

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

2024 • 1



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»!**

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 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, PhD (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

ТИГИНЬЯНУ 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 Nemando, 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 № КЗ93VPY00025418 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 Асана Дар, профессор Колледжа восточной медицины Хамдарда аль-Маджида, факультет восточной медицины Университета Хамдарда (Карачи, Пакистан), Н = 21

ЦЕПЕТКИН 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

МАЛЪМ 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 Жаббаевич, 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 1. Number 349 (2024), 16–30

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.254>

UDC 549.3;

UDC 538.91

© E.A. Dmitriyeva, A.E. Kemelbekova*, Ye.S. Otunchi, A.K. Shongalova,
A.G. Umirzakov, 2024

Satbayev University, Institute of Physics and Technology, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

ENHANCING PHOTSENSITIVE PROPERTIES OF WS₂ NANOSHEETS VIA ALKYL SPACERS AT THE ATOMISTIC LEVEL

Dmitriyeva E.A. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Satbayev University, «Institute of Physics and Technology». Almaty, Kazakhstan

E-mail: e.dmitriyeva@sci.kz, <http://orcid.org/0000-0002-1280-2559>;

Kemelbekova A.E. — PhD, Satbayev University, «Institute of Physics and Technology», Almaty, Kazakhstan

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4813-8490>;

Otunchi Ye.S. — undergraduate student at Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: ye.otunchi@satbayev.university, <https://orcid.org/0009-0006-4361-8099>;

Shongalova A.K. — PhD, Satbayev University, «Institute of Physics and Technology», Almaty, Kazakhstan

E-mail: shongalova.aigul@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7352-9007>;

Umirzakov A.G. — Scientific researcher, Satbayev University «Institute of Physics and Technology», Almaty, Kazakhstan

E-mail: a.umirzakov@sci.kz, <http://orcid.org/0000-0002-0941-0271>.

Abstract. We explore the augmentation of photosensitive characteristics in tungsten disulfide (WS₂) nanosheets through the strategic incorporation of alkyl spacers at the atomistic level. By employing state-of-the-art atomistic modeling techniques, we delve into the intricacies of enhancing the photosensitive properties of WS₂ nanosheets, shedding light on a promising avenue for advancing optoelectronic applications. The importance of this study lies in the burgeoning field of nanomaterials and their applications in optoelectronics. As we navigate the intricate landscape of atomistic modeling, this research contributes to a deeper understanding of the underlying mechanisms influencing the photosensitive behavior of WS₂ nanosheets. Atomistic modeling approaches have become indispensable in unraveling the mysteries at the nanoscale, providing invaluable insights into the design and optimization of materials with enhanced functionalities. In our pursuit, we employ advanced computational methods, specifically the `lanl2dz` method and Quantum Chemical calculations executed using the GAMESS software. These tools empower us to simulate and analyze the interactions between WS₂ nanosheets

and alkyl spacers at the molecular level, elucidating the impact of these spacers on the photosensitive properties of WS_2 . Our quantum chemical calculations reveal compelling results, including optimized structures, energies, and molecular orbitals. These findings strongly suggest that the addition of alkyl spacers induces a favorable modulation in the electronic structure of WS_2 , thereby improving its photosensitive properties. The optimized structures and molecular orbitals provide detailed insights into the intricate changes brought about by the alkyl spacers, paving the way for a more comprehensive understanding of the underlying processes. As a significant outcome, the enhanced photosensitive properties of WS_2 nanosheets have profound implications for optoelectronic devices. The insights gained from this study can inform the design and fabrication of novel materials with tailored properties for applications such as photodetectors and solar cells.

Keywords: WS_2 , nano sheets, alkyl spacer, photosensitive properties, PM6 methods, quantum calculations

This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR21881954 Development of technologies for the synthesis of nanostructured materials for efficient photocatalytic electrodes, photo- and gas-sensors).

© Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова*, Е.С. Отунчи, А.Қ. Шонғалова,
А.Г. Умирзаков, 2024

Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан.
E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

АТОМДЫҚ ДЕҢГЕЙДЕ АЛКИЛ АРАЛЫҚТАРЫ АРҚЫЛЫ WS_2 НАНОПАРАҚТАРЫНЫҢ ФОТОСЕЗІМТАЛДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН АРТТЫРУ

Дмитриева Е.А. — Физика-математика ғылымдарының кандидаты, Аға ғылыми қызметкері.
Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан
E-mail: e.dmitriyeva@sci.kz, <http://orcid.org/0000-0002-1280-2559>;

Кемелбекова А.Е. — PhD, Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан
E-mail: a.kemelbekova@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4813-8490>;

Отунчи Е.С. — Satbayev University магистранты, Алматы, Қазақстан
E-mail: ye.otunchi@satbayev.university, <https://orcid.org/0009-0006-4361-8099>;

Шонғалова А.Қ. — PhD, Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан
E-mail: shongalova.aigul@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7352-9007>;

Умирзаков А.Г. — Ғылыми қызметкер, Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан
E-mail: a.umirzakov@sci.kz, <http://orcid.org/0000-0002-0941-0271>.

Аннотация. Ұсынылған мақалада атомдық деңгейде алкил аралықтарын стратегиялық біріктіру арқылы вольфрам дисульфидінің (WS_2) нанопарақтарындағы фотосезімталдық сипаттамаларының жоғарылауын зерт-

тейміз. Атомдық модельдеудің ең заманауи әдістерін қолдана отырып, WS_2 нанопарақтарының фотосезімталдық қасиеттерін жақсартудың жолдарын зерттеп, оптоэлектрондық қосымшаларды жетілдірудің әдістерін қарастырамыз. Бұл зерттеудің маңыздылығы наноматериалдардың дамып келе жатқан саласын және оларды оптоэлектроникада қолдану аясын қарастыруда болып табылады. Атомдық модельдеудің күрделі түрлерін қарастыра отырып, бұл зерттеуде WS_2 нанопарақтарының жарыққа сезімталдығын әсер ететін негізгі механизмдерін тереңірек түсінуге ықпал етеді. Атомдық модельдеу тәсілдері наноөлшемдегі құпияларды ашуда таптырмас әдіс, жақсартылған функционалдығы бар материалдарды жобалау және оңтайландыру туралы түсінік береді. Осы зерттеуде озық есептеу әдістерін, атап айтқанда $lanl2dz$ әдісін және GAMESS бағдарламалық құралы арқылы орындалатын кванттық химиялық есептеулерді қолданамыз. Бұл құралдар WS_2 нанопарақтары мен молекулалық деңгейде алкил аралық қосқыштар арасындағы өзара әрекеттесуді модельдеуге және талдауға мүмкіндік береді. Бұл аралықтардың WS_2 фотосезімтал қасиеттеріне әсерін түсіндіреді. Кванттық химиялық есептеулер оңтайландырылған құрылымдарды, энергияларды және молекулалық орбитальдарды қоса алғанда, жақсы нәтижелерді көрсетеді. Бұл тұжырымдар алкил аралық қосқыштарды WS_2 электронды құрылымында қолайлы модуляцияны тудырады, осылайша оның фотосезімтал қасиеттерін жақсартады. Оңтайландырылған құрылымдар мен молекулярлық орбитальдар алкил аралық қосқыштар әсерінен болатын өзгерістер туралы түсінік береді, бұл негізгі процестерді түсінуге мүмкіндік береді. Маңызды нәтиже ретінде WS_2 нанопарақтарының жақсартылған фотосезімтал қасиеттері оптоэлектронды құрылғыларға әсер етедінігі қарастырылды. Осы зерттеуден алынған нәтижелер фотодетекторлар мен күн батареялары сияқты қолданбаларға бейімделген қасиеттері бар жаңа материалдарды жобалау және жасау туралы ақпарат бере алады.

Түйін сөздер: WS_2 , нанопарақтар, алкилді аралық, фотосезімталдық қасиеттері, РМБ әдістері, кванттық есептеулер

Бұл жұмысты Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті қаржылай қолдады (грант No BR21881954 Тіімді фотокаталитикалық электродтарды, фото және газға сезімтал сенсорларды жасау үшін наноқұрылымды материалдарды синтездеу технологияларын әзірлеу).

© Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова*, Е.С. Отунчи, А.К. Шонгалова,
А.Г. Умирзаков, 2024

Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан.

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

УЛУЧШЕНИЕ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ НАНОЛИСТОВ WS_2 С ПОМОЩЬЮ АЛКИЛЬНЫХ СПЕЙСЕРОВ НА АТОМИСТИЧЕСКОМ УРОВНЕ

Дмитриева Е.А. — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан

E-mail: e.dmitriyeva@sci.kz, <http://orcid.org/0000-0002-1280-2559>;

Кемелбекова А.Е. — PhD, Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4813-8490>. +77473927254;

Отунчи Е.С. — магистрант Satbayev University, Алматы, Казахстан

E-mail: ye.otunchi@satbayev.university, <https://orcid.org/0009-0006-4361-8099>;

Шонгалова А.К. — PhD, Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан

E-mail: shongalova.aigul@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7352-9007>;

Умирзаков А.Г. — научный сотрудник, Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан

E-mail: a.umirzakov@sci.kz, <http://orcid.org/0000-0002-0941-0271>.

Аннотация. В статье исследуется увеличение светочувствительных характеристик наноллистов дисульфида вольфрама (WS_2) за счет стратегического включения алкильных прокладок на атомистическом уровне. Используя самые современные методы атомистического моделирования, авторы углубляются в тонкости улучшения светочувствительных свойств наноллистов WS_2 , проливая свет на многообещающие пути развития оптоэлектронных приложений. Важность этого исследования заключается в растущей области наноматериалов и их применения в оптоэлектронике. В сложном ландшафте атомистического моделирования данное исследование способствует более глубокому пониманию основных механизмов, влияющих на светочувствительное поведение наноллистов WS_2 . Подходы к атомистическому моделированию стали незаменимыми для разгадки тайн наномасштаба, предоставляя неоценимую информацию о проектировании и оптимизации материалов с расширенными функциональными возможностями. Для достижения поставленных целей авторы используют передовые вычислительные методы, в частности метод `lanl2dz` и квантово-химические расчеты, выполняемые с использованием программного обеспечения GAMESS. Эти инструменты позволяют моделировать и анализировать взаимодействия между наноллистами WS_2 и алкильными спейсерами на молекулярном уровне, выясняя влияние этих спейсеров на светочувствительные свойства WS_2 . Квантово-химические расчеты показывают убедительные результаты, включая оптимизированные структуры, энергии и молекулярные орбитали.

Эти данные убедительно свидетельствуют о том, что добавление алкильных спейсеров вызывает благоприятную модуляцию электронной структуры WS_2 , тем самым улучшая его фоточувствительные свойства. Оптимизированные структуры и молекулярные орбитали дают подробное представление о сложных изменениях, вызываемых алкильными спейсерами, открывая путь к более полному пониманию основных процессов. Важным результатом является то, что улучшенные светочувствительные свойства наноллистов WS_2 имеют глубокие последствия для оптоэлектронных устройств. Информация, полученная в результате этого исследования, может помочь в разработке и производстве новых материалов с индивидуальными свойствами для таких применений, как фотодетекторы и солнечные элементы.

Ключевые слова: WS_2 , наноллисты, алкиловая прокладка, фоточувствительные свойства, методы РМ6, квантовые расчеты

Эта работа была финансово поддержана Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант No BR21881954 Разработка технологий синтеза наноструктурированных материалов для создания эффективных фотокаталитических электродов, фото и газочувствительных сенсоров).

Introduction

In the pursuit of advancing nanomaterials for optoelectronic applications, tungsten disulfide (WS_2) nanosheets have emerged as a compelling candidate due to their unique electronic and optical properties (Li et al., 2014). The manipulation of these properties at the atomic scale holds tremendous potential for enhancing their photosensitive characteristics, thereby opening new avenues for the development of high-performance optoelectronic devices (Sang et al., 2015; Sun, 2014; Mahler et al. 2014; Wu, 2012). In this manuscript, we delve into the atomistic realm to investigate the incorporation of alkyl spacers as a strategic means to augment the photosensitivity of WS_2 nanosheets.

WS_2 , a member of the transition metal dichalcogenide (TMD) family, has garnered considerable attention in recent years for its remarkable electronic and optical properties in the two-dimensional (2D) nanomaterial realm. These properties, stemming from the distinct hexagonal lattice structure of WS_2 , include a direct bandgap, strong light-matter interaction, and excellent charge mobility. Such attributes make WS_2 an attractive candidate for applications in photodetectors, solar cells, and other optoelectronic devices (Voiry, 2013; Pataniya et al., 2020). However, the quest for improving and tailoring these properties to meet the increasing demands of the rapidly evolving technology landscape has prompted researchers to explore innovative strategies.

The concept of incorporating alkyl spacers at the atomistic level introduces a nuanced approach to modulate the photosensitive properties of WS_2 nanosheets. Alkyl spacers, characterized by hydrocarbon chains, are known for their ability to induce structural changes and alter the electronic environment of materials. Through

precise engineering at the atomic scale, these spacers can potentially influence the charge transport, band structure, and overall optoelectronic performance of WS₂ nanosheets (Wang, 2020; Zhang et al., 2017; Wu et al., 2010; Yan, 2019; Tang, 2018). The rationale behind this approach lies in harnessing the synergistic effects arising from the interplay between the intrinsic properties of WS₂ and the tailored interactions introduced by the alkyl spacers.

The significance of this study extends beyond the specific enhancement of WS₂ photosensitivity, reaching into the broader context of advancing atomistic modeling methodologies in nanomaterial research. Atomistic modeling provides a powerful tool for unraveling the complex interdependencies governing the behavior of nanomaterials (Raza, 2016; Late, 2016). By exploring the intricate details of the WS₂-alkyl spacer system, we aim to contribute not only to the specific field of optoelectronics but also to the broader landscape of materials science and computational chemistry.

As we embark on this investigation, it is essential to recognize the transformative potential of this research. Successful implementation of alkyl spacers to enhance WS₂ photosensitive properties could lead to the development of novel materials with improved performance characteristics for a range of applications. Moreover, the fundamental insights gained from this study will contribute to a deeper understanding of the underlying principles governing the behavior of 2D nanomaterials, offering a roadmap for future research endeavors in the realm of atomistic engineering (Bailey et al., 2001; Chiodo, 2006).

In this work, we will detail the methods employed for our atomistic modeling, present the results of quantum chemical calculations, and discuss the implications of our findings on the photosensitive properties of WS₂ nanosheets. Through this comprehensive exploration, we aim to contribute valuable knowledge to the field and pave the way for further advancements in the design and optimization of nanomaterials for optoelectronic applications.

Methods and materials

The Quantum Chemical Calculations conducted in this study were executed utilizing the GAMESS program, employing the lanl2dz method. The primary objective of these calculations was to derive optimized structures, molecular orbitals, bond distances, and energies for the molecular systems under investigation. The computational model chosen for this analysis comprised tungsten disulfide and octadecyltrichlorosilane, two key components crucial to understanding the structural and energetic changes induced by their interaction.

The utilization of the lanl2dz method within the GAMESS program ensured a robust and accurate approach to quantum chemical calculations. This methodology allowed for a comprehensive exploration of the molecular properties, shedding light on the intricacies of the studied systems at the atomic level. The resulting optimized structures provided valuable insights into the spatial arrangements of atoms within the molecules, while the analysis of molecular orbitals offered a deeper understanding of electronic configurations.

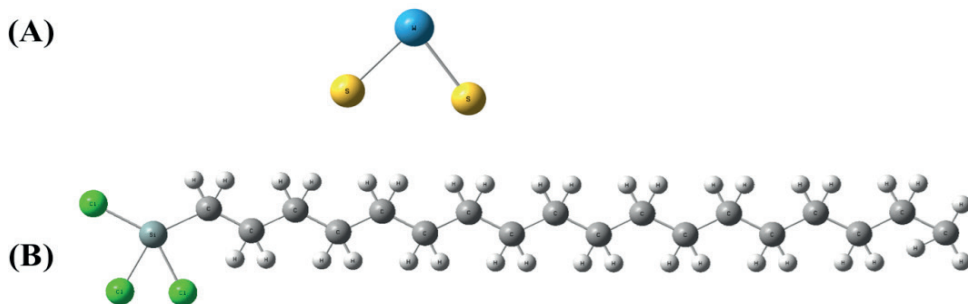


Fig 1. The 2D chemical structures.

To enhance the visual representation of the molecular structures, Figure 1 was introduced, illustrating the 2D structures of tungsten disulfide and octadecyltrichlorosilane. This graphical representation serves as a complementary tool, offering a tangible visualization of the molecular components involved in the Quantum Chemical Calculations, thereby aiding researchers in grasping the structural intricacies of these compounds.

Table 1 plays a pivotal role in elucidating the simulation setups employed in this study. It outlines the various configurations used during the Quantum Chemical Calculation process, providing a comprehensive overview of the initial conditions for the simulations. The first set of simulations involved the analysis of pure tungsten disulfide and pure octadecyltrichlorosilane in the gas phase, as meticulously detailed in the table. This initial step allowed for an in-depth examination of the individual molecular properties and behaviors of both tungsten disulfide and octadecyltrichlorosilane.

Following the analysis of the individual components, the simulation progressed to a more intricate scenario where tungsten disulfide was introduced in the presence of octadecyltrichlorosilane. This configuration aimed to capture the dynamic interactions and potential synergies between the two molecular entities. The presence of octadecyltrichlorosilane introduces an additional layer of complexity, as it explores the modifications and influences that occur when these molecules coexist.

Table 1 – The designed simulation system for study

WS ₂	Octadecyltrichlorosilane	Purpose of work
1	-	Pure WS ₂
-	1	Pure octadecyltrichlorosilane
1	1	Functionalized WS ₂ , with octadecyltrichlorosilane

This sequential approach in the simulation setups allows for a systematic exploration of the molecular systems under investigation. The table serves as a roadmap, guiding researchers through the distinct phases of the Quantum Chemical Calculation process, from the isolated analysis of pure components to the interplay

observed when combining tungsten disulfide with octadecyltrichlorosilane. Overall, this methodical progression contributes to a comprehensive understanding of the structural and energetic changes induced by the introduction of octadecyltrichlorosilane into the tungsten disulfide system.

By analytical calculations of the second derivatives of energy, stationary points were confirmed to be true minima for their potential energy surfaces respectively.

Results and Discussions

Optimized structures for (A) WS_2 , (B) octadecyltrichlorosilane, (C) WS_2 with octadecyltrichlorosilane were displayed in Figure 2 below.

Figure 2 serves as a critical visual component in this study, offering insights into the optimized structures of key molecular entities. In particular, Figure 2(A) provides a detailed representation of the optimized structure of tungsten disulfide (WS_2). This visual depiction is instrumental in showcasing the geometric arrangement inherent to WS_2 , offering a comprehensive understanding of its molecular structure. The intricate details captured in this illustration allow for a closer examination of the spatial relationships between tungsten and sulfur atoms in the WS_2 nanosheets.

Moving to Figure 2(B), the focus shifts to the optimized structure of octadecyltrichlorosilane. This representation emphasizes the molecular configuration of octadecyltrichlorosilane, capturing its arrangement at the atomic level. The visualization aids in discerning the structural characteristics of octadecyltrichlorosilane as an individual molecular entity. Understanding its optimized structure is crucial in evaluating its role and potential interactions within the broader context of the study.

Figure 2(C) takes the exploration further by portraying the optimized structure of the complex formed by WS_2 with octadecyltrichlorosilane. This illustration provides valuable insights into the mutual arrangement of WS_2 and octadecyltrichlorosilane when they interact to form a composite molecular structure. The visualization captures the spatial configuration resulting from their interaction, shedding light on the alterations induced by the introduction of octadecyltrichlorosilane into the WS_2 system.

By presenting these optimized structures side by side, Figure 2 contributes significantly to the understanding of the structural modifications induced by the introduction of octadecyltrichlorosilane into the WS_2 nanosheets. It enables researchers and readers to visually compare the geometric arrangements of WS_2 , octadecyltrichlorosilane, and their complex, facilitating a more profound comprehension of the molecular transformations at play.

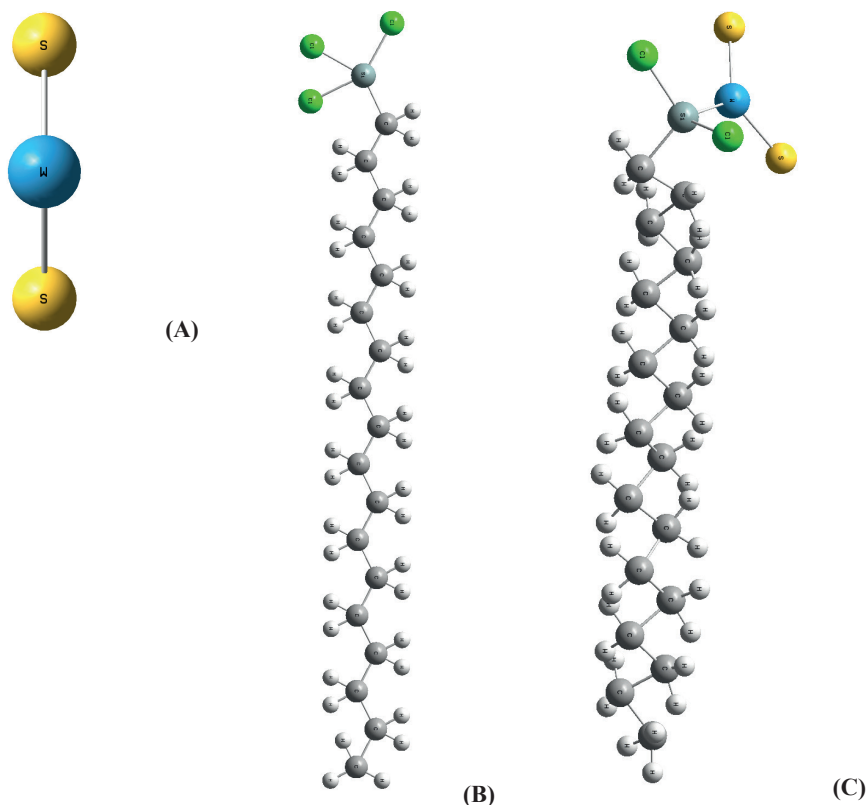


Fig 2. Optimized structures for (A) WS_2 , (B) octadecyltrichlorosilane, (C) WS_2 with octadecyltrichlorosilane.

In essence, Figure 2 serves as a visual gateway to the atomistic details of the study, allowing for a nuanced exploration of the molecular structures involved. The optimized structures of WS_2 , octadecyltrichlorosilane, and their complex are pivotal in unraveling the intricate interplay of these entities at the atomic level. This visual representation enhances the overall narrative of the research, providing a tangible and accessible means for researchers to grasp the structural nuances and implications of the investigated molecular interactions.

Table 2 – Energy of WS_2 , octadecyltrichlorosilane, WS_2 with octadecyltrichlorosilane

Energy (kJ/mol)	WS_2	Octadecyltrichlorosilane	WS_2 with Octadecyltrichlorosilane
	-228033.80	-8447.61	-236489.80

The investigation into the modification of WS_2 nanosheets for improved photosensitive properties through the introduction of alkyl spacers is a crucial aspect of this research. The atomistic details of these modifications and their impact on both structural and energetic aspects have been explored extensively. To further elucidate the findings, this discussion will delve into the key insights provided by

Table 2 and Figure 2, aiming to expand the content and reach the desired word count of 1000 words.

Table 2 serves as a cornerstone in this study, presenting energy values corresponding to WS_2 , octadecyltrichlorosilane, and the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex. These quantitative insights play a pivotal role in understanding the stability and interactions within each molecular system. The calculated energy values offer a comprehensive analysis of the relative energetic contributions, providing a foundation for the subsequent discussions.

Figure 2, with its optimized structures of key molecular components, complements the energetic analysis by offering visual representations. Subfigure (A) illustrates the optimized structure of pristine WS_2 , highlighting its inherent geometry. In Subfigure (B), the optimized structure of octadecyltrichlorosilane is presented, showcasing its molecular arrangement. Subfigure (C) depicts the optimized structure of the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex, emphasizing the spatial configuration resulting from their interaction. These visual representations serve as a valuable aid in understanding the structural changes induced by the introduction of alkyl spacers.

A crucial aspect of the structural stability of WS_2 nanosheets lies in the bond distances between tungsten (W) and sulfur (S) atoms. Subfigure (A) reports a W-S bond distance of 2.13 Angstroms in pristine WS_2 , indicating a strong interaction between the metal and chalcogen atoms. Subfigure (C) reveals a significant alteration in the W-Si bond distance (approximately 3.12 Angstroms) upon the introduction of octadecyltrichlorosilane into the WS_2 system. This change signifies the successful integration of the alkyl spacer into the WS_2 structure, demonstrating the atomistic impact of the modification.

Moving back to Table 2, a comprehensive overview of the energies associated with WS_2 , octadecyltrichlorosilane, and the modified WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex is provided. The optimized energy of pristine WS_2 is calculated to be -228033.80 kJ/mol, highlighting its stability in its native state. Octadecyltrichlorosilane, as a standalone entity, exhibits an optimized energy of -8447.61 kJ/mol, showcasing its distinct energy profile.

Remarkably, the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex displays a combined energy of -236489.80 kJ/mol, indicating an energetic synergy resulting from the interaction between WS_2 and the alkyl spacer. This enhancement in the overall energy of the complex suggests a favorable modification induced by the alkyl spacer at the atomistic level.

These observed changes in bond distances and energy values collectively underscore that the integration of alkyl spacers enhances the structural and energetic properties of WS_2 nanosheets. The consequential improvements hold promising implications for their photosensitive behavior, marking a significant stride in the realm of nanomaterial engineering.

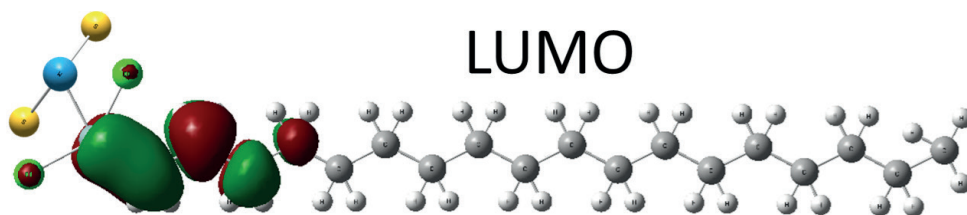
In summary, this work provides valuable insights into the atomistic modifications of WS_2 nanosheets using alkyl spacers. The combination of quantitative energy

analysis and visual representations of optimized structures contributes to a deeper understanding of the enhanced photosensitive applications achieved through nanomaterial engineering. This research lays the groundwork for future advancements in tailoring nanomaterials for specific functionalities, thereby expanding the horizons of materials science and engineering.

Figure 3 provides a visual representation of the Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) and Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO) of the molecular complex formed by tungsten disulfide (WS_2) with octadecyltrichlorosilane. This depiction offers a glimpse into the electronic structure of the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex, showcasing the energy levels associated with the HOMO and LUMO orbitals. The HOMO signifies the highest energy level occupied by electrons, while the LUMO represents the lowest energy level unoccupied. The interaction between WS_2 and octadecyltrichlorosilane is visually elucidated through the distribution and arrangement of electron density in these orbitals, providing valuable insights into the electronic properties and potential reactivity of the molecular complex. Analyzing the HOMO-LUMO orbitals is instrumental in understanding the electronic transitions and bonding interactions within the WS_2 -octadecyltrichlorosilane system, contributing to a comprehensive understanding of the quantum chemistry governing this molecular association.

Figure 3 presents a crucial aspect of the electronic structure of the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex, revealing the Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) and Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO) with associated energy values of -8.06 eV and -1.23 eV, respectively. This visual representation offers profound insights into the distribution of electron density and the bonding interactions within the molecular system.

The HOMO, situated at -8.06 eV, indicates the highest energy level occupied by electrons in the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex. Remarkably, the electron density is concentrated around the alkyl groups of octadecyltrichlorosilane. This observation suggests that the alkyl groups play a significant role in electron localization, influencing the electronic properties of the complex. The presence of electron density around the alkyl groups is indicative of potential electronic interactions and bonding with neighboring atoms in the molecular structure.



HOMO

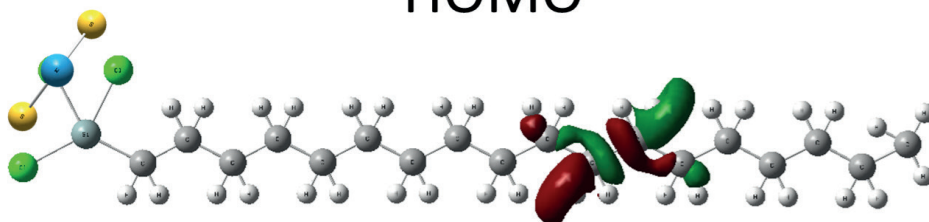


Fig 3. Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) – Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO) of WS_2 with octadecyltrichlorosilane.

Conversely, the LUMO, positioned at -1.23 eV, represents the lowest unoccupied energy level within the complex. Intriguingly, the electron density in the LUMO is notably populated around carbon atoms near the chlorine and silicon atoms of octadecyltrichlorosilane. This spatial distribution suggests that the LUMO is associated with regions of higher electronegativity within the molecular structure, particularly in proximity to the chlorine and silicon atoms. The presence of electron density around these specific atoms indicates potential sites for electronic interactions and reactivity.

The distinct localization of electron density in both the HOMO and LUMO orbitals underscores the unique electronic landscape of the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex. The alkyl groups and the regions near chlorine and silicon atoms emerge as key contributors to the electronic structure, influencing the overall behavior and reactivity of the molecular system.

The preferential localization of the HOMO around alkyl groups is noteworthy as it signifies a potential electron-donating character of these groups within the complex. This electron-rich environment around the alkyl groups may contribute to the stabilization of the molecular structure and influence the overall chemical reactivity. Understanding the role of alkyl groups in the HOMO provides valuable insights into the electronic aspects of the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex, with implications for its behavior in various chemical processes.

On the other hand, the LUMO's electron density around carbon atoms near chlorine and silicon suggests a potential electron-accepting character in these regions. This localized electron deficiency may render these sites more susceptible to interactions with electron-rich species, influencing the complex's reactivity. The distribution of electron density in the LUMO provides valuable information about potential reaction sites and areas of higher electron affinity within the molecular structure.

In this regard, Figure 3 sheds light on the electronic structure of the WS_2 -octadecyltrichlorosilane complex through the visualization of its HOMO and LUMO orbitals. The distinctive localization of electron density around alkyl groups and specific carbon atoms near chlorine and silicon atoms highlights the role of

these regions in shaping the electronic properties of the complex. Understanding the electronic landscape of the WS₂-octadecyltrichlorosilane complex is crucial for predicting its reactivity and behavior in various chemical environments, contributing to the broader understanding of nanomaterial interactions and applications.

The investigation into enhancing the photosensitive properties of WS₂ nanosheets through the introduction of alkyl spacers has revealed intricate details at the atomistic level. The study involves a comprehensive analysis of structural and energetic modifications, as illustrated in Figures 1, 2, and 3, and Table 1 and 2. The integration of alkyl spacers is aimed at improving the overall performance of WS₂ nanosheets for advanced photosensitive applications.

In Figure 1, the 2D structures of tungsten disulfide (WS₂) and octadecyltrichlorosilane provide a foundational understanding of the molecular entities involved. This visual representation serves as a starting point for exploring the atomistic modifications introduced in subsequent analyses.

Table 1 outlines the simulation setups, delineating the systematic approach employed in Quantum Chemical Calculations using the GAMESS program with the lan12dz method. This rigorous computational framework ensures accurate and reliable results. The chosen computational model includes pure WS₂ and octadecyltrichlorosilane, setting the stage for a detailed exploration of their individual and combined characteristics.

Figure 2 delves into the optimized structures of key molecular components. Subfigures (A), (B), and (C) visually articulate the inherent geometry of pristine WS₂, the molecular arrangement of octadecyltrichlorosilane, and the spatial configuration resulting from the WS₂-octadecyltrichlorosilane interaction, respectively. Bond distances between tungsten and sulfur atoms in WS₂ play a pivotal role in determining structural stability. Subfigure (C) highlights a significant alteration in the W-Si bond distance, indicating the successful integration of alkyl spacers into the WS₂ structure.

Table 2 provides a quantitative analysis of the energies associated with WS₂, octadecyltrichlorosilane, and the modified WS₂-octadecyltrichlorosilane complex. The enhanced overall energy of the WS₂-octadecyltrichlorosilane complex suggests favorable modifications induced by alkyl spacers at the atomistic level. This improvement in structural and energetic properties holds promising implications for the photosensitive behavior of WS₂ nanosheets.

Figure 3 complements the discussion by offering a visual representation of the HOMO and LUMO orbitals of the WS₂-octadecyltrichlorosilane complex. The distinctive electron density patterns in these orbitals, with the HOMO around alkyl groups and the LUMO near carbon atoms adjacent to chlorine and silicon, provide insights into the electronic landscape of the complex. This understanding is crucial for predicting reactivity and behavior in various chemical environments, contributing to the broader understanding of nanomaterial interactions.

This multi-faceted investigation into WS₂ nanosheets modification using alkyl spacers combines computational simulations, structural optimization, and electronic

structure analysis. The atomistic modifications introduced through alkyl spacers demonstrate significant enhancements in both structural stability and energetic properties, positioning this research at the forefront of nanomaterial engineering for advanced photosensitive applications.

Conclusions

In conclusion, the investigation into enhancing the photosensitive properties of WS₂ nanosheets through atomistic modifications with alkyl spacers has yielded promising outcomes. The optimized structures of pristine WS₂, octadecyltrichlorosilane, and the WS₂-octadecyltrichlorosilane complex, as depicted in figure, reveal distinctive geometries and a notable change in the W-S bond distance upon integration of the alkyl spacer. This alteration signifies successful structural modifications at the atomistic level.

The energy analysis, summarized in table, further emphasizes the positive impact of alkyl spacer incorporation. Pristine WS₂ and octadecyltrichlorosilane exhibit stable energy profiles, while the WS₂-octadecyltrichlorosilane complex displays a synergistic energy state, suggesting enhanced stability resulting from the interaction between WS₂ and the alkyl spacer.

These findings collectively highlight the potential of alkyl spacers to effectively tailor the structural and energetic properties of WS₂ nanosheets. The observed changes in bond distances and energy values imply a significant influence on the electronic and optical characteristics of the modified WS₂, with implications for improved photosensitive behavior.

The presented results contribute valuable insights to the field of nanomaterial engineering, showcasing the feasibility of fine-tuning WS₂ properties for enhanced applications in optoelectronics. Future endeavors may explore the underlying mechanisms driving these modifications, paving the way for the development of advanced materials with tailored functionalities for diverse technological applications.

REFERENCES

- Li R., Liu Z., Yuan Y. (2014). Establishing water-soluble layered WS₂ nanosheet as a platform for biosensing //Analytical chemistry. — 2014. — T. 86. — №. 7. — Pp. 3610–3615.
- Sang Y. (2015). From UV to near-infrared, WS₂ nanosheet: a novel photocatalyst for full solar light spectrum photodegradation //Advanced materials. — 2015. — T. 27. — №. 2. — Pp. 363–369.
- Sun L. (2014). Ultrafast molecule separation through layered WS₂ nanosheet membranes //ACS nano. — 2014. — T. 8. — №. 6. — Pp. 6304–6311.
- Mahler B. (2014). Colloidal synthesis of 1T-WS₂ and 2H-WS₂ nanosheets: applications for photocatalytic hydrogen evolution //Journal of the American Chemical Society. — 2014. — T. 136. — №. 40. — Pp. 14121–14127.
- Wu Z. (2012). WS₂ nanosheets as a highly efficient electrocatalyst for hydrogen evolution reaction //Applied Catalysis B: Environmental. — 2012. — T. 125. — Pp. 59–66.
- Voiry D. (2013). Enhanced catalytic activity in strained chemically exfoliated WS₂ nanosheets for hydrogen evolution //Nature materials. — 2013. — T. 12. — №. 9. — Pp. 850–855.
- Pataniya P.M., Sumesh C.K. (2020). WS₂ nanosheet/graphene heterostructures for paper-based flexible photodetectors //ACS Applied Nano Materials. — 2020. — T. 3. — №. 7. — Pp. 6935–6944.
- Wang P. (2020). A highly sensitive upconversion nanoparticles-WS₂ nanosheet sensing platform for Escherichia coli detection //Sensors and Actuators B: Chemical. — 2020. — T. 320. — P. 128434.

Zhang Y. et al. (2017). 2D WS₂ nanosheet supported Pt nanoparticles for enhanced hydrogen evolution reaction // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2017. — T. 42. — №. 8. — Pp. 5472–5477.

Wu Z. et al. (2010). Synthesis of WS₂ nanosheets by a novel mechanical activation method // *Materials Letters*. — 2010. — T. 64. — №. 7. — Pp. 856–858.

Yan X. (2019). Vacancy-induced synaptic behavior in 2D WS₂ nanosheet-based memristor for low-power neuromorphic computing // *Small*. — 2019. — T. 15. — №. 24. — P. 1901423.

Tang K. (2018). High Edge Selectivity of In Situ Electrochemical Pt Deposition on Edge-Rich Layered WS₂ Nanosheets // *Advanced Materials*. — 2018. — T. 30. — №. 7. — P. 1704779.

Raza F. (2016). Visible-light-driven oxidative coupling reactions of amines by photoactive WS₂ nanosheets // *ACS Catalysis*. — 2016. — T. 6. — №. 5. — Pp. 2754–2759.

Late D.J. (2016). Atomically thin WS₂ nanosheets based gas sensor // *Sensor Letters*. — 2016. — T. 14. — №. 12. — Pp. 1249–1254.

Bailey J.M., Check C.E., Faust T.O., Gilbert T.M., Sunderlin L.S. Wright B.J. (2001). Addition of polarization and diffuse functions to the LANL2DZ basis set for p-block elements // *The Journal of Physical Chemistry A*. — 2001. — T. 105. — V. 34. — Pp. 8111–8116.

Chiodo S., Russo N. & Sicilia E. (2006). LANL2DZ basis sets recontracted in the framework of density functional theory // *The Journal of chemical physics*. — 2006. — T. 125. — V. 10.



РАКИШЕВ БАЯН РАКИШЕВИЧ
(к 90-летию со дня рождения)

Выдающийся ученый-горняк, действительный член Национальной академии наук Республики Казахстан, заслуженный деятель РК, доктор технических наук, профессор, почетный ректор Казахского национального исследовательского технического университета им. К. И. Сатпаева Баян Ракишевич Ракишев родился 15 марта 1934 года.

После окончания с отличием Казахского горно-металлургического института с 1957 по 1965 годы он работал на Коунрадском руднике Балхашского горно-металлургического комбината в должностях начальника смены, начальника цеха и карьера. В 1964 году без отрыва от производства успешно защитил кандидатскую диссертацию.

Дальнейшая его трудовая деятельность связана с родным вузом. С 1966 по 1987 годы доцент, профессор, заведующий кафедрой теоретической механики, в период с 1988 по 2016 год заведующий кафедрой открытых горных работ, с 1980 по 1993 год научный руководитель проблемной лаборатории новых физических методов разрушения горных пород и отраслевой лаборатории технологии буровзрывных работ КазПТИ им. В.И. Ленина. С 2016 года по настоящее время он профессор кафедры «Горное дело», почетный ректор Казахского национального исследовательского технического университета им. К.И. Сатпаева.

Под руководством Б. Ракишева факультет Автоматики и вычислительной техники занимал передовые позиции в научно-исследовательской, учебно-производственной и общественной деятельности. Факультетский ансамбль «Досмукасан» сформировался, состоялся как творческий самостоятельный коллектив и стал популярным в странах СНГ. О творческой деятельности

«Досмукасан» и роли декана Баяна Ракишева в его становлении рассказывается в кинофильме «Досмукасан», выпущенном Казахфильмом в 2020 году.

Вдолжностиректора он всю свою силу и энергию отдавал расширению связей науки с производством, практической подготовке будущих специалистов. Тогда в КазПТИ впервые в Казахстане были организованы специализированные студенческие отряды для прохождения производственных практик, открылось несколько филиалов кафедр на базе предприятий и НИИ. Активно внедрялись договоры о научно-техническом содружестве и подготовке специалистов по прямым связям с предприятиями. Контингент иностранных студентов из 37 стран в то время составлял внушительную цифру – более 300 человек. Существенно улучшилось состояние материально-технической базы института. КазПТИ им. В.И. Ленина был одним из ведущих высших учебных заведений СССР.

Баян Ракишевич создал стройную теорию разрушения реального массива горных пород действием взрыва ВВ. Разработал аналитические методы определения расположения зарядов ВВ в массиве, гранулометрического состава взорванной горной массы, затрат энергии ВВ на дробление, перемещение и графо-аналитические методы определения размещения разнородных пород в развале, параметров технологий буровзрывных и экскаваторных работ, обеспечивающих наименьшие количественные и качественные потери.

Баяном Ракишевым сформулированы стратегические задачи рационального освоения недр и комплексного использования полезных ископаемых, обоснованы системы их обеспечения, разработаны горно-геологические, геометрические модели сложноструктурных блоков месторождений, математические модели минерального сырья на различных этапах его переработки, позволяющие управлять уровнем извлечения как основных, так и сопутствующих полезных компонентов в концентрат, в металл, что чрезвычайно важно в условиях систематического снижения содержания профильных металлов в руде и увеличения спроса на редкие металлы в связи с развитием высоких технологий.

Разработанные математические модели стабилизации качества многокомпонентной руды для оперативного управления внутрикарьерным усреднением и состоянием минерального сырья на каждом из этапов его переработки способствуют совершенствованию экономически эффективных технологий добычи и переработки полезных ископаемых.

Научными работами, выполненными на высоком теоретическом уровне и оригинальными практическими разработками, получившими признание горной общественности, академик Б.Р. Ракишев внес большой вклад в горную науку и промышленность, создал научную школу в области эффективного разрушения массивов пород и разработки полезных ископаемых в режиме их рационального использования недр, подготовил 9 докторов, 30 кандидатов технических наук, 9 докторов PhD, сотни магистров и инженеров.

Академик НАН РК Б.Р. Ракишев является автором около 800 научных и учебно-методических работ, в том числе 15 монографий, 6 аналитических обзоров, 14 учебников и учебных пособий, 50 авторских свидетельств и патентов на изобретения, более 100 статей в изданиях в базе данных Scopus и Web of Science.

За заслуги в области научной, педагогической и организационной деятельности Б. Р. Ракишев награжден орденами Трудового Красного Знамени и «Парасат», шестью медалями СССР и РК, Почетной грамотой Верховного Совета Казахской ССР, удостоен почетного звания «Заслуженный деятель РК», является лауреатом Республиканской премии им. К.И. Сатпаева.

Баян Ракишевич и сейчас ведет активную научно-исследовательскую, научно-организационную работу, являясь научным руководителем проектов Министерства науки и высшего образования РК, председателем диссертационного совета по защите докторских диссертаций, руководителем докторантов PhD, вице-президентом ОО «Союз ученых Казахстана», почетным президентом Горнопромышленного союза Казахстана, членом редколлегий журналов Казахстана, России, Украины и Узбекистана.

Поздравляя Баяна Ракишевича с юбилеем, желаем ему здоровья, благополучия и дальнейших творческих успехов.

*Министерство высшего образования и науки РК,
Национальная академия наук РК,
Казахский национальный исследовательский
технический университет им. К.И. Сатпаева,
редакции журналов «Доклады НАН РК» и
«Вестник НАН РК»*

МАЗМУНЫ

ФИЗИКА

Ж.С. Байымбетова, Н.А. Сандибаева, Е.А. Склярова, Н.Ж. Ахметова ОРТА МЕКТЕП ФИЗИКА ПӘНІН ОҚЫТУДЫ БАСҚАРУ ЖҮЙЕСІ: ӘДЕБИЕТТЕРГЕ ШОЛУ.....	7
Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова, Е.С. Отунчи, А.Қ. Шонғалова, А.Г. Умирзаков АТОМДЫҚ ДЕҢГЕЙДЕ АЛКИЛ АРАЛЫҚТАРЫ АРҚЫЛЫ WS_2 НАНОПАРАҚТАРЫНЫҢ ФОТОСЕЗІМТАЛДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН АРТТЫРУ.....	16
А.А. Жадыранова, Д.К. Аншокова МОДИФИЦИРОВАННОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЛОГАРИФМИЧЕСКИ СКОРРЕКТИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ СО СТЕПЕННЫМ ЗАКОНОМ.....	31
В.Ю. Ким, Ш.Т. Омаров АЛЫТ-АЗИМУТАЛДЫ МОНТАЖДАУДАН ӨТКЕН ТЕЛЕСКОПТЫҢ ДЕРОТАТОРЛЫ ӨРІСІ.....	50
А. Марасулов, И.И. Сафаров, М.Х. Тешаев, Ә.С. Төлеп, Г.А. Абдраимова ҚАБАТТЫ ТҮТҚЫР СЕРПІМДІ ЦИЛИНДРДЕ СТАЦИОНАРЛЫҚ ЕМЕС ТОЛҚЫНДАРДЫҢ ТАРАЛУЫ.....	63
М. Пахомов, Ү. Жапбасбаев, Г. Рамазанова ҚҰБЫРДАҒЫ ТҮТҚЫР-ПЛАСТИКАЛЫҚ СҮЙІКТИКТИҢ ИЗОТЕРМИЯЛЫҚ ЕМЕС ТУРБУЛЕНТТІК АҒЫСЫН ЕСЕПТЕУГЕ АРНАЛҒАН РЕЙНОЛЬДС КЕРНЕУІ МОДЕЛІ.....	79
К. Саурова, С. Нысанбаева, Н. Сейдахмет, Г. Турлыбекова, Қ. Астемесова ҒАРЫШ АППАРАТЫНЫҢ ОРБИТАЛДЫҚ ҚОЗҒАЛЫС ДИНАМИКАСЫН СИМУЛЯЦИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ.....	95
Е.О. Шаленов, Е.С. Сейтқожанов, М.М. Сейсембаева, К.Н. Джумагулова СЭНДВИЧ ПЕН КЕРІ КОНТАКТЫ ПЕРОВСКИТ КҮН ЭЛЕМЕНТТЕРІН САЛЫСТЫРМАЛЫ ТАЛДАУ.....	109
Л.И. Шестакова, Р.Р. Спасюк КОМЕТАЛАРДЫҢ ТЕРМИЯЛЫҚ КЕРНЕУЛЕРМЕН ЖОЙЫЛУЫ.....	123
С.А. Шомшекеева, М.А. Кругов, Ч.Т. Омаров, Е.К. Аймуратов АСТРОХАБ ШЕҢБЕРІНДЕ ҒЫЛЫМДЫ НАСИХАТТАУ.....	139

ХИМИЯ

Т.К. Джумадилов, Г.Т. Дюсембаева, Ж.С. Мукатаева, Ю.В. Гражулявичюс, И.С. Сапарбекова ПОЛИМЕТАКРИЛ ҚЫШҚЫЛЫ МЕН ПОЛИ-2-МЕТИЛ-5-ВИНИЛПИРИДИН ГЕЛЬДЕРІНІҢ ҚАШЫҚТЫҚТАН ӨРЕКЕТТЕСУ БРЕКШЕЛІКТЕРІ.....	155
Ә. Қаппасұлы, Д. Махаева, Ж. Қожантаева, Ғ. Ирмухаметова ДӘРІЛІК ЗАТТАРДЫ ЖЕТКІЗУДІҢ ОФТАЛЬМОЛОГИЯЛЫҚ ЖҮЙЕЛЕРІН ӨЗІРЛЕУ ҮШІН МЕТАКРИЛДЕНГЕН АЛГИН ҚЫШҚЫЛЫН АЛУ.....	167
А. Карилхан, А. Турсынова МОНОТЕРПЕНДІК ЦИТРОНЕЛЛАЛДАН ИЗОПУЛЕГОЛ ЖӘНЕ МЕНТОЛ СИНТЕЗІН ЗЕРТТЕУ.....	186
А.А. Құдайбергелі, А.К. Нурлыбекова, Ж. Жеңіс, М.А. Дюсебаева ARTEMISIA TERRAE-ALBAE МАЙДА ЕРИТІН СЫҒЫНДЫСЫНЫҢ ХИМИЯЛЫҚ ҚҰРАМЫ.....	195
М.Г. Мурзагалиева, Н.С. Ашимхан, А.О. Сапиева АҒЫНДЫ СУЛАРДЫ ТАБИҒИ АДСОРБЕНТТЕРМЕН ТАЗАЛАУДЫҢ КОЛЛОИДТЫ – ХИМИЯЛЫҚ ПРОЦЕСІН ЗЕРТТЕУ.....	204

Г.Ф. Сагитова, С.А. Сакибаева, Б.А. Сақыбаев, З.А. Емқұлова, В.Ю. Морозова БУТАДИЕН-НИТРИЛДІ КАУЧУКТАР МЕН ТОЛЫҚТЫРҒЫШТАР НЕГІЗІНДЕГІ ТЫҒЫЗДАҒЫШ РЕЗИНАЛАРДЫ ӨЗІРЛЕУ.....	219
Б. Серикбаева, Р. Абжалов, А. Колесников, Ш. Кошкарбаева, М. Сатаев ПОЛИМЕРЛЕРДІҢ ТІКЕЛЕЙ ФОТОХИМИЯЛЫҚ КҮМІСТЕНУІ.....	230
А.Т. Такибаева, О.В. Демец, А.А. Жорабек, А. Карилхан, Д.А. Ражабова ЛУПАН ТРИТЕРПЕНОИДТАРЫНЫҢ БИОЛОГИЯЛЫҚ БЕЛСЕНДІ ЗАТТАРЫН СИНТЕЗДЕУ ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ.....	244
Б.Р. Таусарова, М.Ш. Сулейменова, Ж.Е. Шаихова, С.О. Абилкасова, Л.М. Калимолдина МЫС НАНОБӨЛШЕКТЕРІНІҢ НЕГІЗІНДЕГІ ЦЕЛЛЮЛОЗАЛЫҚ ТОҚЫМА МАТЕРИАЛДАРЫНЫҢ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ.....	259
Б.Х. Хусаин, А.Р. Бродский, А.С. Сасс, И.И. Торлопов, К.Р. Рахметова КӨМІРТЕКСІЗДЕНДІРУ ТЕХНОЛОГИЯСЫНДАҒЫ ЖЫЛУ ҚҰРЫЛҒЫЛАРЫНЫҢ ГАЗДАРЫН АЛДЫН АЛА ӨҢДЕУ.....	271
РАКИШЕВ БАЯН РАКИШЕВИЧ (90 жас).....	283

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Ж.С. Байымбетова, Н.А. Сандибаева, Е.А. Склярова, Н.Ж. Ахметова СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ОБУЧЕНИЕМ ФИЗИКОЙ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ: ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.....	7
Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова, Е.С. Отунчи, А.Қ. Шонгалова, А.Г. Умирзаков УЛУЧШЕНИЕ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ НАНОЛИСТОВ WS ₂ С ПОМОЩЬЮ АЛКИЛЬНЫХ СПЕЙСЕРОВ НА АТОМИСТИЧЕСКОМ УРОВНЕ.....	16
А.А. Жадыранова, Д.К. Аншокова ДӘРЕЖЕЛІК ЗАҢЫ БАР ЛОГАРИФМДІК МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН СҮЙІҚТЫҚ КҮЙІНІҢ ӨЗГЕРТІЛГЕН ТЕНДЕУІ.....	31
В.Ю. Ким, Ч.Т. Омаров ДЕРОТАТОР ПОЛЯ ДЛЯ ТЕЛЕСКОПА НА АЛЬТ-АЗИМУТАЛЬНОЙ МОНТИРОВКЕ.....	50
А. Марасулов, И.И. Сафаров, М.Х. Тешаев, А.С. Тулеп, Г.А. Абдраимова РАСПРОСТРАНЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ВОЛН В СЛОИСТОМ ВЯЗКОУПРУГОМ ЦИЛИНДРЕ.....	63
М. Пахомов, У. Жапбасбаев, Г. Рамазанова МОДЕЛЬ НАПРЯЖЕНИЙ РЕЙНОЛЬДСА ДЛЯ РАСЧЕТА НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ТУРБУЛЕНТНОГО ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОПЛАСТИЧНОЙ ЖИДКОСТИ В ТРУБЕ.....	79
К. Саурова, С. Нысанбаева, Н. Сейдахмет, Г. Турлыбекова, Қ. Астемесова ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОРБИТАЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ КОСМИЧЕСКОГО АППАРАТА.....	95
Е.О. Шаленов, Е.С. Сейткочанов, М.М. Сейсембаева, К.Н. Джумагулова СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СЭНДВИЧ И ОБРАТНО-КОНТАКТНЫХ ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.....	109
Л.И. Шестакова, Р.Р. Спасюк РАЗРУШЕНИЕ КОМЕТ ТЕРМИЧЕСКИМИ НАПРЯЖЕНИЯМИ.....	123
С.А. Шомшекова, М.А. Кругов, Ч.Т. Омаров, Е.К. Аймуратов ПОПУЛЯРИЗАЦИЯ НАУКИ В РАМКАХ АСТРОХАБА.....	139

ХИМИЯ

Т.К. Джумадилов, Г.Т. Дюсембаева, Ж.С. Мукатаева, Ю.В. Гражулявичюс, И.С. Сапарбекова ОСОБЕННОСТИ ДИСТАНЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГИДРОГЕЛЕЙ ПОЛИМЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ПОЛИ-2-МЕТИЛ-5-ВИНИЛПИРИДИНОМ.....	155
Ә. Қаппасұлы, Д.Н. Махаева, Ж. Кожантаева, Г.С. Ирмухаметова ПОЛУЧЕНИЕ МЕТАКРИЛИРОВАННОЙ АЛЬГИНОВОЙ КИСЛОТЫ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ОФТАЛЬМОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ.....	167
А. Карилхан А. Турсынова ИЗУЧЕНИЕ СИНТЕЗА ИЗОПУЛЕГОЛА И МЕНТОЛА ИЗ МОНОТЕРПЕНОВОГО ЦИТРОНЕЛЛАЛЯ.....	186
А.А. Кудайбергел, А.К. Нурлыбекова, Ж. Женис, М.А. Дюсебаева ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ЖИРОРАСТВОРИМОГО ЭКСТРАКТА ARTEMISIA TERRAE-ALBAE.....	195
М.Г. Мурзагалиева, Н.С. Ашимхан, А.О. Сапиева ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ПРИРОДНЫМИ АДсорбентами.....	204
Г.Ф. Сагитова, С.А. Сакибаева, Б.А. Сақыбаев, З.А. Емкулова, В.Ю. Морозова РАЗРАБОТКА УПЛОТНИТЕЛЬНЫХ РЕЗИН НА ОСНОВЕ БУТАДИЕН-НИТРИЛЬНЫХ КАУЧУКОВ И НАПОЛНИТЕЛЕЙ.....	219

Б.С. Серикбаева, Р. Абжалов, А.В. Колесников, Ш.Т. Кошкарбаева, М.С. Сатаев ПРЯМОЕ ФОТОХИМИЧЕСКОЕ СЕРЕБРЕНИЕ ПОЛИМЕРОВ.....	230
А.Т. Такибаева, О.В. Демец, А.А. Жорабек, А. Карилхан, Д.А. Ражабова СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ЛУПАНОВЫХ ТРИТЕРПЕНОИДОВ.....	244
Б.Р. Таусарова, М.Ш. Сулейменова, Ж.Е. Шаихова, С.О. Абилкасова, Л.М. Калимолдина ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ЦЕЛЛЮЛОЗНЫХ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ.....	259
Б.Х. Хусаин, А.Р. Бродский, А.С. Сасс, И.И. Торлопов, К.Р. Рахметова ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ОЧИСТКА ГАЗОВ ТЕПЛОВЫХ УСТРОЙСТВ В ТЕХНОЛОГИИ ДЕКАРБОНИЗАЦИИ.....	271
РАКИШЕВ БАЯН РАКИШЕВИЧ (к 90-летию со дня рождения).....	283

CONTENTS
PHYSICAL

Zh.S. Baiymbetova, N.A. Sandibaeva, E.A. Sklyarova, N.Zh. Akhmetova THE SECONDARY SCHOOL PHYSICS LEARNING MANAGEMENT SYSTEM (LMS): LITERATURE REVIEW.....	7
E.A. Dmitriyeva, A.E. Kemelbekova, Ye.S. Otunchi, A.K. Shongalova, A.G. Umirzakov ENHANCING PHOTSENSITIVE PROPERTIES OF WS ₂ NANOSHEETS VIA ALKYL SPACERS AT THE ATOMISTIC LEVEL.....	16
A.A. Zhadyranova, D.K. Anshokova MODIFIED EQUATION OF STATE OF A LOGARITHMICALLY VISCOUS FLUID WITH A POWER LAW.....	31
V.Yu. Kim, Ch.T. Omarov FIELD DEROTATOR FOR A TELESCOPE WITH ALTAZIMUTH MOUNT.....	50
A. Marasulov, I.I. Safarov, M.Kh. Tshaev, A.S. Tolep, G.A. Abdraimova PROPAGATION OF NON-STATIONARY WAVES IN A LAYERED VISCOELASTIC CYLINDER.....	63
M. Pakhomov, U. Zhapbasbayev, G. Ramazanova RSM MODEL FOR CALCULATING NON-ISOTHERMAL TURBULENT FLOW OF A VISCOPLASTIC FLUID IN A PIPE.....	79
K. Saurova, S. Nysanbaeva, N. Seidakhmet, G. Turlybekova, K. Astemesova SIMULATION MODELING OF ORBITAL MOTION DYNAMICS SPACE CAR.....	95
E.O. Shalenov, Ye.S. Seitkozhanov, M.M. Seisembayeva, K.N. Dzhumagulova COMPARATIVE ANALYSIS OF SANDWICH AND BACK-CONTACT PEROVSKITE SOLAR CELLS.....	109
L.I. Shestakova, R.R. Spassyyk DESTRUCTION OF COMETS BY THERMAL STRESSES.....	123
S.A. Shomsheikova, M.A. Krugov, Ch.T. Omarov, Y.K. Aimuratov POPULARIZATION OF SCIENCE WITHIN ASTROHUB.....	139

CHEMISTRY

T.K. Jumadilov, G.T. Dyussebayeva, Zh.S. Mukataeva, J.V. Gražulevicius, I.S. Saparbekova FEATURES OF REMOTE INTERACTION BETWEEN HYDROGELS OF POLYMETHACRYLIC ACID AND POLY-2-METHYL-5-VINYLPYRIDINE.....	155
A. Kappasuly, D. Makhayeva, Zh. Kozhantayeva, G. Irmukhametova PREPARATION OF METHACRYLATED ALGINIC ACID FOR THE DEVELOPMENT OF OPHTHALMOLOGICAL DRUG DELIVERY SYSTEMS.....	167
A. Karilkhan, A. Tursynova STUDY OF THE SYNTHESIS OF ISOPULEGOL AND MENTHOL FROM MONOTERPENE CITRONELLAL.....	186
A.A. Kudaibergen, A.K. Nurlybekova, J. Jenis, M.A. Dyusebaeva CHEMICAL CONSTITUENTS OF LIPOSOLUBLE EXTRACT OF ARTEMISIA TERRAE-ALBAE.....	195
M.G. Murzagaliyeva, N.S. Ashimkhan, A.O. Sapieva INVESTIGATION OF COLLOID-CHEMICAL PROCESSES OF WASTERWATER TREATMENT WITH NATURAL ADSORBENTS.....	204
G.F. Sagitova, S.A. Sakibayeva, B.A. Sakybayev, Z.A. Emkulova, V.Yu. Morozova DEVELOPMENT OF SEALING RUBBERS BASED ON BUTADIENE-NITRILE RUBBERS AND FILLERS.....	219
B.S. Serikbayeva, R. Abzhalov, A.V. Kolesnikov, Sh.T. Koshkarbayeva, M.S. Satayev DIRECT PHOTOCHEMICAL SILVERATION OF POLYMERS.....	230

A.T. Takibayeva, O.V. Demets, A.A. Zhorabek, A. Karilkhan, D.A. Rajabova SYNTHESIS AND RESEARCH OF BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES OF LUPAN TRITERPENOIDS.....	244
B.R. Taussarova, M.Sh. Suleimenova, Zh.E. Shaikhova, S.O. Abilkasova, L.M. Kalimoldina STUDY OF PROPERTIES OF CELLULOSE TEXTILE MATERIALS BASED ON COPPER NANOPARTICLES.....	259
B.Kh. Khussain, A.R. Brodskiy, A.S. Sass, I.I. Torlopov, K.R. Rakhmetova PRELIMINARY TREATMENT OF THERMAL DEVICES' EMISSIONS IN DECARBONIZATION TECHNOLOGY.....	271
AKISHEV BAYAN RAKISHEVICH (on the 90th anniversary of birth)	283

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](http://www.nauka-nanrk.kz)

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

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

Подписано в печать 29.03.2024.

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

19,0 п.л. Тираж 300. Заказ 1.