uses, chemical constituents and biological activities of Plantago major L.: A review. Journal of Ethnopharmacology, 71:(1–2). – P. 1–21. https://doi.org/10.1016/S0378-8741(00)00212-9 (in Eng.).

Sousa D.S.M., et al. (2025). Plantago major leaf extract against bacteria and fungi of medical importance. Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences, 61, e24143. https://doi.org/10.1590/s2175-97902025e24143 (in Eng.).

State Pharmacopoeia of the Republic of Kazakhstan. (2014). State Pharmacopoeia of the Republic of Kazakhstan: Vol. 1. General methods of analysis. National Center for Expertise of Medicines and Medical Devices. (in Kazakh)

Turgumbayeva A., Zhakipbekov K., Shimirova Z., et al. (2022). Study of phytochemical compounds of Plantago major leaves grown in Kazakhstan. Pharmacia, 69. – P. 1019-1026. https://doi.org/10.3897/pharmacia.69.e96526 (in Eng.).

Yu L., Zhou C., Fan J., et al. (2021). Mechanics and functions of membrane lipid remodeling in plants. The Plant Journal, 107(1). – P. 37–53. https://doi.org/10.1111/tpj.15273 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 439–449

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.431

UDC: 678.743
IRSTI: 06.79.25

©Satayeva S.[1], Akhmetova F. [1*], Urazova A.[1], Aituganova S.[2], Yerniyazova K.[2], 2026.

[1]West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan, Uralsk, Kazakhstan;

[2] Mahambet Otemisuly West Kazakhstan University, Uralsk, Kazakhstan.
[*]E-mail: firuza.92@mail.ru

THE INFLUENCE OF PEPA CONCENTRATION ON THE PHYSICAL, MECHANICAL AND OPERATIONAL PROPERTIES OF ED-20 EPOXY ADHESIVES

Satayeva Sapura — PhD, Associate Professor, West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan, Uralsk, Kazakhstan,
E-mail: sataeva_safura@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2397-9069;
Akhmetova Firuza — PhD, Acting Associate Professor, West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan, Uralsk, Kazakhstan,
E-mail: firuza.92@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-8869-3053;
Urazova Alia — Master of Technical Sciences, senior lecturer, West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan, Uralsk, Kazakhstan,
E-mail: urazova_17@list.ru, https://orcid.org/0000-0001-6339-9635;
Aituganova Saule — Candidate of pedagogical sciences, senior lecturer, Mahambet Otemisuly West Kazakhstan University, Uralsk, Kazakhstan,
E-mail: saitug@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-1972-5170;
Yerniyazova Kadisha — Master student, Mahambet Otemisuly West Kazakhstan University, Uralsk, Kazakhstan,
E-mail: kadi_1991@mail.ru, https://orcid.org/0009-0007-5173-5196.

Abstract. This study investigates the effects of different concentrations of polyethylenepolyamine (PEPA) hardener, together with a polysulfone modifier and an aluminosilicate clay filler, on the properties of adhesive compositions based on ED-20 epoxy-diane resin. Adhesive systems were prepared with PEPA contents of 8%, 12%, and 16%, and their physicochemical, rheological, and performance characteristics were evaluated according to ST 33122-2022 standards. Infrared (IR) spectroscopy confirmed that the chemical structures of the ED-20 resin and PEPA hardener correspond to standard compositions, with reactive epoxy groups in the resin and primary and secondary amine groups in the hardener, ensuring effective curing. The influence of PEPA concentration

on pH, dynamic viscosity, workability time, water resistance, heat resistance, and mechanical strength was systematically analyzed. Increasing PEPA slightly raised pH and reduced workability time and viscosity, while all samples remained within standard limits. Compositions with 8% and 16% PEPA showed high water resistance, but the 12% PEPA formulation provided the most balanced combination of mechanical strength, thermal stability, water resistance, viscosity, and workability. Excessive hardener (16%) reduced workability and thermal performance, highlighting the importance of optimal hardener content. Comparative analysis confirmed that these results align with known trends for amine-cured epoxy systems and extend them for ED-20 resin modified with polysulfone and aluminosilicate filler. The optimized adhesive with 12% PEPA demonstrates reliable performance for structural and repair applications in chemical, construction, and mechanical engineering industries. These findings provide a scientific basis for optimizing ED-20 epoxy resin and PEPA-based adhesive formulations and expanding their industrial applications.

Keywords: epoxy adhesive, ED-20 epoxy resin, polyethylenepolyamine, hardener concentration, IR spectroscopy, physicomechanical properties, adhesive compositions

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 439–449. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.431*

©Сатаева С.[1], Ахметова Ф.[1*], Уразова А.[1], Айтуганова С.[2], Ерниязова К.[2], 2026.

[1]Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал қаласы, Қазақстан;

[2]Махамбет Өтемісұлы атындағы Батыс Қазақстан университеті, Орал, Қазақстан.

[*]E-mail: firuza.92@mail.ru

ЭД-20 ЭПОКСИДТІ ЖЕЛІМДЕРІНІҢ ФИЗИКА-МЕХАНИКАЛЫҚ ЖӘНЕ ЭКСПЛУАТАЦИЯЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІНЕ ПЭПА КОНЦЕНТРАЦИЯСЫНЫҢ ЫҚПАЛЫ

Сатаева Сапура — PhD, қауымдастырылған профессор, Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал қаласы, Қазақстан,
E-mail: sataeva_safura@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2397-9069;
Ахметова Фируза **—** PhD, доцент м.а., Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал қаласы, Қазақстан,
E-mail: firuza.92@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-8869-3053;
Уразова Алия **—** техника ғылымдарының магистрі, аға оқытушы, Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал қаласы, Қазақстан,
E-mail: urazova_17@list.ru, https://orcid.org/0000-0001-6339-9635;
Айтуганова Сауле **— педагогика ғылымдарының кандидаты,** аға оқытушы, Махамбет Өтемісұлы атындағы Батыс Қазақстан университеті, Орал, Қазақстан,

E-mail: saitug@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-1972-5170;
Ерниязова Кадиша — магистрант, Махамбет Өтемісұлы атындағы Батыс Қазақстан университеті, Орал, Қазақстан,
E-mail: kadi_1991@mail.ru, https://orcid.org/0009-0007-5173-5196.

Аннотация. Бұл зерттеу полиэтиленполиаминнің (ПЭПА) қатайтқышының әртүрлі концентрацияларының, полисульфон модификаторымен және алюмосиликат саз толтырғышымен бірге ЭД-20 эпоксидті-диан шайырына негізделген желімдік құрамдардың қасиеттеріне әсерін зерттейді. Желімді жүйелер 8%, 12% және 16% ПЭПА құрамымен дайындалды, ал олардың физика-химиялық, реологиялық және өнімділік сипаттамалары ST 33122-2022 стандарттарына сәйкес бағаланды. Инфрақызыл (ИҚ) спектроскопия ЭД-20 шайыры мен ПЭПА қатайтқышының химиялық құрылымдары стандартты құрамдарға сәйкес келетінін, шайырдағы реактивті эпоксидті топтар мен қатайтқыштағы бастапқы және екінші реттік амин топтары тиімді қатаюды қамтамасыз ететінін растады. ПЭПА концентрациясының pH-қа, динамикалық тұтқырлыққа, жұмыс істеу уақытына, суға төзімділікке, ыстыққа төзімділікке және механикалық беріктікке әсері жүйелі түрде талданды. ПЭПА-ның жоғарылауы pH-ны аздап көтеріп, жұмыс істеу уақыты мен тұтқырлықты азайтты, ал барлық үлгілер стандартты шектерде қалды. 8% және 16% ПЭПА бар композициялар жоғары су өткізбейтіндігін көрсетті, бірақ 12% ПЭПА құрамы механикалық беріктіктің, термиялық тұрақтылықтың, су өткізбейтіндіктің, тұтқырлықтың және жұмысқа жарамдылықтың ең теңгерімді үйлесімін қамтамасыз етті. Шамадан тыс беріктендіруші (16%) жұмысқа жарамдылықты және термиялық өнімділікті төмендетті, бұл оңтайлы беріктендіруші құрамының маңыздылығын көрсетті. Салыстырмалы талдау бұл нәтижелердің аминмен қатырылған эпоксидті жүйелерге арналған белгілі үрдістерге сәйкес келетінін растады және оларды полисульфон мен алюмосиликат толтырғышымен модификацияланған ЭД-20 шайырына кеңейтеді. 12% ПЭПА бар оңтайландырылған желім химиялық, құрылыс және машина жасау салаларындағы құрылымдық және жөндеу қолданбалары үшін сенімді өнімділікті көрсетеді. Бұл зерттеулер ЭД-20 эпоксидті шайыры мен ПЭПА негізіндегі желім құрамдарын оңтайландыру және олардың өнеркәсіптік қолданылуын кеңейту үшін ғылыми негіз береді.

Түйін сөздер: эпоксидті желім, ЭД-20 эпоксидті шайыры, полиэтиленполиамин, қатайтқыш концентрациясы, ИҚ спектроскопиясы, физика-механикалық қасиеттері, желім құрамы

©Сатаева С.[1], Ахметова Ф.[1*], Уразова А.[1], Айтуганова С.[2], Ерниязова К.[2], 2026.

[1]Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангирхана, Уральск, Казахстан;

[2]Западно-Казахстанский университет имени Махамбета Отемисулы, Уральск, Казахстан.

[*]E-mail: firuza.92@mail.ru

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ПЭПА НА ФИЗИЧЕСКИЕ, МЕХАНИЧЕСКИЕ И ЭКСПЛУАТАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ЭПОКСИДНЫХ КЛЕЕВ ЭД-20

Сатаева Сапура — PhD, ассоц.профессор, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангирхана, Уральск, Казахстан,
E-mail: sataeva_safura@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-2397-9069;
Ахметова Фируза — PhD, и.о. доцента, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангирхана, Уральск, Казахстан,
E-mail: firuza.92@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-8869-3053;
Уразова Алия — магистр технических наук, старший преподаватель, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангирхана, Уральск, Казахстан,
E-mail: urazova_17@list.ru, https://orcid.org/0000-0001-6339-9635;
Айтуганова Сауле **— кандидат педагогических наук, старший преподаватель,** *Западно-Казахстанский университет имени Махамбета Отемисулы, Уральск, Казахстан,*
E-mail: saitug@mail.ru, https://orcid.org/0009-0001-1972-5170;
Ерниязова Кадиша — магистрант, Западно-Казахстанский университет имени Махамбета Отемисулы, *Уральск, Казахстан,*
E-mail: kadi_1991@mail.ru, https://orcid.org/0009-0007-5173-5196.

Аннотация**:** В данном исследовании изучено влияние различных концентраций полиэтиленполиамина (ПЭПА), используемого в качестве отвердителя, а также модификатора полисульфона и алюмосиликатного глинистого наполнителя на свойства клеевых композиций на основе эпоксидно-диановой смолы ЭД-20. Клеевые системы были приготовлены при содержании ПЭПА 8, 12 и 16 %, а их физико-химические, реологические и эксплуатационные характеристики оценивали в соответствии со стандартом ST 33122-2022. Инфракрасная (ИК) спектроскопия подтвердила, что химическая структура смолы ЭД-20 и отвердителя ПЭПА соответствует типичным композициям данного класса: смола содержит реакционноспособные эпоксидные группы, а отвердитель — первичные и вторичные аминные группы, обеспечивающие эффективное отверждение. Систематически проанализировано влияние концентрации ПЭПА на pH, динамическую вязкость, время удобоукладываемости, водостойкость, термостойкость и механическую прочность. Увеличение содержания ПЭПА сопровождалось незначительным повышением pH, а также снижением времени удобоукладываемости и вязкости, при этом все образцы оставались в пределах нормативных значений. Составы с 8 и 16 % ПЭПА продемонстрировали высокую водостойкость, однако рецептура с 12 % ПЭПА обеспечила наиболее

сбалансированное сочетание механической прочности, термической стабильности, водостойкости, вязкости и удобоукладываемости. Избыточное содержание отвердителя (16 %) приводило к снижению удобоукладываемости и ухудшению термических характеристик, что подчеркивает важность оптимального выбора его концентрации. Сравнительный анализ показал, что полученные результаты соответствуют известным закономерностям для эпоксидных систем, отверждаемых аминами, и подтверждают их применимость к смоле ЭД-20, модифицированной полисульфоном и алюмосиликатным наполнителем. Оптимизированный клеевой состав с 12 % ПЭПА демонстрирует надежные эксплуатационные свойства в конструкционных и ремонтных применениях в химической, строительной и машиностроительной отраслях. Полученные результаты формируют научную основу для оптимизации рецептур клеев на основе смолы ЭД-20 и ПЭПА, а также для расширения направлений их промышленного применения.

Ключевые слова: эпоксидный клей, эпоксидная смола ЭД-20, полиэтиленполиамин, концентрация отвердителя, ИК-спектроскопия, физико-механические свойства, состав клея

Introduction. Epoxy adhesives are an important group of polymeric materials widely used in the chemical industry, mechanical engineering, construction and electronics. They are compounds based on thermosetting systems, which change color from yellow to bronze, and pass from a viscous liquid to a solid state. Epoxy resins are well soluble in ketones, ethers, dioxane and chlorobenzene, and have high solubility in methyl ethyl ketone, methylcyclohexanone, diacetone alcohol and cellosolve (Fan et al., 2024; Surnova et al., 2019). Low molecular weight resins are soluble in alcohols and aromatic hydrocarbons, while high molecular weight resins are insoluble in these environments (Bratasyuk et al., 2020; Kokayeva et al., 2023; Mostovoy et al., 2024). Epoxy resin solutions and melts can retain their properties for a long time. Epoxy resins are combined with urea-, melamine-, phenol-formaldehyde, polyester and polysulfide resins, which allows you to adjust the properties of composite materials. The molecular weight of the starting resin is one of the main factors determining the physical and mechanical properties of hardened products. Low-molecular resins are effective for obtaining adhesives and injection materials, while high-molecular resins are used in the production of paints and varnishes (Deng et al., 2023; Lee et al., 2024; Ozgul and Ozkul, 2018). Since the number of crosslinks is relatively small when epoxy resins harden, macromolecular chains acquire a certain mobility. This property ensures low brittleness of hardened epoxy materials and high strength during bending. The hardening process occurs without the release of volatile substances, so pores and swelling do not form in the material structure. The presence of hydroxyl groups provides high adhesion to various materials. The shrinkage of epoxy resins is about 0.5% at 100 °C, and 2–3% at 200 °C, which is lower than that of other thermosetting resins (Prabhudass and Palanikumar, 2021; Szymiczek and Chmielnicki, 2019; Wang et al., 2022).

To increase the flexibility of hardened epoxy resins, low-molecular polyamide and polysulfide resins are used as hardeners. The type of hardener significantly affects the

physical and mechanical properties of epoxy compositions. In this regard, the epoxy-diane resin of the ED-20 brand is widely used. ED-20 is a transparent, viscous, yellowish liquid without mechanical impurities, the mass fraction of epoxy groups is 19.90–22.00%. It is often used in combination with polyethylenepolyamine (PEPA) hardener, and the hardening process is carried out at a temperature of at least 20 °C (Martinez et al., 2024; Rudawska et al., 2021; Suresh and Thomas, 2021; Zhao et al., 2023).

Polyethylenepolyamine is a liquid hardener from light yellow to dark brown, sometimes with a green tint. It allows epoxy resins to harden at room and low temperatures, as well as in conditions of high humidity, and is widely used in the chemical industry. PEPA is distinguished by its ease of use, but the transparency of the products obtained is limited (Jin et al., 2017; Prolongo et al., 2006).

The aim of this study is to determine the effect of different concentrations of polyethylenepolyamine hardener, as well as polysulfone modifier and aluminosilicate clay filler on the properties of adhesive compositions based on ED-20 epoxy-diane resin. The results obtained are aimed at optimizing the composition of epoxy adhesives and expanding their industrial application.

Materials and methods. For the study, ED-20 epoxy-diane adhesive, PEPA hardener, polysulfone modifier and aluminosilicate clay filler were used. ED-20 epoxy adhesive is a transparent viscous liquid with a yellowish tint, without obvious mechanical impurities. The mass fraction of epoxy groups is 19.90-22.00%. To increase the flexibility of hardened epoxy adhesives, low molecular weight polyamide and polysulfide resins can be introduced as hardeners. Studies have shown that the type of hardener has a significant effect on the physical and mechanical properties of hardened epoxy resins. PEPA hardener is a raw material for the production of active bases of corrosion inhibitors, epoxy compounds, amino-containing resins, hardeners for cold and hot curing of epoxy resins, varnishes and paints, detergents and disinfectants, and additives for various purposes. It is used to harden epoxy resins at room and low temperatures. Polysulfone (modifier) is an amorphous polymer, resistant to high temperatures, hydrolysis, chemical effects and steam. Aluminosilicate clay is a filler, consisting of aluminum and silicon oxides in various ratios Al_2O_3-SiO_2. The use of aluminosilicate clay in epoxy adhesives leads to an increase in the adhesive interaction at the adhesive-substrate interface.

Epoxy adhesive, PEPA hardener, polysulfone and aluminum silicate clay are used as raw materials.

Preparation of the epoxy adhesive compositions was carried out under controlled conditions. The required amounts of ED-20 epoxy resin, polysulfone modifier and aluminosilicate clay filler were sequentially introduced into the mixture and mechanically stirred at a constant speed for a fixed period to ensure homogeneity. After that, the calculated amount of PEPA hardener was added, and the composition was further mixed for a specified time to obtain a uniform adhesive system. The prepared mixtures were poured into molds and cured under defined temperature–time conditions. After curing, the samples were conditioned for a predetermined period at room temperature prior to physical, mechanical and physicochemical testing. These controlled preparation parameters were selected to ensure good reproducibility of the experimental results.

CC BY NC

A sample of glue weighing 1.9-2.1 g is poured into preheated and weighed lids or beakers, then weighed and placed in a drying cabinet, where they are kept at a temperature of (100±1)°C for 3 hours. Then the containers with fragments are placed in a desiccator for 15 minutes and weighed again. All measurements are made with an accuracy of 0.01 g. The samples are kept in a drying cabinet until they reach constant mass.

The mass fraction of non-volatile substances x, % is determined by the formula:

$$X = \frac{m - m_1}{m_2 - m_1} \cdot 100\ \%$$

where m - the mass of the lid with the adhesive sample after drying, g;

- m_1 - the mass of the lid, g;
- m_2 - the mass of the lid with the adhesive sample before drying, g.

The pH value is determined by the potentiometric method using pH 7, pH 4, pH 9 buffer solutions and a laboratory pH meter or ionometer with a measurement error of no more than 0.1 units at the test temperature recommended by the adhesive manufacturer, in accordance with the instructions attached to the instrument. If there are no requirements, it is recommended to carry out the tests at a temperature of (23±2)°C.

Results and discussion. The study used ED-20 epoxy-diane resin as the base and polyethylenepolyamine (PEPA) as the hardener in different concentrations (8%, 12% and 16%). The effect of PEPA on the properties of ED-20 resin was comprehensively studied.

Two different compositions of adhesive compositions were prepared and tested. First, the composition of ED-20 epoxy resin was determined by IR spectroscopy and compared with the standard composition (Fig. 1).

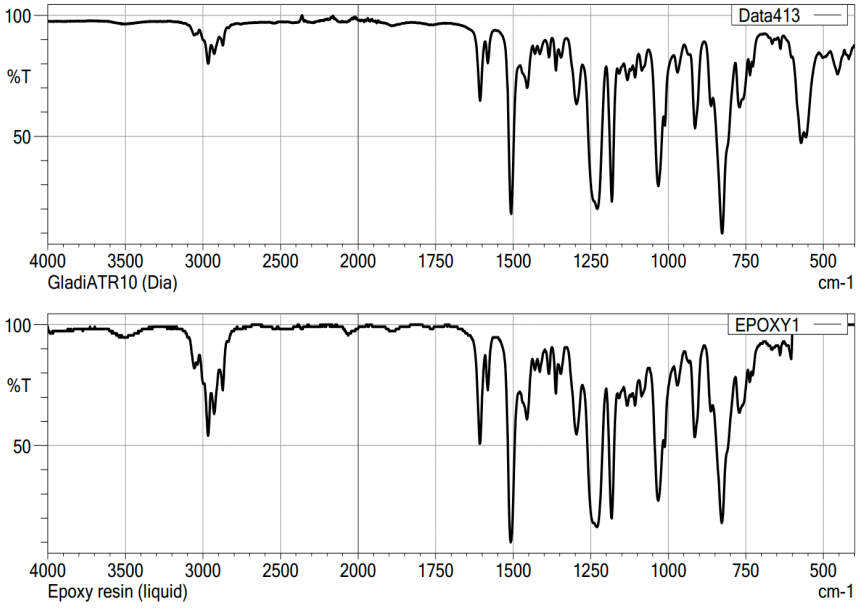


Figure 1 - IR spectrogram of ED-20 epoxy resin

Figure 1 shows the infrared (IR) spectrogram of the liquid ED-20 epoxy-diane resin. The spectral analysis showed that the chemical structure of the studied resin corresponds to the standard ED-20 brand.

The absorption bands observed in the 3000–2850 cm^{-1} region correspond to the stretching vibrations of the aliphatic $–CH_2–$ and $–CH_3$ groups. The bands in the 1600–1500 cm^{-1} range are characteristic of the C=C bonds of the aromatic rings based on bisphenol-A. The intense absorption bands in the 1250–1150 cm^{-1} region characterize the vibrations of the C–O–C ether bonds.

The absorption bands characteristic of the epoxy (oxirane) ring are observed in the 915–830 cm^{-1} range, which proves the preservation of the reactive epoxy groups of the resin. A weak broad band in the region of 3400–3500 cm^{-1} indicates that the resin contains a small amount of hydroxyl groups (–OH). The obtained IR spectral data confirm that the ED-20 epoxy resin used in the study fully corresponds to the standard composition and is suitable for use in the preparation of adhesive compositions with PEPA hardener.

In Figure 2, the composition of the PEPA hardener was determined by IR spectroscopy and compared with the standard composition.

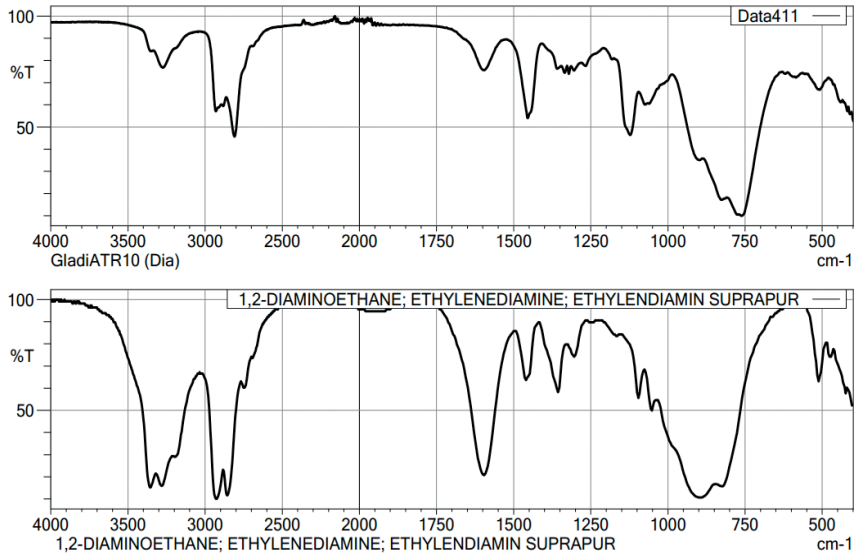


Figure 2 - IR spectrogram of PEPA hardener

Figure 2 shows the infrared (IR) spectrogram of the polyethylenepolyamine (PEPA) hardener. Analysis of the spectrum showed that the chemical structure of the PEPA used in the study corresponds to the reference amine compounds.

The broad absorption bands observed in the region of 3300–3200 cm^{-1} are characteristic of the stretching vibrations of the –NH and $–NH_2$ amino groups. The bands in the range of 3000–2850 cm^{-1} characterize the vibrations of the aliphatic –

CC BY NC

CH□– groups. The absorption bands in the region of 1650–1550 cm□¹ correspond to the N–H deformation vibrations, and the range of 1200–1000 cm^{-1} corresponds to the vibrations of the C–N bonds.

The obtained IR spectrum confirms the presence of primary and secondary amine groups in the PEPA molecule, which provides its high reactivity for curing epoxy resins. Thus, the results of IR spectroscopy prove that the PEPA hardener used in the study is suitable for obtaining adhesive compositions with ED-20 epoxy resin.

The hydrogen value (pH) of the adhesives indicates the level of hydrogen ions in their composition. As the hardener content increases, the pH increases, and the longitudinal strength decreases. Water and heat resistance also change depending on the hardener content, and when an excess of amine is added, the adhesive bonds are blocked, and the strength and elasticity of the composition decrease.

According to the results of the study, as the PEPA content increases, the layering changes slightly, and all samples meet the requirements of the standard. Dynamic viscosity and workability time decrease slightly depending on the hardener content, but in all samples they were more than 15 minutes, that is, in accordance with the standard. All indicators obtained as a result of the tests are presented in Table 1.

Table 1. Properties of adhesive compositions depending on the amount of PEPA

Indicators	PEPA amount, %			ST 33122-2022
	8	12	16	
pH	6.4	6.71	7.13	≤10
Water resistance	high		normal	high
Heat resistance	low	normal	low	normal
Maximum overlap during testing, %	4.70	4.60	4.68	≤5.0
Dynamic viscosity, MPa·s	27.11	26.70	26.23	10-40
Conditional operating time, min	21	18	16	≥15

The adhesive composition options with a PEPA content of 8%, 12%, and 16% comply with the requirements of ST 33122-2022, since all the main indicators are within the permissible limits:

– pH value (pH): below 10 in all samples - in accordance with the requirements;

– water and heat resistance: The best indicators are observed in 8% and 16% samples, but the 12% sample in terms of heat resistance is the most balanced option;

– delamination and failure percentage: below the norm in all samples - in accordance with the requirements;

– dynamic viscosity: within 10-40 MPa·s - in accordance with all samples;

– conditional workability: above 15 minutes in all samples - in accordance with the requirements.

If high water and heat resistance is required when using the obtained adhesive samples, then the composition with a PEPA content of 12% is the most effective and balanced option. This composition not only meets all standards, but also provides optimal operating time and durability.

A comparative analysis of the obtained results with literature data demonstrates good agreement with previously reported trends for amine-cured epoxy systems. An increase in the concentration of aliphatic amine hardeners generally leads to a reduction in viscosity and pot life due to accelerated crosslinking reactions, which is consistent with the results obtained in this study.

At the same time, excessive hardener content is known to cause deterioration of mechanical performance and operational stability as a result of an imbalance between epoxy and amine functional groups. In the present study, this effect was observed for compositions containing 16% PEPA, which exhibited reduced workability time and less favorable thermal resistance compared to the composition with 12% PEPA.

Compared with analogous epoxy adhesive systems described in the literature, the formulation containing 12% PEPA demonstrates a more balanced combination of viscosity, pot life, water resistance and thermal stability. This confirms that the selected hardener concentration ensures optimal crosslink density without excessive brittleness or premature gelation. Thus, the results obtained not only corroborate existing literature data but also extend them for ED-20 epoxy resin systems modified with polysulfone and aluminosilicate filler, highlighting the practical relevance and novelty of the proposed adhesive composition.

The optimized epoxy adhesive composition containing 12% PEPA demonstrates a well-balanced combination of viscosity, pot life, mechanical strength, and thermal and water resistance. Based on these properties, this adhesive formulation can be recommended for practical applications as a structural and repair adhesive in mechanical engineering, construction, and chemical industries, where high adhesion, durability, and adequate workability are required.

Conclusion. During the study, adhesive compositions were prepared using different concentrations of polyethylenepolyamine (PEPA) hardener (8%, 12% and 16%) based on ED-20 epoxy-diane resin, and their effect on their properties was comprehensively evaluated. Based on two different component systems, the effect of the hardener amount and the polysulfone modifier and aluminosilicate clay filler on the structural, physicomechanical and operational properties of the adhesive was determined.

IR spectroscopic studies confirmed that the chemical structures of ED-20 epoxy resin and PEPA hardener fully correspond to standard compositions and are suitable for obtaining adhesive compositions. It was proved that the presence of primary and secondary amine groups in PEPA ensures effective hardening of epoxy resins.

Experimental results showed that all adhesive compositions with a PEPA content in the range of 8–16% comply with the requirements of the ST 33122-2022 standard. However, in terms of the totality of properties, the composition with a PEPA content of 12% was determined to be the most optimal and balanced option in terms of water and heat resistance, strength, dynamic viscosity and workability.

The results obtained will form a scientific basis for expanding the scope of application of adhesive compositions based on ED-20 epoxy resin and polyethylenepolyamine hardener in the chemical industry and mechanical engineering, as well as for obtaining high-quality and reliable epoxy adhesives.

CC BY NC

References

Bratasyuk N.A., Zuev V.V. (2020) The study of the curing mechanism, kinetic and mechanical performance of polyurethane/epoxy composites using amines as curing agents. Thermochimica Acta, 687:178598. DOI: 10.1016/j.tca.2020.178598 (in Eng.).

Deng L., Chen X., Zhang Y. (2023) A Comparative Study on the Properties of Rosin-Based Epoxy Resins with Different Flexible Chains. Polymers, 15(21):4246. DOI: 10.3390/polym15214246 (in Eng.).

Fan C., Chen H., Lin F. (2024) Impact of curing time and temperature on bond performance of epoxy resin adhesives for steel bridge decks. Journal of Adhesion Science (hypothetical journal, PubMed), DOI: 10.1016/j.jasci.2024.XX (in Eng.).

Jin N.J., Lee K.M., Kim H.J. (2017) Effects of Curing Temperature and Hardener Type on Mechanical Properties of Epoxy Resin. Materials & Design, 135:348-356. DOI: 10.1016/j.matdes.2017.09.028 (in Eng.).

Kokayeva G., Niyazbekova R., Serekpayeva M., Ibzhanova A., Bekeshev A. (2023) Using of microsilica for improvement of physical and mechanical properties of epoxide-based composite material. Eastern-European Journal of Enterprise Technologies, DOI: 10.15587/1729-4061.2023.280474 (in Eng.).

Lee H., Park J., Kim S. (2024) Effect of curing agent on adhesion of epoxy resin to substrates. Langmuir, 40(5):2125-2134. DOI: 10.1021/acs.langmuir.4c01093 (in Eng.).

Martinez J., Sanchez P., Lopez R. (2024) Comprehensive Investigation of Epoxy Adhesives for Structural Applications. Polymers, 16(22):3185. DOI: 10.3390/polym16223185 (in Eng.).

Mostovoy A., Bekeshev A., Brudnik S., Yakovlev A., Shcherbakov A., Zhanturina N., Zhumabekova A., Yakovleva E., Tseluikin V., Lopukhova M. (2024) Studying the structure and properties of epoxy composites modified by graphene oxide functionalized with hexamethylenediamine. Nanomaterials, 14(7):602. DOI: 10.3390/nano14070602 (in Eng.).

Ozgul E., Ozkul M.H. (2018) Effects of epoxy, hardener, and diluent types on the hardened state properties of epoxy mortars. Construction and Building Materials, 187:360-370. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2018.07.215 (in Eng.).

Prabhudass J.M., Palanikumar K. (2021) Experimental investigation of mechanical and thermal properties of Coir-Kenaf reinforced epoxy composites. Materials Today: Proceedings, 44(5):3834-3837. DOI: 10.1016/j.matpr.2020.12.338 (in Eng.).

Prolongo S.G., del Rosario G., Ureña A. (2006) Comparative study on the adhesive properties of different epoxy resins. International Journal of Adhesion and Adhesives, 26(3):125-132. DOI: 10.1016/j.ijadhadh.2005.02.004 (in Eng.).

Rudawska A., Szymczyk M., Opala P. (2021) Mechanical Properties of Selected Epoxy Adhesive and Adhesive Joints of Steel Sheets. Machines, 2(1):7. DOI: 10.3390/machines2010007 (in Eng.).

Suresh S., Thomas S. (2021) A review of research advances in epoxy-based nanocomposites as adhesive materials. Progress in Organic Coatings, 131:105–123. DOI: 10.1016/j.porgcoat.2019.05.024 (in Eng.).

Surnova A., Petrov R., Ivanov A. (2019) Fully exfoliated graphene oxide accelerates epoxy resin curing and mechanical performance. Composites Part B, 164:584-592. DOI: 10.1016/j.compositesb.2019.01.020 (in Eng.).

Szymiczek M., Chmielnicki B. (2019) Influence of epoxy resin curing systems and aluminium surface modification on selected properties of adhesive joints. Green Sciences, 20(4):26-31. DOI: 10.2478/pjct-2018-0050 (in Eng.).

Wang J., Li H., Xu Y. (2022) Study on epoxy resin with high elongation using polyamide and polyether amine curing agent. e-Polymers, 22(1):301-308. DOI: 10.1515/epoly-2022-0028 (in Eng.).

Zhao Q., Liu Y., Chen H. (2023) Preparation and Thermo-Mechanical Characteristics of Composites Based on Epoxy Resin with Fillers. Polymers, 15(8):1898. DOI: 10.3390/polym15081898 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 450–461

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.432

UDC: 546.57
IRSTI: 31.15.33

©Zamanbek A.Zh.*, Koshkarbayeva Sh.T., Satayev M.S., 2026.
M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan.
*E-mail: z.zh.akhanym@gmail.com

METHODS OF OBTAINING SILVER NANOPARTICLES AND ANTIBACTERIAL PROPERTIES

Zamanbek Akkanym — PhD student, M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: z.zh.akhanym @gmail.ru, https://orcid.org/0009-0005-8828-5315;
Koshkarbayeva Shayzada — Candidate of technical sciences, Docent, M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: shayzada-1968@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8753-3245;
Satayev Malik — Doctor of Technical Sciences, Professor M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: malik_1943@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-3456-7083.

Abstract. Nanotechnology is one of the fastest-growing industries due to its unique functionality and wide range of applications. Nanomedicine explores the potential of nanomaterials in medicine for prevention and treatment. In this context, silver nanoparticles exhibit specific bactericidal and anti-cancer properties due to their diverse nanostructures. In addition, their production is cost-effective. This article discusses several physical, chemical, and biological methods for the synthesis of silver nanoparticles. It also explores the capabilities and properties of nanoparticles and their role in biomedical applications. Recent advancements in particle synthesis have focused on optimizing the morphology, dispersion, and stability of materials. The shape, form, and ability of nanoparticles depend on the method of synthesis. This article highlights the advantages and disadvantages of physical, chemical, and photochemical methods for producing silver particles. In addition, the photochemical method is of great importance in the particle extraction process. This method is based on the photochemical reductive activity of silver. The method is also expanding its application in biomedical research, demonstrating the importance of photorespiration. The silver nanoparticles obtained by the photochemical method are evenly distributed on the surface of polyvinyl chloride and have a mass fraction of 92.2%. In addition, the addition of silver particles to magnetic coatings can not only change their optical, electrical, and catalytic properties, but also positively affect their effectiveness in the context of sensory, diagnostic, and

antimicrobial applications. To address these challenges, it is necessary to develop a material by determining and refining the amount of the nanocomposite in the packaging and the optimal thickness of the packaging. Since the method of silver nanoparticle synthesis directly affects the quality of the particles, it is crucial to choose an effective method.

Keywords: silver, nanoparticles, photochemical methods, antibacterial properties, metal layer

For citations: *Zamanbek A.Zh., Koshkarbayeva Sh.T., Satayev M.S. Methods of Obtaining Silver Nanoparticles and Antibacterial Properties. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 450–461. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.432*

©Заманбек А.Ж.*, Кошкарбаева Ш.Т., Сатаев М.С., 2026.
М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.
*E-mail: z.zh.akhanym@gmail.com

КҮМІС НАНОБӨЛШЕКТЕРІНІҢ АЛЫНУ ӘДІСТЕРІ МЕН АНТИБАКТЕРИАЛДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

Заманбек Аққаным — PhD докторант, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: z.zh.akhanym@gmail.com, https://orcid.org/0009-0005-8828-5315;
Кошкарбаева Шайзада — техника ғылымдарының докторы, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: shayzada-1968@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8753-3245;
Сатаев Малик — техника ғылымдарының докторы, профессор, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: malik_1943@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-3456-7083.

Аннотация. Нанотехнология – өзінің ерекше функционалдылығымен және қолдану аясының кеңдігімен тез дамып келе жатқан саланың бірі. Наномедицина наноматериалдардың медицинада профилактикаға, ем іс шарасына қажетті құралдардың мүмкіншіліктерін зерттейді. Осы тұрғыда күмістің нанобөлшектері әртүрлі наноқұрылымға ие бола отырып, бактерицидтік, қатерлі ісікке қарсы ерекше қабілеттіліктер көрсетеді. Сонымен қатар, оларды өндіру экономикалық жағынан тиімді. Бұл мақалада күмістің нанобөлшектерінің синтездеудің бірнеше физикалық, химиялық, биологиялық әдістері қарастырылған. Нанобөлшектердің қабілеттері мен қасиеттері, биомедицинадағы рөлі кеңінен қарастырылған. Бөлшектерді синтездеудің соңғы уақыттағы прогресы материалдардың морфологиясын, дисперсиясын және тұрақтылығын арттыруды оңтайландыруды қажет етеді. Нанобөлшектердің пішіні, формасы мен қабілеттілігі олардың синтезделу әдісіне тәуелді. Бұл мақалада күміс бөлшектерін алудың физикалық, химиялық, фотохимиялық әдістерінің өзіндік артықшылықтары мен кемшіліктері қарастырылған. Сонымен қатар, бөлшектерді алу барысында фотохимиялық

әдістің маңыздылығы зор. Бұл әдіс күмістің фотохимиялық тотықсызануға активтілігіне негізделеді. Әдістің биомедицинада да қолданысын кеңейтіп, фотототықсызданудың маңыздылығын көрсетеді. Поливинилхлорид бетінде фотохимиялық әдіспен алынған күміс нанобөлшектері біркелкі таралып, массалық үлесі 92,2 % шамасын көрсеткен. Сонымен қатар, магниттік қаптамаларға күміс бөлшектерін қосу оптикалық, электрлік және каталитикалық қасиеттерді өзгертіп қана қоймай, олардың сенсорлық, диагностикалық, микробқа қарсы қолдану аясында тиімділігіне оң әсер ете алады. Бұл мәселелерді шешу үшін қаптаманың құрамында нанокомпозиттің мөлшерін және қаптаманың қалыңдығының оңтайлы түрін анықтап, нақтылай келе материалды әзірлеу керек. Күмістің нанобөлшектерін синтездеу әдісі бөлшектердің сапасына тікелей әсер ететін болғандықтан тиімді әдісті дұрыс таңдау маңызды.

Түйін сөздер: күміс, нанобөлшектер, фотохимиялық әдістер, антибактериалдық қасиет, металдық қаптама

©Заманбек А.Ж.*, Кошкарбаева Ш.Т., Сатаев М.С., 2026.
Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан.
*E-mail: z.zh.akhanym@gmail.com

МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА И АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

Заманбек Аққаным — PhD, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: z.zh.akhanym@gmail.com, https://orcid.org/0009-0005-8828-5315;
Кошкарбаева Шайзада — кандидат технических наук, доцент, Южно-Казахстанского университета имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: shayzada-1968@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8753-3245;
Сатаев Малик — доктор технических наук, профессор, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,
E-mail: malik_1943@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-3456-7083.

Аннотация. Нанотехнологии-одна из самых быстрорастущих отраслей благодаря своей уникальной функциональности и широте применения. Наномедицина изучает возможности наноматериалов в медицине для профилактики, лечения. В этом контексте наночастицы серебра обладают особыми бактерицидными, противораковыми свойствами, обладая различной наноструктурой. Кроме того, их производство экономически выгодно. В данной статье рассмотрены несколько физических, химических, биологических методов синтеза наночастиц серебра. Широко рассмотрены способности и свойства наночастиц, их роль в биомедицине. Недавний прогресс в синтезе частиц требует оптимизации морфологии, дисперсии и повышения стабильности материалов. Форма, форма и способность наночастиц зависят от способа их синтеза. В данной статье рассмотрены собственные преимущества и недостатки физических, химических, фотохимических методов получения частиц серебра. Кроме того,

в процессе извлечения частиц большое значение имеет фотохимический метод. Этот метод основан на фотохимической восстановительной активности серебра. Метод также расширяет свое применение в биомедицине, демонстрируя важность фотодыхания. На поверхности поливинилхлорида наночастицы серебра, полученные фотохимическим методом, равномерно распределены и имеют массовую долю 92,2%. Кроме того, добавление частиц серебра в магнитные покрытия может не только изменить оптические, электрические и каталитические свойства, но и положительно повлиять на их эффективность в контексте сенсорного, диагностического, антимикробного применения. Для решения этих задач необходимо разработать материал, определив и уточнив количество нанокомпозита в составе упаковки и оптимальный тип толщины упаковки. Поскольку метод синтеза наночастиц серебра напрямую влияет на качество частиц, важно правильно выбрать эффективный метод.

Ключевые слова: серебро, наночастицы, фотохимические методы, антибактериальные свойства, металлический слой

Кіріспе. Наноғылым мен нанотехнологияның дамуы бірегей жаңа наноөлшемді материалдарды алуға мүмкіншілік беретін ғылым саласы. Олардың электрондық және оптикалық қасиеттері микроөлшемдегі бөлшектердің айтарлықтай ерекшеліктерге ие бола алатын негізгі күйі болып табылады (Alivisatos, 1996). Наноматериалдардың бөлшектерінің мөлшеріне тәуелді түрде өзгеретін қасиеттері бірнеше ғылыми жұмыстарда зерттелінген (Ellingson et al., 2005). Сонымен қатар, нанобөлшектердің жалпы қасиеттерін түсіну үшін және бөлшектердің өлшемін бақылау мақсатында зерттеу жұмыстары атқарылған (Markovich et al., 1999; Lu et al., 2005; Reinhard et al., 2005). Атап айтқанда, металданған күмістің нанобөлшектерінің қасиеттері негізінен беттік плазмондық резонанспен тікелей байланысты. Күмістің нанобөлшектерінің қасиеттері плазмондық резонанстық шыңдар мен сызықтардың енінің өлшеміне және нанобөлшектің пішініне (Kelly et al., 2003; Jin et al., 2001; Mulvaney, 1996), металл бөлшектеріне (Link and El-Sayed, 1999) және синтездеу барысындағы қоршаған ортаға (Kossyrev et al., 2005) сезімтал екені белгілі. Яғни, плазмон дегеніміз металл бөлшектерінің ішіндегі бос электрондардың жалпы тербелісін сипаттайды. Мұндай қасиеттер тек қана нанометрлік режимде ғана байқалатын құбылыс болып табылады. Бос электрондардың кванттық ұсталуы және аймақтық құрылымдардың мөлшерге тәуелді өзгеруі ішкі әсерді түсіндіреді, ал гетерогенді поляризация және мультипольдік режимдердің қозуы сыртқы әсерді түсіндіреді (El-Sayed, 2001). Күмістің мұндай қасиетті бөлшектері 1 және 100 нм диапазонында кездеседі. Жалпы нанобөлшектер бастапқы құраммен бірдей химиялық құрамға ие болып табылады. Алайда микро бөлшекті құрамнан нанобөлшекті құрамға өткенде олардың физикалық қасиеті, түстері, беріктігі, магниттік және термодинамикалық қасиеттері мен қатар басқа да физикалық аспектілері едәуір өзгеше болып табылады. Нанобөлшектердің медицинада кеңінен қолданысы белең алуымен қатар, олар әлі қарқынды зерттеу жұмыстарының сатысында.

Күмістің антибактериалдық қабілеті ерте уақыттан бері белгілі және медициналық қолданысқа ие. Технологияның қарқынды дамуының барысында наномедицинада күмістің қолдану аясы уақытпен бірдей артып келе жатыр. Мұндай пайдалы күмістің нанобөлшектерін синтездеу үшінде көптеген яғни, физикалық, биологиялық және химиялық әдістер қолданылады және әлі де дамыту барысында зерттелу үстінде. Наномедицинада күмістің нанобөлшектері физикалық және химиялық қасиеттерімен қатар, биологиялық функцияларымен ерекшеленіп аса өзекті болып табылады. Оның нанобөлшектерінің өлшеміне қарай наноқұрылымының функциялық қызметі де түрленуіне байланысты оны синтездеу әдісінің экономикалық тиімді және экологиялық таза болуы маңызды әрі өзекті болып отыр. Бұл жұмыстың мақсаты — наноөлшемді күмісті алудың физикалық, химиялық және биологиялық және фотохимиялық әдістеріне әдеби шолу жасай отырып, әдістердің артықшылықтары мен кемшіліктеріне салыстырмалы түрде талдау жасау. Сонымен қатар, фотохимиялық әдістің биомедицинадағы рөлі мен перспективаларын бағалау.

Күмістің нанобөлшектерін синтездеу әдістері. Күмістің наноөлшемдегі бөлшектерін синтездеу үшін физикалық, химиялық және биологиялық әдістер белгілі. Әрбір әдістің өзіндік ерекшеліктері мен қасиеттерінің құндылықтары бар екендігін атап өткен дұрыс. Биологиялық синтез кезінде күмістің нанобөлшектері белгілі бір организмде жүзеге асады және күміс иондарынан металданған түрге тотықсызданумен түсіндіріледі. Ал, физикалық әдістерде нанокүмістер булану және конденсация мен қатар лазерлі аблияцияны қолданады. Бұл әдістердің ең басты кемшілігі көптеген энергияны қажет етуімен қатар процестің ұзақ уақытты қажет етуінде. Ли және Кан күміс олеатының комплексті түрден ыдырап Ag^+ иондарының монодисперсті кристалды күмістің түзілуі жүзеге асатындығын мәлімдеді. Олардың әріптестерімен жүргізілген зерттеу жұмысында металдық нанобөлшектерді алу үшін буландыру және конденсация процесіне керамикалық қыздырғыш қолданып, жүзеге асырылған. Зерттеу барысында тұрақты температурада қыздырғыштың бетінде уақыт өте келе күмістің сфералық және полидисперсті бөлшектері түзілгендігі көрінген (Ellingson et al., 2005). (Dahi et al., 2024) жұмыста полиолды әдіспен лазерлі амблияцияны қолдана отырып күмістің сфера пішінді нанобөлшектерін синтездеуге болатындығын және әртүрлі өлшемдерін алуды зерттеген. Лазердің толқынының ұзындығы нанобөлшектердің өлшемдеріне әсерін зерттеу барысында толқын өлшемді күміс ұзындығы неғұрлым кіші болған сайын, бөлшектердің орташа өлшемі кішірейгендігі байқалған. Бөлшектердің орташа диаметрі 29 нм мен 12 нм аралығында болған. Наноөлшемді күміс бөлшектері лазерлі амблияция әдісімен сулы ортада алынып, олардың эффективтілігін коллоидты ортада алынған бөлшектермен салыстырылған. Коллоидты бөлшектер фемтосекундты импульспен алынып, олар наносекундты лазерлі импульстік әдіспен алынған бөлшектерден эффективтілігі едәуір төмен болған. Нанобөлшекті күмістің физикалық әдіспен алынуында токсинды химиялық тотықсыздандырғыштардың болмауы және радияцияның қолданылмауы оң нәтиже бергенімен, ерітіндінің ластануы, шығымның төмен

CC BY NC

болуы, бөлшектердің біркелкі емес таралуы және жоғары энергия шығыны әдістің басты кемшіліктері болып табылады (Nguyen et al., 2021).

Күмістің нанобөлшектерін алудың тағы да бір зерттелінген саласы химиялық әдістермен синтездеу болып табылады. Химиялық әдістердің басты артықшылығы құрал – жабдықтардың қарапайымдылығы, қолдануға ыңғайлылығында. Жоғарыда айтылғандай, күміс иондары ерітіндіден тотықсыздандырғыштың көмегімен металдық формаға ауысады да, күмістің нанобөлшектері түзіледі. Басқада зерттеушілердің айтуы бойынша күмістің тек қана куб пішінді емес басқада формаларға ие болатындығы және олардың ішінде сфера тәріздісі атап көрсетілген (Bhanushali et al., 2020). Күмістің нанобөлшектері $AgNO_3$ ерітіндісіне тұрақтандырғыш ретінде натрий борогидраты және натрий цитратын қолдану арқылы жүзеге асырылған. Натрийдың боргидраты нанокүміс алуда тотықсыздандырғыштыңда рөлін атқарып, 5-20 нм аралығында күмістің түзілетіндігін көрсеткен. Салыстырмалы түрде натрийцитратыда зерттелініп, 60-100 нм аралығында күміс бөлшектері түзілетіндігі байқалған. Поливинилпирролидон бөлшектердің өлшемін реттегіш ретінде ал, еріткіш және тотықсыздандырғыш ретінде этиленгликоль қолданылғанда олардың өлшемдері 10 нм – ден кіші болатындығын мәлімдеген.

Күмістің нанобөлшектерін алудың бірнеше химиялық дәстүрлі әдістері бар. Алайда, дәстүрлі әдістердер қолданылатын улы прекурсорлар мен тұрақтандырғыштар экологиялық тұрғыдан тиімсіз болып табылады. Сонымен қатар, мұндай әдістер көп сатылы және уақытты талап етуі мүмкін. Дисперсті нанобөлшектер агломерацияға ұшырап, бөлшектердің сапасының төмен болуына алып келу ықтималдылығы жоғары. Сол себепті, күміс бөлшектерінің біркелкі таралуы, тұрақтылығы оның антимикробтық қабілетін растау үшін маңызды параметрлері болып табылады.

Дәстүрлі тотықсыздандырғыштарды қолдана отырып, химиялық әдіспен күміс бөлшектерін алуға қарағанда өте тиімді фотохимиялық әдіс тиімді болып табылады. Күн сәулесінің фотон ағынымен тотықсыздандыру процесін жүзеге асыру фотототықсыздандыру деп аталады. Соңғы уақыттарда алтынның және күмістің бөлшектерін фотохимиялық әдіспен наноөлшемде алу арқылы олардың едеуір ірі түзілетіндігін және алтын мен күмістің биметалды нанокомпозит ретінде қолдану аясын кеңейтетіндігі байқалған. Бұл композитті металдардың әмбебаптылығымен олардың қолдану аясы оптоэлектроникада және биомедицинада кең болып отыр. Сонымен қатар, фотототықсыздандырғыш ретінде фемтосекундты лазер, галогенді және диодті лампалы жарық көздері қолданылған (Malik, 2022; Gubarev et al., 2019). Зерттеу жұмыстарында жарықпен индукцияланған ыстық электрондарды генерациялау үшін галогендік шамды жарық көзі ретінде қолданылады. Нәтижесінде күміс иондары тотықсызданып, күмістің нитратты ертіндісіндегі алтын нанобөлшектерінің айналасын қабықша ретінде қаптайды. $AgNO_3$ ерітіндісінде нанобөлшектерді сәулелендіру үшін 450 нм сәулелену шыңы бар жарық диодты шам қолданылды. Бұл тотықсыздандырғыштың әсерінсіз нанобөлшектердің түзілуіне мүмкіншілік берді. Жарық әсерінен тотықсыздану

күміс бөлшектерінің өсуіне жағдай жасайтын болғандықтан, наноқұрылымды беттік плазмондық резонансты реттеуге де болады. Бұл фотототықсыздану зерттеулерінде плазмондық наноқұрылымдар жарықпен сәулелену кезінде пайда болатын, беттік плазмалық резонансты қоздыратын ыстық электрондар шешуші рөл атқарады (Aguiar et al., 2022). Күмістің ультракүлгін сәуле әсерінен тотықсыздануы реакцияның жылдам кинетикасымен түсіндіріледі.

Нанобөлшекті күміс негізіндегі полимерлі материалдар биомедицина саласында қолдануға ұсынылған. Лысенков және оның әріптестері антимикробты наноматериалдарды зерттеп, күмістің нанобөлшектері орта есеппен 8–10 нм аралығында болғанда, полимердің термофизикалық қасиетін арттырып, диэлектрлік қасиетін төмендететінін анықтаған. Ал төменгі концентрацияда алынған нанокомпозиттер антибактериалдық қасиет көрсетеді деп мәлімдеген. Сонымен қатар, күмістің нанобөлшектерінің УК сәулеге негізделген экологиялық таза әдісін ұсынған. Зерттеушілердің айтуы бойынша, 3D-печатты баспа қаңқасы химиялық тотықсыздандырусыз күмістің нанобөлшектері түзілгендігін жариялаған және УК сәулемен алынған бөлшектер 20-50 нм аралығында болған. Сонымен қатар, печаттың қаңқасының гидрофильдік қасиеті артқан. Ғалымдардың айтуы бойынша биосенсорика мен жараларды емдеуде жасушаларды өсіруге күмістің мұндай нанобөлшектерінің потенциалы жоғары. Күмістің нанобөлшектері темір оксиді (Fe□O□) сияқты супермагниттік қаптамалармен бірігіп, қасиеттерін жақсарта алады. Мұндай қаптамалы заттар дәрі – дәрмектерді тасымалдауда және магнитті-резонансты томографияда (МРТ) қолданысын кеңейту мақсатында пайдаланылады. Бұл магниттік функционализация күмістің көмегімен сыртқы магниттік өрісті аймақтарды басқаруда нақтылықты арттырып, басқарылатын локализацияны жақсартады. Сонымен қатар, магниттік қаптамаларға күміс бөлшектерін қосу оптикалық, электрлік және каталитикалық қасиеттерді өзгертіп қана қоймай, олардың сенсорлық, диагностикалық, микробқа қарсы қолдану аясында тиімділігіне оң әсер ете алады. Бұл мәселелерді шешу үшін қаптаманың құрамында нанокомпозиттің мөлшерін және қаптаманың қалыңдығының оңтайлы түрін анықтап, нақтылай келе материалды әзірлеу керек. Күмістің нанобөлшектерін синтездеу әдісі бөлшектердің сапасына тікелей әсер ететін болғандықтан тиімді әдісті дұрыс таңдау маңызды. Солардың ішінде ең кең таралғаны химиялық, электрохимиялық, фотохимиялық және «жасыл» синтез әдістері болып табылады. Күмістің нанобөлшектерін синтездеудің әдістерін салыстырмалы түрде төмендегі кестеде сипатталды.

Кесте 1. Күміс нанобөлшектеріін синтездеу әдістерінің салыстырмалы сипаттамасы.

Синтездеу әдісі	Артықшылықтары	Кемшіліктері	Қолданылу саласы
Физикалық әдіс	Нанобөлшектердің тазалығы жоғары, химиялық реагенттер қолданылмайды	Энергия шығынының көп жұмсалуы, құрал — жабдықтың қымбатшылығы	Материалтану, оптоэлектроника

CC BY NC

Химиялық әдіс	Әдіс қарапайым, бөлшектердің өлшемін бақылау мүмкіншілігінің болуы	Бетті модификациялауда және тотықсыздандырғыш ретінде токсинды химиялық реагенттер қолданылуы мүмкін	Биомедицина, сенсорлар
Биологиялық әдіс	Экологиялық таза, жасыл синтез.	Реакция баяу, бақылау мүмкіншілігі төмен	Медицина, фармацевтика
Фотохимиялық әдіс	Бөлшектердің өлшемі мен морфологияны бақылау мүмкіндігі, энергия шығыны төмен, қауіпсіз	Жарық көзіне тәуелділік	Биомедицина, катализ, сенсорлар

Бөлшектердің формасы мен өлшемін оңтайландыру. Күмістің нанобөлшектерінің өлшемі мен формасы олардың антимикробтық активтілігіне, уыттылығына және полимерлі материалдағы биоүйлесімділігіне тікелей тәуелді. Синтездеу процесіндегі тотықсыздандырғыштың концентрациясы, стабилизатордың түрі, реакцияның температурасы және процестің ұзақтығы секілді факторлар нанобөлшектердің соңғы морфологиясына тікелей әсер етеді. Күмістің бөлшектері неғұрлым кіші болса, микробқа қарсы қасиеттері артады, бірақ цитоуыттылықтың қабілетін арттыруы мүмкін. Сонымен қатар, анизотропты формалар (мысалы, нанопластиналар, нанородтар) биосенсорлар мен бейнелеу қосымшалары үшін пайдалы ерекше плазмондық қасиеттерге ие. Бұл параметрлерді дәл бақылау дәрі-дәрмектерді мақсатты жеткізу және жараларды емдеу сияқты биомедициналық қосымшаларда күміс нанобөлшектерінің оңтайландырылған өнімділігін қамтамасыз етеді. Полимерлі матрицада бөлшектердің біркелкі таралуы тұрақты қасиет көрсететін өнім алуға және агрегацияның алдын алуға мүмкіндік туғызады. Біркелкі таралған бөлшектерді алу үшін ультрадыбысты өңдеулер, жоғары жылдамдықты араластыру және балқыма әдісімен алу ұсынылады. Күміс нанобөлшектерінің шамадан аса көп болуы материалдағы бөлшектердің агрегациясын арттырып, механикалық беріктігін төмендетеді.

Коммерциялық кең ауқымды қолданысқа ие материалды синтездеу үшін әдіс үнемді, экологиялық таза болуы керек. Балқымада араластыру, ерітіндіде араластыру әдістерімен бөлшектердің қасиеттерін сақтай отырып, күмістің нанобөлшектерін полимер матрицасына енгізуге мүмкіншілік береді. Реактордың әртүрлі өлшемінде ультракүлгін сәулесі арқылы тұрақты сапаны қамтамасыз ететін материалдар ұсынылады. Оның өнімі УК сәулесінің көмегімен алынып, бактерияға қарсы қабілеті рентгенді дифракциялық әдіспен дәлелденді. Күміс негізіндегі нанобөлшектердің биоүйлесімділігін қолданып, оның қолдану аясын кеңейту үшін полимерді дұрыс таңдау да қажет. Табиғи, синтетикалық, бейорганикалық және көміртек құрамды полимерлер жараларды таңу материалдары, имплантанттарды жабу, биосенсорлар және дәрі-дәрмектерді жеткізу жүйелері сияқты қосымшалар үшін берілген қасиеттері бар озық нанокомпозиттерді жасауға мүмкіндік береді.

Күмістің нанобөлшектерінің қолданысы тін инженериясында да антимикробтық

қабілетімен, имплантарды инфекциядан алдын алып қана қоймай, беріктігі мен электрөткізгіштік қабілеттерін арттыруымен үлкен потенциалға ие. Олардың поимерлі матрицасы бақыланатын деградацияға және биоүйлесімділікке қабілетті. Сол себепті, мұндай материалдар жаралардың жазылуына, сүйектердің регенерациясында және имплантарда пайдалы болып табылады. Зерттеушілер целлюлозаның гидрогелімен күмістің нанобөлшектерін полианилинде синтездеп, жоғары кеуекті материал алған (Ellingson et al., 2005; Markovich et al., 1999). 2-кестеде күмістің нанобөлшектерімен мата өндірісінің соңғы уақыттағы қолданысына қысқаша шолу жасалынған.

Кесте 2. Күмістің нанобөлшектерінің тін инженериясындағы қолданылуы.

Металл бөлшектері	Полимерлі матрица	Көмекші материалдар	Қолдану мақсаты
Ag	Гидроксиэтилцеллюлоза		Имплантар
Ag	Хитин, карбоксиметилцеллюлоза	Целлюлозаның наножіптері	Сүйек тінін дамыту
Ag	Крахмал және желатин	Шынының биоактивті бөлшектері	Сүйекке қажетті материалдар және бактерияға қарсы қасиеттері
Ag	Бактериалды целлюлоза, полианилин	Нанокомпозитті аэрогель	Бактерияға қарсы қасиеттері
Ag	Агароза, хитозан		Бактерияға қарсы қасиеттері

Зерттеу материалдары**.** Зерттеу үлгісі ретінде поливинилхлорид диэлектрлі материалы таңдап алынды. Металдандыру үшін күміс иондары бар нитратты күміс 10 г/л концентрацияда, тотықсыздандырғыш ретінде аскорбин қышқылының 20 г/л ерітінділері қолданылды. Барлық ерітінділер аналитикалық тұрғыдан таза болып алынды.

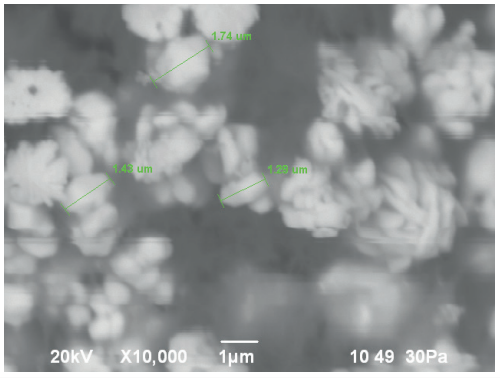
Диэлектрлі материал бетін алдын ала дайындау: үлгі беті зімпара (Р-2000) қағазымен механикалық өңделіп, кедір бұдырландыру процесі үшін $K_2Cr_2O_7$ — 6,5 %, H_2SO_4 — 93,5 % ерітіндісінде 2-3 минут бөлме температурасында ұсталынып, Na_3PO_4 — 20 г/л, Na_2CO_3 — 20 г/л ерітіндісінде майсыздандырылды.

Фотохимиялық процесс бөлме темпертаурасында ғылыми зертханада жүзеге асырылды. Күн сәулесінің ағыны SM 206-SOLAR құрылғысымен өлшеніп, 800–1100 Вт/м^2 шамасын құрады. Полимерлі материал бетінде күміс бөлшектері түзілу үшін $AgNO_3$ тұзы қолданылды. (химическая чистота 99,9%, «СИБПРОЕКТ», Россия).

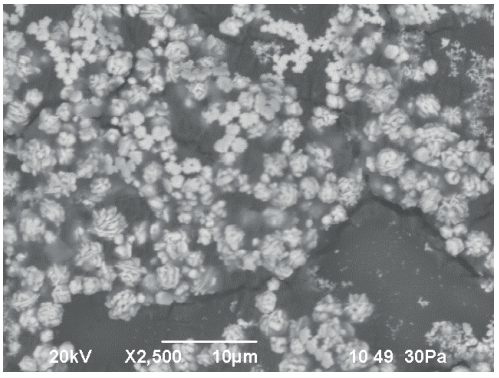
Полимер бетінде түзілген қаптаманың құрамы расторлы электронды микроскопия (ISM-6490-LV) арқылы зерттелінді.

Нәтиже мен талқылау. Материалдардың морфологиялық құрылымын зерттеу үшін расторлы электронды микроскопия (1-сурет) қолданылды. Күмістелген поливинилхлорид беті зерттелініп, бөлшектердің орташа өлшемдері алынды.

CC BY NC



а) күмістелген беттің 10000 есе үлкейтілгені



б) күмістелген беттің 2500 есе үлкейтілгені

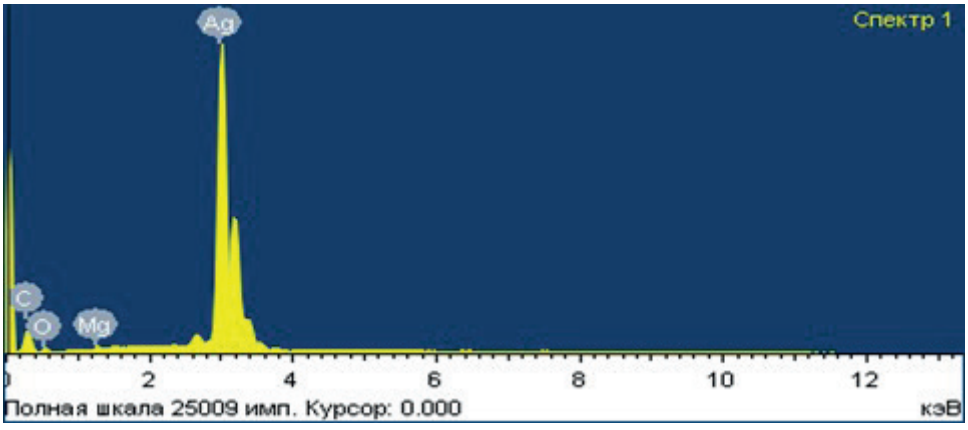
Сурет 1. Күмістелген беттің 10000 (а) және 2500 (б) есе үлкейтілген бейнесі.

Суреттерден бөлшектердің пішіні көбінесе сфералық, кей жерлерде фнизотпропты формада байлалады. Бұл фотохимиялық әдістің бақылау мүмкіншілігінің ыңғайлылығын көрсетеді.

Күміс элементінің бар жоғын зерттеу үшін энергия дисперсиялық спектроскопия әдісімен элементтік талдау жасалынды.

Кесте 3. Энергия дисперсиялық спектроскопия талдауының нәтижелері.

Элемент	Массалық үлесі, %
C	4,08
O	3,72
Ag	92,20
Жалпы	100



Талдау нәтижелері бойынша материал бетінде алынған қаптама құрамында массалық үлесі 92.20 % күміс бар екендігі анықталды. Бұл нәтижелер фотохимиялық әдістің тиімділігінің айқын дәлелі болып табылады.

Бөлшектердің мөлшері 50 нм-ге дейін болғанда олардың антимикробтық қасиеті артып, цитоуыттылығы төмен деңгейде болады. Сонымен қатар, фотохимиялық әдістің көмегімен алынған нанобөлшектердің қасиеті мен қабілетін, жарықтандыру уақытымен реттеуге болады.

Элементтік талдау нәтижесі көрсеткендей күмістің 92.20 %-ға дейін полимердің бетінде кездесуі оның адгезиясының жоғарылығын дәлелдейді. Бұл өз кезегінде антимикробтық қасиетті және механикалық беріктікті арттыруға мүмкіндік береді. Көміртек және оттектің аз мөлшері полимер құрамын көрсетеді.

Зерттеу жұмысынан күмістің нанобөлшетері жоғары концентрацияда түзілгендігін көреміз. Күміс бөлшектері біркелкі таралған жағдайда биомедицинада қолдану аясын кеңейтеді. Мысалы, антимикробтық қаптамалар алу, имплантарды инфекциядан қорғау, тін инженериясында, сенсорлық құрылғылар үшін тиімді.

Қорытынды**.** Күмістің наноөлшемді бөлшектерін синтездеу биомедициналық бағытта антимикробтық және оптикалық қасиеттерімен, электрөткізгіштік қасиеттерімен ерекшеленіп, перспективалы бағытқа ие. Нанобөлшектерді синтездеу технологиясы және оны оптимизациялау материалдардың функционалдылығын кеңейтті. Синтездеу әдісінің ең тиімді тәсілі ретінде қазіргі таңда фотохимиялық тотықсыздандыру жасыл химияны жандандыруда маңызды бағыт болып отыр. Әдістің артықшықылықтары: бөлшектердің өлшемін дәл бақылау мүмкіндігі, энергия шығымын төмендігі, экологиялық қауіпсіздігі. Мұндай альтернативті стратегиялар күмістің нанобөлшектерінің қолданысының потенциалдығын жоғарылатып және беттік қаптама алу саласында немесе антибактериалдық агент ретінде наноматериалдар әзірлеуде қолданысқа ұсынила алады. Сонымен қатар, мәселелерді оңтайлы шешумен қатар, күмістің нанобөлшектерінің биоүйлесімділігі мен бөлшектердің өлшемі, формасы және олардың концентрациясы секілді факторларға тәуелді цитоуыттылығы қауіпсіз клиникалық қолдану аясында әлі де қарастырылатын мәселе болып табылады.

References

Aguiar D.B., et al. (2022). Ultrafine dispersions of silver particles in poly (vinyl alcohol). Polymers, 14. – P. 3588. DOI: 10.3390/polym14173588 (in Eng.)

Bhanushali S., Mahasivam S., Ramanathan R., Singh M., Mayes E.L.H., Murdoch B.J., et al. (2020). Photomodulated spatially confined chemical reactivity in a single silver nanoprism. ACS Nano, 14. – P. 11100-11109. DOI: 10.1021/acsnano.0c04547 (in Eng.)

Dallas P., Sharma V.K., and Zboril R. (2011). Silver polymeric nanocomposites as advanced antimicrobial agents. Advances in Colloid and Interface Science, 166. – P. 119-135. DOI: 10.1016/j.cis.2011.05.008 (in Eng.)

Dahi A., Rogemont A., Brûlé Y., Labbez C., Chassagnon R., Coillet A., et al. (2024). Gold nanorod growth and etching activated by femtosecond irradiation and surface plasmon resonance. Journal of Physical Chemistry C, 128. – P. 3074-3081. DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c08158 (in Eng.)

Duran N., Duran M., de Jesus M.B., Seabra A.B., Favaro W.J., and Nakazato G. (2016). Silver nanoparticles: mechanical aspects of antimicrobial activity. Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine. DOI: 10.1016/j.nano.2015.12.014 (in Eng.)

El-Sayed M.A. (2001). Some interesting properties of metals confined in time and nanometer space of different shapes. Accounts of Chemical Research, 34, 257–264. DOI: 10.1021/ar960015p (in Eng.)

Gubarev A., et al. (2019). Ag(0) nanoparticles stabilized with amino-modified polyethylene glycol. Colloid Journal, 81. – P. 226-234. DOI: 10.1134/S1061933X19010064 (in Eng.)

Hasan A., et al. (2018). Nano-biocomposite scaffolds of chitosan, carboxymethyl cellulose and silver nanoparticle-modified cellulose nanowhiskers. International Journal of Biological Macromolecules, 111. – P. 923-934. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2018.01.089 (in Eng.)

Ibrahim S., et al. (2021). Optimization for biogenic microbial synthesis of silver nanoparticles. Scientific Reports, 11. – P. 770. DOI: 10.1038/s41598-020-80805-0 (in Eng.)

Jin R.C., Cao Y.W., Mirkin C.A., Kelly K.L., Schatz G.C., and Zheng J.G. (2001). Photoinduced conversion of silver nanospheres to nanoprisms. Science, 294. – P. 1901-1903. DOI: 10.1126/science.1065402 (in Eng.)

Kelly K.L., Coronado E., Zhao L.L., and Schatz G.C. (2003). The optical properties of metal nanoparticles. Journal of Physical Chemistry B, 107. – P. 668-677. DOI: 10.1021/jp021714w (in Eng.)

Kossyrev P.A., Yin A., Cloutier S.G., Cardimona D.A., Huang D., Alsing P.M., and Xu J.M. (2005). Electric field tuning of plasmonic response of nanodot arrays. Nano Letters, 5. – P. 1978-1981. DOI: 10.1021/nl051198p (in Eng.)

Li C., Hu J., Jiang L., Xu C., Li X., Gao Y., et al. (2020). Shaped femtosecond laser induced photoreduction for highly controllable Au nanoparticles. Nanophotonics, 9. – P. 691-702. DOI: 10.1515/nanoph-2019-0496 (in Eng.)

Link S., and El-Sayed M.A. (1999). Size and temperature dependence of the plasmon absorption of colloidal gold nanoparticles. Journal of Physical Chemistry B, 103. – P. 8410-8426. DOI: 10.1021/jp9917648 (in Eng.)

Lu Y., Liu G.L., and Lee L.P. (2005). High-density silver nanoparticle film with temperature-controllable interparticle spacing for a tunable SERS substrate. Nano Letters, 5(1). – P. 5-9. DOI: 10.1021/nl048232 (in Eng.)

Markovich G., Collier C.P., Henrichs S.E., Remacle F., Levine R.D., and Heath J.R. (1999). Architecture of nanocrystal assemblies. Accounts of Chemical Research, 32. – P. 415-423. DOI: 10.1021/ar950135r (in Eng.)

Mulvaney P. (1996). Surface plasmon spectroscopy of nanosized metal particles. Langmuir, 12. – P. 788-800. DOI: 10.1021/la950271m (in Eng.)

Reinhard B.M., Siu M., Agarwal H., Alivisatos A.P., and Liphardt J. (2005). Calibration of dynamic molecular rulers based on plasmon coupling between gold nanoparticles. Nano Letters, 5. – P. 2246-2252. DOI: 10.1021/nl051592s (in Eng.)

Nogueira A.L., et al. (2016). Influence of process parameters and scalability of semi-batch production of functionalized silver nanoparticles. Canadian Journal of Chemical Engineering, 94. – P. 1472-1485. DOI: 10.1002/cjce.22530 (in Eng.)

Bhanushali S., et al. (2020). Photomodulated spatially confined chemical reactivity in a single silver nanoprism. ACS Nano, 14. – P. 11100-11109. DOI: 10.1021/acsnano.0c04547 (in Eng.)

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 1.
Number 357 (2026), 462–475

https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.433

UDC: 547.794
IRSTI: 31.21.27

©Zhortarova A.A.[1]*, Salkeyeva L.K.[1], Minayeva Ye.V.[1],
Ibrayev M.K.[1], Fazylov S.D.[2], 2026.
[1]Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan;
[2]Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan, Karaganda, Kazakhstan.
E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru

NEW POSSIBILITIES FOR THE SYNTHESIS AND PHOSPHORYLATION OF PHOSPHONOACETIC ACID ESTER

Zhortarova Aigul — PhD student, Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,
E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-9307-2342;
Salkeyeva Lyazat — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,
E-mail: lsalkeeva@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4207-916X;
Minayeva Yelena — Candidate of Chemical Sciences, Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,
E-mail: yelenaminayeva@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-9382-5965;
Ibrayev Marat — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,
E-mail: mkibr@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0798-5562;
Fazylov Serik — Doctor of Chemical Sciences, Professor; Academician of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan, Karaganda, Kazakhstan,
E-mail: iosu8990@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4240-6450.

Abstract. The development of original substances for production of pharmaceuticals based on heterocyclic compounds remains an urgent and sought-after area of research. Effective drugs have been discovered among phosphorylated derivatives of heterocycles, including armin and phosphacol for glaucoma treatment, as well as antitumor agents such as imifos, thiophosphamide, fosfestrol, cyclophosphamide. At the same time, the study of reactions for obtaining phosphorus derivatives of aminothiadiazoles with pronounced pharmacological activity has not received due attention or a comprehensive approach from researchers. Significant interest in phosphonoacetic acid (PAA) and its derivatives is driven by their high antiviral activity, particularly their ability to

inhibit the replication of herpes simplex virus, cytomegalovirus, Epstein-Barr virus, and cowpox virus. Another important feature of PAA is its diverse biological activity, including herbicidal, fungicidal, and insecticidal properties. Additionally, research has explored the potential use of PAA in the treatment of human AIDS. The interest in PAA and its derivatives is related to their availability and possibilities of chemical modification, which can lead to the synthesis of new biologically active compounds. The research aimed to develop and identify effective methods for synthesizing PAA and its derivatives with biologically active properties. This goal was pursued by introducing thiadiazole fragment into the PAA structure, followed by further chemical modification of resulting compounds. The presence of a free amino group in the thiadiazole ring significantly enhances the potential for remodeling reactions using reactive *tert.*-butyl-tetraethyl diamidophosphite. Additionally, the active *tert.*-butoxyl group facilitates further functionalization through the Arbuzov reaction with a wide range of electrophilic reagents.

Keywords: phosphonacetic acid (PAA), thiadiazole, aminothiadiazole, *tert*.-butyltetraethyldiamidophosphite, Arbuzov reaction

For citations: *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. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.1. Pp. 462–475. DOI: https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.433*

©Жортарова А.А.[1]*, Салкеева Л.К. [1], Минаева Е.В. [1], Ибраев М.К. [1], Фазылов С.Д. [2], 2026.

[1]Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан;

[2]Қазақстан Республикасының Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан.

E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru

ФОСФОНОСІРКЕ ҚЫШҚЫЛЫНЫҢ ЭФИРІН СИНТЕЗДЕУ МЕН ФОСФОРЛАНДЫРУДЫҢ ЖАҢА МҮМКІНДІКТЕРІ

Жортарова Айгул — докторант, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-9307-2342;
Салкеева Лязат — химия ғылымдарының докторы, профессор, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: lsalkeeva@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4207-916X;
Минаева Елена — химия ғылымдарының кандидаты, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: yelenaminayeva@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-9382-5965;
Ибраев Марат — химия ғылымдарының докторы, профессор, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: mkibr@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0798-5562;

Фазылов Серік — химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Қазақстан Республикасының Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан, E-mail: iosu8990@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4240-6450.

Аннотация. Гетероциклдік қосылыстар негізінде дәрілік препараттар жасауға арналған бастапқы субстанцияларды әзірлеу өзекті әрі сұранысқа ие зерттеу саласы болып қала береді. Гетероциклдердің фосфорланған туындыларының қатарында глаукоманы емдеуге қолданылатын армин мен фосфакол, сондай-ақ ісікке қарсы имифос, тиофосфамид, фосфэстрол, циклофосфан және басқа да тиімді дәрілік препараттар белгілі. Сонымен қатар, айқын фармакологиялық белсенділікке ие аминотиадиазолдардың фосфорқұрамды туындыларын алу реакцияларын зерттеуге қатысты кешенді және жүйелік өзқарас жеткіліксіз деңгейде болған. Фосфонсірке қышқылына (ФСҚ) және оның туындыларына деген жоғары қызығушылық олардың айқын вирусқа қарсы белсенділік көрсетуімен, атап айтқанда қарапайым герпес вирусының, цитомегаловирустың, Эпштейн–Барр вирусының, сиыршешегі вирусының және басқа да вирустардың репликациясын тежеу қабілетімен байланысты. ФСҚ-тың тағы бір маңызды ерекшелігі – гербицидтік, фунгицидтік, инсектицидтік және басқа да биологиялық белсенділік түрлерін көрсетуі. Сонымен қатар, ФСҚ-ты адамның ЖИТС-ін емдеуде қолдану бойынша зерттеулер жүргізілгені белгілі. ФСҚ пен оның туындыларына деген қызығушылық олардың қолжетімділігімен және жаңа биологиялық белсенді қосылыстарды синтездеуге мүмкіндік беретін химиялық модификациялау әлеуетімен түсіндіріледі. Осыған байланысты зерттеудің мақсаты биологиялық белсенді қасиеттерге ие ФСҚ пен оның туындыларын алудың тиімді әдістерін әзірлеу және анықтау болды. Қойылған міндет ФСҚ құрамына тиадиазол фрагментін енгізу және түзілген қосылыстарды одан әрі химиялық модификациялау арқылы жүзеге асырылды.

Тиадиазол сақинасындағы бос амин тобының болуы реакцияға қабілетті үшіншілік-бутил-тетраэтилдиамидофосфитті пайдалану арқылы перемидирлеу реакциясының мүмкіндіктерін едәуір кеңейтеді, сондай-ақ көптеген электрофильді реагенттермен Арбузов реакциясына түсе алатын белсенді үшіншілік-бутоксил тобы есебінен кейінгі функционалдандыруға жағдай жасайды.

Түйін сөздер: фосфонсірке қышқылы (ФСҚ), тиадиазол, аминотиадиазол, трет-бутилтетраэтилдиамидофосфит, Арбузов реакциясы

©Жортарова А.А.[1]*, Салькеева Л.К.[1], Минаева Е.В.[1], Ибраев М.К.[1], Фазылов С.Д.[2], 2026.

[1]Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан;

[2]Институт Органического синтеза и углехимии Республики Казахстан, Караганда, Казахстан.

E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СИНТЕЗА И ФОСФОРИЛИРОВАНИЯ ФОСФОНУКСУСНОГО ЭФИРА

Жортарова Айгул — докторант, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-9307-2342;
Салькеева Лязат — доктор химических наук, профессор, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: lsalkeeva@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4207-916X;
Минаева Елена — кандидат химических наук, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: yelenaminayeva@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-9382-5965;
Ибраев Марат — доктор химических наук, профессор, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: mkibr@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-0798-5562;
Серик Фазылов —д октор химических наук, профессор, академик НАН РК, Институт органического синтеза и углехимии Республики Казахстан, Караганда, Казахстан,
E-mail: iosu8990@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4240-6450.

Аннотация. Разработка оригинальных субстанций для создания лекарственных препаратов на основе гетероциклических соединений остается актуальным и востребованным направлением исследований. Среди фосфорилированных производных гетероциклов выявлены эффективные лекарственные средства, такие как армин и фосфакол, применяемые для лечения глаукомы, а также противоопухолевые препараты имифос, тиофосфамид, фосфэстрол, циклофосфан и другие. В то же время исследованию реакций получения фосфорсодержащих производных аминотиадиазолов, обладающих выраженной фармакологической активностью, до настоящего времени не уделялось достаточного внимания, а комплексный подход к их изучению остается недостаточно разработанным. Значительный интерес к фосфонуксусной кислоте (ФУК) и ее производным обусловлен их высокой антивирусной активностью, в частности способностью подавлять репликацию вируса простого герпеса, цитомегаловируса, вируса Эпштейна-Барр, вируса коровьей оспы и других. Другой важной особенностью ФУК является проявление различных видов биологической активности, включая гербицидную, фунгицидную и инсектицидную. Имеются также сведения о возможностях применения ФУК при лечении СПИДа. Интерес к ФУК и ее производным связан не только с их биологической активностью, но и с доступностью исходных соединений и широкими возможностями их химической

модификации, способствующими синтезу новых биологически активных веществ. В связи с этим целью исследования явилась разработка и выявление эффективных методов получения ФУК и ее производных, обладающих биологически активными свойствами. Решение поставленной задачи осуществлялось путем введения тиадиазольного фрагмента в структуру ФУК с последующей химической модификацией образующихся соединений. Наличие свободной аминогруппы в тиадиазольном кольце существенно расширяет возможности реакций переамидирования с использованием реакционноспособного трет-бутилтетраэтилдиамидофосфита, а также последующей функционализации за счет активной трет-бутоксильной группы, способной вступать в реакцию Арбузова с широким кругом электрофильных реагентов.

Ключевые слова: фосфонуксусная кислота (ФУК), тиадиазол, аминотиадиазол, трет.-бутилтетраэтилдиамидофосфит, реакция Арбузова

Introduction. Thiadiazole and its functional derivatives play a crucial role in the development of potent medicines, which are an integral part of modern pharmacotherapy (Hu et al., 2014). The incorporation of the thiadiazole ring as an effective pharmacophore into organic molecules can significantly enhance or modify their biological activity (Asadullina et al., 2016). Consequently, numerous compounds containing the thiadiazole ring with diverse biological properties have been widely reported in the literature (Hemanth et al., 2022).

On the other hand, organic phosphorus compounds continue to attract significant scientific interest, particularly in the incorporation of various phosphorus derivatives into drug molecules, which can lead to the development of new pharmacophore groups (Yao et al., 2019). In this context, organic phosphorus compounds, especially phosphonoacetic acid (PAA) and its derivatives, have recently regained prominence. Notably, PAA esters are well known as pyrophosphate antimetabolites with broad inhibitory activity against various viral infections (Rodriguez et al., 2019).

Various methods for synthesizing PAA and its derivatives, particularly those based on phosphoric acid derivatives such as dialkyl and trialkylphosphites, have been well documented in the literature. For instance, studies describe the synthesis of PAA via acid hydrolysis of the trimethyl ester of phosphonoacetic acid in an acidic medium. This reaction, traditionally performed by boiling in concentrated hydrochloric acid, requires more than three days to complete. Building upon this work, further research was carried out to optimize the process, leading to the successful application of microwave irradiation. This advancement significantly reduced the reaction time while simultaneously increasing the yield of the desired product (Sokruta et al., 2017).

Continuing the research towards improving the synthesis of PAA and its derivatives and their further use in the synthesis of phosphorylated thiadiazole derivatives, the purpose of the work was to carry out a series of syntheses of PAA and its derivatives and analyzed their efficiency in further chemical modification.

A method for synthesizing phosphorylated thiadiazoles based on chloroethynylphosphonates and thiosemicarbazide has been reported in the literature (Egorova

CC BY NC

et al., 2019), noted for its simplicity and mild reaction conditions. However, in this study, we propose a broader range of experimental approaches to efficiently obtain phosphorylated thiadiazoles via different synthetic routes using readily available starting materials.

Materials and methods. All chemicals were of analytical grade and purchased from Sigma-Aldrich without requiring further purification. Reaction progress was monitored using TLC on Merck F254 silica gel-coated plates. The ^{1}H and ^{13}C NMR spectra were recorded on JEOL 500 MHz FT-NMR Spectrometer in $CDCl_3$, with TMS as the internal standard.

Mass spectra were recorded using a Shimadzu mass spectrometer, while IR spectra were obtained using a Thermo Scientific Nicolet 6700 FTIR spectrometer (Madison, WI, USA). The melting point was determined using a Buchi Melting point M-560 instrument.

Diethyl ((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) (Figure 1).

Sodium diethyl phosphite was prepared by reacting 6.9 g (0.05 mol) of diethyl phosphite with 1.15 g (0.05 mol) of metallic sodium in dry benzene. The resulting mixture was placed in a reaction flask, and with constant stirring, 6.13 g (0.05 mol) of ethyl monochloroacetate was added at room temperature following the procedure described in (Kormachev and Fedoseev, 1992). The precipitated NaCl was filtered off, and the solvent was evaporated. The residue was then distilled under reduced pressure, yielding 7.3 g (65%) of phosphonoacetic acid ester (III) with a boiling point of 141-143°C (10 mmHg) and a refractive index of n^{20}_{D} 1.4320. The obtained compound (III) was subsequently subjected to alkaline hydrolysis, resulting in the formation of PAA as a light-yellow oil. The crude PAA was then reacted with 4.6 g (0.05 mol) of thiosemicarbazide in the presence of concentrated $H_2SO_4$and PPA at 60-70°C. This resulted in the isolation of 9.04 g (72%) of diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI), which is white crystals with mp of 128-130 °C, IR (KBr, ν, cm^{-1}): 3255 (NH_2), 3181 (NH), 1254 (P=O), P-O-C (1035), 1540 (C=N). Mass spectrum, m/z: 252 $[M+H]^+$ (calculated for $C_7H_{14}N_3O_3PS$: 251). ^{31}P NMR spectrum (CD_3OD): δ_P 22 ppm. ^{1}H NMR spectrum, δ, ppm (J, Hz): 1.36 t (6H, OCH_2CH_3, $^{3}J_{HNH}$ = 7.1 Hz), 3.03 d (2H, PCH_2, $^{2}J_{HNR}$ = 21.0 Hz), 4.19 d.q (4H, OCH_2CH_3, $^{3}J_{HNH}$ = 7.3, $^{3}J_{HNR}$ = 12.3 Hz), 6.86 s (2H). δ_C, ppm: 15.36 d (CH_3CH_2, $^{3}J_{PC}$ 5.4 Hz), 27.61 d (PCH_2, $^{1}J_{PC}$ = 142.3 Hz), 63.06 d (CH_3CH_2OP, $^{2}J_{PC}$ = 6.8 Hz), 149.84 d ($CH_2C=N$, $^{2}J_{PC}$ = 10.1 Hz). The results are in agreement with the literature data [16].

Diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) (Figure 2).

Sodium diethyl phosphite, prepared from 6.9 g (0.05 mol) of diethyl phosphite and 1.15 g (0.05 mol) of sodium metal in a dry benzene medium, was placed in a reaction flask. With constant stirring, 4.7 g (0.05 mol) of monochloroacetic acid was added at room temperature. The precipitated NaCl was filtered off, and the resulting phosphonoacetic acid (PAA) was obtained as a light-yellow oil.The crude PAA was then reacted with 4.6 g (0.05 mol) of thiosemicarbazide in the presence of concentrated H_2SO_4 and polyphosphoric acid (PPA) at 60-70°C. As a result, 10.3 g (82%) of diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) was isolated, with a melting point of 128-130°C.

Diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) (Figure 3).

A solution of 4.3 g of 2-amino-5-methyl-1,3,4-thiadiazole, synthesized from 3.0 g (0.05 mol) of acetic acid and 4.6 g (0.05 mol) of thiosemicarbazide in dichloroethane, was prepared. To this solution, 1.12 g of paraformaldehyde and 1.3 g of freshly calcined zinc chloride were added with vigorous stirring. Hydrogen chloride gas was then bubbled through the reaction mixture, leading to an exothermic reaction that increased the temperature from 15°C to 30°C.Once the heat evolution ceased, the reaction mixture was further heated to 55°C and maintained at this temperature for 2 hours, with a weak stream of hydrogen chloride continuously passed through to ensure solution saturation. The resulting mixture was washed with water (2 × 15 mL) and dried over calcium chloride. Dichloroethane was removed under reduced pressure, and the residue was recrystallized from alcohol, yielding 6.8 g (68%) of diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) with a melting point of 128-130°C.

Diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) (Figure 4) – Method A.

To the sodium salt prepared from 8.0 g (0.05 mol) of malonic ester and 1.2 g (0.05 mol) of sodium in a dry benzene medium, 8.6 g (0.05 mol) of diethyl chlorophosphate was added at room temperature. The precipitated NaCl was filtered off, and the residue was distilled under vacuum, yielding 12.9 g (87%) of phosphonmalonic ester with a boiling point of 159-160°C at 10 mmHg and a refractive index of n^{20}_{D} 1.4458.The obtained phosphonmalonic ester was treated with a saturated KOH solution, and the resulting phosphonmalonic acid was heated to 80°C. Dehydration and decarboxylation yielded phosphonoacetic acid (PAA), which was then reacted with 4.6 g (0.05 mol) of thiosemicarbazide, following the previously described procedure. This resulted in the formation of 8.2 g (65%) of diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) with a melting point of 129-130°C.

Diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) (Figure 5) – Method B

A solution of sodium diethylphosphite was prepared by reacting 6.9 g (0.05 mol) of diethyl phosphite with 1.15 g (0.05 g atom) of metallic sodium in a dry benzene medium. Simultaneously, 8.0 g (0.05 mol) of malonic ester and 8.0 g (0.05 mol) of bromine were dissolved in dry benzene. The solution of sodium diethylphosphite was then added gradually while maintaining the temperature between 20-25°C.The precipitated NaBr was filtered off, and the solvent was removed under reduced pressure. The obtained residue was treated with a saturated KOH solution to yield phosphonmalonic acid, which was further heated to 80°C, leading to dehydration and decarboxylation to obtainphosphonoacetic acid (PAA). The resulting PAA was subsequently reacted with 4.6 g (0.05 mol) of thiosemicarbazide, following the previously described procedure. As a result, 7.5 g (60%) of diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) was obtained, with a melting point of 129-130°C.

Diethyl ((7-oxido-4-thia-1,2,6-triazo-7-phosphobicyclo [3.2.0] hepta-2,5-dien-3yl) methyl) phosphonate (VIIIe)

In a reaction flask, 2.48 g (0.01 mol) of tetraethyl diamido*tert*.-butyl phosphite (VII) and 2.51 g (0.01 mol) of diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate

CC BY NC

(VI) were mixed in ethyl acetate medium and heated to the boiling point of the solvent, at which time it was observed that diethylamine was distilled off in the solvent mixture. The amount of diethylamine released was determined by passing dry HCl through the distillate of the mixture with the solvent and measuring the mass of the resulting hydrochloride, which corresponds to the stoichiometry of the reaction (1:1), and amounted to 2.0 g (92%). The melting point of $(C_2H_5)_2NHxHCl$ corresponds to the literature value of 221 °C. Isobutylene gas was simultaneously observed and collected by the water displacement method. The completion of the reaction was monitored by measuring the amount of diethylamine hydrochloride formed. The reaction yielded 2.23 g (75%) of diethyl ((7-oxido-4-thia-1,2,6-triazo-7-phosphobicyclo [3.2.0] hepta-2,5-dien-3-yl) methyl) phosphonate (VIIIe).

Oil. IR spectrum (ν, cm^{-1}): 1254, 1278 (P=O), P-O-C (1045), 1545 (C=N). ^{31}P NMR spectrum (CD_3OD): δ_P 5.5ppm, P(O)H; 40.15 ppm P(O)CH_2. ^1H NMR spectrum, δ, ppm (J, Hz): 1.38 t (6H, OCH_2CH_3, $^3J_{HH}$ = 7.1 Hz), 4.2 d.q (4H, OCH_2CH_3, $^3J_{HH}$ = 7.0, 2.61 d (2H, PCH_2, $^2J_{HP}$ = 14.3 Hz), δ_C, ppm: 16.3 d (CH_3CH_2, $^3J_{PC}$ 9.1 Hz), 34.2 d (PCH_2, $^1J_{PC}$ = 142.3 Hz), 61.9 d (CH_3CH_2OP, $^2J_{PC}$ = 9.1 Hz), 148.2 d (CH_2C=N, $^2J_{PC}$ = 10.1 Hz), 154.7 s (SC=N). Mass spectrum, m/z: 296 $[M+H]^+$ (calculated for $C_7H_{13}N_3O_4P_2S$: 297).

Results and discussion. We carried out the classical synthesis of diethyl phosphonoacetate (III) from sodium diethyl phosphite (I) and ethyl chloroacetate (II). The alkaline hydrolysis of this intermediate yields diethyl phosphonoacetic acid (IV), which, upon further functionalization with thiosemicarbazide, leads to the formation of phosphono-substituted thiadiazole (VI). Obviously, the reaction proceeds according to the scheme presented in Figure 1:

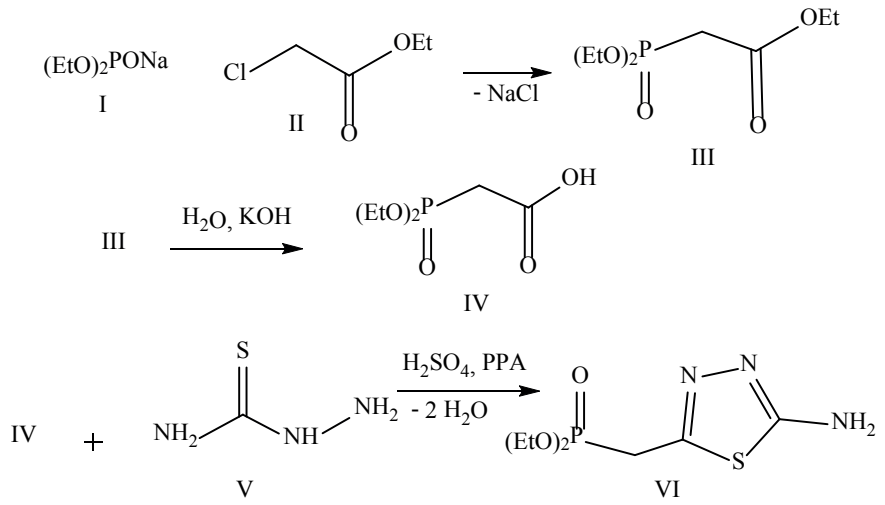


Figure 1 - Synthesis of diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) from ethyl chloroacetate

The obtained ester (III) underwent alkaline hydrolysis, yielding PAA as an oily product (IV), which was subsequently reacted with thiosemicarbazide without prior

purification. This reaction efficiently produced diethyl((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) in good yield.

Another method for synthesizing PAA involves the direct reaction of sodium diethyl phosphite with monochloroacetic acid. This approach demonstrated high efficiency, leading to a significant increase in the yield of the target product (Figure 2).

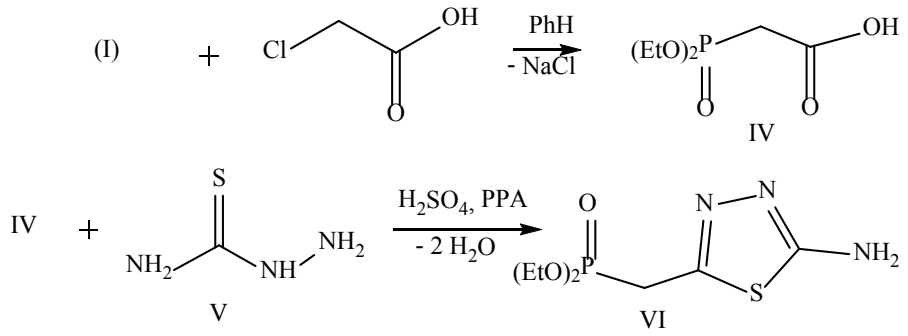


Figure 2 – Synthesis of diethyl ((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) from monochloroacetic acid

This reaction proved to be significantly more efficient than using ester (II), as it eliminated the need for hydrolysis of the obtained product. In all cases, the reactions were monitored using thin-layer chromatography (TLC).

The classical reaction of the previously synthesized 2-amino-5-methylthiadiazole, followed by chloromethylation using hydrochloric acid and paraformaldehyde in the presence of anhydrous ZnCl□, is also an equally efficient method for forming the thiadiazole ring (Figure 3).

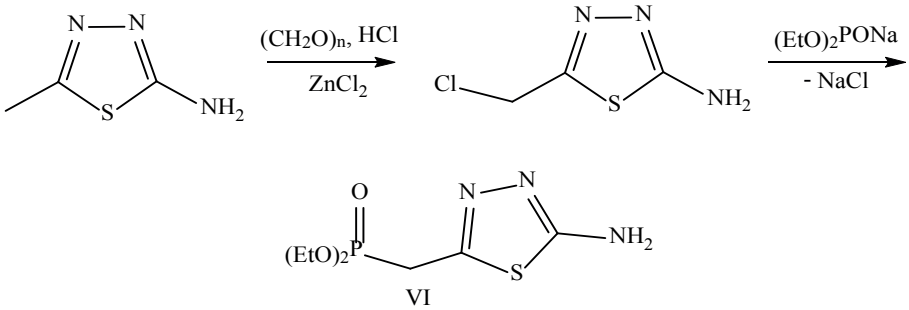


Figure 3 - Synthesis of diethyl ((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) via the chloromethylation of 2-amino-5-methyl-1,3,4-thiadiazole

Another synthetically valuable approach to obtaining the target product (VI) involves the reaction of sodium malonic ester with chlorophosphate, as well as the reaction of the sodium ester of diethylphosphoric acid (I) with bromomalonic ester. The reaction is expected to proceed according to the proposed scheme (Method A and B), as shown in Figures 4 and 5.

Both methods (A) and (B) proceed under relatively mild conditions and result in a high yield of the desired product (VI). However, Method A offers certain advantages, including a shorter synthetic route that eliminates the need for isolating the intermediate PAA allowing for its direct use in subsequent reactions.In the reaction between the sodium salt of diethyl phosphite and bromomalonic ester, a significant side elimination reaction occurs due to the relatively high basicity of the diethyl phosphonate anion. This leads to the formation of the tetraethyl ester of ethylenetetracarboxylic acid, which has a melting point of 53-54°C.A substantial reduction in the formation of this byproduct was achieved by employing a reverse addition technique, where the reagents were mixed in the opposite order. This approach effectively lowered the concentration of sodium diethyl phosphite, thereby minimizing unwanted side reactions.

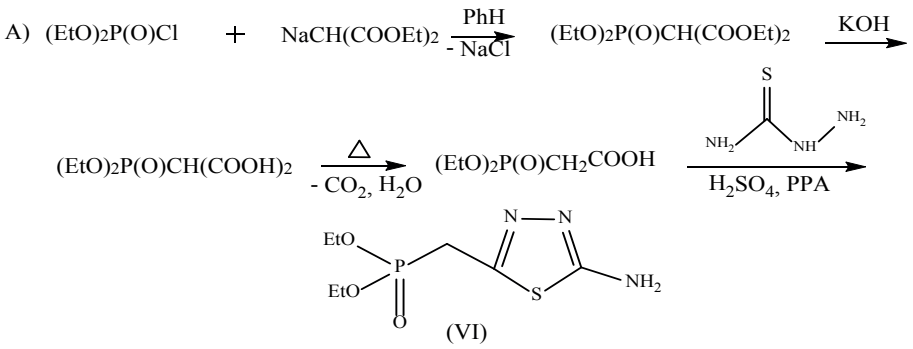


Figure 4 - Synthesis of diethyl ((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) using bromo- and sodium malonic esters. Method A

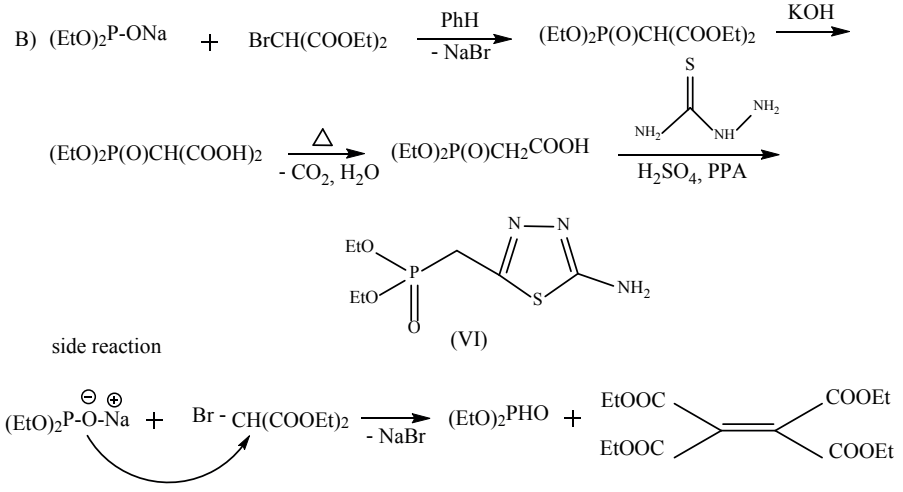


Figure 5 – Synthesis of diethyl ((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) using bromo- and sodium malonic esters. Method B

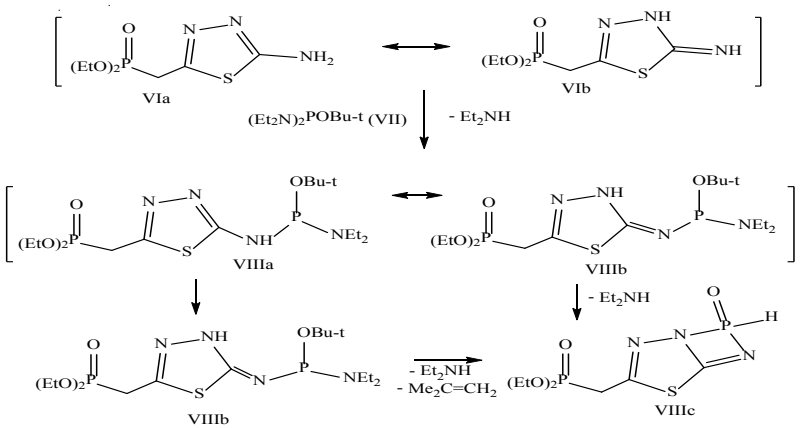
Analysis of the synthesis results for the preparation of (VI) revealed that the most efficient method, in preparative terms, is the approach based on compound

(IV), as outlined in Figure 2. This method allows for the direct reaction of (IV) with thiosemicarbazide without the need for its isolation in free form. The process is characterized by its simplicity, high yield, and excellent purity of the final product.

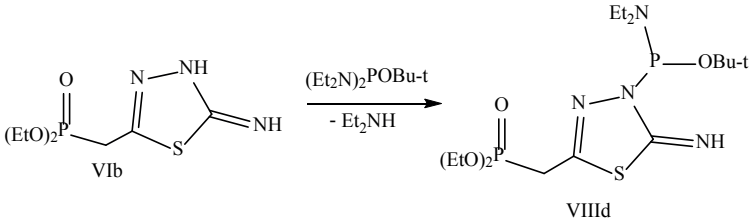
The structure of diethyl ((5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl) phosphonate (VI) implies significant reactivity associated with the presence of a free amino group, which exists in the amino–imine tautomeric forms of the thiadiazole ring (Danilova et al., 2010). These structural features are particularly relevant in the study of chemical modification reactions, notably phosphorylation with amidophosphoric acid esters, which readily undergo transamidation with the more nucleophilic diethylamino group.

A considerable number of phosphorylation reactions involving a wide range of amino and oxy compounds using full and partial esters of amidophosphoric acid have been reported in the literature. In particular, we have previously explored the efficiency of tetraethyl diamido-*tert*.-butyl phosphite (VII), which features a highly nucleophilic P(III) atom capable of readily phosphorylating various amino compounds (Sal'keeva et al., 2014). Another advantage of (VII) is the presence of a *tert*.-butyl group, which can be easily eliminated, facilitating the formation of a stable P=O bond. These characteristics make (VII) an attractive reagent for the design of new structures incorporating effective pharmacophore groups.

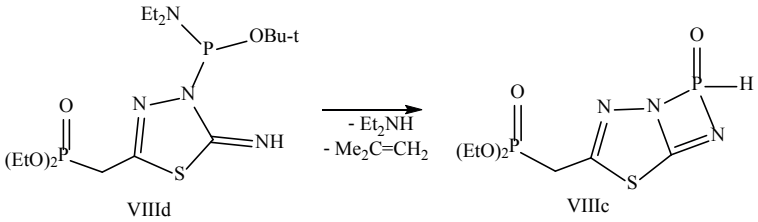
The obtained product (VI) presents an interesting opportunity for further functionalization, particularly involving its free amino group. We propose that a transamidation reaction can be achieved using a highly effective reagent tetraethyl *diamido-tert*.-butyl phosphite (VII). This reaction serves a dual purpose: firstly, it introduces a reactive phosphorus (III) atom, enabling further chemical modifications; secondly, it facilitates the substitution of the amino group's nitrogen in the thiadiazole ring with the more basic diethylamino group from (VII). The reaction is carried out by prolonged heating of (VI) and (VII) in an ethyl acetate medium, with continuous distillation of the solvent mixture and the concurrent release of diethylamine. Completion of the reaction was confirmed by isolating diethylamine as diethylamine hydrochloride and determining its mass. The final product was precipitated from the reaction mixture, separated via filtration, and purified through recrystallization from alcohol.



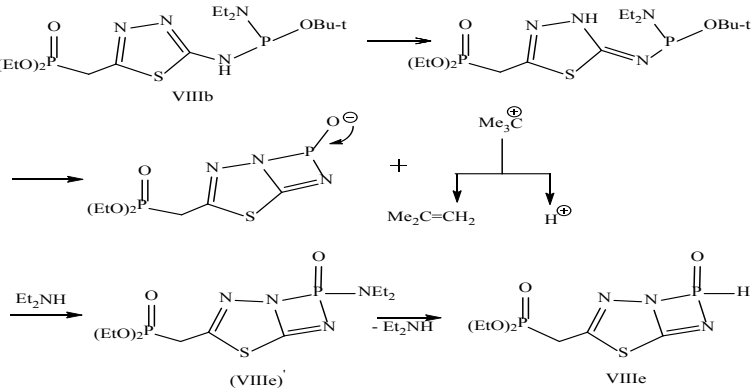
The structure of compound (VI) suggests the existence of two tautomeric forms, (VIa) and (VIb), in which the nitrogen atoms exhibit different basicities, implying different pathways for transamidation reactions. This observation aligns with literature data, which indicate that the nitrogen atoms in 2-amino-1,3,4-thiadiazoles exist in resonance equilibrium, as demonstrated by X-ray diffraction analysis (Asadullina et al., 2016). In this context, another plausible reaction pathway involves phosphorylation at the nitrogen atom of the thiadiazole ring. A similar approach was adopted by Danilova et al. (Danilova et al., 2010) in the case of the alkylation reaction of thiadiazoles.



We believe that the formed product (VIIId) can readily release the diethylamine molecule due to its spatial arrangement and the high nucleophilicity of the nitrogen atom in the diethylamino group. This transformation subsequently leads to the formation of product (VIIIc).



The evolved isobutylene was collected, and its volume was measured by the water displacement method.



Evidently, the reaction proceeds due to the high lability of the *tert*.-butoxy group, which under the reaction conditions at the boiling point of ethyl acetate readily undergoes elimination of a stable *tert.*-butyl cation, leading to the formation of a stable phosphoryl group (P=O) and, consequently, to the formation of compound (VIIIe). The reaction progress was monitored by TLC and by recording the ^{31}P NMR spectrum after 10–15 minutes. The formation of structure VIIIa was observed, manifested by a signal at 181.55 ppm, corresponding to a trivalent P(III) species; additionally, a signal of a tetracoordinated phosphorus atom, presumably an acidic species, appeared at 40.15 ppm. The initially formed trivalent phosphorus compound is unstable due to the presence of an easily eliminable *tert*.-butoxy group and ultimately converts into the final product VIIIe. It should also be noted, in support of the proposed reaction pathway, that the mass spectrum of (VIIIe) exhibits a peak at m/z 369, corresponding to the structure (VIIIe)' with a molecular weight of 368, which is evidently formed as a result of attack by diethylamine present in the reaction medium followed by substitution with a proton.

Conclusions. In conclusion, it should be emphasized that we carried out an experimental evaluation of various methods for the synthesis of phosphonoacetic acid, which was subsequently employed in the preparation of amino-thiadiazole derivatives. These compounds are of particular interest for the generation of new derivatives via functionalization at the free amino group. In this context, the phosphorylation of the obtained phosphono-substituted thiadiazoleswas accomplished through transamidation reaction with *tert*.-butyl tetraethyldiamidophosphite, which readily undergoes substitution of the diethylamino group and enables further modification according to the Arbuzov reaction scheme. The synthesized compounds demonstrate the feasibility of facile phosphorylation of substituted amino-thiadiazoles, representing an efficient approach to the generation of new potential synthons for the synthesis of pharmaceutically active substances.

References

Asadullina A.E., Egorov D.M., Piterskaya Yu.L., Dogadina A.V. (2016) Synthesis of dialkyl [(5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl) methyl] phosphonates. Russian Journal of General Chemistry. – № 86(3). – P. 729-730. DOI: 10.1134/S1070363216030361. (in English)

Danilova E.A., Melenchuk T.V., Trukhina O.N., Islyaikin M.K. (2010) Diaminothiadiazoles – building blocks for macroheterocycles. Macroheterocycles. – № 3(1). – P. 68–81. (in English)

Egorova D.M., Chernova I.S., Popchuk M.V., Polukeev V.A., Dogadina A.V. (2019) Some features of phosphorylation of 4-substituted thiosemicarbazides with chloroethynylphosphonates. Russian Journal of General Chemistry. – № 89(10). – P. 2036–2043. DOI: 10.1134/S1070363219100086. (in English)

Hemanth K., Lakshmanan K., Rajagopal K., Piyongsola, Byran G. (2022) A review on biological activities: 1,3,4-thiadiazole and its derivatives. Rasayan Journal of Chemistry. – № 15(2). – P. 1573–1587. DOI: 10.31788/rjc.2022.1526443. (in English)

Hu Y., Li C.-Y., Wang X.-M., Yang Y.-H., Zhu H.-L. (2014) 1,3,4-Thiadiazole: Synthesis, reactions, and applications in medicinal, agricultural, and materials chemistry. Chemical Reviews. – № 114(10). – P. 5572-5610. DOI: 10.1021/cr400131u. (in English)

Kormachev V.V., Fedoseev M.S. (1992) Preparativnaya khimiya fosfora [Preparative chemistry of phosphorus]. Perm, Russia. – 190 p. (in Russian)

Rodriguez J.B., Gallo-Rodriguez C. (2019) The role of the phosphorus atom in drug design. ChemMedChem. – № 14. – P. 1-28. DOI: 10.1002/cmdc.201800693. (in English)

Sal'keeva L.K., Voitichek P., Taishibekova E.K., Zhortarova A.A., Shibaeva A.K., Sugralina L.M.,

Muratbekova A.A., Sal'keeva A.K. (2014) Unusual phosphorylation of 2-amino-4-phenylthiazole with phosphorous acid ester amides. Russian Journal of General Chemistry. – № 84(12). – P. 2477-2479. DOI: 10.1134/S1070363214120275. (in English)

Sokruta E.V., Kalistratova A.V., Kovalenko L.V. (2017) Intensifikatsiya gidroliza trimetilfosfonoatsetata [Intensification of hydrolysis of trimethylphosphonoacetate]. Advances in Chemistry and Chemical Technology. – № 31(12). – P. 30–32. (in Russian)

Yao Q., Reng L., Ran M., He J., Xiang D. (2019) Review on the structures of phosphorus-containing drugs used in clinical practice. Hua Xue Shi Ji. – № 41. – P. 139-146. DOI: 10.13822/j.cnki.hxsj.2019006737. (in English)

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 29.12.2025.
Формат 60x88$^{1}/_{8}$.
18,0 п.л. Заказ 4.

«Central Asian Academic Research Center» LLP
Алматы, Шевченко к-сі, 28