

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

2023 • 3



ҚАЙЫРЫМДЫЛЫҚ ҚОРЫ

HALYK

CHARITY FOUNDATION

«ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫ» РҚБ
«ХАЛЫҚ» ЖҚ

БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ

РОО «НАЦИОНАЛЬНОЙ
АКАДЕМИИ НАУК РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН»
ЧФ «ХАЛЫҚ»

REPORTS

OF THE ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN
«Halyk» Private Foundation

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK



ЧФ «ХАЛЫҚ»

В 2016 году для развития и улучшения качества жизни казахстанцев был создан частный Благотворительный фонд «Халык». За годы своей деятельности на реализацию благотворительных проектов в областях образования и науки, социальной защиты, культуры, здравоохранения и спорта, Фонд выделил более 45 миллиардов тенге.

Особое внимание Благотворительный фонд «Халык» уделяет образовательным программам, считая это направление одним из ключевых в своей деятельности. Оказывая поддержку отечественному образованию, Фонд вносит свой посильный вклад в развитие качественного образования в Казахстане. Тем самым способствуя росту числа людей, способных менять жизнь в стране к лучшему – профессионалов в различных сферах, потенциальных лидеров и «великих умов». Одной из значимых инициатив фонда «Халык» в образовательной сфере стал проект *Ozgeris powered by Halyk Fund* – первый в стране бизнес-инкубатор для учащихся 9-11 классов, который помогает развивать необходимые в современном мире предпринимательские навыки. Так, на содействие малому бизнесу школьников было выделено более 200 грантов. Для поддержки талантливых и мотивированных детей Фонд неоднократно выделял гранты на обучение в Международной школе «Мирас» и в *Astana IT University*, а также помог казахстанским школьникам принять участие в престижном конкурсе «*USTEM Robotics*» в США. Авторские работы в рамках проекта «Тәлімгер», которому Фонд оказал поддержку, легли в основу учебной программы, учебников и учебно-методических книг по предмету «Основы предпринимательства и бизнеса», преподаваемого в 10-11 классах казахстанских школ и колледжей.

Помимо помощи школьникам, учащимся колледжей и студентам Фонд считает важным внести свой вклад в повышение квалификации педагогов, совершенствование их знаний и навыков, поскольку именно они являются проводниками знаний будущих поколений казахстанцев. При поддержке Фонда «Халык» в южной столице был организован ежегодный городской конкурс педагогов «*Almaty Digital Ustaz*».

Важной инициативой стал реализуемый проект по обучению основам финансовой грамотности преподавателей из восьми областей Казахстана, что должно оказать существенное влияние на воспитание финансовой грамотности и предпринимательского мышления у нового поколения граждан страны.

Необходимую помощь Фонд «Халык» оказывает и тем, кто особенно остро в ней нуждается. В рамках социальной защиты населения активно проводится работа по поддержке детей, оставшихся без родителей, детей и взрослых из социально уязвимых слоев населения, людей с ограниченными возможностями, а также обеспечению нуждающихся социальным жильем, строительству социально важных объектов, таких как детские сады, детские площадки и физкультурно-оздоровительные комплексы.

В копилку добрых дел Фонда «Халык» можно добавить оказание помощи детскому спорту, куда относится поддержка в развитии детского футбола и карате в нашей стране. Жизненно важную помощь Благотворительный фонд «Халык» оказал нашим соотечественникам во время недавней пандемии COVID-19. Тогда, в разгар тяжелой борьбы с коронавирусной инфекцией Фонд выделил свыше 11 миллиардов тенге на приобретение необходимого медицинского оборудования и дорогостоящих медицинских препаратов, автомобилей скорой медицинской помощи и средств защиты, адресную материальную помощь социально уязвимым слоям населения и денежные выплаты медицинским работникам.

В 2023 году наряду с другими проектами, нацеленными на повышение благосостояния казахстанских граждан Фонд решил уделить особое внимание науке, поскольку она является частью общественной культуры, а уровень ее развития определяет уровень развития государства.

Поддержка Фондом выпуска журналов Национальной Академии наук Республики Казахстан, которые входят в международные фонды Scopus и Wos и в которых публикуются статьи отечественных ученых, докторантов и магистрантов, а также научных сотрудников высших учебных заведений и научно-исследовательских институтов нашей страны является не менее значимым вкладом Фонда в развитие казахстанского общества.

**С уважением,
Благотворительный Фонд «Халык»!**

Б А С Р Е Д А К Т О Р :

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

Р Е Д А К Ц И Я Л Ы Қ А Л Қ А :

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 онтайландыру» кафедрасының меңгерушісі, (Санкт-Петербург, Ресей), Н = 14

ЛЮКШИН 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 Хамдар университетінің шығыс медицина факультеті, Шығыс медицинасы колледжінің профессоры, (Карачи, Пәкістан), Н = 21

ЩЕПЕТКИН 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

КАЛИМОЛДАЕВ Мақсат Нұрәліұлы, 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

ЖУСНОВ 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>

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

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

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

ЦЕЛЕТКИН 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

МАЛЫМ 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 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 Hemando, 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 Нургали Жабгаевич, 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, Казахстанско-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>

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>

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

ISSN 2224-5227

Volume 3. Number 347 (2023), 58–70

<https://doi.org/10.32014/2023.2518-1483.225>

UDK 539.194

© **A.Z. Tychengulova^{1,2*}, K.A. Katpayeva³, 2023**

¹Satpayev University, Almaty, Kazakhstan;

²Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan;

³Yassawi International Kazakh Turkish University, Turkestan, Kazakhstan.

E-mail: a.tychengulova@gmail.com

INVESTIGATION OF THE INITIAL STAGE OF PHOTOACTIVATION IN MN-BASED TRANSITION METAL CATALYSTS

Tychengulova Ailya Zhanatkyzy — PhD, senior research associate, Satpayev University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: a.tychengulova@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1849-1560>;

Katpayeva Karakoz Abdiseitovna — PhD, senior research associate, Satpayev University, Almaty, Kazakhstan. Senior Lecturer, Yassawi International Kazakh Turkish University, Turkestan, Kazakhstan

E-mail: karakoz_012@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4867-4974>.

Abstract. The process of photosynthesis is an important source of energy, efficiently converting sunlight into chemical energy for over 2.5 billion years. The most significant process of photosynthesis is the catalytic reaction of water splitting in PS II, which occurs during the oxidation and deprotonation of the Mn₄CaO₅ complex through five S₀–S₄ steps of the so-called Kok–Joliot cycle. In this work, we plan to study in detail the formation of oxo-bridges between Mn ions with acetate ligands, which is a model of a natural Mn catalyst. The chosen research strategy and approaches to studying the properties and electronic structure of Mn catalysts are due to the availability of high-resolution X-ray crystallographic data of apo-PS II and the lack of data on protons in the system and the mechanism of electron transfer associated with protons for the formation of oxo-bridges between metal ions as the initial stage of the photoactivation process. In addition, the theoretical study of apo-PS II and models of Mn catalysts by computational chemistry will help to rationalize and explain the conflicting results of experimental studies and bring clarity to the understanding of the mechanism of photoactivation. Photoelectrochemical devices for artificial photosynthesis that mimic biological systems are the big technological challenge of the 21st century as the most appropriate solution to the problem of energy resources. Since the self-assembly mechanism of a water oxidation catalyst is critical to its long-term stability and catalytic performance, the elucidation of such processes will greatly facilitate the practical implementation of artificial

photosynthesis devices. Ultimately, these technologies will make it possible to store solar energy in an environmentally friendly way.

Keywords: photosynthesis, PSII, photoactivation, transition metal complexes, water-oxidizing complex, density functional theory, computational chemistry, synthetic catalyst

Acknowledgement. *This research has been funded by the Science Committee of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP09058000).*

© А.Ж. Тыченгулова^{1,2*}, К.А. Катпаева³, 2023

¹Қ.И. Сәтпаев атындағы Қазақ Ұлттық Техникалық Зерттеу Университеті, Алматы, Қазақстан;

²В.Г.Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан;

³Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті, Түркістан, Қазақстан.

E-mail: a.tychengulova@gmail.com

MN НЕГІЗІНДЕ ӨТПЕЛІ МЕТАЛДАР КАТАЛИЗАТОРЛАРЫНДАҒЫ ФОТОАКТИВАЦИЯНЫҢ БАСТАПҚЫ КЕЗЕНІҢ ЗЕРТТЕУ

Тыченгулова Алия Жанатқызы — PhD, Аға ғылыми қызметкер. Қ.И. Сәтпаев атындағы Қазақ Ұлттық Зерттеу Университеті, Алматы, Қазақстан

E-mail: a.tychengulova@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1849-1560>;

Катпаева Қаракөз Абдисейтовна — PhD, Аға ғылыми қызметкер. Қ.И. Сәтпаев атындағы Қазақ Ұлттық Зерттеу Университеті, Алматы, Қазақстан. Аға оқытушы, Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті, Түркістан, Қазақстан

E-mail: karakoz_012@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4867-4974>.

Аннотация. Фотосинтез процесі күн сәулесін 2,5 миллиард жылдан астам уақыт бойы химиялық энергияға тиімді түрлендіретін маңызды энергия көзі болып табылады. Фотосинтездің ең маңызды процесі - бұл ФЖ II судың бөлінуінің каталитикалық реакциясы, ол Mn_4CaO_5 кешенінің тотығуы және протонациясы кезінде Кок-Жолиот деп аталатын циклдің бес S0–S4 сатысы арқылы жүреді. Бұл жұмыста табиғи Mn катализаторының моделі болып табылатын ацетатты лигандтармен Mn иондары арасындағы оксокөпірлердің түзілуін егжей-тегжейлі зерттеуді жоспарлап отырмыз. Тандалған зерттеу стратегиясы мен Mn катализаторларының қасиеттері мен электрондық құрылымын зерттеу тәсілдері апо-ФЖ II жоғары ажыратымдылықтағы рентгендік кристаллографиялық деректерінің болуымен және жүйедегі протондар және электрондардың механизмі туралы мәліметтердің болмауымен түсіндіріледі. Фотоактивация процесінің бастапқы сатысы ретінде металл иондары арасында оксокөпірлердің түзілуі үшін протондармен байланысты тасымалдау. Сонымен қатар, апо-ФЖ II және Mn катализаторларының модельдерін есептеу химиясы бойынша теориялық зерттеу эксперименттік

зерттеулердің қарама-қайшы нәтижелерін рационализациялауға және түсіндіруге көмектеседі және фотоактивация механизмін түсінуге түсінік береді. Биологиялық жүйелерге еліктейтін жасанды фотосинтезге арналған фотоэлектрхимиялық құрылғылар энергия ресурстары мәселесінің ең қолайлы шешімі ретінде 21 ғасырдың үлкен технологиялық мәселесі болып табылады. Судың тотығу катализаторының өзін-өзі құрастыру механизмі оның ұзақ мерзімді тұрақтылығы мен каталитикалық өнімділігі үшін маңызды болғандықтан, мұндай процестерді түсіндіру жасанды фотосинтез құрылғыларының практикалық орындалуын айтарлықтай жеңілдетеді. Сайып келгенде, бұл технологиялар күн энергиясын экологиялық таза түрде сақтауға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: фотосинтез, ФЖ II, фотоактивация, өтпелі металл кешендері, суды тотықтырғыш кешені, тығыздық функционалының теориясы, есептеу химиясы, синтетикалық катализатор

Алғыс. Бұл мақала ҚР БҒМ Ғылым Комитетімен қаржыландырылды (Грант AP09058000)

© А.Ж. Тыченгулова^{1,2*}, К.А. Катпаева³, 2023

¹Казахский Национальный Технический Исследовательский Университет имени К.И. Сатпаева, Алматы, Қазақстан;

²Астрофизический институт имени В.Г.Фесенкова, Алматы, Қазақстан;

³Международный Казахско-Турецкий Университет имени Қожа Ахмет Ясауи, Түркістан, Қазақстан.

E-mail: a.tychengulova@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ФОТОАКТИВАЦИИ В КАТАЛИЗАТОРАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ MN

Тыченгулова Алия Жанатқызы — PhD, старший научный сотрудник. Казахский Национальный Технический Исследовательский Университет имени К.И.Сатпаева, Алматы, Қазақстан.

E-mail: a.tychengulova@gmail.com. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1849-1560>;

Катпаева Қаракоз Абдисейтовна — PhD, старший научный сотрудник. Казахский Национальный Технический Исследовательский Университет имени К.И.Сатпаева, Алматы, Қазақстан. Старший преподаватель, Международный Казахско-Турецкий Университет имени Қожа Ахмет Ясауи, Түркістан, Қазақстан

E-mail: karakoz_012@mail.ru. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4867-4974>.

Аннотация. Процесс фотосинтеза является важным источником энергии, эффективно преобразовывающим солнечный свет в химическую энергию на протяжении более 2,5 миллиардов лет. Наиболее значимым процессом фотосинтеза является каталитическая реакция расщепления воды в ФС II, осуществляемая при окислении и депротонировании Mn_4CaO_5 комплекса по пяти S0–S4 ступеням так называемого цикла Кока–Жолио. В настоящей работе детально исследуется процесс формирования оксомостиков между

ионами Mn с лигандами ацетата, являющегося моделью натурального Mn катализатора. Выбранная исследовательская стратегия и подходы к изучению свойств и электронной структуры Mn катализаторов обусловлены наличием рентгенокристаллографических данных высокого разрешения апо-ФС II и отсутствием данных о протонах в системе и механизме переноса электронов, связанных с протонами для формирования оксомостиков между ионами металлов как начальном этапе процесса фотоактивации. Кроме того, теоретическое исследование апо-ФС II и моделей Mn катализаторов методами вычислительной химии поможет рационализировать и объяснить противоречивые результаты экспериментальных исследований и внесет ясность в понимание механизма фотоактивации. Фотоэлектрохимические устройства искусственного фотосинтеза, имитирующие биологические системы, являются большой технологической задачей 21го века в качестве наиболее подходящего решения проблемы энергоресурсов. Поскольку механизм самосборки катализатора окисления воды имеет решающее значение для его долгосрочной стабильности и каталитических характеристик, выяснение таких процессов будет в значительной степени способствовать практической реализации устройств искусственного фотосинтеза. В конечном итоге подобные технологии позволят хранить солнечную энергию экологически безопасным способом.

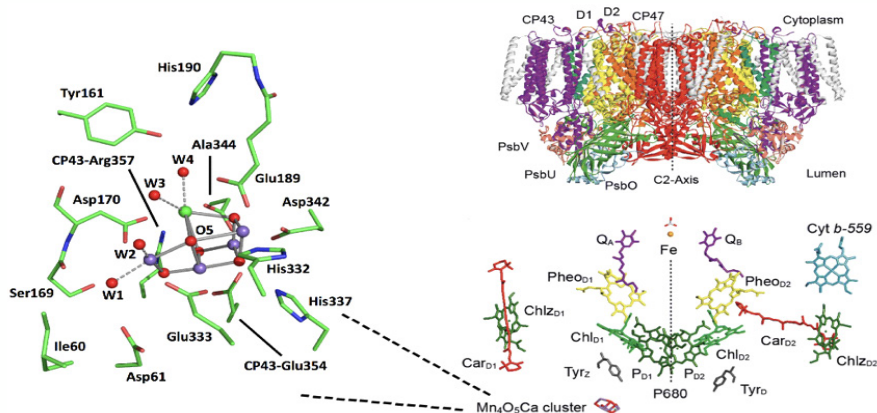
Ключевые слова: фотосинтез, ФС II, фотоактивация, комплексы переходных металлов, водо-окисляющий комплекс, теория функционала плотности, вычислительная химия, синтетический катализатор

Кіріспе

Судың фотосинтетикалық тотығуы тіршіліктің барлық формаларының тіршілігі үшін өте маңызды. Фотосинтез фотожүйе II (ФЖ II) ақуыздарындағы амин қышқылы лигандтарымен байланысқан Mn₄Ca кластері арқылы тиімді катализденетін атмосфералық оттегінің барлығын өндіреді (Zhang, 2017; Barra, 2006; Dasgupta, 2008). Mn₄Ca кластері фотоактивация деп аталатын Mn иондарының фотототығуы арқылы өздігінен құрастырылу механизміне байланысты ғылыми қауымдастық үшін үлкен қызығушылық тудырады (Kristy, 2000; Nakamura, 2021; Suga, 2015). Бұл механизм оқшауланған металл иондарынан Mn₄Ca кластерінің түзілуіне, сондай-ақ физиологиялық жағдайларда фотозақымданудан кейін оның қалпына келуіне ықпал етеді. Бұл жұмыстың негізгі идеясы тығыздықтың функционалдық теориясына негізделген есептеу химиялық әдістерімен өздігінен құрастыру процесінде су тотықтырғыш катализатордың аралық күйлерін зерттеу болып табылады.

Құрылымдық жағынан ФЖ II — бұл тилакоидты мембранаға ендірілген ақуыз-пигментті кешеннің (Suga, 2015) (1-сурет, оң жағы) гомодимері, онда әрбір мономерді үш субдоменге бөлуге болады: оттегі бөлінуі жүретін екі полипептидтік тізбектен (D1 және D2) тұратын орталығы (PO), сондай-ақ CP43 және CP47 екі трансмембраналық доменнен тұрады (1-суретті

қараңыз). Сонымен қатар, оттегінің бөліну процесін оңтайландыруға бағытталған PsbO, PsbU және PsbV блоктары сияқты сыртқы домендер бар. Антенна жүйесінің пигменттері жұтатын күн энергиясы ФЖ II реакция орталығына беріледі, онда ол P680 бастапқы электрон донорында зарядтың бөлінуін индукциялау үшін қолданылады. P680-ден төрт электронды реттілікпен алып тастау кезінде Mn₄Ca кластеріндегі екі су молекуласының протондар, электрондар және молекулалық оттегіге тотығуына алып келеді.



Сурет 1. ФЖ 2 және оның 1,9 Å өлшемінде кофакторларының кристаллографиялық құрылымы (Suga, 2015).

(Figure 1. Crystallographic structure of PS 2 and its cofactors with 1.9 Å resolution (Suga, 2015).)

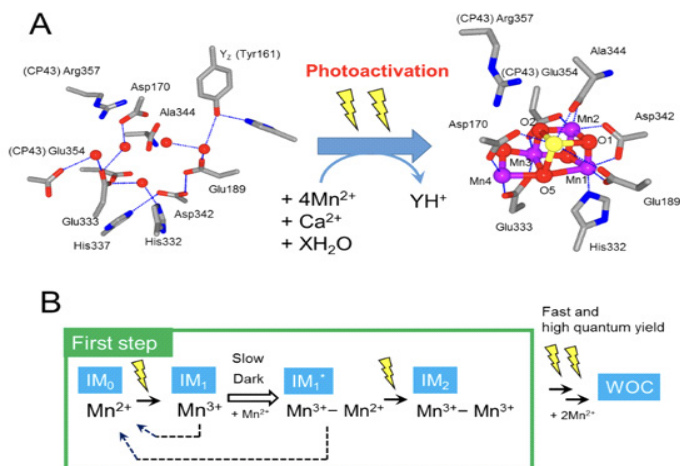
Соңғы жылдары ФЖ II құрылымы өсу деңгейінің шегінде зерттелді (Ferreira, 2004; Dau, 2008; Umena, 2011; Young, 2016; Kern, 2018), бұл Mn₄Ca кластерінің және оның аминқышқыл лигандтарының құрылымдық бөлшектерін анықтады (1-сурет, сол жағы). Бұл зерттеулер теориялық зерттеулерді негізге ала отырып ФЖ II каталитикалық механизмінің әртүрлі аспектілерін түсіндіруге мүмкіндік берді

Фотоактивация кезінде болатын процестерді түсінудің алғашқы міндетті қадамы апо-ФЖ II деп аталатын Mn₄Ca кластері жоқ ФЖ II құрылымдық сипаттамасы болып табылады. Апо-ФЖ II құрылымы *Thermosynechococcus elongatus*-тен Zhang et al. 2017 жылы 2,55 Å өлшемінде алды (Zhang, 2017). Бір қызығы, Mn₄Ca қуысын қоршап тұрған ақуыз суббірліктері мен кофакторлары, тіпті ақуыз қалдықтарының құрылымы металл кластері болмаған жағдайда айтарлықтай өзгеріссіз қалады. 2020 жылы *Synechocystis* PCC 6803-тен сыртқы және перифериялық суббірліктерден айырылған мономерлі апо-ФЖ II крио-ЭМ құрылымы алынды (Gisriel, 2020). Күтпеген жерден бұл жағдайда толық белсендірілген ФЖ II құрылымына қатысты кластер қуысын қоршап тұрған ақуыз қалдықтарының құрылымында айтарлықтай айырмашылықтар табылды. Осылайша, Zhang et al. (Zhang, 2017) ұсынған құрылымдық деректерге Mn₄Ca кластерін ФЖ II-ден алып

тастағаннан кейін құрылымды блоктайтын кристалды тор әсер етуі мүмкін деген болжам жасалды (Murray, 2020).

Бұл жағдайда апо-ФЖ II және фотоактивацияның бастапқы қадамдарына қатысты көтерілген сұрақтар бойынша зерттеуге теориялық көзқарас эксперименттік деректерді ұтымды етуге көмектеседі. Алғаш рет біз Mn4Ca кешенінің өздігінен жиналуының бастапқы процесін зерттейміз және Mn2+ екінші ионының қосылуының ең ықтимал механизмін, бірінші оксо-көпірдің түзілу механизмін, сондай-ақ фотоактивация процесіне ацетатқа қарсы ионның орналасуы мен үйлестіруінің әсерін ұсынамыз. Ацетатқа қарсы ион қолданылды, өйткені бұл Mn катализаторының бастапқы электр тұндырылған ерітіндісінде болатын әдеттегі анион ғана емес, сонымен қатар ақуыздық ортадағы аспарагин мен глутамин қышқылдарының жеңілдетілген моделі. Соңғы зерттеулер мұндай лигандтардың Mn иондарымен ФЖ II-де MnCa кластерінің түзілуінің бастапқы кезеңінде байланысуға қабілетті екендігін көрсетті (Maier, 2015; Wang, 2004; Lindahl, 2001).

Жоғары көрсеткішті ФЖ II рентгендік кристаллографиялық зерттеулер (Umena, 2011; Young, 2016; Kern, 2018) Mn және Ca иондары арасында көп оксо-көпірлері бар бірнеше металлоксо-ядросымен сипатталатын ФЖ II аминқышқылдарының қалдықтарымен байланысты Mn4Ca кластерінің егжей-тегжейлі құрылымын анықтады (2A-сурет, оң жағы). Сонымен қатар, Zhang et al. (Zhang, 2017) еңбектерінде көрсетілген апо-ФЖ II құрылымының соңғы рентгенографиясы Mn4Ca кластерінің қуысын қоршап тұрған ақуыз ортасының атомдық құрылымын көрсетті (2A-сурет, сол жағы). Бұл рентгендік зерттеулер табиғи Mn катализаторының фотоактивация процесін компьютерлік зерттеуге жол ашты.



Сурет 2. Табиғи су тотықтырғыш кешенінің фотоактивация процесінің диаграммасы (СТК) ФЖ II (Zhang, 2015; Suga, 2015; Radmer, 1971).
(Diagram of the photoactivation process of the natural water-oxidizing complex (WOC) of PS II (Zhang, 2015; Suga, 2015; Radmer, 1971).)

ФЖ II катализдейтін судың бөліну механизмін сипаттаудағы соңғы жетістіктерге қарамастан, Mn_4Ca кластерінің еріген Mn^{2+} бастап жарық әсерінен өздігінен жиналу процесі туралы әлдеқайда аз мәлімет бар. Фотоактивация деп те аталатын бұл процесс ФЖ II құрастыру және бастапқы белсендіру үшін ғана емес, сонымен қатар жарық әсерінен зақымданудан кейін су тотығу кешенін қалпына келтіру үшін де маңызды. Қазіргі уақытта ФЖ II-де Mn_4Ca кешенінің өздігінен жиналу механизмін сипаттаудың жалпы қабылданған үлгісі «екі кванттық» деп аталатын модель болып табылады (Radmer, 1971). 2В-суретте көрсетілгендей, $IM_0 \rightarrow IM_1$ фотоактивациясының бастапқы кезеңінде апо-ФЖ II жоғары аффиндік аймағымен байланысқан жалғыз Mn^{2+} ионы тотықсыздандырғыш белсенді тирозинмен (Yz) Mn^{3+} дейін тотығады (Ono, 1999). Ca^{2+} бар кешеннің түзулуін және ақуыз конформациясының өзгеруін қамтитын кейінгі баяу қараңғы қайта топтастыру екінші Mn^{2+} ($IM_1 \rightarrow IM_1^*$) ионының қосылуына әкеледі (Ono, 1999; Bao, 2016). Екінші металл ионының фотототығуы тұрақты $Mn^{3+}-Mn^{3+}$ ($IM_1^* \rightarrow IM_2$) аралық кешенінің түзілуіне алып келеді (Вага, 2006; Kristy, 2000; Bao, 2016). Әрі қарай жарықтандыру Mn_4CaO_5 кластерінің толық өздігінен жиналуына алып келеді.

Табиғи катализатордардың құрылымы мен судың бөліну процессіне қарағанда Mn катализаторының өздігінен жиналу процесі кешеннің аралық күйлері туралы құрылымдық және теориялық зерттеулердің кемшілігіне байланысты әлі толық зерттелмеген. Жасанды және табиғи катализаторлардың егжей-тегжейлі құрылымдары рентгендік зерттеулер арқылы жақсы анықталғанымен, фотоактивация процесінде кешендердің аралық күйлері туралы құрылымдық ақпараттың болмауына байланысты өздігінен құрастыру процестері анықталмады. Атап айтқанда, рентгендік деректерде протондар туралы ешқандай ақпарат болмағандықтан, оксо-көпірдің түзілуі және металл иондарын металл-оксо-ядроға тұндыру үшін протондармен байланысқан электронды тасымалдау мезанизмі анықталмаған. Сонымен қатар, қарсы иондардың өздігінен құрастыру механизміне әсері де түсініксіз болып қалады. Осылайша, бұл жұмыс аталған бірқатар мәселелерді ашуға көмектеседі, атап айтқанда, фотоактивация процесінде өтпелі металл катализаторларының аралық күйлерінің құрылымдары зерттеледі және анықталады, екінші Mn^{2+} ионының қосылу механизмі және оксо-көпірлердің түзілуі туралы ақпарат алынады және ацетат иондарының өзін-өзі құрастыру механизмі мен Mn катализатор құрылымындағы рөлі зерттеледі.

Әдістер мен материалдар

Металл атомдары арасындағы (гидро) оксо-көпірлерінің түзілуі ORCA бағдарламалық пакетінің 5.0.2 нұсқасын қолдану арқылы орындалатын тығыздық функционалдық теориясының (DFT) есептеулері көмегімен зерттелетін болады. Су молекулаларының бірінші координациялық сферасымен қоршалған металл атомдарының геометриясын оңтайландыру V3LYP теориясы деңгейінде Бекке-Джонсонның (D3BJ) демпферлік Гримме атомдарының дисперсиялық түзету арқылы жүзеге асырылады

Барлық атомдар үшін сәйкестік/сфералық тізбек (RIJCOSX) әдісіне негізделген SARC/J көмекші базалық жиынтықтары бар ZORA-recontraced def2-TZVPP Гаусс типті базалық жиынтықтар қолданылады. Су параметрлері бар поляризацияланатын континуумның (CPCM) өткізгіш моделі барлық жүйелерді қолайлы көлемді шешім аумағына орналастыру үшін геометрияны оңтайландырудың барлық процесстеріне қолданылады. Есептеулер жүйелерді жоғары спиндік конфигурацияда ұстау арқылы орындалады және сәйкес бөлшектердің барлық тотығу күйлері бағалау параметрлері ретінде Лоудин мен Малликеннің спиндік поляризациясын қолдану арқылы тексеріледі. Барлық электрондар үшін ZORA әдісінің орнына Штутгарт/Дрезден (SDD) тиімді ядро потенциалдарын (ECP) пайдалана отырып, қосымша геометриялық оңтайландырудан кейін нөлдік нүкте энергиясын есептеулер сол құрылымда орындалады. Су ерітіндісіндегі зерттелетін бөлшектердің бос энергиялары B3LYP/def2-TZVPP деңгейіндегі бір нүктелік электронды энергиясын, D3BJ дисперсияны түзетуді, 1 атм және 298,15 К термодинамикалық түзетулерді қосу арқылы бағаланады:

$$G_{aq} = E_{el}^{B3LYP} + E_{disp}^{D3BJ} + (G^0 - E_{el})^{B3LYP} + \Delta G_{hydr}^{CPCM} \quad (1)$$

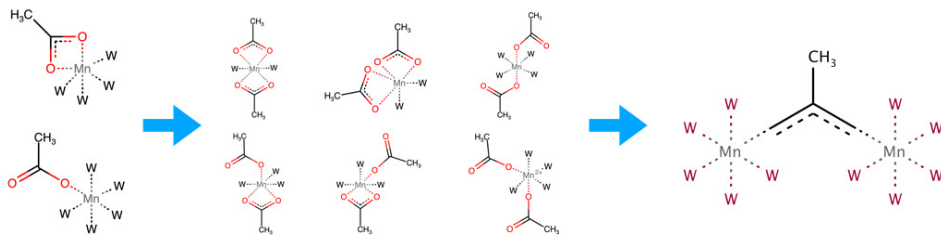
Тотығу потенциалы U , сондай-ақ сулы ерітіндідегі электрохимиялық процесстер үшін есептелген ΔG мәндері компьютерлік сутегі электродының (SHE) теңдеуімен байланысты (Garcia-Mota, 2011; Valdes, 2008; Li, 2019; Norskov, 2004). Атап айтқанда, НА жүйесінен бір протон мен бір электронның жойылуын сипаттайтын жартылай реакция $[HA \rightarrow A + H^+ + e^-]$ стандартты сутегі электродының (SHE) $[H^+ + e^- \rightarrow H_2(g)]$ жартылай реакциясымен байланысты:

$$\Delta G = G[A] + \frac{1}{2} G^0 [H_2(g)] - G[HA] - k_B T \ln 10 \times pH - |q|U \quad (2)$$

Нәтижелер және оларды талқылау

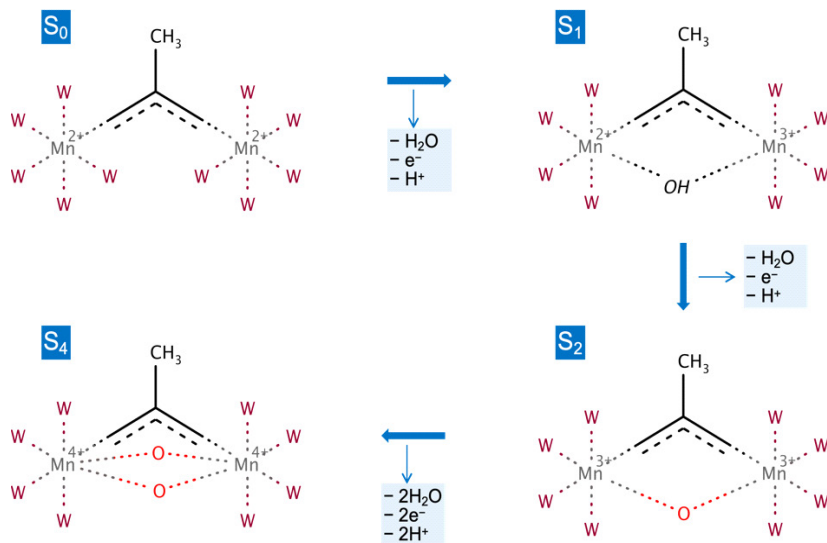
Біз табиғи Mn катализаторының өздігінен құрастыру процесін, оксо-көпірдің түзілу процесін және оның энергетикалық тосқауылын Ogsa 5.0.2 бағдарламалық пакетіндегі тығыздықтың функционалдық теориясына (DFT) негізделген есептеу химиясы әдістерімен су лигандтары мен ацетатқа қарсы иондары бар Mn катализатор модельдерінің мысалында зерттедік.

3-суретте осы зерттеудің жоспары схемалық түрде көрсетілген. Бірінші кезеңде біз бір Mn және бір өзара әрекеттесетін ацетат тобымен, сондай ақ бір Mn және екі ацетат лигандтары бар конфигурациядағы барлық ықтимал изомерлердің модельдерін геометриялық оңтайландыруды орындадық. Нәтижесінде әрбір изомер үшін минималды энергияға ие модель құрылымдары табылды. Сонымен қатар, әрбір құрылым үшін сыртқы U потенциалдары мен Гиббстің бос энергиясының өзгеруі есептелді. Алынған есептеулер қосымша Mn ионын қосу арқылы күрделі модельді одан әрі жобалау үшін таңдалған құрылымды анықтауға мүмкіндік берді.



Сурет 3. Mn катализаторының модельдерін зерттеу схемасы.
(Figure 3. Scheme of the study of Mn catalyst models.)

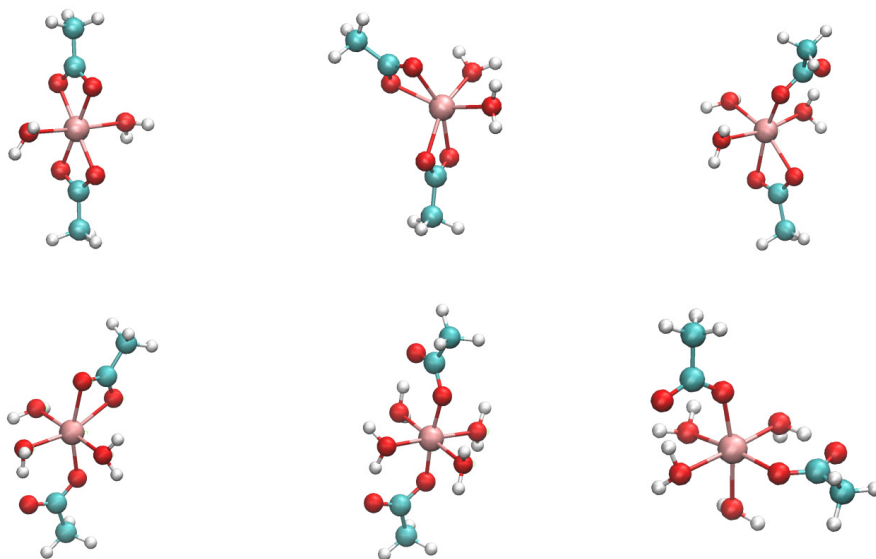
4-суретте тотығу мен депротонацияның электрохимиялық реакциялары нәтижесінде таңдалған модель үшін бірінші және екінші оксо-көпірлердің түзілу реакциясының схемасы көрсетілген.



Сурет 4. Mn каталитикалық кешендеріндегі оксо-көпірлердің түзілу реакциясының сызбасы.
(Figure 4. Scheme of the reaction pathway for the formation of oxo-bridges in catalytic Mn complexes.)

Су молекулаларының бірінші координациялық сферасымен қоршалған металл атомдарын геометриялық оңтайландыру Mn катализаторларының әртүрлі модельдерін зерттеу үшін таңдалған схемаға сәйкес B3LYP тығыздық функционалы және Grimme жұптық атомдық дисперсиялық түзетулер қолдану арқылы орындалды (5-сурет).

Біз сутегі электродының (СНЕ) есептеу теңдеуін қолдана отырып, су ерітіндісіндегі электрохимиялық процесстерінің сыртқы потенциалдары U және Гиббстің бос энергиясының өзгерісін ΔG есептедік, олардың нәтижелері тотығу-тотықсыздану реакцияларының S_0 және S_1 сатылары үшін 1-кестеде келтірілген.



Сурет 5. Бір Mn ионы және екі ацетат лигандтары бар фотоактивация кешенінің S0 үлгілерінің құрылымдық күйлері. (Figure 5. Structural states of S0 models of the photoactivation complex with one Mn ion and two acetate ligands)

Біз сондай-ақ, судағы оң потенциалдарға ұшыраған екі валентті өтпелі металдардың атомдары арасындағы –O–және–OH– көпірлерінің түзілу кезеңдерін зерттеу үшін DFT модельдеуді қолдандық. Осылайша, алынған есептеулер қарапайым модельдің әртүрлі рН жағдайлары мен бастапқы ерітінділерді есепке алу үшін жеткілікті икемді екенін және каталикалық белсенді аморфты металл–(гидро) окспенкаларының электртұндыруы кезінде байқалатын ерекшеліктердің көпшілігін сипаттай алатындығын көрсетті. Біз бір немесе екі валентті марганец иондарына қолданылатын тотығу-тотықсыздану/депротонация процессінің бірнеше сатыларын модельдеу үшін өз моделімізді қолдандық.

Кесте 1. Су ерітіндісіндегі электрохимиялық процесстердің ионадалу потенциалдары ΔG және сыртқы потенциалдары U. (Table 1. Ionization potentials ΔG and external potentials U of electrochemical processes in an aqueous solution.)

	1 Mn_2Ac_a	1 Mn_2Ac_b	1 Mn_2Ac_c	1 Mn_2Ac_d	1 Mn_2Ac_e
S0	0,96	0,58	0,09	0,00	0,00
S1	2,17	0,23	0,39	0,00	0,00
U, eV	1,96	0,40	1,04	0,74	0,76

Қорытынды

Осылайша, әртүрлі конформациялық күйдегі бір металл ионы және екі ацетатты лигандтары бар Mn катализаторларының модельдерінің мысалында фотоактивацияның бастапқы кезеңін зерттеу нәтижесінде энергиялық (ΔG)

және сыртқы потенциалдарға U негізделетін екі моодеттік лигандтары бар құрылымдық модель ең қолайлысы екендігі анықталды. Бұл модель екінші Мп ионының қосылуын бірінші және екінші оксо-көпірлердің түзілуінің бастапқы кезеңін одан әрі есептеу үшін қолданылатын болады.

ӘДЕБИЕТТЕР

- Bao H. and Burnap R.L. (2016). Photoactivation: The Light-Driven Assembly of the Water Oxidation Complex of Photosystem II, *Front. PlantSci*, 7:578. DOI: 10.3389/fpls.2016.00578
- Barra M. et al. (2006). Intermediates in Assembly by Photoactivation after Thermally Accelerated Disassembly of the Manganese Complex of Photosynthetic Water Oxidation, *Biochemistry*, 45:14523-32. DOI:10.1021/bi061842z
- Dasgupta J., Ananyev G.M., Dismukes G.C. (2008). Photoassembly of the Water-Oxidizing Complex in Photosystem II, *Coord Chem Rev*. 252(3-4):347–360. DOI: 10.1016/j.ccr.2007.08.022
- Dau H., Grundmeier A., Loja P., Haumann M. (2008). On the structure of the manganese complex of photosystem II: extended-range EXAFS data and specific atomic-resolution models for four S-states, *Philos Trans R Soc Lond B Biol Sci.*, 363(1494):1237–43. DOI: 10.1098/rstb.2007.2220
- Ferreira K.N., Iverson T.M., Maghlaoui K., Barber J., Iwata S. (2004). Architecture of the photosynthetic oxygen-evolving center, *Science*, 303(5665):1831–8. DOI: 10.1126/science.1093087
- Garcia-Mota M., Vojvodic A., Metiu H., Man I.C., Su H.Y., Rossmeisl J. and Norskov J.K. (2011). Tailoring the activity for oxygen evolution electrocatalysis on rutile TiO₂(110) by transition- metal substitution, *ChemCatChem*, 3:1607–1611. DOI: 10.1002/cctc.201100160
- Gisriel C., Zhou K., Huang H., Debus R., Xiong, Y., Brudvig G. (2020). Cryo-EM Structure of Monomeric Photosystem II from *Synechocystis* sp. PCC 6803 Lacking the Water-Oxidation Complex, *Joule*, 4(10):2131–2148. DOI: 10.1016/j.joule.2020.07.016
- Kern J., Chatterjee R., Young I., Fuller F., Lassalle L., Ibrahim M., Gul S., Fransson T., Brewster A., et al. (2018). Structures of the intermediates of Kok's photosynthetic water oxidation clock, *Nature*, 563(7731):421–425. DOI: 10.1038/s41586-018-0681-2
- Kristy A., Campbell D., Force A., Peter J. N., Dole F., Bruce A., and Britt D.R. (2000). *Journal of the American Chemical Society*, 122(15): 3754–3761. DOI:10.1021/ja000142t
- Li Y. F. (2019). First-principles simulations for morphology and structural evolutions of catalysts in oxygen evolution reaction, *ChemSusChem*, 12:1846–1857. DOI: 10.1002/cssc.201802525
- Lindahl E., Hess B. and Van der Spoel D. (2001). GROMACS 3.0: A package for molecular simulation and trajectory analysis, *Journal of Molecular Modeling*, 7:306–317. DOI: 10.1007/s008940100045
- Maier J.A., Martinez C., Kasavajhala K., Wickstrom L., Hauser K.E. and Simmerling S. (2015). ff14SB: Improving the Accuracy of Protein Side Chain and Backbone Parameters from ff99SB, *Theory Comput.*, 11:3696–3713. DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00255
- Murray J.W., Rutherford A.W., Nixon P.J. (2020). Photosystem II in a State of Disassembly, *Joule*, 4(10):2082–2084. DOI: 10.1016/j.joule.2020.09.014
- Nakamura S., Capone M., Mattioli G. and Guidoni L. (2021). Early-stage formation of (hydr)oxo bridges in transition-metal catalysts for photosynthetic processes, *Catal. Sci. Technol.*, 11:1801. DOI: 10.1039/D0CY02227F
- Norskov J. K., Rossmeisl J., Logadottir A., Lindqvist L., Kitchin J. R., Bligaard T. and Jónsson H. (2004). Origin of the overpotential for oxygen reduction at a fuel-cell cathode, *J. Phys. Chem. B*, 108:17886–17892. DOI: 10.1021/jp047349j
- Ono T. and Mino H. (1999). Unique Binding Site for Mn²⁺ Ion Responsible for Reducing an Oxidized YZ Tyrosine in Manganese-Depleted Photosystem II Membranes, *Biochemistry*, 38:8778-8785. DOI: 10.1021/bi982949s
- Radmer R., Chénia G.M. (1971). Photoactivation of the manganese catalyst of O₂ evolution. II. A two quantum mechanism, *Biochim Biophys Acta*, 253:182–186. DOI: 10.1016/0005-2728(71)90243-x
- Suga M., Akita F., Hirata K. et al. (2015). Native structure of photosystem II at 1.95 Å resolution viewed by femtosecond X-ray pulses, *Nature*, 517:99–103. DOI:10.1038/nature14072

- Umena Y., Kawakami K., Shen J.R., Kamiya N. (2011). Crystal structure of oxygen-evolving photosystem II at a resolution of 1.9 Å, *Nature*, 473(7345):55–60. DOI: 10.1038/nature09913
- Valdés A., Qu Z.W., Kroes G.J., Rossmeis J. and Nørskov J.K. (2008). Oxidation and photo-oxidation of water on TiO₂ surface, *J. Phys. Chem. C*, 112:9872–9879. DOI: 10.1021/jp711929d
- Wang J., Wolf R.M., Caldwell J.W., Kollman P.A. and Case D.A. (2004). Development and testing of a general amber force field, *J. Comput. Chem.*, 25:1157–1174. DOI: 10.1002/jcc.20035
- Young I.D., Ibrahim M., Chatterjee R., Gul S., Fuller F., Koroidov S., Brewster A., Tran R., et al. (2016). Structure of photosystem II and substrate binding at room temperature, *Nature*. 540(7633):453–457. DOI:10.1038/nature20161
- Zhang M., Bommer M., Chatterjee R., Hussein R., Yano J., Dau H., Kern J., Dobbek H., Zouni A. (2017). Structural insights into the light-driven auto-assembly process of the water-oxidizing Mn₄CaO₅-cluster in photosystem II, *eLife*, 6:e26933 DOI:10.7554/eLife.26933

REFERENCES

- Bao H. and Burnap R.L. (2016). Photoactivation: The Light-Driven Assembly of the Water Oxidation Complex of Photosystem II, *Front. PlantSci*, 7:578. DOI: 10.3389/fpls.2016.00578
- Barra M., et al. (2006). Intermediates in Assembly by Photoactivation after Thermally Accelerated Disassembly of the Manganese Complex of Photosynthetic Water Oxidation, *Biochemistry*, 45:14523–32. DOI:10.1021/bi061842z
- Dasgupta J., Ananyev G.M., Dismukes G.C. (2008). Photoassembly of the Water-Oxidizing Complex in Photosystem II, *Coord Chem Rev*. 252(3-4):347–360. DOI: 10.1016/j.ccr.2007.08.022
- Dau H., Grundmeier A., Loja P., Haumann M. (2008). On the structure of the manganese complex of photosystem II: extended-range EXAFS data and specific atomic-resolution models for four S-states, *Philos Trans R Soc Lond B Biol Sci.*, 363(1494):1237–43. DOI: 10.1098/rstb.2007.2220
- Ferreira K.N., Iverson T.M., Maghlaoui K., Barber J., Iwata S. (2004). Architecture of the photosynthetic oxygen-evolving center, *Science*, 303(5665):1831–8. DOI: 10.1126/science.1093087
- Garcia-Mota M., Vojvodic A., Metiu H., Man I.C., Su H.Y., Rossmeis J. and Nørskov J.K. (2011). Tailoring the activity for oxygen evolution electrocatalysis on rutile TiO₂(110) by transition- metal substitution, *ChemCatChem*, 3:1607–1611. DOI: 10.1002/cctc.201100160
- Gisriel C., Zhou K., Huang H., Debus R., Xiong, Y., Brudvig G. (2020). Cryo-EM Structure of Monomeric Photosystem II from *Synechocystis* sp. PCC 6803 Lacking the Water-Oxidation Complex, *Joule*, 4(10):2131–2148. DOI: 10.1016/j.joule.2020.07.016
- Kern J., Chatterjee R., Young I., Fuller F., Lassalle L., Ibrahim M., Gul S., Fransson T., Brewster A., et al. (2018). Structures of the intermediates of Kok's photosynthetic water oxidation clock, *Nature*, 563(7731): 421–425. DOI:10.1038/s41586-018-0681-2
- Kristy A., Campbell D., Force A., Peter J. N., Dole F., Bruce A., and Britt D.R. (2000). *Journal of the American Chemical Society*, 122(15): 3754–3761. DOI:10.1021/ja000142t
- Li Y.F. (2019). First-principles simulations for morphology and structural evolutions of catalysts in oxygen evolution reaction, *ChemSusChem*, 12:1846–1857. DOI: 10.1002/cssc.201802525
- Lindahl E., Hess B. and Van der Spoel D. (2001). GROMACS 3.0: A package for molecular simulation and trajectory analysis, *Journal of Molecular Modeling*, 7:306–317. DOI: 10.1007/s008940100045
- Maier J.A., Martinez C., Kasavajhala K., Wickstrom L., Hauser K.E. and Simmerling S. (2015). ff14SB: Improving the Accuracy of Protein Side Chain and Backbone Parameters from ff99SB, *Theory Comput.* 11:3696–3713. DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00255
- Murray J.W., Rutherford A.W., Nixon P.J. (2020). Photosystem II in a State of Disassembly, *Joule*, 4(10):2082–2084. DOI: 10.1016/j.joule.2020.09.014
- Nakamura S., Capone M., Mattioli G. and Guidoni L. (2021). Early-stage formation of (hydr)oxo bridges in transition-metal catalysts for photosynthetic processes, *Catal. Sci. Technol.*, 11:1801. DOI: 10.1039/D0CY02227F
- Nørskov J. K., Rossmeis J., Logadottir A., Lindqvist L., Kitchin J. R., Bligaard T. and Jónsson H. (2004). Origin of the overpotential for oxygen reduction at a fuel-cell cathode, *J. Phys. Chem. B*, 108:17886–17892. DOI: 10.1021/jp047349j

Ono T. and Mino H. (1999). Unique Binding Site for Mn²⁺ Ion Responsible for Reducing an Oxidized YZ Tyrosine in Manganese-Depleted Photosystem II Membranes, *Biochemistry*, 38:8778–8785. DOI: 10.1021/bi982949s

Radmer R., Cheniae G.M. (1971). Photoactivation of the manganese catalyst of O₂ evolution. II. A two quantum mechanism, *Biochim Biophys Acta*, 253:182–186. DOI: 10.1016/0005-2728(71)90243-x

Suga M., Akita F., Hirata K. et al. (2015). Native structure of photosystem II at 1.95 Å resolution viewed by femtosecond X-ray pulses, *Nature*, 517:99–103. DOI:10.1038/nature14072

Umena Y., Kawakami K., Shen J.R., Kamiya N. (2011). Crystal structure of oxygen-evolving photosystem II at a resolution of 1.9 Å, *Nature*, 473(7345):55–60. DOI: 10.1038/nature09913

Valdés A., Qu Z. W., Kroes G. J., Rossmeisl J. and Nørskov J. K. (2008). Oxidation and photo-oxidation of water on TiO₂ surface, *J. Phys. Chem. C*, 112:9872–9879. DOI: 10.1021/jp711929d

Wang J., Wolf R.M., Caldwell J.W., Kollman P.A. and Case D.A. (2004). Development and testing of a general amber force field, *J. Comput. Chem.*, 25:1157–1174. DOI: 10.1002/jcc.20035

Young I.D., Ibrahim M., Chatterjee R., Gul S., Fuller F., Koroidov S., Brewster A., Tran R, et al. (2016). Structure of photosystem II and substrate binding at room temperature, *Nature*. 540(7633):453–457. DOI:10.1038/nature20161

Zhang M., Bommer M., Chatterjee R., Hussein R., Yano J., Dau H., Kern J., Dobbek H., Zouni A. (2017). Structural insights into the light-driven auto-assembly process of the water-oxidizing Mn₄CaO₅-cluster in photosystem II, *eLife*, 6:e26933. DOI:10.7554/eLife.26933

**МАЗМУНЫ
ФИЗИКА**

М.С. Есенаманова, Ж.С. Есенаманова, А.Е. Глепбергенова, М. Махамбет, Н.Б. Байтемирова ГИДРОПОНИКАЛЫҚ ҚОНДЫРҒЫДАҒЫ ҚЫШҚЫЛДЫҚ ПЕН ЭЛЕКТР ӨТКІЗГІШТІК ШАМАЛАРЫНЫҢ ӨЗАРА БАЙЛАНЫСЫ.....	7
Е.А. Жақанбаев, В.Н. Володин, Ю.Ж. Тулеушев ГАФНИЙ-КАДМИЙ ЖҮЙЕСІНДЕГІ НАНОБӨЛШЕКТЕРДІҢ БАЛҚУ ТЕМПЕРАТУРАСЫН ЖӘНЕ БАЛҚЫМА-КРИСТАЛ ШЕКАРАСЫНДАҒЫ БЕТТІК КЕРІЛҮДІ АЗАЙТУ.....	20
А.С. Ларионов, А.С. Диков, Л.А. Дикова, С.О. Ақаев, Р.В. Кирьянов СУТЕКТІ САҚТАУ ҮШІН ҰЗАҚ ПАЙДАЛАНУДАН КЕЙІН КОНТЕЙНЕР МАТЕРИАЛЫН ЗЕРТТЕУ.....	28
Е.М. Мырзакулов, Г.Т. Ергалиева БАРДИН-ЯНГ-МИЛЛС ҚАРА ҚҰРДЫМДАРЫНЫҢ ТЕРМОДИНАМИКАЛЫҚ ҚҰРЫЛЫМЫ.....	36
В.М. Терещенко 8 ^m -10 ^m СПЕКТРОФОТОМЕТРЛІК СТАНДАРТТАР.VI. +40° АЙМАҚ.....	47
А.Ж. Тыңенгулова, К.А. Катпаева MN НЕГІЗІНДЕ ӨТПЕЛІ МЕТАЛДАР КАТАЛИЗАТОРЛАРЫНДАҒЫ ФОТОАКТИВАЦИЯНЫҢ БАСТАПҚЫ КЕЗЕҢІ ЗЕРТТЕУ.....	58
И. Хромущин, Т. Аксенова, Е. Слямжанов, К. Мунасбаева БАРИЙ ЦЕРАТЫ ЖӘНЕ ЛАНТАН СКАНДАТЫ НЕГІЗІНДЕГІ ПРОТОНДЫ ӨТКІЗГІШТЕРДІ САЛЫСТЫРМАЛЫ ТАЛДАУ.....	71
ХИМИЯ	
А. Абдрахманова, Н. Омарова, А. Сабитова ЭЛЕКТРОЛИТ ҚҰРАМЫНЫҢ АНОДЫ ЖОҚ ЛИТИЙ-ИОНДЫ ЭЛЕМЕНТТЕРДІҢ ЭЛЕКТРОХИМИЯЛЫҚ КӨРСЕТКІШТЕРІНЕ ӘСЕРІ.....	83
М.Ә. Дәуренбек ШЕТЕЛДІК ЗЕРТТЕУЛЕР АҒЫНДЫ СУЛАРДЫ ТАЗАРТУ ТЕХНОЛОГИЯЛАР ШЕҢБЕРІНДЕ ПАЙДАЛАНЫЛАТЫН СУЛЬФИДТЕРДІҢ КЕШЕНДІ ҚОСЫЛЫСТАРЫ ТУРАЛЫ.....	94
С.Ж. Егембердиева, Н.Х. Халдаров, М.Н. Рахимов БУТИЛ СПИРТТЕРІНІҢ ӨРТҮРЛІ ӘДІСТЕРМЕН СИНТЕЗІНЕ КЕШЕНДІ ШОЛУ.....	106
А.Т. Кабылбекова, Е. Тілеуберді ПОЛИМЕРҚҰРАМДЫ ТҰРМЫСТЫҚ ҚАЛДЫҚТАРДЫҢ БИТУМ ТОТЫҚТЫРУҒА ӘСЕРІН ЗЕРТТЕУ: ШОЛУ.....	119
З.И. Кобжасарова, М.К. Касымова, Г.Э. Орымбетова ҚҰРАМЫ БАЙЫТЫЛҒАН НАННЫҢ ЖАҢА ТҮРІН ӨНДІРУ ТЕХНОЛОГИЯСЫН ЖАСАУ.....	134
А. Қуандықова, Н. Жаникулов, Б. Таймасов, Б. Жакибаев ПОРТЛАНДЦЕМЕНТ КЛИНКЕРІН АЛУДА АШІСАЙ МЕТАЛЛУРГИЯЛЫҚ ЗАУЫТЫНЫҢ КЛИНКЕРІН РЕТТЕУШІ ҚОСПА РЕТІНДЕ ҚОЛДАНУДЫ ЗЕРТТЕУ.....	146
Г.М. Мадыбекова, Б.Ж. Муталиева, Э.М. Туркеева, А.Б. Исаева ПРОБИОТИКАЛЫҚ МИКРООРГАНИЗМДЕРДІҢ ТУРАҚТЫЛЫҒЫ МЕН ӨМІР СҮРУІН АРТТЫРУ ҮШІН МИКРОКАПСУЛДАУ.....	157
Ж.Ш. Рахимбердиева, С.Д. Арыстанова, У.Т. Жуматаева ОҢТҮСТІК ҚАЗАҚСТАН ӨңІРІНІҢ <i>ARTEMISIA L.</i> ТУЫСЫНЫҢ ТҮРЛЕРІНІҢ ФИТОХИМИЯЛЫҚ ҚҰРАМЫ.....	172
Н. Сағдоллина, М. Ибраева, Ж. Мукажанова, М. Ozturk <i>ASTERACEAE</i> ТҰҚЫМДАСЫНА ЖАТАТЫН КЕЙБІР ӨСІМДІКТЕРДІҢ ҚЫШҚЫЛДЫҚ ҚҰРАМЫН САЛЫСТЫРМАЛЫ ТАЛДАУ.....	181
А.С. Унгарбаева, А.Т. Кабылбекова, Е. Тілеуберді, Х.И. Акбаров АУЫР МҰНАЙДЫҢ ҚАЛДЫҚТАРЫНАН КОКС АЛУ ӘДІСТЕРІНЕ ШОЛУ.....	191
А.А. Шинибекова, Х.Л. Диаз де Туеста, Б.К. Масалимова ТАБИҒИ РЕСУРСТАРДАН КӨМІРТЕКТІ МАТЕРИАЛДАРДЫ АЛУ: ШОЛУ.....	210

СОДЕРЖАНИЕ
ФИЗИКА

М.С.Есенаманова, Ж.С.Есенаманова, А.Е.Тлепбергенова, Махамбет М., Байтемирова Н.Б. ВЗАИМОСВЯЗЬ ВЕЛИЧИН КИСЛОТНОСТИ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ В ГИДРОПИОННОЙ УСТАНОВКЕ.....	7
Е.А. Жаканбаев, В.Н. Володин, Ю.Ж. Тулеушев ПОНИЖЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ И ПОВЕРХНОСТНОЕ НАТЯЖЕНИЕ НА ГРАНИЦЕ РАСПЛАВ – КРИСТАЛЛ В СИСТЕМЕ ГАФНИЙ – КАДМИЙ.....	20
А.С. Ларионов, А.С. Диков, Л.А. Дикова, С.О. Акаев, Р.В. Кирьянов ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕРИАЛА КОНТЕЙНЕРА ПОСЛЕ ДЛИТЕЛЬНОГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДЛЯ ХРАНЕНИЯ ВОДОРОДА.....	28
Е.М. Мырзакулов, Г.Т. Ергалиева ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ЧЕРНЫХ ДЫР БАРДИНА-ЯНГА-МИЛЛСА.....	36
В.М. Терещенко СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИЕ СТАНДАРТЫ 8 ^m -10 ^m . VI. ЗОНА +40°	47
А.Ж. Тычenguлова, К.А. Катпаева ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ФОТОАКТИВАЦИИ В КАТАЛИЗАТОРАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ MN.....	58
И. Хромушин, Т. Аксенова, Е. Слямжанов, К. Мунасбаева СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОТОННЫХ ПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ ЦЕРАТА БАРИЯ И СКАНДАТА ЛАНТАНА.....	71
ХИМИЯ	
А. Абдрахманова, Н. Омарова, А. Сабитова ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ БЕЗАНОДНЫХ ЛИТИЙ-ИОННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.....	83
М.А. Дауренбек О ЗАРУБЕЖНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СУЛЬФИДОВ В РАМКАХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ТЕХНОЛОГИЯХ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД.....	94
С.Ж. Егембердиева, Н.Х. Халдаров, М.Н. Рахимов КОМПЛЕКСНЫЙ ОБЗОР СИНТЕЗА БУТИЛОВЫХ СПИРТОВ РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ.....	106
А.Т.Кабылбекова, Е.Тілеуберді ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОЛИМЕРОСОДЕРЖАЩИХ БЫТОВЫХ ОТХОДОВ НА ОКИСЛЕНИЕ БИТУМА: ОБЗОР.....	119
З.И. Кобжасарова, М.К. Касымова, Г.Э. Орымбетова РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА НОВОГО ВИДА ХЛЕБА С ОБОГАЩЕННЫМ СОСТАВОМ.....	134
А. Куандыкова, Н. Жаникулов, Б. Таймасов, Б. Жакипбаев ИССЛЕДОВАНИЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КЛИНКЕРА АШЧИСАЙСКОГО МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ЗАВОДА В КАЧЕСТВЕ ДОБАВКИ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ПОРТЛАНДЦЕМЕНТНОГО КЛИНКЕРА.....	146
Г.М. Мадыебекова, Б.Ж. Муталиева, Э.М. Туркеева, А.Б. Исаева МИКРОКАПСУЛИРОВАНИЕ ПРОБИОТИЧЕСКИХ МИКРООРГАНИЗМОВ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ИХ СТАБИЛЬНОСТИ И ВЫЖИВАЕМОСТИ.....	157
Ж.Ш. Рахимбердиева, С.Д. Арыстанова У.Т. Жуматаева ФИТОХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ВИДОВ РОДА <i>ARTEMISIA L.</i> ЮЖНОГО КАЗАХСТАНСКОГО РЕГИОНА.....	172
Н. Сагдоллина, М. Ибраева, Ж. Мукажанова, М. Ozturk СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КИСЛОТНОГО СОСТАВА НЕКОТОРЫХ ПРЕДСТАВИТЕЛЕЙ СЕМЕЙСТВА <i>ASTERACEAE</i>	181
А.С. Унгарбаева, А.Т. Кабылбекова, Е.Тілеуберді, Х.И. Акбаров ОБЗОР МЕТОДОВ ПОЛУЧЕНИЯ КОКСА ИЗ ОСТАТКОВ ТЯЖЕЛОЙ НЕФТИ.....	191
А.А. Шинибекова, Х.Л. Диаз де Туеста, Б.К. Масалимова ОБЗОР: РАЗРАБОТКА УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ИЗ ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ.....	210

PHYSICAL SCIENCES

M. Yessenamanova, Zh. Yessenamanova, A. Tlepbergenova, M. Makhambet, N. Baitemirova THE RELATIONSHIP BETWEEN THE VALUES OF ACIDITY AND ELECTRICAL CONDUCTIVITY IN A HYDROPONIC INSTALLATION.....	7
Y.A. Zhakanbaev, V.N. Volodin, Yu.Zh. Tuleushev DECREASING THE MELTING TEMPERATURE OF NANOPARTICLES AND SURFACE TENSION AT THE MELT-CRYSTAL BOUNDARY IN THE HAFNIUM-CADMIUM SYSTEM.....	20
A.S. Larionov, A.S. Dikov, L.A. Dikova, S.O. Akayev, R.V. Kiryanov RESEARCH OF CONTAINER MATERIAL AFTER LONG-TERM USAGE FOR HYDROGEN STORAGE.....	28
Y. Myrzakulov, G. Yergaliyeva THERMODYNAMIC STRUCTURE OF BARDEEN-YANG-MILLS BLACK HOLES.....	36
V.M. Tereschenko SPECTROPHOTOMETRIC STANDARDS 8 ^m - 10 ^m . VI. ZONE +40°.....	47
A.Z. Tychengulova, K.A. Katpayeva INVESTIGATION OF THE INITIAL STAGE OF PHOTOACTIVATION IN MN-BASED TRANSITION METAL CATALYSTS.....	58
I. Khromushin, T. Aksenova, E. Slyamzhanov, K. Munasbaeva COMPARATIVE ANALYSIS OF PROTON CONDUCTORS BASED ON BARIUM CERATE AND LANTHANUM SCANDATE.....	71
CHEMISTRY	
A. Abdrakhmanova, N. Omarova, A. Sabitova THE EFFECT OF THE COMPOSITION OF ELECTROLYTES ON THE ELECTROCHEMICAL PARAMETERS OF ANODE-FREE LITHIUM-ION BATTERIES.....	83
M.A. Daurenbek ABOUT FOREIGN RESEARCH OF COMPLEX SULFIDE COMPOUNDS AS PART OF THEIR USE IN WASTEWATER PURIFICATION TECHNOLOGIES.....	94
S. Yegemberdiyeva, N. Khaldarov, M. Rakhimov A COMPREHENSIVE REVIEW ON BUTYL ALCOHOLS SYNTHESIS THROUGH DIFFERENT METHODS.....	106
A.T. Kabyzbekova, Ye. Tileuberdi STUDY OF THE INFLUENCE OF POLYMER-CONTAINING HOUSEHOLD WASTE ON BITUMEN OXIDATION: REVIEW.....	119
Z. Kobzhasarova, M. Kassymova, G. Orymbetova DEVELOPMENT OF TECHNOLOGY FOR THE PRODUCTION OF A NEW TYPE OF BREAD WITH AN ENRICHED COMPOSITION.....	134
A. Kuandykova, N. Zhanikulov, B. Taimasov B. Zhakipbayev INVESTIGATION OF THE USE OF CLINKER OF THE ASHCHISAI METALLURGICAL PLANT AS ADDITIVE IN THE PRODUCTION OF PORTLANDCEMENT CLINKER.....	146
G.M. Madybekova, B.Zh. Mutaliyeva, E.M. Turkeyeva, A.B. Issayeva MICROCAPSULATION OF PROBIOTIC MICROORGANISMS TO INCREASE THEIR STABILITY AND SURVIVAL.....	157
Zh.Sh. Rakhimberdiyeva, S.D. Arystanova U.T. Zhumataeva FITOCHEMICAL COMPOSITION OF SPECIES OF THE GENUS ARTEMISIA L. IN THE SOUTHERN KAZAKHSTAN REGION.....	172
N. Sagdollina, M. Ibrayeva, Zh. Mukazhanova, M. Ozturk COMPARATIVE ACIDIC COMBINATION ANALYSIS OF SELECTED <i>ASTERACEAE</i> FAMILY SPECIES.....	181
A.S. Ungarbayeva, A.T. Kabyzbekova, Ye. Tileuberdi, Kh.I. Akbarov REVIEW OF METHODS FOR OBTAINING COKE FROM HEAVY OIL WASTES.....	191
A.A. Shinibekova, J.L. Diaz de Tuesta, B.K. Massalimova REVIEW: DEVELOPMENT OF CARBON-BASED MATERIALS FROM NATURAL RESOURCES.....	210

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>

Подписано в печать 30.09.2023.

Формат 60x88^{1/8}. Бумага офсетная. Печать - ризограф.

22,0 п.л. Тираж 300. Заказ 3.