

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

**ACADEMIC JOURNAL  
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

**№3  
2025**

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

2025 • 3



CENTRAL ASIAN ACADEMIC  
RESEARCH CENTER



**ACADEMIC JOURNAL  
OF PHYSICAL AND  
CHEMICAL SCIENCES**

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

**Editor-in-Chief:**

**ZHURINOV Murat Zhurinovich**, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Acting President of RPA NAS RK, General Director of JSC "Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry named after D.V. Sokolsky" (Almaty, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>

**Editorial Board:**

**KALIMOLDAYEV Maksat Nuradilovich**, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>

**ADEKENOV Sergazy Mynzhasarovich**, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Director of the International Science and Production Holding "Phytochemistry" (Karaganda, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>

**RAMAZANOV Tlekkabul Sabitovich**, (Deputy Editor-in-Chief), Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

**DAVLETOV Askar Erbulanovich**, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Branch of NRNU MEPhI Kazakh National University named after Al-Farabi (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602642543>

**ABISHEV Medeu Erzhanovich**, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>

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

**ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES.****ISSN 2518-1483 (Online), ISSN 2224-5227 (Print)**

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

The certificate of registration of a periodical printed publication in the Committee of Information of the Ministry of Information and Social Development of the Republic of Kazakhstan № **KZ93VPY00121157** issued **05.06.2025**Thematic scope: *physics and chemistry*.

Periodicity: 4 times a year.

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

**Бас редактор:**

**ЖУРЫНОВ Мұрат Жұрынулы**, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, ҚР ҰҒА РҚБ президенті м.а., АҚ «Д.В. Сокольский атындағы Отын, катализ және электрохимия институтының» бас директоры (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>

**Редакция ұжымы:**

**ҚАЛИМОЛДАЕВ Мақсат Нүрәліұлы**, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>

**ӘДЕКЕНОВ Серғазы Мыңжасарұлы**, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, «Фитохимия» халықаралық ғылыми-өндірістік холдингінің директоры (Қарағанды, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>

**РАМАЗАНОВ Тілекқабұл Сәбитұлы**, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің ғылыми-инновациялық қызмет жөніндегі проректоры, (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>

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

**ОЛИВЬЕРО Россин Сезаре**, PhD (химия), Калабрия университетінің профессоры (Калабрия, Италия) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>

**ТИГИНЯНУ Ион Михайлович**, физика-математика ғылымдарының докторы, академик, Молдова Ғылым Академиясының президенті, Молдова техникалық университеті (Кишинев, Молдова) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>

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

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

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

**БОШКАЕВ Қуанғай Ағвазыұлы**, Ph.D. Теориялық және ядролық физика кафедрасының доценті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>

**Бүркітбаев Мұхамбетқали**, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>

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

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

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

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

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

**ДАВЛЕТОВ Асқар Ербуланович**, физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, ҰЯЗУ МИФИ әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602642543>

**ӘБШЕВ Медеу Ержанұлы**, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>

**ӘБІЛМАҒЖАНОВ Арпан Зайнуталлайұлы**, химия ғылымдарының кандидаты, Д.В. Сокольский атындағы "Отын, катализ және электрохимия институты" АҚ Бас директорының бірінші орынбасары, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>

**ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

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

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

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

Тақырыптық бағыты: *физика, химия.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

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

**Главный редактор:**

**ЖУРИНОВ Мурат Журинович**, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, и.о. президента РОО НАН РК, Генеральный директор АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского» (Алматы, Казахстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960>

**Редакционная коллегия:**

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

**АДЕКЕНОВ Сергазы Мынжасарович**, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, директор Международного научно-производственного холдинга «Фитохимия» (Караганда, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>

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

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

**ОЛИБЬЕРО Росси Чезаре**, доктор философии (PhD, химия), профессор Университета Калабрии (Калабрия, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>

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

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

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

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

**БОШКАЕВ Куантай Авгазиевич**, PhD, преподаватель, доцент кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>

**БҮРКИТБАЕВ Мухамбеткали**, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>

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

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

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

**ТАКИБАЕВ Нургали Жабагаевич**, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>

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

**ДАВЛЕТОВ Аскар Ербуланович**, кандидат физико-математических наук, доцент, Филиал НИЯУ МИФИ Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602642543>

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

**АБИЛЬМАГЖАНОВ Арлан Зайнуталлаевич**, кандидат химических наук, первый заместитель генерального директора АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>

**ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

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

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

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

Периодичность: 4 раза в год.

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

© ТОО «Центрально-азиатский академический научный центр», 2025

CONTENTS

PHYSICS

**M.B. Albatyrova**

Energy evolution equation in a nonlinear spin system: derivation and numerical modeling.....11

**E.A. Dmitriyeva, A.E. Kemelbekova, A.K. Shongalova, O.A. Shilova**

Effect of the precursor concentration on the morphology and photosensitivity of the resulting ZnO thin films.....21

**A. Istlyaup, L. Myasnikova, A. Lushchik**

Computer simulation of the electrical properties of a carbon sheet with alkali metal iodide crystals.....33

**A. Kenesbayeva, Ye.I. Kuldeev, E.O. Shalenov, T.B. Nurpeissova**

Determination of the gravitational constant.....49

**Sh.T. Nurmakhmetova, N.L. Vaidman, S.A. Khokhlov, A.T. Agishev, A.A. Khokhlov**

The emission-line dusty object IRAS 07080+0605: evidence for binarity.....60

**E.Otunchi, A.A. Migunova, A.Umirzakov, N.Tokmoldin**

Effect of the composition of the film-forming system on the properties of SnO<sub>2</sub> films obtained by spray pyrolysis.....71

**U.A. Ualikhanova, A.N. Abdipatta, O.V. Razina, A.M. Syzdykova, G.S. Altayeva**

Bulk viscosity in f(T) gravity and its impact on cosmological evolution.....83

**A.Zh. Umirbayeva, L. Aktay, L.N. Kondratyeva, I.M. Izmailova, A. Shomshekova**

Methodology for the reduction of archival slit spectra of planetary nebulae.....99

**N. Eghtesadi, S.S. Uzakbaeva, Z.K. Aimaganbetova, N.N. Zhanturina, A.Z. Bekeshev**

Prediction of the kinetic properties of low-density polyethylene.....115

**D. Yurin, D. Kuvatova, A. Glushenko, Ch. Omarov, M. Makukov**

Analysis of the limits of direct n-body simulation using Nvidia RTX4090 GPU cards.....131

## CHEMISTRY

<b>A.S. Beisenova, A.A. Zhanybekova, M.M. Duysebaeva, G.E. Berganaeva</b> Study of the chemical composition of <i>Centaurea diffusa</i> Lam. growing in the territory of Almaty region.....	146
<b>N.N. Berikbol, Zh.S. Kassymova, L.K. Orazzhanova, A.N. Klivenko, N.N. Nurgaliyev</b> Synthesis of interpolyelectrolyte complexes from fluorescently labeled biopolymers.....	161
<b>O.A.Yessimova, S.Sh. Kumargaliyeva, B.K. Musabekov, A.K. Konysbek</b> Colloidal - chemical properties of alhagi and tansy ( <i>tanacetum</i> ) hydrolates.....	182
<b>R.N. Zhanaliyeva, B. Imangaliyeva, B. Torsykbaeva, R. Kozykeyeva</b> Catalytic hydrogenation of carbonyl-containing compounds: mechanism, catalysts and application.....	193
<b>M.A. Zhumash, K. Tilegen, Y.A. Boleubayev, S.S. Itkulova</b> Dry reforming of methane over the high active Co-Fe-Ir-containing alumina supported catalyst.....	207
<b>M. Ibrayeva, N. Sagdollina, Zh. Mukazhanova, Sh. Sanyazova, M.Ozturk</b> Optimization of flavonoid extraction conditions from a plant of the genus <i>Symphotrichum novi-belgii</i> .....	218
<b>M.K. Kurmanaliev, Zh.E. Shaikhova, S.O. Abilkasova</b> Supramolecular polymeric receptors for binding alkali metal ions.....	228
<b>Y.A. Mussatay, M.I. Tulepov</b> Carbon filters from rice husk for air purification in confined spaces.....	238
<b>A.Zh. Mutushev, A.B. Seisenova, O.S. Kapizov, A.M. Nuraly, D.K. Mukhanov</b> Integrated process for the synthesis of carbon–silicon nanocomposites from biowaste and metallurgical sludge.....	258
<b>A.S. Sass, I.I. Torlopov, K.S. Rakhmetova, D.A. Zhumadullaev, M. Zhurinov</b> Influence of metal surface mechanical preparation on the properties of phosphate coatings.....	274

## МАЗМҰНЫ

## ФИЗИКА

**М.Б. Альбатырова**Сызықтық емес спиндік жүйедегі энергия эволюциясының теңдеуі:  
шығарылуы және сандық модельдеу.....11**Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова, А.Қ. Шонғалова, О.А. Шилова**Прекурсор концентрациясының алынған жұқа ZnO жабындарының  
құрылымы мен фотосезімталдығына әсері.....21**Н. Эхтесади, С.С. Узакбаева, З.К. Аймаганбетова, Н.Н. Жантурина,  
А.З. Бекешев**Төмен тығыздықтағы полиэтиленнің кинетикалық қасиеттеріне  
болжау жасау.....33**А. Истляуп, Л. Мясникова, А. Лущик**Сілтілі металл иодидтерінің кристалдарымен көміртек қабатының  
электрлік қасиеттерін компьютерлік модельдеу.....49**А. Кенесбаева, Е. Кульдеев, Е. Шаленов, Т. Нурпеисова**

Гравитациялық тұрақтыны анықтау.....60

**Ш.Т. Нурмахаметова, Н.Л. Вайдман, С.А. Хохлов, А.Т. Агишев, А.А. Хохлов**

IRAS 07080+0605 эмиссиялық объекті: екіжұлдыздық жүйенің дәлелі.....71

**Е. Отунчи, А.А. Мигунова, А.Г. Умирзаков, Н. Токмолдин**Жабын түзуші жүйе құрамының спрей-пиролиз әдісімен алынған  
SnO<sub>2</sub> жабындарының қасиетіне әсері.....83**У.А. Уалиханова, А.Н. Әбдіпатта, О.В. Разина, А.М. Сыздыкова, Г.С. Алтаева**f(T) гравитациясындағы көлемдік тұтқырлық және оның  
космологиялық эволюцияға әсері.....99**А.Ж. Умирбаева, Л. Актай, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова,  
С.А. Шомшекова**Планетарлық тұмандықтардың архивтік саңылаулы спектрлерін  
өңдеу әдістемесі.....115**Д. Юрин, Д. Куватова, А. Глущенко, Ч. Омаров, М. Макуков**N-бөлшекті тікелей үлгілеудің шектерін Nvidia RTX 4090  
GPU-карталарын пайдаланып талдау.....131

## ХИМИЯ

- А.С. Бейсенова, А.А. Жаныбекова, Г.Е. Берганаева, М.А. Дюсебаева**  
Алматы облысының аумағында өсетін шашыңқы гүлкекіре *Centaurea diffusa Lam.* өсімдігінің химиялық құрамын зерттеу.....146
- Н.Н. Берікбол, Ж.С. Касымова, Л.К. Оразжанова, А.Н. Кливенко, Н.Н. Нурғалиев**  
Флуоресцентті таңбаланған биополимерлерден интерполиэлектрлиттік комплексті синтездеу.....161
- О.А. Есимова, С.Ш. Құмарғалиева, К.Б. Мусабеков, А.Қ. Қонысбек**  
Жантақ және түймешетен гидрولاتтарының коллоидтық-химиялық қасиеттері.....182
- Р.Н. Жаналиева, Б. Иманғалиева, Б.Б. Торсыкбаева, Р. Козыкеева, Р.Э. Ходжаназаров**  
Құрамында карбонил бар қосылыстардың каталитикалық гидрогенизациясы: механизмі, катализаторлары және қолданылуы.....193
- М.А. Жұмаш, К.Т. Тілеген, Е.А. Болеубаев, Ш.С. Итқұлова**  
Алюминий тотығына қондырылған жоғары белсенді Co-Fe-Ir құрайтын катализатордағы метанның құрғақ риформингі.....207
- М. Ибраева, Н. Сағдоллина, Ж. Мукажанова, Ш. Санъязова, М. Ozturk**  
*Symphytotrichum novi-belgii* тұқымдас өсімдіктен флавоноидтарды алу жағдайларын оңтайландыру.....218
- М.Қ. Құрманалиев, Ж.Е. Шаихова, С.О. Әбілқасова**  
Сілтілік металл иондарын байланыстыруға арналған супрамолекулалық полимерлік рецепторлар.....228
- Е.А. Мұсатай, М.И. Тулепов**  
Шағын кеңістіктегі ауаны тазартуға арналған күріш қауызы негізіндегі көміртек құрамды сүзгілер.....238
- А.Ж. Мутушев, А.Б. Сейсенова, Ө.С. Капизов, Ә.М. Нұралы, Д.К. Муханов**  
Биоқалдықтар мен металлургиялық шламнан көміртек-кремний нанокөміртектерін синтездеудің интеграцияланған әдісі.....258
- А.С. Сасс, И.И. Торлопов, К.С. Рахметова, Д.А. Жумадуллаев, М. Журинов**  
Металдар бетін механикалық дайындаудың фосфатты жабындар қасиеттеріне әсері.....274

## СОДЕРЖАНИЕ

## ФИЗИКА

**М.Б. Альбатырова**Уравнение эволюции энергии в нелинейной спиновой системе:  
вывод и численное моделирование.....11**Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова, А.Қ. Шонғалова, О.А. Шилова**Влияние концентрации прекурсора на морфологию и фоточувствительность  
получаемых тонких пленок ZnO.....21**А. Истляуп, Л. Мясникова, А. Лущик**Компьютерное моделирование электрических свойств углеродного листа  
с кристаллами йодидов щелочных металлов.....33**А. Кенесбаева, Е. Кульдеев, Е. Шаленов, Т. Нурпеисова**

Определение гравитационной постоянной.....49

**Ш.Т. Нурмахаметова, Н.Л. Вайдман, С.А. Хохлов, А.Т. Агишев, А.А. Хохлов**Эмиссионный пылевой объект IRAS 07080+0605: доказательство двойной  
природы.....60**Е. Отунчи, А.А. Мигунова, А.Г. Умирзаков, Н. Токмолдин**Влияние состава пленкообразующей системы на свойства пленок  
SnO<sub>2</sub>, полученных методом спрей-пиролиза.....71**У.А. Уалиханова, А.Н. Эбдіпатта, О.В. Разина, А.М. Сыздыкова, Г.С. Алтаева**Объемная вязкость в f(T) гравитации и ее влияние  
на космологическую эволюцию.....83**А.Ж. Умирбаева, Л. Актай, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова,  
С.А. Шомшекова**

Методика обработки архивных щелевых спектров планетарных туманностей...99

**Н. Эхтесади, С.С. Узакбаева, З.К. Аймаганбетова, Н.Н. Жантурина,  
А.З. Бекешев**

Прогнозирование кинетических свойств полиэтилена низкой плотности.....115

**Д. Юрин, Д. Куватова, А. Глущенко, Ч. Омаров, М. Макуков**Анализ пределов прямого моделирования n-тел с использованием  
GPU-карт Nvidia RTX4090.....131

## ХИМИЯ

- А.С. Бейсенова, А.А. Жаныбекова, М.А. Дюсебаева, Г.Е. Берганаева**  
Исследование химического состава василек раскидистый *Centaurea diffusa* Lam., растущий на территории Алматинской области.....146
- Н.Н. Берікбол, Ж.С. Касымова, Л.К. Оразжанова, А.Н. Кливенко, Н.Н. Нурғалиев**  
Синтез интерполиэлектrolитных комплексов на основе флуоресцентно-меченых биополимеров.....161
- О.А. Есимова, С.Ш. Кумарғалиева, К.Б. Мусабеков, А.Қ. Қонысбек**  
Коллоидно-химические свойства гидратов верблюжьей колючки и пижмы...182
- Р.Н. Жаналиева, Б. Иманғалиева, Б.Б. Торсықбаева, Р. Қозықеева, Р.Э. Ходжаназаров**  
Каталитическое гидрирование карбонилсодержащих соединений: механизм, катализаторы и применение.....193
- М.А. Жұмаш, К.Т. Тілеген, Е.А. Болеубаев, Ш.С. Иткулова**  
Сухой риформинг метана на высокоактивном Co-Fe-Ir содержащем нанесенном на оксид алюминия катализаторе.....207
- М. Ибраева, Н. Сағдоллина, Ж. Мукажанова, Ш. Саньязова, М. Ozturk**  
Оптимизация условий экстракции флавоноидов из растения рода *Symphotrichum novi-belgii*.....218
- М.К. Курманалиев, Ж.Е. Шаихова, С.О. Абилкасова**  
Супрамолекулярные полимерные рецепторы для связывания ионов щелочных металлов.....228
- Е.А. Мұсатай, М.И. Тулепов**  
Углеродные фильтры из рисовой шелухи для очистки воздуха в стесненных помещениях.....238
- А.Ж. Мутушев, А.Б. Сейсенова, О.С. Капизов, А.М. Нуралы, Д.К. Муханов**  
Интегрированная технология получения углеродно-кремниевых нанокомпозитов из биоотходов и металлургических шламов.....258
- А.С. Сасс, И.И. Торлопов, К.С. Рахметова, Д.А. Жумадуллаев, М. Журинов**  
Влияние механической подготовки поверхности металла на свойства фосфатных покрытий.....274

©A. Istlyaup<sup>1</sup>, L. Myasnikova<sup>1\*</sup>, A. Lushchik<sup>2</sup>, 2025.

<sup>1</sup> K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan;

<sup>2</sup> Institute of Physics, University of Tartu, Tartu, Estonia.

E-mail: [assel.ist94@gmail.com](mailto:assel.ist94@gmail.com)

## COMPUTER SIMULATION OF THE ELECTRICAL PROPERTIES OF A CARBON SHEET WITH ALKALI METAL IODIDE CRYSTALS

**A. Istlyaup** — PhD student, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: [assel.ist94@gmail.com](mailto:assel.ist94@gmail.com), <https://orcid.org/0000-0003-3423-5126>;

**L. Myasnikova** — candidate of physical and mathematical sciences, associated professor, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: [myasnikova\\_ln@zhubanov.edu.kz](mailto:myasnikova_ln@zhubanov.edu.kz), <https://orcid.org/0000-0003-3326-7206>;

**A. Lushchik** — doctor of physical and mathematical sciences, professor, Institute of Physics, University of Tartu, Tartu, Estonia,

E-mail: [aleksandr.lushchik@ut.ee](mailto:aleksandr.lushchik@ut.ee), <https://orcid.org/0000-0003-2035-3420>.

**Abstract.** The article examines the modeling of the electronic properties of a graphene sheet modified with alkali halide crystals, including NaI, KI, RbI, and LiI. The main objective of the study is to identify the influence of alkali metal and halogen incorporation on the electronic structure of graphene and to assess the prospects of using the resulting composites in nanoelectronics. The density functional theory method implemented in the Atomistix ToolKit software package was applied for the calculations. This approach ensures high accuracy in describing interatomic interactions and makes it possible to analyze both the energetic and structural characteristics of the material. During the simulations, changes in the density of states spectrum, the Fermi level, and the band structure were investigated. The results revealed that the incorporation of alkali metal and halogen ions leads to local symmetry breaking of the graphene lattice, resulting in the formation of additional energy levels near the conduction and valence bands. These effects indicate the possibility of targeted control over the electronic properties of graphene through chemical modification. In particular, the emergence of a band gap, absent in pristine graphene, was observed, which is of significant importance for expanding the scope of its practical applications. It should be noted that the obtained results are consistent with current studies in the field of functional materials and confirm the high sensitivity of graphene to external influences, including doping and surface adsorption. The conducted modeling thus demonstrates the potential of graphene as

a platform for creating new materials with tunable properties and opens avenues for further research in the field of two-dimensional systems.

**Key words:** carbon sheet, graphene, graphene modification, NaI, KI, LiI, and RbI nanocrystals, density of states, total energy

©А. Истляуп<sup>1</sup>, Л. Мясникова<sup>1\*</sup>, А. Лущик<sup>2</sup>, 2025.

<sup>1</sup>Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан;

<sup>2</sup>Тарту университеті, Физика институты, тарту, Эстония.

E-mail: assel.ist94@gmail.com

## СІЛТІЛІ МЕТАЛЛ ИОДИДТЕРІНІҢ КРИСТАЛДАРЫМЕН КӨМІРТЕК ҚАБАТЫНЫҢ ЭЛЕКТРЛІК ҚАСИЕТТЕРІН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

**А. Истляуп** — PhD докторант, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: assel.ist94@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3423-5126>;

**Л. Мясникова** — физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор,

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: myasnikova\_ln@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3326-7206>;

**А. Лущик** — физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, Тарту университеті, Физика институты, Тарту, Эстония,

E-mail: aleksandr.lushchik@ut.ee, <https://orcid.org/0000-0003-2035-3420>.

**Аннотация.** Мақалада NaI, KI, RbI және LiI сияқты сілтілігаллоидты кристалдармен модификацияланған графен қабатының электрондық қасиеттерін модельдеу қарастырылады. Зерттеудің негізгі мақсаты – сілтілік металдар мен галогендердің енуінің графеннің электрондық құрылымына әсерін айқындау және алынған композиттердің нанoeлектроникадағы қолдану мүмкіндіктерін бағалау болып табылады. Есептеулерді жүргізу үшін Atomistx ToolKit бағдарламалық ортасында жүзеге асырылған тығыздық функционалы әдісі қолданылды. Бұл тәсіл атомаралық өзара әрекеттесулерді жоғары дәлдікпен сипаттауға және материалдың энергетикалық әрі құрылымдық сипаттамаларын талдауға мүмкіндік береді. Модельдеу барысында күй тығыздығы спектріндегі, Ферми деңгейіндегі және зоналық құрылымдағы өзгерістер зерттеледі. Нәтижелер көрсеткендей, сілтілік металдар мен галоген иондарының енуі графен торының симметриясын жергілікті түрде бұзып, өткізгіштік және валенттік зоналар маңында қосымша энергетикалық деңгейлердің түзілуіне алып келеді. Бақыланған құбылыстар графеннің электрондық қасиеттерін химиялық модификация арқылы мақсатты түрде басқару мүмкіндігін көрсетеді. Атап айтқанда, таза графенде болмайтын тыйым салынған зонаның ашылуы анықталды, бұл оның практикалық қолдану салаларын кеңейту үшін маңызды. Айта кетерлігі, алынған нәтижелер функционалды материалдар саласындағы қазіргі заманғы зерттеулерге сәйкес келеді және графеннің сыртқы әсерлерге, соның ішінде легирлеу мен беткі адсорбцияға жоғары сезімталдығын дәлелдейді. Бұл графен негізіндегі



модификацияланған құрылымдарды наноэлектроника элементтерін, сенсорлық құрылғыларды және электрондық өткізгіштік бақыланатын өзгерту қажет болатын басқа да технологияларды әзірлеуде болашағы зор етеді. Жүргізілген модельдеу графеннің реттелетін қасиеттері бар жаңа материалдарды жасау үшін платформа ретіндегі әлеуетін көрсетеді және екіөлшемді жүйелер саласында одан әрі зерттеулерге мүмкіндік ашады.

**Түйін сөздері:** көміртек қабаты, графен, графенді модификациялау, NaI, KI, LiI және RbI нанокристалдары, күй тығыздығы, толық энергия

©А. Истляуп<sup>1</sup>, Л. Мясникова<sup>1\*</sup>, А. Лущик<sup>2</sup>, 2025.

<sup>1</sup>Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актюбе, Казахстан;

<sup>2</sup>Институт Физики, Университет Тарту, Тарту, Эстония.  
E-mail: assel.ist94@gmail.com

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНОГО ЛИСТА С КРИСТАЛЛАМИ ЙОДИДОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

**А. Истляуп** — PhD докторант, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актюбе, Казахстан,

E-mail: assel.ist94@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3423-5126>;

**Л. Мясникова** — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актюбе, Казахстан,

E-mail: myasnikova\_ln@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3326-7206>;

**А. Лущик** — доктор физико-математических наук, профессор, Институт Физики, университет Тарту, Тарту, Эстония,

E-mail: aleksandr.lushchik@ut.ee, <https://orcid.org/0000-0003-2035-3420>.

**Аннотация.** В статье рассматривается моделирование электронных свойств графенового листа, модифицированного щелочногалогенидными кристаллами, включая NaI, KI, RbI и LiI. Основной целью исследования является выявления влияния внедрения щелочных металлов и галогенов на электронную структуру графена и оценка перспектив использования полученных композитов в наноэлектронике. Для проведения расчетов применен метод функционала плотности, реализованный в программной среде Atomistx ToolKit. Данный подход обеспечивает высокую точность описания межатомных взаимодействий и позволяет анализировать энергетические, так и структурные характеристики материала. В ходе моделирования были исследованы в спектре плотности состояний, уровне Ферми и зонной структуре. Результаты показали, что внедрение ионов щелочных металлов и галогенов вызывает локальное нарушение симметрии графеновой решетки, что приводит к формированию дополнительных энергетических уровней вблизи зоны проводимости и валентной зоны. Наблюдаемые эффекты указывают на возможность целенаправленного управления электронными свойствами графена за счет химической модификации. В частности, было выявлено открытие

запрещенной зоны, отсутствующей у чистого графена, что имеет важное значение для расширения областей его практического применения. Следует отметить, что полученные результаты согласуются с современными исследованиями в области функциональных материалов и подтверждают высокую чувствительность графена к внешним воздействиям, включая легирование и поверхностную адсорбцию. Это делает модифицированные структуры на основе графена перспективными для разработки элементов нанoeлектроники, сенсорных устройств и других технологий, где требуется контролируемое изменение электронной проводимости. Проведенное моделирование демонстрирует потенциал графена как платформы для создания новых материалов с регулируемыми свойствами и открывает возможности для дальнейших исследований в области двумерных систем.

**Ключевые слова:** углеродный лист, графен, модификация графена, нанокристаллы NaI, KI, LiI и RbI, плотность состояния, полная энергия

**Кіріспе.** Қазіргі заманауи нанотехнология және материалтану саласындағы зерттеулер түрлі көміртекті нанокұрылымдардың электрлік және құрылымдық қасиеттерін зерделеуге бағытталған. Бұл құрылымдардың ішінде графенге ерекше назар аударылады. Графен – көміртектің екі өлшемді аллотроптық түрі, ол бірегей физика-химиялық қасиеттерімен: заряд тасымалдаушыларының жоғары қозғалғыштығы, беріктігі, жылу мен химиялық тұрақтылығымен ерекшеленеді. Осы қасиеттерінің арқасында графен микроэлектроникада, сенсорларда, энергия жинақтау құрылғыларында және кванттық құрылғыларда қолдануға болашағы зор материал ретінде қарастырылады (Castro Neto et.al., 2009; Zhang et al., 2012)

Графенді функционалдаудың тиімді тәсілдерінің бірі – оның галогенденуі, бұл кезде галоген атомдарының (F, Cl, Br, I) қосылуы арқылы оның электрондық қасиеттері өзгереді. Мұндай графен туындылары – фторографен мен хлорографен – кең тыйым салынған аймаққа, жоғары химиялық тұрақтылыққа және бірегей оптикалық сипаттамаларға ие болып келеді (Karlicky et.al., 2013 a; Zboril et al., 2010). Атап айтқанда, фторографен диэлектрлік өтімділігімен және фотолюминесценциясымен графендік кванттық нүктелерге ұқсас қасиет көрсетеді (Robinson et.al., 2010; Feng et al., 2013), ал оның сипаттамаларын ендірілген фтор немесе басқа галоген атомдарының мөлшері арқылы дәл келтіруге болады (Poh et.al., 2013; Karlicky et al., 2013 b; Takagi et al., 2002).

Графен құрылымына сілтілі галоидты қосылыстарды, мысалы NaI, KI, RbI, LiI енгізу – тағы бір маңызды бағыт болып табылады. Бұл кристалдар жоғары иондық қозғалғыштыққа және энергия деңгейлерінің кең диапазонына ие бола отырып, жүйенің электрондық күй тығыздығын (DOS) және толық энергиясын едәуір өзгерте алады (Han et.al., 2010; Osuna et al., 2010). Бұған дейін графеннің адсорбцияланған молекулалармен немесе нанокристалдармен өзара әрекеттесуі Ферми деңгейінің ығысуын, тыйым салынған аймақта қосымша энергия деңгейлерінің пайда болуын және электрондық күйлердің локализациясын тудыратындығы көрсетілген болатын (Chang et.al., 2011; Li et al., 2011; Zheng et al., 2012). Мұндай жүйелерді тығыздық функционалы теориясы (DFT) әдістері арқылы модельдеу

ерекше қызығушылық тудырады. Бұл әдістер графен мен енгізілген бөлшектер арасындағы өзара әрекеттесуді, тұрақтылығын және электрондық құрылымын кванттық-механикалық деңгейде болжауға мүмкіндік береді (Istlyaur et al., 2024 a; Istlyaur et al., 2024 b). Мысалы, галоидтармен модификацияланған графен құрылымдарын модельдеу арқылы алынған композиттердің наноэлектрондық құрылғылар мен сенсорлық платформалар элементтері ретінде қолдану әлеуетін бағалауға болады (Gopalakrishnan et al., 2012).

Осы зерттеуде NaI, KI, LiI және RbI кристалдарын енгізу арқылы графен қабатының электрлік қасиеттері компьютерлік модельдеу арқылы зерттеледі. Зерттеудің мақсаты – бұл қосылыстардың электрондық күй тығыздығына, жүйенің толық энергиясына әсерін анықтау, сондай-ақ модификацияланған құрылымдардың тұрақтылығын және оларды функционалдық наноматериалдар ретінде қолдану мүмкіндігін бағалау.

### **Материалдар мен зерттеу әдістер.**

#### **Модельдеу**

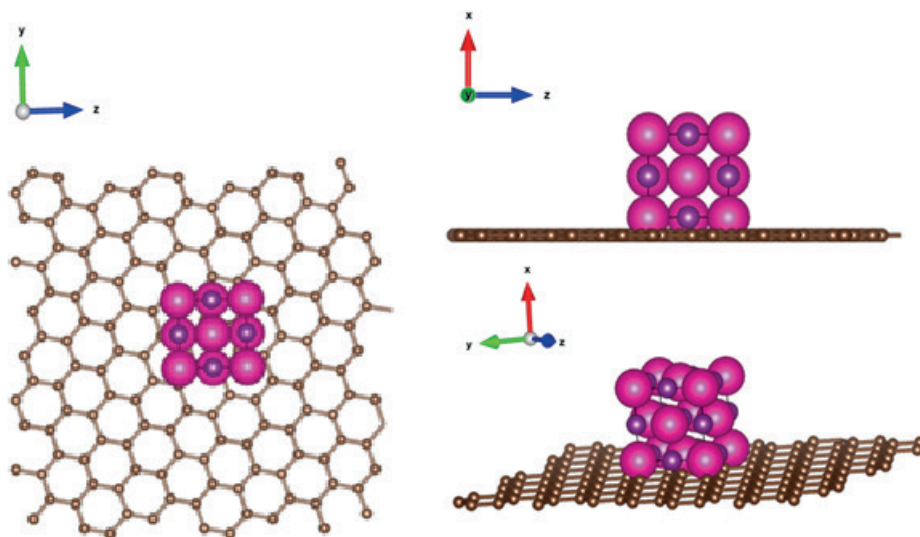
Берілген жұмыста DFT әдісі негізінде компьютерлік модельдеу жүргізілді. Есептеулер Atomistix ToolKit бағдарламалық кешенінде Virtual NanoLab интерфейсі арқылы жүзеге асырылды, ол гетероқұрылымдардың электрондық құрылымын, күй тығыздығын және толық энергиясын атомдық деңгейде есептеуге мүмкіндік береді. Барлық есептеулер LCAO базисі мен PBE (Perdew–Burke–Ernzerhof) алмастыру-корреляциялық потенциалы қолданылған жалпыланған градиентті жуықтау (GGA) шеңберінде орындалды.

Наноқұрылымдар ретінде көміртек қабаттары модельденді, олардың бетіне сілтілі галоидты қосылыстардың (NaI, KI, RbI, LiI) кристалдары орналастырылды. Геометриялық оңтайландыру қалдық күштер  $0.05 \text{ эВ}/\text{Å}$ -ден төмен мәнге жеткенше жүргізілді. Электрондық күй тығыздығы  $-30$ -дан  $+20 \text{ эВ}$ -ке дейін энергия аймағында есептелді, ал энергетикалық тыйым салынған аймақ (энергетикалық саңылау) ең жоғары толтырылған және ең төменгі бос деңгейлер арасындағы айырма ретінде анықталды.

Модельдеудің әдіснамасы модификацияланған нано-көміртекті құрылымдарды кванттық сипаттау бойынша бұрынғы табысты зерттеулерге негізделген (Istlyaur et al., 2024 b), олар табиғаты әртүрлі енгізілімдермен әрекеттескен кездегі электрондық және тасымалдау қасиеттерін жоғары дәлдікпен болжай алатындығын көрсетті. Бұл зерттеуде иондық кристалдардың Ферми деңгейіне және электрондық күйлердің тығыздығына әсерін бағалаумен қатар, зарядтың ықтимал локализациялану аймақтарын анықтауға да назар аударылады, бұл наноқұрылғыларды жобалау үшін аса маңызды.

Жүйе құрылымын визуализациялау үшін VESTA бағдарламасы қолданылды, ол атомдардың кристалдық тордағы орналасуын, сондай-ақ графен мен сілтілі галоидты кристалдар арасындағы өзара әрекеттесуді дәл бейнелеуге мүмкіндік берді. Модельді құру бірнеше кезеңнен тұрды: графен қабатын жасау, оның бетіне сілтілі металл кристалдарын (NaI, KI, LiI, RbI) орналастыру және ең тұрақты геометриялық конфигурацияға қол жеткізу үшін құрылымды оңтайландыру.

Зерттеудің негізгі кезеңдерінің бірі – күй тығыздығын есептеу болды, бұл адсорбцияланған атомдардың графеннің электрондық құрылымына қосқан үлесін бағалауға мүмкіндік берді. Таза графен мен модификацияланған құрылымдар үшін DOS салыстыруы энергетикалық деңгейлердің өзгергенін және тыйым салынған аймақта жаңа күйлердің пайда болу мүмкіндігін көрсетті. Сонымен қатар, негізгі есептеулерге дейін құрылымдардың геометриялық релаксациясы жүргізілді. Бұл процесс атомдарға әсер ететін күштерді азайтуға және жүйенің энергетикалық тұрғыдан тұрақты конфигурациясына қол жеткізуге бағытталды.



Сурет 1. Кубтық сілтілі галоидты кристалдармен модификацияланған көміртек қабаты (RbI@Graphen)

Берілген зерттеуде 1-суретте көрсетілген құрылымға ұқсас материалдар конструкциясы қолданылды. Сілтілі металл йодидтерінің кубтық кристалдары ( $3 \times 3 \times 3$  өлшемінде), яғни 27 ионнан тұратын құрылымдар, 152 атомнан құралған шағын графен қабатының бетіне орналастырылды. Бұл атомдардың 48-і кристалмен өзара әрекеттесу аймағында орналасқан. Кристалдың элементар ұяшығының көлемі  $28,934 \text{ \AA}$  құрады, бұл NaI, KI, LiI және RbI типті қосылыстар үшін тән тор өлшемдеріне сәйкес келеді.

Кристалдар құрылымы NaCl типіндегі кубтық тор түрінде ұсынылды, онда сілтілі металдардың катиондары мен йодтың аниондары кезектесіп орналасып, тұрақты кеңістіктік конфигурацияны түзеді. Кристалдағы ең жақын иондар арасындағы арақашықтық сілтілі металл табиғатына байланысты  $1,535\text{--}1,850 \text{ \AA}$  аралығында болды. Мысалы, NaI үшін бұл арақашықтық шамамен  $1,535 \text{ \AA}$ , ал KI, LiI және RbI үшін –  $1,850 \text{ \AA}$ .

Графен қабаты көміртек атомдарынан тұратын бір қабаты құрылым болып табылады және ол атомдар арасындағы типтік арақашықтығы  $\approx 1,42 \text{ \AA}$  шамасында гексагональды торда орналасқан. Графен мен кристалдық құрылым арасындағы

өзара әрекет бірнеше факторлардың есебінен жүзеге асты. Ван-дер-ваальс күштері графеннің  $\pi$ -электрондық жүйесі мен кристалл иондары арасында әлсіз қабатаралық әрекеттесуді қамтамасыз етті. Электростатикалық күштер сілтілі металдардың катиондары ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ ) мен йод аниондарының ( $\text{I}^-$ ) заряд айырмашылығынан туындап, бұл, өз кезегінде, графен бетінде поляризацияны пайда болдырды. Деформациялық әсерлер кристалл әсерінен графен қабатының мүмкін болатын иілуінен байқалды.

Графенмен кристалдың төменгі иондар қабаты арасындағы орташа арақашықтық 3,0–3,5 Å құрап, кристалдың графен бетінде тұрақты адсорбциялануын қамтамасыз етті. Бүкіл жүйенің электрондық қасиеттеріне әсер етуі мүмкін өзара әрекеттесу энергиясы қосылыстың түріне байланысты әртүрлі болды.

### **Нәтижелер мен талқылау.**

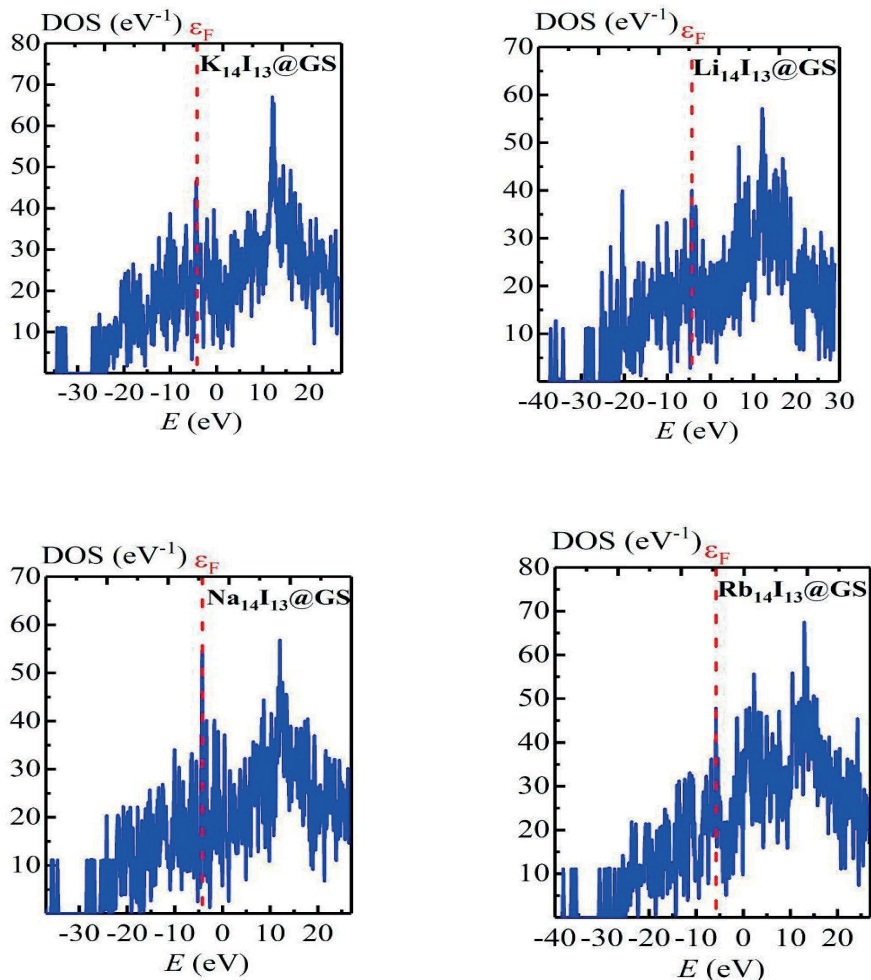
Жүйенің толық энергиясына есептеулер жүргізіліп, тығыздық функционалы теориясы шеңберінде күй тығыздығы талданды, бұл алынған құрылымдардың электрлік қасиеттерін тереңірек зерттеуге мүмкіндік берді.

Берілген жұмыстағы есептеулерді жүргізу үшін кванттық механика мен материалтануда кеңінен қолданылатын әдістердің бірі тығыздық функционалы теориясына негізделген тәсіл қолданылды. Тығыздық функционалы теориясы материалдардың электрондық құрылымдарын жоғары дәлдікпен зерттеуге мүмкіндік береді және олардың негізгі физика-химиялық қасиеттерін — энергиясын, күй тығыздығын, өткізгіштік және валенттік зоналарын болжауға мүмкіндік береді. Толық энергия бойынша алынған нәтижелер әртүрлі сілтілі галоидты қосылыстарда жүйелердің тұрақтылық дәрежесінің әртүрлі болатындығын көрсетті. Бұл графен мен адсорбцияланған NaI, KI, LiI және RbI молекулалары арасындағы иондық және ван-дер-ваальс күштерінің үлесін қоса алғанда, атомаралық өзара әрекеттесулердегі айырмашылықтарға байланысты.

Модельдеу нәтижесінде NaI, KI, LiI, RbI сілтілі галоидты кристалдарымен модификацияланған көміртек қабаты үшін күй тығыздығының графиктері алынды. Графиктерді талдау барлық зерттелген жүйелерде күй тығыздығының ұқсас таралу сипаты байқалатынын көрсетті, және бұл таралуларда катион түріне байланысты белгілі бір айырмашылықтары болды. Барлық нұсқаларда қызыл пунктирлі сызықпен белгіленген Ферми деңгейі ( $\epsilon_F$ ), тыйым салынған аймақтың ортасына жақын немесе күй тығыздығы жоғары аймақта орналасқан, бұл графеннің кристалдық енгізілімдермен әрекеттесуі нәтижесінде оның электрондық құрылымының өзгергенін көрсетеді. Мысалы,  $\text{K}_{14}\text{I}_{13}@GS$  жүйесінде күй тығыздығының ең жоғары мәні энергияның оң аймағында байқалады, ал  $\text{Rb}_{14}\text{I}_{13}@GS$  жүйесінде күйлердің таралуы энергияның төменгі аймағына ығысқан. Ұқсас көрініс  $\text{Na}_{14}\text{I}_{13}@GS$  және  $\text{Li}_{14}\text{I}_{13}@GS$  жүйелерінде де байқалады, бірақ соңғы жағдайда энергетикалық диапазон кеңейген, ал күй тығыздығы басқа жүйелермен салыстырғанда төменірек.

Осылайша, есептеу нәтижелері сілтілі галоидты кристалдардың графеннің электрондық қасиеттеріне айтарлықтай әсер ететінін көрсетеді. Атап айтқанда,  $\text{Li}^+$  және  $\text{Na}^+$  сияқты жеңіл катиондар энергия деңгейлерінің үлкен ығысуына

алып келеді, ал  $K^+$  және  $Rb^+$  сияқты ауыр катиондар неғұрлым локализацияланған күйлерді түзеді. Бұл олардың графен қабатымен электростатикалық әрекеттесуіндегі және жүйенің поляризация дәрежесіндегі айырмашылықтармен байланысты болуы мүмкін.



Сурет 2. Сілтілі металдар йодидтерінен тұратын кубтық кристалдардың және көміртек қабатының күй тығыздығы спектрлері

Күй тығыздығын талдау сілтілі галоидты кристалдарды енгізудің графеннің электрондық құрылымына қалай әсер ететінін көрсетті. Кейбір жағдайларда өткізгіштік және валенттік аймақтарда өзгерістер байқалды, бұл графенді осы қосылыстар арқылы допирлеу мүмкіндігін білдіреді. Сонымен қатар, локализацияланған күйлердің сипатында айырмашылықтар анықталды, бұл мұндай жүйелерді нанотехнология мен микроэлектроника салаларында қолдану әлеуетін түсіну үшін маңызды.

KI, LiI, RbI, NaI сілтілі галоидты кристалдарынан және көміртек қабатынан (GS) тұратын модельденген жүйелердің толық энергиясы көрсетілген кесте түрлі энергия үлестерін және олардың құрылым тұрақтылығына әсерін егжей-тегжейлі талдауға мүмкіндік береді (Кесте 1).

Кесте 1 – Көміртек қабаты мен сілтілі галоидты кристалдардан тұратын жүйенің энергия үлестері

Модельдеу нысаны	Ауыстыру-корреляциялық энергия (eV)	Кинетикалық энергия (eV)	Электростатикалық энергия (eV)	Энтропиялық қосылғыш (eV)	Толық энергия (eV)
(KI)@GS	-4275.86549	8382.50376	-16038.69300	-0.00012	-11932.05485
(LiI)@GS	-3908.83727	7908.22278	-15857.72045	-0.00012	-11858.33506
(RbI)@GS	-4262.21741	8617.31455	-16106.87983	-0.00013	-11751.78282
(NaI)@GS	-6044.36272	7871.96182	-15377.37362	-0.00019	-13549.77471

Кестеге енгізілген параметрлерге ауыстыру-корреляциялық энергия, кинетикалық энергия, электростатикалық өзара әрекеттесу, энтропиялық қосылғыш және қорытынды толық энергия кіреді. Ауыстыру-корреляциялық энергия электрондар арасындағы кванттық-механикалық өзара әрекеттесулерге жауап береді. Ең үлкен абсолюттік мән (ең теріс) NaI@GS жүйесінде байқалады (-6044.36 эВ), бұл электрондық корреляциялардың айтарлықтай әсерін көрсетеді. Қалған жүйелер (KI@GS, LiI@GS, RbI@GS) модуль бойынша кіші мәндер көрсетіп, бұл құрылымдарда электрондық корреляцияның әлсіздеу екенін білдіреді. Кинетикалық энергия электрондардың қозғалысынан туындайтын үлесті сипаттайды. Оның ең жоғары мәндері RbI@GS (8617.31 эВ) және KI@GS (8382.50 эВ) жүйелерінде тіркелген, бұл электрондық таралуға әсер ететін массивті катиондардың болуымен түсіндіріледі. Ең төменгі кинетикалық энергия NaI@GS жүйесінде байқалды (7871.96 эВ), бұл электрондық өзара әрекеттесудің әлсіздеу екенін көрсетеді.

Электростатикалық энергия – графен мен кристалдық құрылым арасындағы өзара әрекеттесуді анықтайтын негізгі параметр болып табылады. Ең айқын электростатикалық үлесті RbI@GS жүйесі көрсетеді (-16106.87 эВ), ал ең аз теріс мән NaI@GS жүйесінде байқалады (-15377.37 эВ), бұл жүйенің поляризациялану қабілетінің төмен болуымен байланысты болуы мүмкін. Сонымен қатар, барлық жүйелерде энтропиялық қосылғыш іс жүзінде еленбейтіндей аз мәнге ие (-0.00012...-0.00019 эВ), бұл термодинамикалық энтропияның бұл құрылымдардың түзілуіне әсері әлсіз екенін көрсетеді.

Толық энергияны талдау нәтижесінде ең тұрақты жүйе NaI@GS (-13549.77 эВ) екені анықталды, бұл ауыстыру-корреляциялық энергияның күшті үлесімен түсіндіріледі. Сонымен қатар, RbI@GS жүйесі ең үлкен модульдегі электростатикалық энергияға ие болғанымен, оның толық энергиясы жоғарырақ (-11751.78 эВ), бұл графен қабатының RbI-пен әрекеттесу кезінде айтарлықтай құрылымдық деформацияға ұшырайтынын көрсетеді. KI@GS (-11932.05 эВ) және LiI@GS (-11858.33 эВ) жүйелерінің толық энергия мәндері аралық диапазонда орналасқан, бұл берілген қосылыстардың орташа тұрақтылығын

білдіреді. Осылайша, термодинамикалық тұрақтылық тұрғысынан графеннің NaI қосылысымен әрекеттесуі ең тиімді болып табылады, ал ауыр катиондары бар жүйелер ( $Rb^+$ ,  $K^+$ ) графеннің электрондық құрылымына көбірек әсер еткенімен, тұрақтылығы төменірек болып келеді.

Осы зерттеу көміртекті нанокұрылымдардың сілтілі галоидты қосылыстармен өзара әрекеттесуін түсінуге өз үлесін қосады және бұл реттелетін электрлік қасиеттері бар жаңа нанокөміртекті материалдарды әзірлеу үшін пайдалы болуы мүмкін. Жалпы алғанда, жүргізілген модельдеу сілтілі галоидты қосылыстардың графен қабатының физика-химиялық қасиеттеріне әсерін талдауға мүмкіндік берді. Бұл графенді функционализациялау және берілген сипаттамаларға ие жаңа наноматериалдарды жасау саласындағы болашақ зерттеулер үшін маңызды негіз бола алады.

**Қорытынды.** Жүргізілген зерттеу NaI, KI, RbI және LiI сілтілі галоидты кристалдарын графен қабатының бетіне орналастыру оның электрондық құрылымы мен энергия сипаттамаларына айтарлықтай әсер ететінін көрсетті. Күй тығыздығының спектрлері өткізгіштік аймағында жаңа энергетикалық деңгейлердің пайда болуын және Ферми деңгейінің ығысуын көрсетеді, бұл графеннің электрондық қасиеттерін тиімді басқаруға болатындығын дәлелдейді.

Модельдеу нәтижелері мұндай нано-гетерокұрылымдарды сенсорлық құрылғыларда, бірэлектронды транзисторларда, сондай-ақ энергияны жинақтау және түрлендіру салаларында қолданудың болашағы зор екенін көрсетеді. Осы жұмыста қолданылған бірінші принциптерге негізделген есептеу әдістері және Atomistix ToolKit бағдарламалық пакеті графен негізіндегі төмен өлшемді жүйелердің физикалық сипаттамаларын сипаттауда жоғары дәлдік көрсетті.

Сонымен қатар, NaI@GS жүйесі ең төменгі толық энергия мәніне ие бола отырып, электрондық корреляция мен құрылымдық тұрақтылықтың оңтайлы үйлесімін көрсетті. Ал ауыр катиондармен ( $Rb^+$ ,  $K^+$ ) модификацияланған жүйелерде электрондық құрылымда айтарлықтай өзгерістер байқалғанымен, олардың термодинамикалық тұрақтылығы төмендеуі болып шықты. Бұл нәтижелер ион табиғатының графен негізіндегі нанокұрылымдардың энергетикалық және функционалдық сипаттамаларын қалыптастыруда шешуші рөл атқаратынын айқындайды. Алынған деректер иондық кристалдардың көміртекті нанокұрылымдармен әрекеттесуін зерттеуге арналған келешектегі теориялық және эксперименттік зерттеулерге негіз бола алады. Бұл кванттық электроникаға арналған жаңа функционалдық материалдарды әзірлеуге ықпал етеді.

### References

Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N., Novoselov K. S., Geim A.K. (2009) The Electronic Properties of Graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81. — P. 109–162. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109> (in Eng.).

Chang H.X., Cheng J.S., Liu X.Q., Gao J.F., Li M.J., Li J.H., Tao X.M., Ding F., Zheng Z.J. (2011) Facile Synthesis of Wide-Bandgap Fluorinated Graphene Semiconductors. *Chem. Eur. J.*, 17. — P. 8896–8903. DOI: 10.1002/chem.201100699 (in Eng.).

Feng Q., Cao Q., Li M., Liu F., Tang N., Du Y. (2013) Synthesis and Photoluminescence of Fluorinated Graphene Quantum Dots. *Appl. Phys. Lett.*, 102, 013111. DOI:10.1063/1.4774264 (in Eng.).



Gopalakrishnan K., Subrahmanyam K.S., Kumar P., Govindaraj A., Rao C. (2012) Reversible Chemical Storage of Halogens in Few-Layer Graphene. *RSC Adv.*, 2, 1605–1608. <https://doi.org/10.1039/C1RA00403D> (in Eng.).

Han S.S., Yu T.H., Merinov B.V., van Duin A., Yazami R., Goddard W.A. (2010) Unraveling Structural Models of Graphite Fluorides by Density Functional Theory Calculations. *Chem. Mater.*, 22. — P. 2142–2154. <https://doi.org/10.1021/cm903760t> (in Eng.).

Istlyaup A., Myasnikova L., Luschik, A. (2024). Computer simulation of the density of state NaX (X = F, Cl) nanoobjects. *Reports NAS RK*, 4. — P. 49–60. <https://doi.org/10.32014/2023.2518-1483.306> (in Eng.)

Istlyaup A., Myasnikova L., Bezrukovs V., Žalga A., Popov A.I. (2024). Computer simulation of the electrical properties of carbon nanotubes encapsulated with alkali metal iodide crystals. *Low Temperature Physics*, 50. — P. 898 – 904. DOI:10.1063/10.0028637 (in Eng.).

Karlicky F., Datta K., Otyepka M., Zboril R. (2013) Halogenated Graphenes: Rapidly Growing Family of Graphene Derivatives. *ACS Nano*, 7(8). — P. 6434–6464. DOI: 10.1021/nn4024027 (in Eng.).

Karlicky F., Otyepka M. (2013) Band Gap and Optical Spectra of Chlorographene, Fluorographene and Graphane from G0W0, GW0 and GW Calculations on Top of PBE and HSE06 Orbitals. *J. Chem. Theory Comput.*, DOI:10.1021/ct400476r. (in Eng.).

Li B., Zhou L., Wu D., Peng H.L., Yan K., Zhou Y., Liu Z.F. (2011) Photochemical Chlorination of Graphene. *ACS Nano*, 5. — P. 5957–5961. DOI: 10.1021/nn201731t (in Eng.).

Osuna S., Torrent-Sucarrat M., Sola M., Geerlings P., Ewels C.P., Van Lier G. (2010) Reaction Mechanisms for Graphene and Carbon Nanotube Fluorination. *J. Phys. Chem. C*, 114. — P. 3340–3345. <https://doi.org/10.1021/jp908887n> (in Eng.).

Poh H.L., Simek P., Sofer Z., Pumera M. (2013) Halogenation of Graphene with Chlorine, Bromine, or Iodine by Exfoliation in a Halogen Atmosphere. *Chem. Eur. J.*, 19. — P. 2655–2662. <https://doi.org/10.1002/chem.201202972> (in Eng.).

Robinson J.T., Burgess J.S., Junkermeier C.E., Badescu S.C., Reinecke T.L., Perkins F.K., Zalalutdniov M.K., Baldwin J.W., Culbertson J.C., Sheehan P.E. (2010) Properties of Fluorinated Graphene Films. *Nano Lett.*, 10. — P. 3001–3005. <https://doi.org/10.1021/nl101437p> (in Eng.).

Takagi Y., Kusakabe K. (2002) Transition from Direct Band Gap to Indirect Band Gap in Fluorinated Carbon. *Phys. Rev. B*, 65, 121103(R). DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.121103> (in Eng.).

Zboril R., Karlicky F., Bourlinos A.B., Steriotis T.A., Stubos A.K., Georgakilas V., Safarova K., Jancik D., Trapalis C., Otyepka M. (2010) Graphene Fluoride: A Stable Stoichiometric Graphene Derivative and Its Chemical Conversion to Graphene. *Small*, 6. — P. 2885–2891. <https://doi.org/10.1002/sml.201001401> (in Eng.).

Zhang T., Xue Q.Z., Zhang S., Dong M.D. (2012), Theoretical Approaches to Graphene and Graphene-Based Materials. *Nano Today* 7. — P. 180–200. DOI: 10.1016/j.nantod.2012.04.006 (in Eng.).

Zheng J., Hong L., Bin W., Chong D., Yun T., Gui Y., Liu Y., Zhu D. (2012) Production of Graphite Chloride and Bromide Using Microwave Sparks. *Sci. Rep.*, 2, 662. DOI: 10.1038/srep00662 (in Eng.).

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

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

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

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

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

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

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

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

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

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

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

Подписано в печать 3.09.2025.

Формат 60x88<sup>1</sup>/<sub>8</sub>.  
18,0 п.л. Заказ 3.