

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

2022 • 2

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫНЫҢ

БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

REPORTS
OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

БАС РЕДАКТОР:

БЕНБЕРИН Валерий Васильевич, медицина ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Қазақстан Республикасы Президенті Іс Басқармасы Медициналық орталығының директоры (Алматы, Қазақстан), Н = 11

РЕДАКЦИЈАЛЫҚ АЛҚА:

РАМАЗАНОВ Тілекқабил Сәбитұлы, (бас редактордың орынбасары), физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), Н = 26

РАМАНҚҰЛОВ Ерлан Мирхайдарұлы, (бас редактордың орынбасары), профессор, ҚР ҰҒА корреспондент-мүшесі, Ph.D биохимия және молекулалық генетика саласы бойынша Ұлттық биотехнология орталығының бас директоры (Нұр-Сұлтан, Қазақстан), Н = 23

САНГ-СУ Квак, Ph.D (биохимия, агрохимия), профессор, Корей биоғылым және биотехнология ғылыми-зерттеу институты (KRIBB), өсімдіктердің инженерлік жүйелері ғылыми-зерттеу орталығының бас ғылыми қызметкері, (Дэчон, Корея), Н = 34

БЕРСІМБАЕВ Рахметқажы Ескендірұлы, биология ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Еуразия ұлттық университеті. Л.Н. Гумилев (Нұр-Сұлтан, Қазақстан), Н = 12

ӘБИЕВ Руфат, техника ғылымдарының докторы (биохимия), профессор, Санкт-Петербург мемлекеттік технологиялық институты «Химиялық және биотехнологиялық аппаратураны оңтайландыру» кафедрасының меңгерушісі, (Санкт-Петербург, Ресей), Н = 14

ЛОКШИН Вячеслав Нотанович, медицина ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, «PERSONA» халықаралық клиникалық репродуктология орталығының директоры (Алматы, Қазақстан), Н = 8

СЕМЕНОВ Владимир Григорьевич, биология ғылымдарының докторы, профессор, Чуваш республикасының еңбек сіңірген ғылым қайраткері, «Чуваш мемлекеттік аграрлық университеті» Федералдық мемлекеттік бюджеттік жоғары білім беру мекемесі Акушерлік және терапия кафедрасының меңгерушісі, (Чебоксары, Ресей), Н = 23

ФАРУК Асана Дар, Хамдар аль-Маджида Хамдард университетінің шығыс медицина факультеті, Шығыс медицинасы колледжінің профессоры, (Карачи, Пәкістан), Н = 21

ЦЕЛЕТКИН Игорь Александрович, медицина ғылымдарының докторы, Монтана штаты университетінің профессоры (Монтана, АҚШ), Н = 27

КАЛАНДРА Пьетро, Ph.D (физика), нанокұрылымды материалдарды зерттеу институтының профессоры (Рим, Италия), Н = 26

МАЛЫМ Анна, фармацевтика ғылымдарының докторы, профессор, Люблин медицина университетінің фармацевтика факультетінің деканы (Люблин, Польша), Н = 22

БАЙМҰҚАНОВ Дастан Асылбекұлы, ауыл шаруашылығы ғылымдарының докторы, ҚР ҰҒА корреспондент мүшесі, "Мал шаруашылығы және ветеринария ғылыми-өндірістік орталығы" ЖШС мал шаруашылығы және ветеринарлық медицина департаментінің бас ғылыми қызметкері (Нұр-Сұлтан, Қазақстан), Н=1

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, академик, Молдова Ғылым Академиясының президенті, Молдова техникалық университеті (Кишинев, Молдова), Н = 42

ҚАЛИМОЛДАЕВ Мақсат Нұрділұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), Н = 7

БОШКАЕВ Қуантай Авғазыұлы, Ph.D. Теориялық және ядролық физика кафедрасының доценті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 10

QUEVEDO Hernando, профессор, Ядролық ғылымдар институты (Мехико, Мексика), Н = 28

ЖҮСПНОВ Марат Абжанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, теориялық және ядролық физика кафедрасының профессоры, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 7

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, Украина ҰҒА академигі, Қолданбалы математика және механика институты (Донецк, Украина), Н = 5

ТАКИБАЕВ Нұрғали Жабағаұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 5

ХАРИН Станислав Николаевич, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Қазақстан-Британ техникалық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 10

ДАВЛЕТОВ Асқар Ербуланович, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 12

«Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясының баяндамалары»

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

Меншіктеуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» Республикалық қоғамдық бірлестігі (Алматы қ.). Қазақстан Республикасының Ақпарат және қоғамдық даму министрлігінің Ақпарат комитетінде 29.07.2020 ж. берілген № KZ93VPY00025418 мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік.

Тақырыптық бағыты: *өсімдік шаруашылығы, экология және медицина саласындағы биотехнология және физика ғылымдары.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет. Тиражы: 300 дана.

Редакцияның мекен-жайы: 050010, Алматы қ., Шевченко көш., 28; 219 бөл.; тел.: 272-13-19

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

© Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы, 2022
Типографияның мекен-жайы: «Аруна» ЖК, Алматы қ., Муратбаева көш., 75.

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР:

БЕНБЕРИН Валерий Васильевич, доктор медицинских наук, профессор, академик НАН РК, директор Медицинского центра Управления делами Президента Республики Казахстан (Алматы, Казахстан), Н = 11

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

РАМАЗАНОВ Тлеккабул Сабитович, (заместитель главного редактора), доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), Н = 26

РАМАНКУЛОВ Ерлан Мирхайдарвич, (заместитель главного редактора), профессор, член-корреспондент НАН РК, Ph.D в области биохимии и молекулярной генетики, Генеральный директор Национального центра биотехнологии (Нур-Султан, Казахстан), Н = 23

САНГ-СУ Квак, доктор философии (Ph.D, биохимия, агрохимия), профессор, главный научный сотрудник, Научно-исследовательский центр инженерных систем растений, Корейский научно-исследовательский институт бионауки и биотехнологии (KRIBB), (Дэчон, Корея), Н = 34

БЕРСИМБАЕВ Рахметкажи Искендинович, доктор биологических наук, профессор, академик НАН РК, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева (Нур-Султан, Казахстан), Н = 12

АБИЕВ Руфат, доктор технических наук (биохимия), профессор, заведующий кафедрой «Оптимизация химической и биотехнологической аппаратуры», Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Санкт-Петербург, Россия), Н = 14

ЛОКШИН Вячеслав Нотанович, доктор медицинских наук, профессор, академик НАН РК, директор Международного клинического центра репродуктологии «PERSONA» (Алматы, Казахстан), Н = 8

СЕМЕНОВ Владимир Григорьевич, доктор биологических наук, профессор, заслуженный деятель науки Чувашской Республики, заведующий кафедрой морфологии, акушерства и терапии, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Чувашский государственный аграрный университет» (Чебоксары, Чувашская Республика, Россия), Н = 23

ФАРУК Асана Дар, профессор Колледжа восточной медицины Хамдарда аль-Маджида, факультет восточной медицины Университета Хамдарда (Карачи, Пакистан), Н = 21

ЩЕПЕТКИН Игорь Александрович, доктор медицинских наук, профессор Университета штата Монтана (США), Н = 27

КАЛАНДРА Пьетро, доктор философии (Ph.D, физика), профессор Института по изучению наноструктурированных материалов (Рим, Италия), Н = 26

МАЛЬМ Анна, доктор фармацевтических наук, профессор, декан фармацевтического факультета Люблинского медицинского университета (Люблин, Польша), Н = 22

БАЙМУКАНОВ Дастанбек Асылбекович, доктор сельскохозяйственных наук, член-корреспондент НАН РК, главный научный сотрудник Департамента животноводства и ветеринарной медицины ТОО «Научно-производственный центр животноводства и ветеринарии» (Нур-Султан, Казахстан), Н = 1

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, доктор физико-математических наук, академик, президент Академии наук Молдовы, Технический университет Молдовы (Кишинев, Молдова), Н = 42

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нурадилович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), Н = 7

БОШКАЕВ Куантай Авгазыевич, доктор Ph.D, преподаватель, доцент кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), Н = 10

QUEVEDO Hernando, профессор, Национальный автономный университет Мексики (UNAM), Институт ядерных наук (Мехико, Мексика), Н = 28

ЖУСУПОВ Марат Абжанович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), Н = 7

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, академик НАН Украины, Институт прикладной математики и механики (Донецк, Украина), Н = 5

ТАКИБАЕВ Нурғали Жабағевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), Н = 5

ХАРИН Станислав Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахско-Британский технический университет (Алматы, Казахстан), Н = 10

ДАВЛЕТОВ Аскар Ербуланович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), Н = 12

Доклады Национальной академии наук Республики Казахстан»

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

Собственник: Республиканское общественное объединение «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы). Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации Министерства информации и общественного развития Республики Казахстан № **KZ93VPY00025418**, выданное 29.07.2020 г.

Тематическая направленность: *биотехнология в области растениеводства, экологии, медицины и физические науки.*

Периодичность: 4 раз в год. Тираж: 300 экземпляров

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28; ком. 219; тел. 272-13-19

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

© Национальная академия наук Республики Казахстан, 2022

Адрес типографии: ИП «Аруна», г. Алматы, ул. Муратбаева, 75.

EDITOR IN CHIEF:

BENBERIN Valery Vasilievich, Doctor of Medicine, Professor, Academician of NAS RK, Director of the Medical Center of the Presidential Property Management Department of the Republic of Kazakhstan (Almaty, Kazakhstan), H = 11

EDITORIAL BOARD:

RAMAZANOV Tlekkabul Sabitovich, (Deputy Editor-in-Chief), Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), H = 26

RAMANKULOV Erlan Mirkhaidarovich, (Deputy Editor-in-Chief), Professor, Corresponding Member of NAS RK, Ph.D in the field of biochemistry and molecular genetics, General Director of the National Center for Biotechnology (Nur-Sultan, Kazakhstan), H = 23

SANG-SOO Kwak, PhD in Biochemistry, Agrochemistry, Professor, Chief Researcher, Plant Engineering Systems Research Center, Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology (KRIBB), (Daecheon, Korea), H = 34

BERSIMBAEV Rakhmetkazhi Iskendirovich, Doctor of Biological Sciences, Professor, Academician of NAS RK, L.N. Gumilyov Eurasian National University (Nur-Sultan, Kazakhstan), H = 12

ABIYEV 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), H = 14

LOKSHIN Vyacheslav Notanovich, Professor, Academician of NAS RK, Director of the PERSONA International Clinical Center for Reproductology (Almaty, Kazakhstan), H = 8

SEMENOV Vladimir Grigorievich, Doctor of Biological Sciences, Professor, Honored Scientist of the Chuvash Republic, Head of the Department of Morphology, Obstetrics and Therapy, Chuvash State Agrarian University (Cheboksary, Chuvash Republic, Russia), H = 23

PHARUK Asana Dar, professor at Hamdard al-Majid College of Oriental Medicine. Faculty of Oriental Medicine, Hamdard University (Karachi, Pakistan), H = 21

TSHEPETKIN Igor Aleksandrovich, Doctor of Medical Sciences, Professor at the University of Montana (Montana, USA), H = 27

CALANDRA Pietro, PhD in Physics, Professor at the Institute of Nanostructured Materials (Monterotondo Station Rome, Italy), H = 26

MALM Anna, Doctor of Pharmacy, Professor, Dean of the Faculty of Pharmacy, Lublin Medical University (Lublin, Poland), H = 22

BAIMUKANOV Dastanbek Asylbekovich, Doctor of Agricultural Sciences, Corresponding Member of the NAS RK, Chief Researcher of the department of animal husbandry and veterinary medicine, Research and Production Center for Livestock and Veterinary Medicine Limited Liability Company (Nur-Sultan, Kazakhstan), H=1

TIGHINEANU Ion Mikhailovich, Doctor in Physics and Mathematics, Academician, Full Member of the Academy of Sciences of Moldova, President of the AS of Moldova, Technical University of Moldova (Chisinau, Moldova), H = 42

KALIMOLDAYEV Maksat Nuradilovich, doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), H = 7

BOSHKAYEV Kuantai Avgazievich, PhD, Lecturer, Associate Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), H = 10

QUEVEDO Hemando, Professor, National Autonomous University of Mexico (UNAM), Institute of Nuclear Sciences (Mexico City, Mexico), H = 28

ZHUSSUPOV Marat Abzhanovich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), H = 7

KOVALEV Alexander Mikhailovich, Doctor in Physics and Mathematics, Academician of NAS of Ukraine, Director of the State Institution «Institute of Applied Mathematics and Mechanics» DPR (Donetsk, Ukraine), H = 5

TAKIBAYEV Nurgali Zhabagaevich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), H = 5

KHARIN Stanislav Nikolayevich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, Kazakh-British Technical University (Almaty, Kazakhstan), H = 10

DAVLETOV Askar Erbulanovich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), H = 12

Reports of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

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

Owner: RPA «National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan» (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 No. **KZ93VPY00025418**, issued 29.07.2020.

Thematic scope: *biotechnology in the field of crop research, ecology and medicine and physical sciences.*

Periodicity: 4 times a year. Circulation: 300 copies.

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, Almaty, 050010, tel. 272-13-19

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

© National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 2022

Address of printing house: ST «Aruna», 75, Muratbayev str., Almaty.

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
ISSN 2224-5227

Volume 2, Number 342 (2022), 122-133
<https://doi.org/10.32014/2022.2518-1483.153>

УДК 538.958.915

**А.Е. Кемелбекова^{1,2*}, А.Қ. Шонғалова¹, С.Қ. Шегебай¹,
М. Карибаев¹, Ж. Сайлау³, А.С. Серикканов¹**

¹«Физико-Технический институт» ТОО, Алматы, Казахстан;
²Satbayev University, Алматы, Казахстан;
³ НАО Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
Алматы, Казахстан.
E-mail: a.kemelbekova@mail.ru

ПРОВЕДЕНИЕ СКРИНИНГОВЫХ РАСЧЕТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ZnO И ИЗУЧЕНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ В ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

Аннотация. Органико-неорганические гибридные перовскитные солнечные элементы с их значительными достижениями в области экономичного процесса изготовления и высокой эффективности преобразования мощности превзошли ряд традиционных фотоэлектрических технологий, таких как многокристаллические Si и CIGS. Между тем, нежелательная эксплуатационная стабильность перовскитовых солнечных элементов задерживает их коммерциализацию, поскольку перовскитовые солнечные элементы подвергаются деградации решетки и теряют способность собирать энергию при столкновении с критическими факторами окружающей среды, такими как высокая влажность, так и сильное облучение. Соответственно, повышение стабильности работы становится одним из решающих факторов, определяющих следующую волну развития перовскитовых солнечных элементов. Стабильность и желательное кристаллообразование перовскитных полупроводников имеют первостепенное значение для обеспечения успеха перовскитов в фотоэлектрической технологии.

Несмотря на улучшенные свойства и структуру кристалла ZnO,

его практическое применение в очистке биотоплив и перовскитных солнечных элементах по-прежнему сложно. Основная проблема связана с отсутствием большой площади поверхности для ZnO, чтобы обеспечить высокую пористость и улучшенную шероховатость поверхности, что позволит нам проникнуть в электролит. В связи с этим существует несколько расчетных работ по первым принципам для определения кристаллических свойств ZnO и связи их с экспериментальными свойствами для разработки его фотоэлектрических характеристик. Две важные кристаллические структуры ZnO включая гексоганальную и гранецентрированную, были выбраны в качестве вычислительной модели в нашей работе. Здесь методология этой работы в основном основана на оптимизации геометрии для наиболее стабильных кристаллических структур ZnO. Затем были визуализированы оптимизированные структуры кристаллической структуры ZnO и детально проанализированы его энергии и другие важные квантово-химические параметры.

Ключевые слова: ZnO; кристаллическая структура, биотопливы, перовскит, квантово-химический расчет.

**А.Е. Кемелбекова^{1,2*}, А.Қ. Шонғалова¹, С.Қ. Шегебай¹,
М. Карибаев¹, Ж. Сайлау³, А.С. Серикканов¹**

¹Сатпаев университеті, «Физика-Техникалық институты» ЖШС,
Алматы, Қазақстан;

²Satbayev University, Алматы, Қазақстан;

³Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.
E-mail: a.kemelbekova@mail.ru

ПЕРОВСКИТТІК КҮН ЭЛЕМЕНТТЕРІНДЕ ҚОЛДАНУҒА АРНАЛҒАН ZNO КРИСТАЛДЫ ҚҰРЫЛЫМЫН ЕСЕПТЕУ СКРИНИНГІ

Аннотация. Органикалық-бейорганикалық гибриді перовскиттік күн батареялары үнемді өндіріс процесінде және жоғары қуатты конверсиялау тиімділігінде айтарлықтай жетістіктерге ие, соның ішінде көп кристалды Si және CIGS сияқты дәстүрлі фотоэлектрлік технологиялардан асып түседі. Сонымен қатар, перовскиттік күн элементтерінің қажетсіз эксплуатациялық тұрақтылығы олардың коммерциялануын кешіктіреді, өйткені перовскиттік күн элементтері тордың тозуына ұшырайды және жоғары ылғалдылық пен күшті

сәулелену сияқты қоршаған орта факторларына тап болған кезде энергия жинау қабілетін жоғалтады. Тиісінше, жұмыс тұрақтылығының артуы перовскиттік күн элементтерінің дамуының келесі толқынын анықтайтын шешуші факторлардың бірі болып табылады. Перовскиттік жартылай өткізгіштердің тұрақтылығы мен қалаған Кристалл түзілуі перовскиттердің фотоэлектрлік технологиядағы сәттілігін қамтамасыз ету үшін өте маңызды.

ZnO кристалының қасиеті мен құрылымының жақсарғанына қарамастан, Perovskite күн батареясында, және де биоотынды тазартуда ZnO практикалық қолдану әлі де қиын. Негізгі мәселе электролиттің енуіне мүмкіндік беретін жоғары кеуектілікті және жақсартылған беттің кедір-бұдырлығын қамтамасыз ету үшін ZnO үшін жоғары бетінің болмауына байланысты. Осыған байланысты, ZnO кристалдық қасиеттерін анықтау және оның фотоэлектрлік өнімділігін дамыту үшін оны тәжірибелік қасиеттермен байланыстыру үшін алғашқы принципті есептеу жұмыстары аз. Біздің жұмысымызда есептеу моделі ретінде ZnO екі маңызды кристалдық құрылымы таңдалды, оның ішінде гексогональді және де центрленген куб. Мұнда бұл жұмыстың әдістемесі негізінен ZnO ең тұрақты кристалдық құрылымдарының геометриясын оңтайландыруға негізделген. Содан кейін ZnO кристалдық құрылымының оңтайландырылған құрылымдары визуалды түрде көрсетіліп, оның энергиялары және басқа маңызды кванттық химиялық параметрлер егжей-тегжейлі талданды.

Түйін сөздер: ZnO, кристалдық құрылым, биоотын, перовскит, кванттық химиялық есептеу.

**A.E. Kemelbekova^{1,2*}, A.K. Shongalova¹, S.K. Shegebay¹,
M. Karibaev¹, J.Sailau³, A.S. Serikanov¹**

¹”Institute of Physics and Technology” LLP, Almaty, Kazakhstan;

²Satbayev University, Almaty, Kazakhstan;

³KazNU named after al Farabi, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: a.kemelbekova@mail.ru

COMPUTATIONAL SCREENING OF ZnO CRYSTAL STRUCTURE FOR THE PEROVSKITE SOLAR CELL APPLICATION

Abstract. Organic-inorganic hybrid perovskite solar cells with their significant achievements in the field of economical manufacturing process

and high efficiency of power conversion have surpassed a number of traditional photovoltaic technologies, such as multicrystalline Si and CIGS. Meanwhile, the undesirable operational stability of perovskite solar cells delays their commercialization, since perovskite solar cells undergo lattice degradation and lose their ability to collect energy when faced with critical environmental factors such as high humidity and strong irradiation. Accordingly, increasing the stability of operation becomes one of the decisive factors determining the next wave of development of perovskite solar cells. The stability and desirable crystallization of perovskite semiconductors are of paramount importance to ensure the success of perovskites in photovoltaic technology.

Despite the improved properties and structure of the ZnO crystal, its practical application in the purification of biofuels and perovskite solar cells is still difficult. The main problem is the lack of a large surface area for ZnO to provide high porosity and improved surface roughness, which will allow us to penetrate the electrolyte. In this regard, there are several computational works on the first principles to determine the crystalline properties of ZnO and their connection with experimental properties for the development of its photovoltaic characteristics. Two important crystal structures of ZnO, including hexagonal and face-centered, were chosen as a computational model in our work. Here, the methodology of this work is mainly based on geometry optimization for the most stable ZnO crystal structures. Then optimized structures of the crystal structure of ZnO were visualized and its energies and other important quantum chemical parameters were analyzed in detail.

Key words: ZnO, crystal structure, biofuel, perovskite, quantum chemical calculation.

Введение. Оксид цинка представляет собой неорганическое соединение, имеющее химическую формулу ZnO. ZnO – практический нерастворимый в воде, кристаллизуется в гексагональной и кубической форме (Зырянов, 2006: 94). Структура ZnO обычно описывается как состоящая из ряда чередующихся плоскостей, состоящих из тетраэдрически координированных ионов O^{2-} и Zn^{2+} (Дроздов и др. 2019: 814) с попеременно уложенных вдоль осей с без центральной симметрии (Павлюк и др. 2021: 120). ZnO полупроводник группы II – VI с широкой запрещенной зоной около 3,33 эВ (Калякин и др. 2015: 162). ZnO обладает многими уникальными свойствами, такими как экситонное излучение при комнатной температуре или даже выше, оптическая прозрачность в видимом диапазоне, высокое отношение

поверхности к объему и эффект квантового ограничения. В основном известно, что ZnO кристаллизуется как полупроводник n-типа, тогда как синтез р-типа является сложной задачей (Абрашова, 2016).

ZnO легко синтезируемый, применяются как химические, так и физические методы для производства превосходных эпитаксиальных пленок. Наиболее часто используемые методы выращивания эпитаксиальных пленок ZnO включают электроосаждение, пиролиз распылением, золь-гель процесс (Майоров и др. 2007:899), последовательную ионно-слоевую адсорбцию и реакцию (SILAR), ВЧ-распыление (Егорова и др. 2020:1842), осаждение в химической ванне (CBD), центрифугирование, электронно-лучевую эпитаксию (Ляшенко, 2020), лазерную эпитаксию, испарение и ионно-лучевое распыление (Павлов и др. 2021: 76).

Фотоэлектрическое применение наноструктур ZnO требует большой площади внутренней поверхности с пористой и высокой шероховатостью поверхности для обеспечения хорошего проникновения электролита (Коротков и др. 2021:34). Химические методы очень просты, надежны и экономичны для синтеза высококачественных электродов для фотоэлектрических применений. В частности, метод химического осаждения в ванне подходит для получения пленок ZnO большой площади с интересными свойствами для фотоэлектрохимических солнечных элементов. Этот метод подходит для выращивания наноструктур ZnO на многих подложках, включая микроскопное стекло и нержавеющую сталь (Гурин и др. 2019: 111).

В некоторых приложениях, таких как оптоэлектроника, ZnO можно использовать в качестве дополнения или альтернативы некоторым полупроводникам, таким как GaN, и во всем мире проводятся исследования для дальнейшего улучшения свойств полупроводника (Положенцев, 2010). Известны исследования по контролю непреднамеренную проводимость n-типа и достичь проводимости р-типа — такие известные темы исследований. Другие подходы, такие как расчеты из первых принципов, основанные на теории функционала плотности (DFT), носят теоретический характер и, тем не менее, полезны для глубокого понимания роли собственных точечных дефектов и примесей в непреднамеренной проводимости n-типа в ZnO. Акцепторное легирование в ZnO, которое приведет к стабильному р-типу, еще недостаточно изучено (Гременок и др. 2009: 59).

Было отмечено, что широкое применение ZnO в электронных устройствах ограничивается отсутствием надлежащего контроля за его электропроводностью. Контролировать проводимость в ZnO можно с

помощью создания запрещенной зоны. Введение малых концентраций собственных точечных дефектов и примесей может существенно влиять на электрические, структурные, оптические и морфологические свойства полупроводников. Таким образом, понимание роли собственных точечных дефектов (то есть вакансий, междоузлий и антиузлов) и включения примесей (легирования) является ключом к управлению проводимостью в ZnO, что фактически изменяет ширину запрещенной зоны, тем самым улучшая его характеристики (Марончук и др. 2019:105).

Нами показаны исследование кристаллической структуры и фазовой стабильности ZnO и их применение для фотоэлектрического поля с использованием квантово-химического расчета. Нами реализуется квантово-химический метод расчета программного обеспечения VASP и Hyperchem. Приведены исследования оптимизированных кристаллических структур, полные энергии и фазовая стабильность для неорганического соединения ZnO.

Методы и материалы. Расчеты DFT были выполнены методом псевдопотенциальной плоской волны с использованием кода VASP. Нами были использованы спин-поляризованное приближение обобщенного градиента (GGA), реализованное Perdew, Burke и Ernzerhof для обменно-корреляционного функционала энергии. K – расстояние, параметр был установлен на $0,2 \text{ \AA}^{-1}$. Для исключения ошибки Пуля, параметры решетки а оптимизацию позиций атомов (ISIF = 2). Максимальная сила после оптимизации составила менее $0,05 \text{ эВ/\AA}$. Все расчеты производились с помощью программного пакета SIMAN, VASP и HyperChem которые позволяют выполнять расчеты в высокопроизводительным способом (Аксенов и др. 2018: 449).

Фазовая стабильность кристаллов ZnO. Как указывалось выше, в этом разделе были проиллюстрированы квантово-химические свойства, такие как оптимизированные кристаллические структуры, энергии и другие. Оптимизированная структура гексагональных и гранецентрированных кубических кристаллов ZnO показана на рисунке 1.

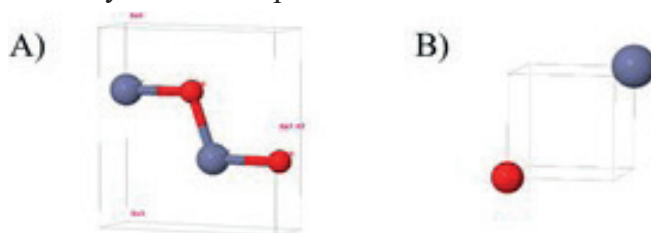


Рисунок 1. Оптимизированные структуры для А) гексагональной и В) гранецентрированной кубической ячейки ZnO (VASP).

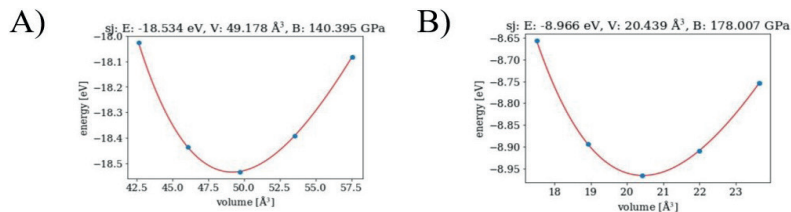


Рисунок 2. Энергии для оптимизированных структур гексагональной (А) и гранецентрированной кубической (В) ячейки на основе ZnO.

Энергии оптимизации для гексагональных и гранецентрированных кубических кристаллов ZnO показаны на рисунке 2. Отсюда мы можем отметить, что значение энергии для оптимизированной структуры гексагонального кристалла ZnO составляет -18.53 эВ. Кроме того, мы также можем отметить, что значение энергии для оптимизированной структуры гранецентрированной кубического кристалла ZnO составляет -8.96 эВ.

Фазовая стабильность кристаллов Sb_2Se_3 . Как указывалось выше, в этом разделе были проиллюстрированы квантово-химические свойства, такие как оптимизированные кристаллические структуры, энергии и другие.

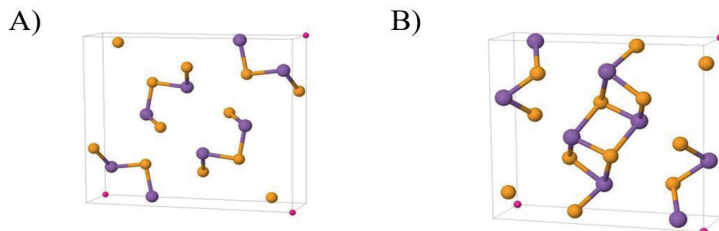


Рисунок 3. Оптимизированные структуры для А) гексагональной и В) гранецентрированной кубической ячейки Sb_2Se_3 .

Оптимизированная структура гексагональных и гранецентрированных кубических кристаллов Sb_2Se_3 показана на рисунке 3.

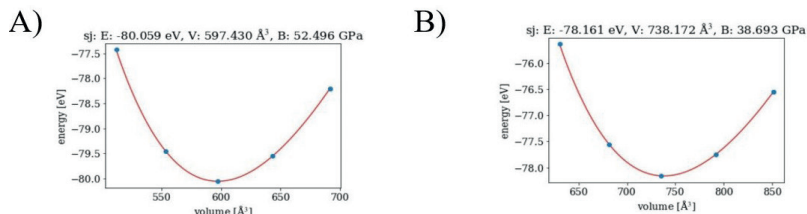


Рисунок 4. Энергии для оптимизированных структур гексагональной и гранецентрированной кубической ячейки на основе Sb_2Se_3 .

Энергии оптимизации для гексагональных и гранецентрированных кубических кристаллов Sb_2Se_3 показаны на рисунке 4. Отсюда мы можем отметить, что значение энергии для оптимизированной структуры гексагонального кристалла Sb_2Se_3 составляет 80.05- эВ. Кроме того, мы также можем отметить, что значение энергии для оптимизированной структуры гранецентрированной кубического кристалла Sb_2Se_3 составляет -78.16 эВ.

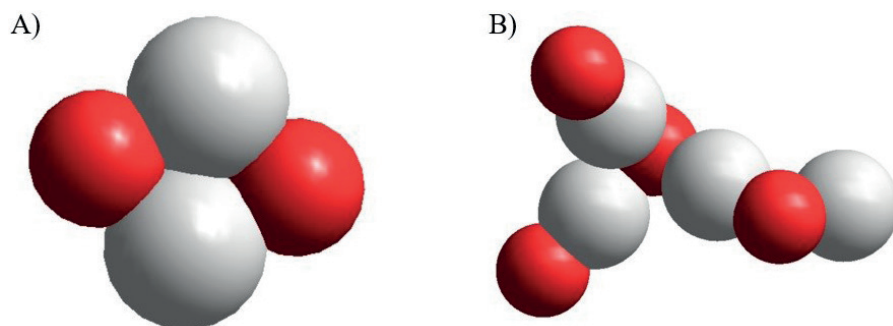


Рисунок 5. Оптимизированные структуры для А) гексагональной и В) гранецентрированной кубической ячейки ZnO (HyperChem).

Модель ZnO рассматривается с искажением и полярностью гексагональной и гранецентрированной кубической молекул ZnO. Для этого поведения структурная оптимизация, показанная на Рисунке 1 (А) для шестиугольного типа, (В) для гранецентрированного кубического типа.

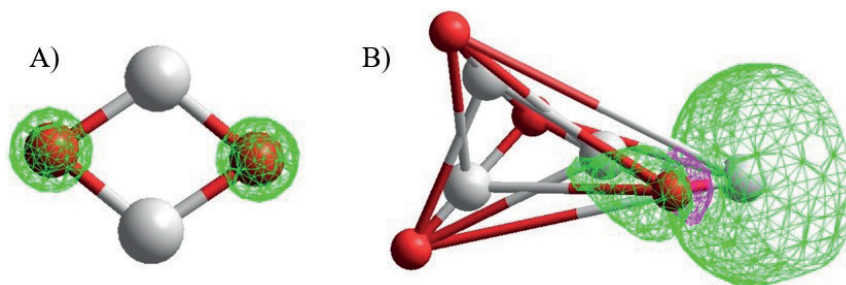


Рисунок 6. Молекулярная электростатическая карта для А) гексагональной и В) гранецентрированной кубической ячейки ZnO (HyperChem).

Молекулярная электростатическая карта для гексоганальной и гранецентрированной структур ZnO показана на рисунке 6А, и 6В.

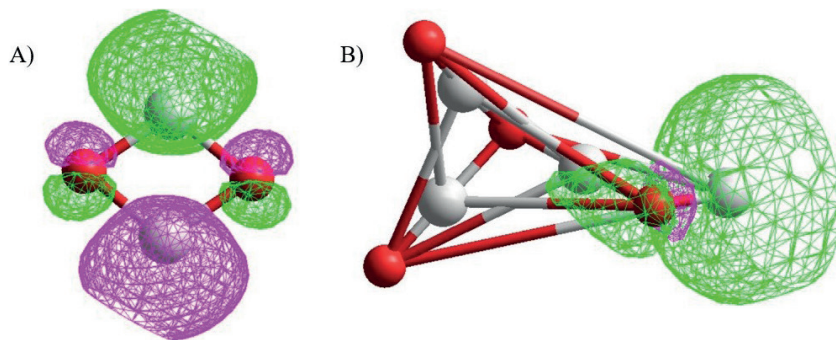


Рисунок 7. Высшая занятая молекулярная орбиталь для А) гексагональной и В) гранецентрированной кубической ячейки ZnO (HyperChem).

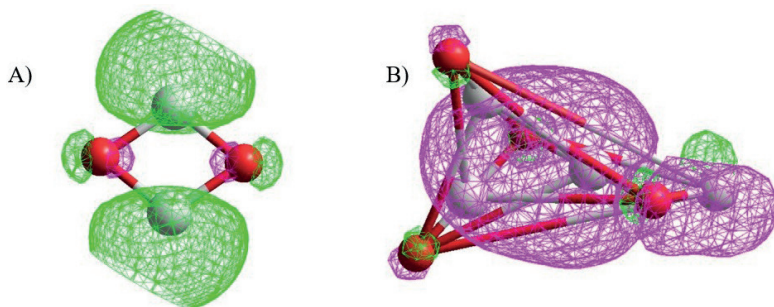


Рисунок 8. Самая нижняя незанятая молекулярная орбиталь А) гексагональной и В) гранецентрированной кубической ячейки ZnO (HyperChem).

Самая высокая занятая молекулярная орбиталь и самая низкая незанятая молекулярная орбиталь для гексагональной и гранецентрированной структур ZnO показаны на рисунках 7 и 8.

Обсуждение. В нашей работе подробно были изучены оптимизированные структуры и энергии для кристаллической структуры ZnO, как это видно на рисунках 1 и 2. Из рисунка 2 мы можем отметить, что гексагональная структура кристалла ZnO более стабильна, чем гранецентрированная кубическая структура ZnO.

В нашей второй работе мы подробно изучили оптимизированные структуры и энергии для кристаллической структуры Sb_2Se_3 , как это видно на рисунках 3 и 4. Из рисунка 3 мы можем отметить, что гексагональная структура кристалла Sb_2Se_3 более стабильна, чем гранецентрированная кубическая структура Sb_2Se_3 .

Заключение. Кристаллические свойства ZnO и Sb_2Se_3 были подробно исследованы. Результат компьютерного исследования показал, что гранецентрированная кубическая структура кристалла ZnO более стабильна, чем гексагональная структура кристалла ZnO. Это

иллюстрирует возможную фазовую нестабильность ZnO из-за границентрированной кубической кристаллической структуры.

Результат компьютерного исследования показал, что границентрированная кубическая структура кристалла Sb_2Se_3 более стабильна, чем гексагональная структура кристалла Sb_2Se_3 . Это иллюстрирует возможную фазовую нестабильность Sb_2Se_3 из-за границентрированной кубической кристаллической структуры. Это исследование может быть полезным для разработки лучшего материала для фотогальванических применений.

***Благодарность.** Данное исследование было профинансировано Комитетом науки Министерства образования и науки Республики Казахстан по программе № AP09260940 «Оптимизация структуры тонких плёнок для изготовления солнечных элементов на гибкой подложке».*

Information about authors:

Kemelbekova Ainagul – assistant at the Satbayev University, «Institute of Physics and Technology», e-mail: a.kemelbekova@mail.ru; ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-4813-8490> +77473927254;

Shongalova Aigul – researcher at the «Institute of Physics and Technology», Satpaev University, e-mail: shongalova.aigul@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7352-9007>;

Shegebay Saltanat – junior researcher at the «Institute of Physics and Technology», Satpaev University, e-mail: salta2597@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-0518-8140>;

Karibayev Mirat – junior researcher at the «Institute of Physics and Technology», Satpaev University, e-mail: kz_mirat_kz@mail.ru; ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-2513-9987>;

Zhassulan Sailau – PhD student of KazNU, e-mail: sailau.online@gmail.com; ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-5222-6827>;

Serikkanov Abay – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Director at the «Institute of Physics and Technology», e-mail: a.serikkanov@satbayev.university ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-6817-9586>.

ЛИТЕРАТУРА:

Зырянов В.В. Механохимический синтез, фазовый состав и свойства сегнетокерамики на основе РЬ (7п 1/3 МБ2/з) Оз. // Неорганические материалы. – 2006. – 42(1). – 94-100 с.

Дроздов К.А., Крылов И.В., Чижов А.С., Румянцева М.Н., Рябова Л.И., Хохлов Д.Р. Оптически индуцированный зарядовый обмен в композитных структурах на основе ZnO с внедренными нанокристаллами CsPbBr // Физика и техника полупроводников. – 2019. – 53(6). – 824-828 с.

Павлюк А.С., Бабкина А.Н. Исследование температурной зависимости оптических свойств борогерманатного стекла с нанокристаллами перовскитов. // *In Стекло: наука и практика.* – 2021. – 120-122 с.

Калякин А.С., Фадеев Г.И., Волков А.Н., Горбова Е.В. & Демин А.К. Электроды для потенциометрических твердоэлектролитных сенсоров с неразделенными газовыми пространствами для измерения содержания горючих газов CO и H₂ в газовых смесях // *Электрохимия.* – 2015. – 51(2). – 162 с.

Абрашова Е.В. Золь-гель синтез и анализ нанопористых фрактальных композиций на основе системы ZnO-SnO₂-SiO₂ для газочувствительных элементов // *СПбГЭТУ «ЛЭТИ», СПб.* – 2016.

Майоров В.Г., Николаев А.И., Зильберман Б.Я., Щербаков В.М. Утилизация сбросных растворов в технологии перовскита // *Журнал прикладной химии.* – 2007. – 80(6). – 899-902 с.

Егорова А.В., Белова К.Г., Анимича И.Е. Новый кислород-дефицитный перовскит La (Al 0.5 Zn 0.5) O 2.75: синтез, структура, транспортные свойства // *Журнал физической химии.* – 2020. – 94(12). – 1842-1848 с.

Ляшенко Т.Г. Подавление фото-и электроиндуцированной фазовой нестабильности в свинцовогогалогенидных перовскитах для разработки светоизлучающих устройств (Doctoral dissertation). – (2020).

Павлов С.С., Макаров Н.А. Золь-гель синтез материалов в системе ZnO-SnO₂ // *Успехи в химии и химической технологии.* – 2021. – 35(4). – 76-78 с.

Коротков Л.Н., Толстых Н.А., Короткова Т.Н., Емельянов Н.А., Еремина Р.М. Магнитный отклик субмикронных титаната бария и титаната стронция // *XXII Всероссийская конференция по физике сегнетоэлектриков (ВКС-XXII).* – 2021. – 34.

Гурин С.А., Печерская Е.А., Зинченко Т.О., Фимин А.В., Николаев К.О. Конструкции и технологические режимы формирования чувствительных элементов микроэлектронных датчиков быстропеременного и статического давления // *Измерение. Мониторинг. Управление. Контроль.* – 2019. – (3(29)). – 111-118 с.

Положенцев О.Е. // Локальная атомная и электронная структура некоторых разбавленных магнитных полупроводников на основе оксидов (Doctoral dissertation, Южный федеральный университет). – 2010.

Гременок В.Ф., Тиванов М.С., Залесский В.Б. Солнечные элементы на основе полупроводниковых материалов. // *Альтернативная энергетика и экология.* – 2009. – 1. – 59-124 с.

Марончук И.И., Санникович Д.Д., Мирончук В.И. Солнечные элементы: современное состояние и перспективы развития // *Энергетика. Известия высших учебных заведений и энергетических объединений СНГ.* – 2019. – 62(2). – 105-123 с.

Аксенов и др. Понимание миграционных барьеров для введения одновалентных ионов в катодные материалы на основе оксидов переходных металлов и фосфатов: исследование DFT // *Comp. Mat. Science.* – 2018. – 154. – 449-458 с.

REFERENCES:

Zyryanov B.V. Mechanochemical synthesis, phase composition and properties of the Pb (7n 1/3 Mb₂/z) Oz-based segmented ceramics. // *Inorganic Materials.* - 2006. - 42(1). - 94-100 с. (in Russ).

Drozdov K.A., Krylov I.V., Chizhov A.S., Romyantseva M.N., Ryabova L.I., Khokhlov D.R. Optically induced charge exchange in composite structures based on ZnO with

embedded CsPbBr nanocrystals // *Semiconductor Physics and Technology*. - 2019. - 53(6). - 824-828 c. (in Russ).

Pavlyuk A.S., Babkina A.N. Investigation of the temperature dependence of the optical properties of borogermanate glass with perovskite nanocrystals. // *In Glass: Science and Practice*. - 2021. - 120-122 c. (GlasSP2021) (in Russ).

Kalyakin A.S., Fadeev G.I., Volkov A.N., Gorbova E.V. & Demin A.K. Electrodes for potentiometric solid electrolyte sensors with undivided gas spaces for measuring the content of combustible gases CO and H₂ in gas mixtures // *Electrochemistry*. - 2015. - 51(2). - 162 c. (in Russ).

Abrashova E.V. Sol-gel synthesis and analysis of nanoporous fractal compositions based on ZnO-SnO₂-SiO₂ system for gas-sensitive elements // *SPbGETU "LETI", SPb*. - 2016. (in Russ).

Mayorov V.G., Nikolaev A.I., Zilberman B.Y., Shcherbakov V.M. Disposal of discharge solutions in perovskite technology // *Journal of Applied Chemistry*. - 2007. - 80(6). - 899-902 c. (in Russ).

Egorova A.V., Belova K.G., Animitsa I.E. New oxygen-deficient perovskite La (Al 0.5 Zn 0.5) O 2.75: synthesis, structure, transport properties // *Journal of Physical Chemistry*. - 2020. - 94(12). - 1842-1848 c. (in Russ).

Lyashenko T.G. Suppression of photo- and electro-induced phase instability in lead-halide perovskites for development of light-emitting devices (Doctoral dissertation). - (2020). (in Russ).

Pavlov S.S., Makarov N.A. SOL-GEL SYNTHESIS OF MATERIALS IN ZnO-SnO₂ SYSTEM // *Advances in Chemistry and Chemical Technology*. - 2021. - 35(4). - 76-78 c. (in Russ).

Korotkov L.N., Tolstykh N.A., Korotkova T.N., Emelyanov N.A., Eremina R.M. Magnetic response of submicron barium titanate and strontium titanate // *XXII All-Russian Conference on Physics of Ferroelectrics (VKS-XXII)*. - 2021. - 34. (in Russ).

Gurin S.A., Pecherskaya E.A., Zinchenko T.O., Fimin A.V., Nikolaev K.O. Designs and technological modes of formation of sensitive elements of microelectronic sensors of rapidly variable and static pressure // *Measurement. Monitoring. Control. Control*. - 2019. - (3(29)). - 111-118 c. (in Russ).

Polozhentsev O.E. // *Local atomic and electronic structure of some dilute oxide-based magnetic semiconductors (Doctoral dissertation, Southern Federal University)*. - 2010. (in Russ).

Gremenok V.F., Tivanov M.S., Zaleskii V.B. Solar cells based on semiconductor materials. // *Alternative Energy and Ecology*. -2009. - 1. - 59-124 c. (in Russ).

Maronchuk I.I., Sanikovich D.D., Mironchuk V.I. Solar cells: current state and prospects for development // *Energy. Izvestiya vysokikh izuchenii i energeticheskikh soedinenii SSSR [Proceedings of Higher Educational Institutions and Energy Associations of the CIS]*. - 2019. - 62(2). - 105-123 c. (in Russ).

Aksenov et al. Understanding migration barriers for introducing single-valent ions into cathode materials based on transition metal and phosphate oxides: a DFT study // *Comp. Mat. Science*. -2018. - 154. - 449-458 c. (in Russ).

ПАМЯТИ

АНДРЕЯ ЛЕОНИДОВИЧА КУНИЦЫНА

19 января 2022 г. на 86 году жизни скончался известный ученый, член Национального комитета по теоретической и прикладной механике РФ профессор Андрей Леонидович Куницын.

Куницын А.Л. родился 26 июля 1936 г. в Саратове. Там же прошли его детские годы. Папа был врачом. Он погиб на фронте. Все заботы о сыне легли на плечи мамы. Род Куницыных известен с конца 18-го века. Кира Владимировна поощряла тягу сына к знаниям и спорту, воспитывала высокопорядочного юношу, отличающегося исключительной честностью. Школу Андрей закончил с золотой медалью на Сахалине, куда его мама уезжала работать. Интерес к полетам привел Андрея Куницына в Московский авиационный институт, куда он поступил в 1954 г.

Приоритетной в обществе в то время была космическая тематика. Лучших выпускников вузов распределяли в соответствующие ОКБ. Так в 1960 г. А.Л. Куницын начал работать специалистом по траекториям спутников и других космических аппаратов. Интерес к проекту самолета, летающего на высоте ближнего космоса, привел его к мысли о необходимости дальнейшей теоретической подготовки в аспирантуре. Аспирантуру Куницын А.Л. проходил под руководством Г.В. Каменкова – ректора МАИ, одного из организаторов Казанского авиационного института. Каменков Г.В. существенно развил теорию устойчивости Ляпунова в критических случаях. При этом за рамками рассмотрения остались случаи внутреннего резонанса – наличия целочисленного соотношения между частотами линейной системы.

Научные интересы А.Л. Куницына на много лет стали связаны с теорией внутреннего резонанса и её приложениями в задачах механики. В 70-х годах прошлого века началось интенсивное изучение систем, которые со времени создания А.М. Ляпуновым теории устойчивости вызывали принципиальные трудности. Тем не менее, такие системы имеют важное значение в объяснении резонансных эффектов, встречающихся как в природе, так и в математических моделях. Куницын А.Л. получил результаты для наиболее важных случаев

резонанса низших порядков для автономных и периодических систем общего вида. Исследования подытожены в монографии «Некоторые задачи устойчивости нелинейных резонансных систем» (совместно с Ташимовым Л.Т.) и обзоре «Устойчивость в резонансных случаях» (совместно с Маркеевым А.П.). Сегодня в научном мире имя Куницына А.Л. связывают с разработкой теории устойчивости резонансных систем общего (негамильтонового) вида.

Исследования Куницына А.Л. всегда были связаны с небесной механикой и космонавтикой. Его работы по геостационарному спутнику, треугольным точкам либрации неограниченной задачи трех тел, стабилизации спутника в коллинеарных точках либрации в системе Земля-Луна, движению тела в гравитационно-репульсивном поле (фотогравитационная задача трех тел) хорошо известны в научном мире. В неограниченной задаче трех тел Куницыным А.Л. дана геометрическая интерпретация для треугольных точек либрации в нелинейной постановке и получены результаты по устойчивости. В фотогравитационной круговой задаче трех тел с одним и двумя излучающими телами им (совместно с Турешбаевым А.Т.) удалось описать все устойчивые множества точек либрации. В звездной динамике он предложил модель, которая впоследствии позволила предсказывать существование гигантских облачных скоплений микрочастиц. А.Л. Куницын был признанным авторитетом по фотогравитационной небесной механике. Его обзор по фотогравитационной задаче трех тел (совместно с Поляховой Е.Н.) не теряет актуальности и поныне. Работы А.Л. Куницына отличаются ясностью постановки задачи, аналитическая глубина и изящество геометрической интерпретации.

Он автор и соавтор более 100 работ, включая 3 монографии. В 1966 г. Куницын А.Л. был приглашен проф. Шевченко К.Н. в МИФИ на кафедру, где начали готовить специалистов по космической тематике. Здесь во всей полноте проявился педагогический талант Андрея Леонидовича, увлекший наукой Медведева С.В., Красильникова П.С., Пережогина А.А., Тхай В.Н. – студентов старших курсов. В это же время кандидатскую диссертацию защитил Мырзабеков Т. – первый ученик из Казахстана. В 1977 г. А.Л. Куницын вернулся в альма-матер на кафедру теоретической механики, где работал профессором до ухода на пенсию. Докторскую диссертацию он защитил в 1980 г. Звание профессора ему присвоено в 1983 г. В 2006 г. избран в Национальный комитет по теоретической и прикладной механике РФ. Филиал МАИ в г. Ленинск привлекает талантливую молодежь из

Казахстана. В результате А.Л. Куницыным создана научная школа в Казахстане. Всего под руководством А.Л. Куницына в МАИ защитились 8 ученых из Казахстана. Видный представитель школы Ташимов Л.Т. стал доктором наук, профессором, академиком НАН РК (скончался в 2021 г). В студенческие годы А.Л. Куницын был известен как чемпион Москвы по штанге, сейчас в youtube <https://youtu.be/WJh7Nrwwq68> слушают песню на его стихи. Он любил песни, навеянные широкими просторами Волги, пел романсы. Он полюбил казахскую культуру.

П.С. Красильников (профессор МАИ), А.П. Маркеев (профессор МФТИ), С.В. Медведев (профессор МАИ), Е.Н. Поляхова (профессор СПбГУ), В.Н. Тхай (главный научный сотрудник ИПУ РАН, профессор), А.А. Пережогин (профессор МАИ), А.С. Муратов (профессор ЮКУ), А.Т. Турешбаев (профессор КУ им. Коркыт Ата), А.А. Туякбаев (профессор КУ им. Коркыт Ата).

МАЗМҰНЫ

БИОТЕХНОЛОГИЯ

А.Н. Аралбаев, З.Ж. Сейдахметова, Н.К. Аралбай
КОЧИ ҚАТЫРАНЫ (*CRAMBE KOTSCHYANA*) ТАМЫРЛАРЫНЫҢ
ТАҒАМДЫҚ ЖӘНЕ БИОЛОГИЯЛЫҚ ҚҰНДЫЛЫҒЫН БАҒАЛАУ.....5

**Н.М. Ибишева, А.С. Нурмаханова, С.Ж. Атабаева, Б.М. Тыныбеков,
Э.С. Бөрібай**
ОҢТҮСТІК БАЛҚАШ ӨҢІРІНІҢ ТОПЫРАҚ ЖАМЫЛҒЫСЫНЫҢ
ҚАЗІРГІ ЖАҒДАЙЫ.....21

**А.М. Қожахметова, Қ.Т. Жантасов, Н.Д. Төрбай, М.Т. Байжанова,
А.Б. Сейтханова**
ӨНДІРІСТІҢ ҚАТТЫ ҚАЛДЫҚТАРЫНАН КЕШЕНДІ ТЫҢАЙТҚЫШТАР
АЛУ ТЕХНОЛОГИЯСЫН ӨЗІРЛЕУ.....40

**А. Кохметова, А. Малышева, М. Кумарбаева, А. Болатбекова,
А. Кохметова**
БИДАЙДЫҢ РЕКОМБИНАНТТЫ ИНБРИДТІ ЛИНИЯЛАРЫНЫҢ
ҚОҢЫР ТАТҚА ТӨЗІМДІЛІГІН БАҒАЛАУ.....48

А. Нурдаулетова, Г.И. Байгазиева, Н.Б. Батырбаева
ГИДРОБИОНТ ТҰНБАЛАРЫН ҚОЛДАНУ АРҚЫЛЫ АРАҚТЫҢ
БИОЛОГИЯЛЫҚ БЕЛСЕНДІЛІГІН АРТТЫРУ.....61

**К.Ж. Тлеуова, А.У. Шингисов, С.С. Ветохин, А.К. Тулекбаева,
А.Е. Отуншиева**
ҚЫШҚЫЛ СҮТ ӨНІМДЕРІН АЛУ ҮШІН ТАҒАЙЫНДАЛҒАН СҮТ
ШИКІЗАТЫН ҚҰРАМДАСТЫРУДЫҢ ТИІМДІ ҚАТЫНАСЫН
ТАҢДАУ.....75

Ш.Г. Чильманбетов, А.К. Кекибаева
СУСЫНДАР ӨНДІРІСІНДЕ ҚОЛДАНУ ҮШІН ШЫРҒАНАҚТАН
ӨЗДІГІНЕН АҚҚАН ШЫРЫННЫҢ САПАСЫН ЗЕРТТЕУ.....88

ФИЗИКА

**Н.Н. Жантурина, З.К. Аймаганбетова, В. Дроздовски, Л. Таймуратова,
А. Сейтмуратов**
КВr ЖӘНЕ КСІ КРИСТАЛДАРЫНДАҒЫ ТЕРМОСТИМУЛЬДЕНГЕН
ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯНЫҢ ҚАРМАУ ОРТАЛЫҚТАРЫНЫҢ
ПАРАМЕТРЛЕРІН АНЫҚТАУ.....99

А. Жумагельдина, Қ. Есмаханова
ЫҒЫСҚАН ЛОКАЛДЫ ЕМЕС СЫЗЫҚСЫЗ ШРЕДИНГЕР ЖӘНЕ
МАКСВЕЛЛ-БЛОХ ТЕНДЕУІ: ДАРБУ ТҮРЛЕНДІРУІ ЖӘНЕ
ШЕШІМІ.....108

**А.Е. Кемелбекова, А.Қ. Шонғалова, С.Қ. Шегебай, М. Қарибаев,
Ж. Сайлау, А.С. Серикканов**
ZnO КРИСТАЛДЫҚ ҚҰРЫЛЫМЫНА СКРИНИНГТІК ЕСЕПТЕУЛЕР
ЖҮРГІЗУ ЖӘНЕ ОНЫҢ ПЕРОВСКИТТИ КҮН ЭЛЕМЕНТІНЕ
ҚОЛДАНЫЛУЫН ЗЕРТТЕУ.....122

**С. Сырлыбекқызы, А.К. Курбаниязов, С.Е. Койбакова,
Н.Ш. Джаналиева, А.Ш. Аккенжеева, А.Е. Жидебаева**
АҚТАУ КЕНТІ – "ҚҰРЫҚ" ӨК ҚИМАСЫНДАҒЫ ОРТА КАСПИЙДЕГІ
ТЕҢІЗ АҒЫСТАРЫ ТУРАЛЫ ЖАҢА ДЕРЕКТЕР ЖӘНЕ КЛИМАТТЫҚ
ЖАҒДАЙЛАРҒА БАЙЛАНЫСТЫ ОЛАРДЫҢ ӨЗГЕРГІШТІГІ.....134

И. Т. Султанғалиева, Р.Р. Бейсенова
ҰЯЛЫ ТЕЛЕФОНДАРДЫҢ ЭЛЕКТРОМАГНИТТІК СӘУЛЕЛЕНУДІҢ
ГИДРОБИОНТТАРҒА ӘСЕРІН БИОТЕСТІЛЕУ ӘДІСІМЕН
БАҒАЛАУ.....146

ҒАЛЫМДЫ ЕСКЕ АЛУ

Андрей Леонидович Куницынды еске Алу.....158

СОДЕРЖАНИЕ

БИОТЕХНОЛОГИЯ

А.Н. Аралбаев, З.Ж. Сейдахметова, Н.К. Аралбай
ОЦЕНКА ПИЩЕВОЙ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ ЦЕННОСТИ КОРНЕЙ
КАТРАНА КОЧИ (*CRAMBE KOTSCHYANA*).....5

**Н.М. Ибишева, А.С. Нурмаханова, С.Ж. Атабаева, Б.М. Тыныбеков,
Э.С. Бөрібай**
СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ПОЧВЕННОГО ПОКРОВА ЮЖНОГО
ПРИБАЛХАШЬЯ.....21

**А.М. Кожаметова, К.Т. Жантасов, Н.Д. Торейбай, М.Т. Байжанова,
А.Б. Сейтханова**
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ КОМПЛЕКСНОГО
УДОБРЕНИЯ ИЗ ТВЕРДЫХ ОТХОДОВ ПРОИЗВОДСТВА.....40

А. Кохметова, А. Малышева, М. Кумарбаева, Болатбекова, А. Кохметова
ОЦЕНКА РЕКОМБИНАНТНЫХ ИНБРЕДНЫХ ЛИНИЙ ПШЕНИЦЫ
НА УСТОЙЧИВОСТЬ К БУРОЙ РЖАВЧИНЕ.....48

А. Нурдаулетова, Г.И. Байгазиева, Н.Б. Батырбаева
ПОВЫШЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ВОДКИ
ПРИ ПРИМЕНЕНИИ НАСТОЕВ ГИДРОБИОНТОВ.....61

**К.Ж. Тлеуова, А.У. Шингисов, С.С. Ветохин, А.К. Тулекбаева,
А.Е. Отуншиева**
ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОГО СООТНОШЕНИЯ КОМБИНИРОВАНИЯ
МОЛОЧНОГО СЫРЬЯ, ПРЕДНАЗНАЧЕННОГО ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ
КИСЛОМОЛОЧНОГО ПРОДУКТА.....75

Ш.Г. Чильманбетов, А.К. Кекибаева
ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕСТВА СОКА-САМОТЕКА ОБЛЕПИХИ
ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ПРОИЗВОДСТВЕ НАПИТКОВ.....88

ФИЗИКА

**Н. Жантурина, З. Аймаганбетова, В. Дроздовский, Л. Таймуратова,
А. Сейтмуратов**
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЦЕНТРОВ ЗАХВАТА
ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ
В КРИСТАЛЛАХ KBr И KCl99

А. Жумагельдина, К. Есмаханова СМЕЩЕННОЕ НЕЛОКАЛЬНОЕ НЕЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА И МАКСВЕЛЛА-БЛОХА: ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ДАРБУ И РЕШЕНИЕ.....	108
А.Е. Кемелбекова А.Қ. Шонғалова, С.Қ. Шегебай, М. Кармбаев, Ж. Сайлау, А.С. Серикканов ПРОВЕДЕНИЕ СКРИНИНГОВЫХ РАСЧЕТОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ZnO И ИЗУЧЕНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ В ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ.....	122
С. Сырлыбеккызы, А.К. Курбаниязов, С.Е. Койбакова, Н.Ш. Джаналиева, А.Ш. Аккенжеева, А.Е. Жидебаева НОВЫЕ ДАННЫЕ О МОРСКИХ ТЕЧЕНИЯХ В СРЕДНЕМ КАСПИИ НА РАЗРЕЗЕ п. АКТАУ-ПК «КУРЫК» И ИХ ИЗМЕНЧИВОСТИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ КЛИМАТИЧЕСКИХ УСЛОВИЙ.....	134
И. Т. Султангалиева, Р. Р. Бейсенова ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ИЗЛУЧЕНИЙ СОТОВЫХ ТЕЛЕФОНОВ НА ГИДРОБИОНТЫ МЕТОДОМ БИОТЕСТИРОВАНИЯ.....	146
ПАМЯТИ УЧЕНОГО	
Памяти Андрея Леонидовича Куницына.....	158

CONTENTS

BIOTECHNOLOGY

- A.N. Aralbayev, Z.Zh. Seidakhmetova, N.K. Aralbay**
THE ESTIMATION OF *CRAMBE KOTSCHYANA* ROOTS NUTRITIONAL
AND BIOLOGICAL VALUE.....5
- N.M. Ibisheva, A.S. Nurmahanova, S.Zh., Atabayeva, B.M. Tynybekov,
E.S. Boribay**
THE CURRENT STATE OF THE SOIL COVER OF THE SOUTHERN
BALKHASH REGION.....21
- A.M. Kozhakhmetova, K.T. Zhantasov, N.D. Torebay, M.T. Baizhanova,
A. B. Seitkhanova**
DEVELOPMENT OF TECHNOLOGY FOR OBTAINING INTEGRATED
FERTILIZER FROM SOLID WASTE OF PRODUCTION.....40
- A. Kokhmetova, A. Malysheva, M. Kumarbayeva, A. Bolatbekova,
A. Kokhmetova**
EVALUATION OF THE WHEAT RECOMBINANT INBRED LINES
FOR RESISTANCE TO LEAF RUST.....48
- A. Nurdauletova, G.I. Baigaziev, N.B. Batyrbaeva**
INCREASING THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF VODKA WITH
THE APPLICATION OF HYDROBIONTS INFUSIONS.....61
- K.Zh. Tleuova, A.U. Shingisov, S.S. Vetokhin, A.K. Tulekbayeva,
A.E. Otunshieva**
SELECTION OF THE OPTIMAL RATIO OF COMBINATION OF MILK RAW
MATERIALS DESIGNED FOR OBTAINING A SOUR MILK PRODUCT.....75
- Sh.G. Chilmanbetov, A.K. Kekilbaeva**
RESEARCH OF THE QUALITY OF SEA BUCKTHORN JUICE FOR
APPLICATION IN THE PRODUCTION OF BEVERAGES.....88

PHYSICAL SCIENCES

- N. Zhanturina, Z. Aimaganbetova, W. Drozdowski, L. Taimuratova,
A. Seitmuratov**
DETERMINATION OF THE PARAMETERS OF CAPTURE CENTERS OF
THERMALLY STIMULATED LUMINESCENCE IN KBr AND
KCl CRYSTALS.....99

A. Zhumageldina, K. Yesmakhanova SHIFTED NONLOCAL NONLINEAR SCHRÖDINGER AND MAXWELL- BLOCH EQUATION: DARBOUX TRANSFORMATION AND SOLUTION.....	108
A.E. Kemelbekova, A.K. Shongalova, S.K. Shegebay, M. Karibaev, J. Sailau, A.S. Serikanov COMPUTATIONAL SCREENING OF ZnO CRYSTAL STRUCTURE FOR THE PEROVSKITE SOLAR CELL APPLICATION.....	122
S. Syrlybekkyzy, A.K. Kurbaniyazov, S. Koibakova, N.Sh. Janaliyeva, . Akkenzheyeva, A. Zhidebaeva NEW DATA ON SEA CURRENTS IN THE MIDDLE CASPIAN SEA IN THE SECTION OF AKTAU-PK "KURYK" AND THEIR VARIABILITY DEPENDING ON CLIMATIC CONDITIONS.....	134
I.T. Sultangaliyeva, R.R. Beisenova ASSESSMENT OF THE EFFECT OF ELECTROMAGNETIC RADIATION FROM CELL PHONES ON HYDROBIONTS BY BIOTESTING.....	146

MEMORY OF SCIENTISTS

In memory of Andrey Leonidovich Kunitsyn.....	158
--	-----

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

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 National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the work described 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 National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan 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 originality detection service Cross Check <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 National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan 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>

Директор отдела издания научных журналов НАН РК *А. Ботанқызы*
Заместитель директор отдела издания научных журналов НАН РК *Р. Жәліқызы*

Редакторы: *М.С. Ахметова, Д.С. Аленов*

Верстка на компьютере *Г.Д. Жадырановой*

Подписано в печать 08.07.2022.

Формат 60x88¹/₈. Бумага офсетная. Печать - ризограф.

10,5 п.л. Тираж 300. Заказ 2.