

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

**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

**№2
2026**

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

2026 • 2



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 IAAS and NAS RK, General Director of the Research Institute of Petroleum Refining and Petrochemicals (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960> <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

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>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

ADEKENOV Sergazy Mynzhasarovich, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Director of the JSC "Phytochemistry Research and Production Center", (Karaganda, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

RAMAZANOV Tlekkaul 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>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

ABIEV Rufat, Doctor of Technical Sciences (Biochemistry), Professor, Head of the Department of Optimization of Chemical and Biotechnological Equipment, St. Petersburg State Technological Institute (St. Petersburg, Russia), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

OLIVIERO Rossi Cesare, PhD (Chemistry), Professor at the University of Calabria (Calabria, Italy), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

TIGINYANU Ion Mihailovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician, President of the Academy of Sciences of Moldova, Technical University of Moldova (Chisinau, Moldova), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

SANG SU Kwak, PhD (Biochemistry, Agricultural Chemistry), Professor, Chief Scientist, Research Center for Plant Systems Engineering, Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology (KRIBB), (Daecheon, Korea), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

BERSIMBAYEV Rakhmetkazhi Iskenderovich, Doctor of Biological Sciences, Professor, Academician of NAS RK, L.N. Gumilyov Eurasian National University (Astana, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

CALANDRA Pietro, PhD (Physics), Professor, Institute for the Study of Nanostructured Materials (Rome, Italy), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/616360>

BOSHKAEV Kuantai Avgazyevich, PhD, Associate Professor, Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

BURKITBAEV Mukhambetkali, Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan) <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29017135>

QUEVEDO Hernando, Professor, National Autonomous University of Mexico (UNAM), Institute of Nuclear Sciences (Mexico City, Mexico), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ZHUSUPOV Marat Abzhanovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

KOVALEV Alexander Mikhailovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Academician of NAS of Ukraine, Institute of Applied Mathematics and Mechanics (Donetsk, Ukraine), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

TAKIBAEV Nurgali Zhabagaevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

KHARIN Stanislav Nikolaevich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Kazakh-British Technical University (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

ABISHEV Medeu Erzhanovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Corresponding Member of NAS RK, (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

ABILMAGZHANOV Arlan Zainutallaevich, 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>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

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:

ЖҰРЫНОВ Мұрат Жұрыңұлы, химия ғылымдарының докторы, профессор, ХҒАҚ және ҚР ҰҒА академигі, Мұнай өңдеу және мұнай-химиясы ғылыми-зерттеу институтының бас директоры (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960%3Cp%3Ehttps://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

Редакция ұжымы:

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нұрәділұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

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

РАМАЗАНОВ Тілеккабыл Сәбитұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

ӘБИЕВ Руфат, техника ғылымдарының докторы (биохимия), профессор, Санкт-Петербург мемлекеттік технологиялық институты «Химиялық және биотехнологиялық аппаратураны оңтайландыру» кафедрасының меңгерушісі, (Санкт-Петербург, Ресей), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

ОЛИВЬЕРО Росси Сесаре, PhD (химия), Калабрия университетінің профессоры (Калабрия, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

ТИГІНЯНУ Ион Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, академик, Молдова Ғылым Академиясының президенті, Молдова техникалық университеті (Кишинев, Молдова), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

САНГ-СУ Квак, PhD (биохимия, агрохимия), профессор, Корея Биология және биотехнология ғылыми-зерттеу институты (KRIIBV), өсімдіктердің инженерлік жүйелері ғылыми-зерттеу орталығының бас ғылыми қызметкері, (Дэчон, Корея), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

БЕРСІМБАЕВ Рахметқажы 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>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

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

БОШКАЕВ Қуантай Авғазыұлы, 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>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

БҮРКІТБАЕВ Мұхамбетқали, химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29017135>

QUEVEDO Hernando, профессор, Мексика ұлттық автономиялық университеті (UNAM), Ядролық ғылымдар институты (Мехико, Мексика), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ЖҮСІПОВ Марат Абжанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, теориялық және ядролық физика кафедрасының профессоры, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, Украина ҰҒА академигі, Қолданбалы математика және механика институты (Донецк, Украина), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

ТАКИБАЕВ Нұрғали Жабағұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

ХАРИН Станислав Николаевич, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

ӘБІШЕВ Медеу Ержанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, (Алматы, Қазақстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

ӘБІЛМАҒЖАНОВ Арлан 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>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

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

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

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

Тақырыптық бағыты: *физика, химия.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

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

Главный редактор:

ЖУРИНОВ Мурат Журинович, доктор химических наук, профессор, академик МАН и НАН РК, Генеральный директор НИИ нефтепереработки и нефтехимии (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602177960%3Cp%3Ehttps://www.webofscience.com/wos/author/record/2017489>

Редакционная коллегия:

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нурадилович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

АДЕКЕНОВ Сергезы Мынжасарович, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, директор АО "Научно-производственного центра "Фитохимия" (Караганда, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006153118>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/48648658>

РАМАЗАНОВ Тлеккабул Сабитович, (заместитель главного редактора), доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

АБИЕВ Руфат, доктор технических наук (биохимия), профессор, заведующий кафедрой «Оптимизация химической и биотехнологической аппаратуры», Санкт-Петербургский государственный технологический институт (Санкт-Петербург, Россия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602431781>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1405661>

ОЛИВЬЕРО Росси Чезаре, доктор философии (PhD, химия), профессор Университета Калабрии (Калабрия, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57221375979>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/399768>

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, доктор физико-математических наук, академик, президент Академии наук Молдовы, Технический университет Молдовы (Кишинев, Молдова), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7006315935>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/524462>

САНГ-СУ Квак, доктор философии (PhD, биохимия, агрохимия), профессор, главный научный сотрудник, Научно-исследовательский центр инженерных систем растений, Корейский научно-исследовательский институт бионауки и биотехнологии (KRIBB), (Дэжон, Корея), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=59286321700>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30028581>

БЕРСИМБАЕВ Рахметкажи Искендинович, доктор биологических наук, профессор, академик НАН РК, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева (Астана, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004012398>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/19854255>

КАЛАНДРА Пьетро, доктор философии (PhD, физика), профессор Института по изучению наноструктурированных материалов (Рим, Италия), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004303066>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/616360>

БОШКАЕВ Куантай Авгазыевич, PhD, преподаватель, доцент кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54883880400>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2080231>

БУРКИТБАЕВ Мухамбеткали, доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=8513885600>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/29017135>

QUEVEDO Hernando, профессор, Национальный автономный университет Мексики (UNAM), Институт ядерных наук (Мехико, Мексика), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55989741100>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/30353742>

ЖУСУПОВ Марат Абжанович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6602166928>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/566>

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, академик НАН Украины, Институт прикладной математики и механики (Донецк, Украина), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7202799321>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/65533963>

ТАКИБАЕВ Нурғали Жабағәевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=24077239000>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1671760>

ХАРИН Станислав Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701353063>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2023295>

АБИШЕВ Медеу Ержанович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=26530759900>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/1556025>

АБИЛМАТЖАНОВ 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>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

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

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

Свидетельство № KZ93VPY00121157 о повторной регистрации периодического печатного издания информационного агентства, информационного агентства и сетевого издания, выданное Республиканским государственным учреждением «Комитет информации» Министерства культуры и информации Республики Казахстан 05.06.2025

Тематическая направленность: физика, химия.

Периодичность: 4 раза в год.

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

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

CONTENTS

PHYSICS

Koshtybayev T.B., Aliev Sh., Aliyeva M.E., Zhavliyeva A.T. Covariant approach to the kinetic theory of plasma in a strong electromagnetic field.....	13
Kemelbekova A., Shongalova A., Bondar E., Otunchi Ye. Recycling technologies for spent lithium-ion batteries: environmental impact, recovered products, and future development trends.....	25
Koilyk N., Baimbetova G., Dalelkhankyzy A., Kaptagay G., Primkulova Zh. Simplification of the fermionic dynamical symmetry model for identical particles and its mapping into bosonic space.....	38
Massak B., Agyl-Mussapar O., Amangeldinova S., Kurmangaliyeva V., Snow M. Constraints on Yukawa-Type short-range interactions from neutron interferometry data.....	60
Nurbayev B.M., Dmitriyeva E.A. Tin-based perovskites.....	70
Nurtazina A.S., Zhubaev A.K. Study of the effect of highly dispersed ochre on the kinetic characteristics of epoxy composites.....	92
Shokanov A.K., Khamrayev Sh.I., Smikhan Y.A. Mössbauer studies of fly ash-based tracers.....	103
Ualikhanova U.A., Kurban Y.Y., Syzdykova A.M., Altayeva G.S., Altaibayeva A.B. Breaking the degeneracy between metric and teleparallel gravity theories through multi-messenger gravitational-wave astronomy.....	119
Zhadyranova A.A., Yerzhan B. Dynamics of bounce regimes in modified teleparallel gravity.....	134
Zhusupova N.K. Application of machine learning methods in the analysis of gravitational waves and cosmological models.....	151

CHEMISTRY

Aubakirov Ye., Akhmetova F., Tashmukhambetova Zh., Toshtay K., Amantaiuly K. Conversion of Polymer Waste into Synthetic Fuel via Modification of Taizhuzhen Zeolite with Tungsten Salts.....	164
Auyeshov A.P., Eskibayeva Ch.Z., Ibrayeva A.M., Alzhanov K.B., Dikanbayeva A.K. Physicochemical study of serpentinite waste and phosphoric acid products.....	175
Bayeshova A.K., Bayeshov A., Tuleshova E.Zh. Reduction of copper ions by zinc in the presence of titanium(iv) ions in sulfuric acid solutions.....	188

Fazylov S.D., Syzdykov A.K., Pustolaikina I.A., Kazhmuratova A.T., Tazhibay A.M. Production of α -, β -, γ -oligosaccharide clathrate cytosine complexes.....	200
Jalmakhanbetova R.I., Yelshibayeva A.M., Zhumagaliyeva Zh.Zh., Mukusheva G.K. Terpenoid compounds of <i>Artemisia terrae-albae</i> growing in the Turkestan Region of Kazakhstan.....	213
Kapizov O.S., Mukhanov D.K., Dzheldybaeva I.M., Seisenov E.B., Akimbayeva A.B. Sustainable recycling of ferrosilicon machining chips from metallurgical plants into high-performance silicon–carbon anodes.....	228
Massalimova B.K. Wastewater treatment methods for heavy metal removal: production of activated carbon from biomass.....	244
Nurtai Zh., Orynassar R., Aimaganbetova Z.K., Zhanturina N.N. Simulation of kinetic parameters of vinyl ester resin samples with diatomite and dimethyl methylphosphonate fillers.....	272
Sagyntayeva A., Zhanikulov N., Sudarev E., Kaiyrbaeva M., Zhakipbayev B. Research on the quality of raw materials for obtaining gypsum-cement-pozzolanic composite material.....	286
Satayeva S., Yermukhanova S., Urazova A., Mendygaliyeva A., Sabitov B. Obtaining benzene by photocatalytic oxidation of toluene.....	302
Sdikova G.Zh., Dalabayeva N.S., Sarova N.B., Muhtar T.Zh., Zhaltirbayeva N.K. Efficiency of phosphorus-containing inhibitors in protecting steel against corrosion.....	315
Shaimardan M., Azhikhanova Z., Abutalip M., Toktarbaiuly O. Isolation and Characterization of lignin from <i>Phlomis tuberosa</i> L. biomass via acid treatment.....	329
Yesimsiitova Z.B., Seisenova A., Oryngaliyeva S.Zh., Sanuar A., Manap K.R. Obtaining carbonized materials from rice husk using a mobile pyrolysis plant for energy applications.....	338
Zhetenova M.S., Suleimenova M.Sh., Nuraly A.M., Mutushev A.Zh., Kalimoldina L.M. Development and research of carotenoid-containing extracts obtained from plant raw materials.....	353
Zhortarova A.A., Kubicek V., Salkeyeva L.K., Ibrayev M.K., Seidakhmetova R.B. Synthesis and investigation of biological activity of 1,3-Bis(4-Phenylthiazol-2-yl)-2,4-Bis(N,N- Diethylamino)-1,3-Diaza-2,4-Diphosphétidine.....	367
Zhumabek M., Tungatarova S.A., Murzin D.Yu., Baizhumanova T.S. Structural and catalytic properties of SCS-derived Co–Al–Mg–Mn catalysts in dry reforming of methane.....	383

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

Қоштыбаев Т.Б., Алиев Ш., Алиева Е.М., Жавлиева А.Т. Күшті электромагниттік өрістегі плазманың кинетикалық теориясына коварианттық көзқарас.....	13
Кемелбекова А., Шонғалова А., Бондарь Е., Отунчи Е. Пайдаланылған литий-ионды аккумуляторларды қайта өңдеу технологиялары: экологиялық әсері, алынатын өнімдер және болашақ даму бағыттары.....	25
Қойлық Н.О., Байымбетова Г.А., Дәлелханқызы А., Қаптағай Г.А., Примкулова Ж.Е. Бірдей бөлшектер үшін фермионды динамикалы-симметриялық модельді ықшамдау және оны бозондық кеңістікке бейнелеу.....	38
Масақ Б., Ағыл-Мұсапар О., Амангелдинова С., Курманғалиева В., Сноу М. Нейтрондық интерферометрия негізінде юкава типті қысқа-қашықтықтағы өзара әсерлесулерге шектеулер қою.....	60
Нұрбаев Б.М., Дмитриева Е.А. Қалайы негізіндегі перовскиттер.....	70
Нуртазина А.С., Жубаев А.К. Дисперстілігі жоғары охраның эпоксидті композиттердің кинетикалық сипаттамаларына ықпалын зерттеу.....	92
Шоканов А.К., Хамраев Ш.И., Смихан Е.А. Ұшқыш күл негізіндегі трассерлердің мессбауэрлік зерттеулері.....	103
Уалиханова У.А., Құрбан Е.Е., Сыздыкова А.М., Алтаева Г.С., Алтайбаева А.Б. Көп арналы гравитациялық-толқындық астрономия арқылы метрикалық және телепараллельді гравитация теорияларының айырмашылығын зерттеу.....	119
Жадыранова А.А., Ержан Б. Модификацияланған телепараллель гравитациядағы серпіліс режимдерінің динамикасы.....	134
Жусупова Н.К. Машиналық оқыту әдістерін гравитациялық толқындар мен космологиялық модельдерді талдауда қолдану.....	151

ХИМИЯ

Аубакиров Е., Ахметова Ф., Ташмұхамбетова Ж., Тоштай Қ., Амантайұлы Қ. Тайжүзген цеолитін вольфрам тұздарымен модификациялау арқылы полимер қалдықтарын синтетикалық отынға түрлендіру.....	164
Ауешов А.П., Ескибаева Ч.З., Ибраева А.М., Алжанов К.Б., Диканбаева А.К. Серпентинит қалдықтарының фосфор қышқылымен әрекеттесу өнімдерінің физика-химиялық зерттелуі.....	175

Башова А.К., Башов А.Б., Түлешова Э.Ж.

Мыс иондарын күкіртқышқылды ерітінділерде титан (IV) иондары қатысында
мырышпен тотықсыздандыру.....188

Фазылов С.Д., Сыздықов А.К., Пустолайкина И.А., Қажмұратова А.Т., Тәжібай А.М.
Цитизиннің α -, β -, γ -олигосахаридтермен клатраттыкешендерін алу.....200

Джалмаханбетова Р.И., Елшібаева А.М., Жумагалиева Ж.Ж., Мукушева Г.К.
Қазақстанның Түркістан өңірінде өсетін *Artemisia terrae-albae* терпеноидты
косылыстары.....213

Капизов О.С., Муханов Д.К., Желдыбаева И.М., Сейсенев Е.Б., Акимбаева А.Б.
Металлургиялық зауыттардың ферросилиций жоңқаларын жоғары өнімді
кремний-көміртекті анодтарға тұрақты қайта өңдеу.....228

Масалимова Б.К.

Ауыр металдардан ағын суларды жою әдістері: биомассада белсендендірілген
көміртек алу.....244

Нуртай Ж., Орынбасар Р.О., Аймағанбетова З.К., Жантурина Н.Н.

Диатомит пен диметил метилфосфонат толтырғыштары бар винилэфир шайыр
үлгілерінің кинетикалық параметрлерінің модельдеу.....272

Сағынтаева А., Жаниқұлов Н., Сударев Е., Қайырбаева М., Жакипбаев Б.

Гипс-цемент-пуццоланды композициялық материал алу үшін қажетті
шикізаттардың сапасын зерттеу.....286

Сатаева С., Ермуханова С., Уразова А., Мендығалиева А., Сабитов Б.

Толуолдың фотокаталитикалық тотығуы арқылы бензол алу.....302

Сдикова Г.Ж., Далабаева Н.С., Сарова Н.Б., Мұхтар Т.Ж., Жалтырбаева Н.К.

Фосфор ингибиторлардың болаттың жемірілуіне қарсы тиімділігі.....315

Шаймардан М., Ажиханова Ж., Әбутәліп М., Тоқтарбайұлы О.

Phlomis Tuberosa L. өсімдігі биомассасынан лигнинді қышқылдық өңдеу арқылы
бөліп алу және сипаттау.....329

Есимсиитова З.Б., Сейсенова А., Орынғалиева С.Ж., Сануар А., Манап К.Р.

Энергиялық қолдану үшін жылжымалы пиролиз қондырғысын пайдалану арқылы
күріш қауызынан көміртекті материалдар алу.....338

**Жетенова М.С., Сүлейменова М.Ш., Нұралы Ә.М., Мутушев А.Ж.,
Калимолдина Л.М.**

Өсімдік шикізатынан алынған құрамында каротиноид бар сығындыларды
әзірлеу және зерттеу.....353

Жортарова А.А., Kubicek V., Салькева Л.К., Ибраев М.К., Сейдахметова Р.Б.
1,3-бис(4-фенилтиазол-2-ил)-2,4-бис(N,N-диэтиламино)-1,3-диазо-2,4-дифосфетидиннің
синтезі және биологиялық белсенділігін зерттеу.....367

Жұмабек М., Тунгатарова С.А., Мурзин Д.Ю., Байжуманова Т.С.
SCS әдісімен дайындалған Co–Al–Mg–Mn катализаторларының метанның құрғақ
реформингіндегі құрылымдық және каталитикалық қасиеттері.....383

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Коштыбаев Т.Б., Алиев Ш., Алиева М.Е., Жавлиева А.Т. Ковариантный подход к кинетической теории плазмы в сильном электромагнитном поле.....	13
Кемелбекова А., Шонгалова А., Бондарь Е., Отунчи Е. Технологии переработки отработанных литий-ионных аккумуляторов: экологическое воздействие, получаемые продукты и будущие направления развития.....	25
Қойлық Н.О., Баймбетова Г.А., Дәлелханқызы А., Қаптағай Г.Ә., Примкулова Ж.Е. Упрощение фермионной динамико-симметрической модели для идентичных частиц и её отображение в бозонное пространство.....	38
Масақ Б., Ағыл-Мұсапар О., Амангелдинова С., Курмангалиева В., Сноу М. Ограничения на юкавовские короткодействующие взаимодействия на основе нейтронной интерферометрии.....	60
Нурбаев Б.М., Дмитриева Е.А. Перовскиты на основе олова.....	70
Нуртазина А.С., Жубаев А.К. Исследование влияния высокодисперсной охры на кинетические характеристики эпоксидных композитов.....	92
Шоканов А.К., Хамраев Ш.И., Смихан Е.А. Мёсбауэровские исследования трассеров на основе летучей золы.....	103
Уалиханова У.А., Курбан Е.Е., Сыздыкова А.М., Алтаева Г.С., Алтайбаева А.Б. Разрешение вырождения метрических и телепараллельных теорий гравитации посредством многоканальной гравитационно-волновой астрономии.....	119
Жадыранова А.А., Ержан Б. Динамика отскоковых режимов в модифицированной телепараллельной гравитации.....	134
Жусупова Н.К. Применение методов машинного обучения при анализе гравитационных волн и космологических моделей.....	151

ХИМИЯ

Аубакиров Е., Ахметова Ф., Ташмухамбетова Ж., Тоштай К., Амантайулы К. Конверсия полимерных отходов в синтетическое топливо путем модификации цеолита тайжугзен солями вольфрама.....	164
--	-----

Ауешов А.П., Ескибаева Ч.З., Ибраева А.М., Алжанов К.Б., Диканбаева А.К. Физико-химическое исследование продуктов взаимодействия серпентинитовых отходов и фосфорной кислоты.....	175
Башова А.К., Башов А.Б., Тулешова Э.Ж. Восстановление ионов меди цинком в присутствии ионов титана (IV) в растворах серной кислоты.....	188
Фазылов С.Д., Сыздыков А.К., Пустолайкина И.А., Кажмуратова А.Т., Тажибай А.М. Получение α -, β -, γ -олигосахаридных клатратных комплексов цитизина.....	200
Джалмаханбетова Р.И., Елшыбаева А.М., Жумагалиева Ж.Ж., Мукушева Г.К. Терпеноидные соединения <i>Artemisia terrae-albae</i> , произрастающего в Туркестанском регионе Казахстана.....	213
Капизов О.С., Муханов Д.К., Желдыбаева И.М., Сейсенов Е.Б., Акимбаева А.Б. Устойчивая переработка стружки ферросилиция металлургических заводов в высокопроизводительные кремний-углеродные аноды.....	228
Масалимова Б.К. Методы очистки сточных вод от тяжелых металлов: получение активированного угля из биомассы.....	244
Нуртай Ж., Орынбасар Р.О., Аймаганбетова З.К., Жантурина Н.Н. Моделирование кинетических параметров образцов винилэфирных смол с наполнителями из диатомита и диметилметилфосфоната.....	272
Сагынтаева А., Жаникулов Н., Сударев Е., Кайырбаева М., Жакипбаев Б. Исследование качества сырья для получения гипсо-цементно-пуццоланового композиционного материала.....	286
Сатаева С., Ермуханова С., Уразова А., Мендыгилиева А., Сабитов Б. Получение бензола методом фотокаталитического окисления толуола.....	302
Сдикова Г.Ж., Далабаева Н.С., Сарова Н.Б., Мухтар Т.Ж., Жалтырбаева Н.К. Эффективность фосфорсодержащих ингибиторов против коррозии стали.....	315
Шаймардан М., Ажиханова Ж., Абуталип М., Токтарбай О. Выделение и характеристика лигнина из биомассы <i>Phlomis Tuberosa</i> L. с помощью кислотной обработки.....	329
Есимсиитова З.Б., Сейсенова А., Орынгалиева С.Ж., Сануар А., Манап К.Р. Получение карбонизированных материалов из рисовой шелухи с использованием мобильной пиролизной установки для энергетических применений.....	338

**Жетенова М.С., Сулейменова М.Ш., Нуралы А.М., Мутушев А.Ж.,
Калимолдина Л.М.**

Разработка и исследование каротиноидсодержащих экстрактов, полученных
из растительного сырья.....353

Жортарова А.А., Kubicek V., Салькева Л.К., Ибраев М.К., Сейдахметова Р.Б.

Синтез и исследование биологической активности 1,3-бис(4-фенилтиазол-2-ил)-2,4-
бис(N,N-диэтиламино)-1,3-диазо-2,4-дифосфетидина.....353

Жумабек М., Тунгатарова С.А., Мурзин Д.Ю., Байжуманова Т.С.

Структурные и каталитические свойства Co–Al–Mg–Mn катализаторов, приготовленных
методом SCS, для сухого риформинга метана.....383

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 70–91

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.438>

UDC: 539.23
IRSTI: 29.19.16

©Nurbayev B.M.^{1,2*}, Dmitriyeva E.A.², 2026.

¹Satbayev university, Almaty, Kazakhstan;

²LLP Institute of Physics and Technology, Almaty, Kazakhstan.

*E-mail: bedel.armia.99@gmail.com

TIN-BASED PEROVSKITES

Nurbayev Bedelbek — PhD student, junior researcher, Satbayev University; LLP Institute of Physics and Technology, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: bedel.armia.99@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3059-6349>;

Dmitriyeva Elena — Candidate of Physical and Mathematical sciences, LLP Institute of Physics and Technology, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: dmitriyeva2017@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1280-2559>.

Abstract. This review article summarizes and systematically analyzes the structural, electronic, and optical properties of tin (Sn)-based metal halide perovskites, which are considered promising materials for solar energy and a wide range of optoelectronic applications. Over the past decade, the power conversion efficiency of perovskite solar cells has increased significantly and has approached a level comparable to that of conventional silicon technology. However, in most high-efficiency devices, lead (Pb) is used as a key component; therefore, its toxicity, the hazards associated with degradation products under moisture and oxygen exposure, and related environmental risks remain important factors limiting practical implementation. In this context, the development of lead-free perovskites, particularly through the substitution of Pb^{2+} ions with the isovalent Sn^{2+} ion, represents a promising and relevant research direction. The paper discusses the structural features of three-dimensional tin-based perovskites (MASnI_3 , FASnI_3 , and CsSnI_3), including their temperature-dependent phase transitions and symmetry lowering caused by the tilting of $[\text{BX}_6]$ octahedra and changes in bond angles. From the perspective of electronic properties, theoretical (DFT, GW with consideration of spin–orbit coupling, SOC) and experimental data on the orbital nature of the valence and conduction bands, bandgap energy, density of states, and effective masses of charge carriers are compared. In addition, stability issues related to the tendency of tin ions to oxidize from Sn^{2+} to Sn^{4+} , the influence of defects (deep and shallow trap states) on device performance, and approaches to mitigate these effects through doping, passivation, and compositional cation/anion engineering are



discussed. Overall, the reviewed literature indicates that tin-based perovskites exhibit a high absorption coefficient, favorable charge-transport characteristics, and significant potential for the development of environmentally friendly, lead-free, high-efficiency solar cells.

Keywords: perovskite, tin, solar cells, MASnI_3 , FASnI_3 , crystal structure, effective masses

Financing. This research was conducted as part of the targeted funding program for the project AP23485698, titled “Research of tin-based perovskites on flexible substrates”.

For citations: Nurbayev B.M., Dmitriyeva E.A. Tin-Based Perovskites. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 70–91. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.438>

©Нұрбаев Б.М.^{1,2*}, Дмитриева Е.А.², 2026.

¹Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университеті, Алматы, Қазақстан;

²ТОО Физика-Техникалық Институт, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: bedel.armia.99@gmail.com

ҚАЛАЙЫ НЕГІЗІНДЕГІ ПЕРОВСКИТТЕР

Нұрбаев Беделбек — PhD докторант, кіші ғылыми қызметкер, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық зерттеу техникалық университеті, ТОО Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан, E-mail: bedel.armia.99@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3059-6349>;

Дмитриева Елена — физика-математика ғылымдарының кандидаты, профессор, ТОО Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан, E-mail: dmitriyeva2017@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1280-2559>.

Аннотация. Бұл шолу мақаласында күн энергетикасы мен кең ауқымды оптоэлектрондық қолданбалар үшін перспективалы материалдар ретінде қарастырылатын қалайы (Sn) негізіндегі металлогалогенидті перовскиттердің құрылымдық, электрондық және оптикалық қасиеттері жинақталып, жүйелі түрде талданады. Соңғы онжылдықта перовскитті күн элементтерінің пайдалы әсер коэффициенті айтарлықтай өсіп, дәстүрлі кремний технологиясымен бәсекелес деңгейге жақындады. Дегенмен, көпшілік жоғары тиімді құрылғыларда қорғасын (Pb) негізгі компонент ретінде қолданылатындықтан, оның уыттылығы, ылғал мен оттегі әсерінен деградация өнімдерінің қауіптілігі және экологиялық тәуекелдер практикалық енгізуді шектейтін маңызды факторлар болып отыр. Осыған байланысты қорғасынсыз перовскиттерді дамыту, әсіресе Pb^{2+} орнына валенттігі ұқсас Sn^{2+} ионын енгізу – перспективалы әрі өзекті бағыт. Жұмыста Sn-негізді үшөлшемді перовскиттердің (MASnI_3 , FASnI_3 және CsSnI_3) кристалдық құрылым ерекшеліктері, температураға тәуелді фазалық ауысулары, $[\text{BX}_6]$

октаэдрлерінің еңкеюі мен байланыс бұрыштарының өзгеруі арқылы туындайтын симметрия төмендеуі талқыланады. Электрондық қасиеттер тұрғысынан валенттік және өткізгіштік зоналардың орбиталық табиғаты, тыйым салынған аймақтың ені, күйлердің тығыздығы және заряд тасымалдаушылардың тиімді массалары жөніндегі теориялық (DFT, GW, SOC ескеру) және эксперименттік деректер салыстырылады. Сонымен қатар, қалайы иондарының $\text{Sn}^{2+} \rightarrow \text{Sn}^{4+}$ тотығуына бейімділігіне байланысты тұрақтылық мәселелері, ақаулардың (терең/таязырақ тұзақ күйлері) құрылғы параметрлеріне ықпалы және оларды легирлеу, пассивациялау, композициялық катион/анион инженериясы арқылы төмендету тәсілдері қарастырылады. Жалпы алғанда, әдеби деректер Sn-негізді перовскиттердің жоғары жұтылу коэффициентіне, қолайлы тасымалдау сипаттамаларына және қорғасынсыз экологиялық қауіпсіз күн элементтерін әзірлеуге мүмкіндік беретін айқын әлеуетке ие екенін көрсетеді.

Түйін сөздер: Перовскит, қалайы, күн элементтері, MASnI_3 , FASnI_3 , кристалдық құрылымы, тиімді массалар

©Нурбаев Б.М.^{1,2*}, Дмитриева Е.А.², 2026.

¹Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан;

²ТОО «Физико-технический институт», Алматы, Казахстан.

*E-mail: bedel.armia.99@gmail.com

ПЕРОВСКИТЫ НА ОСНОВЕ ОЛОВА

Нурбаев Беделбек — PhD докторант, младший научный сотрудник, Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева; ТОО «Физико-технический институт», Алматы, Казахстан,

E-mail: bedel.armia.99@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3059-6349>;

Дмитриева Елена — кандидат физико-математических наук, профессор, ТОО «Физико-технический институт», Алматы, Казахстан,

E-mail: dmitriyeva2017@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1280-2559>.

Аннотация. В обзорной статье обобщены и систематизированы современные данные о структурных, электронных и оптических свойствах металлгалогенидных перовскитов на основе олова (Sn), рассматриваемых в качестве перспективных материалов для солнечной энергетики и различных оптоэлектронных устройств. За последнее десятилетие эффективность перовскитных солнечных элементов существенно возросла и приблизилась к показателям традиционных кремниевых технологий. Однако использование свинца в составе большинства высокоэффективных перовскитов сопровождается экологическими рисками и ограничивает их широкое практическое применение. В связи с этим особый интерес представляет разработка бессвинцовых материалов, основанных на замещении ионов Pb^{2+} валентно аналогичными ионами Sn^{2+} . В работе рассмотрены особенности кристаллической структуры трёхмерных оловосодержащих

перовскитов MASnI_3 , FASnI_3 и CsSnI_3 , их температурно-зависимые фазовые переходы, а также изменения симметрии, обусловленные наклоном октаэдров $[\text{BX}_6]$ и вариацией углов химических связей. Проанализированы теоретические и экспериментальные данные о природе валентной и проводящей зон, ширине запрещённой зоны, плотности электронных состояний и эффективных массах носителей заряда. Особое внимание уделено проблемам стабильности, связанным с окислением Sn^{2+} до Sn^{4+} , влиянию дефектных состояний на характеристики устройств, а также современным подходам к повышению стабильности материалов посредством легирования, пассивации и инженерии катионно-анионного состава. Анализ литературных данных показывает, что перовскиты на основе олова обладают высоким коэффициентом поглощения света, благоприятными транспортными свойствами и значительным потенциалом для создания экологически безопасных бессвинцовых высокоэффективных солнечных элементов и других оптоэлектронных устройств.

Ключевые слова: перовскит, олово, солнечные элементы, MASnI_3 , FASnI_3 , кристаллическая структура, эффективные массы

Кіріспе. «Перовскит» термині қазір жанартылатын энергия көздерін дамытуға қызығушылық танытқан кез келген адамға таныс. Бұл құбылыс зерттеушілер мен технологтардың перовскиттерге негізделген гибриді органикалық-бейорганикалық жартылай өткізгіштер - металл галогенидтері деп аталатын материалдар тобына ерекше қызығушылығынан туындайды. Бұл құрылғылардың тиімділігінің бұрын-соңды болмаған өсуін соңғы онжылдықтағы ең маңызды ғылыми жетістіктердің бірі деп санауға болады. 2007 жылы перовскит күн батареяларының тиімділігі жалпы алғанда 3%-дан аспаса, бүгінде күн энергиясын түрлендірудің бұл маңызды параметрі 25%-ға жетті. Бұл мән қазіргі уақытта ең кең таралған кристалды кремний негізіндегі күн батареяларының рекордтық тиімділігіне өте жақын. Басып шығару технологияларын қолдана отырып, ерітіндіден белсенді қабаттарды басып шығару мүмкіндігінің арқасында жұқа қабықшалы перовскит күн батареяларын өндіру өте тиімді болуы мүмкін.

Перовскиттердің басым көпшілігі негізгі белсенді компонент ретінде қорғасынды (Pb) пайдаланады. Қорғасын негізіндегі металл галогенидті перовскиттер қорғасынның белгілі уыттылығынан басқа ерекше жоғары тиімділікті (25%-дан астам) көрсеткенімен, олар бірқатар маңызды мәселелерді тудырады. Қорғасын және оның қосылыстары улы болғандықтан, перовскит құрылымындағы қорғасын атомын қалайымен алмастыру өте перспективалы және тартымды стратегияға айналды.

Осы мақсатқа сәйкес келесі зерттеу мақсаттары анықталды:

1. Металл және қалайы галогенидті перовскиттеріндегі кристалдық құрылым түрлерін, кеңістіктік топтарын және фазалық ауысулардың температураға тәуелділігін жүйелі түрде талдау;

2. MASnI_3 , FASnI_3 және CsSnI_3 перовскиттерінің электрондық құрылымын, оның ішінде валенттілік және өткізгіштік жолақтарының орналасуын, күйлердің тығыздығын және заряд тасымалдаушылардың тиімді массаларын зерттеу;

3. Тығыздық функционалдық теориясын (ТФТ), гибриді функционалдарды және қолжетімді эксперименттік деректермен GW жуықтауын пайдаланып алынған теориялық нәтижелерге салыстырмалы талдау жүргізу;

4. Қалайы негізіндегі перовскиттердің оптикалық қасиеттерін, соның ішінде сіңіру коэффициентін, тыйым салынған аймақ саңылауын және фотолюминесценция сипаттамаларын жүйелеу және олардың кристалдық құрылыммен байланысын анықтау;

5. Заряд тасымалдаушыларының рекомбинация процестерін, ақаулық күйлерінің (терең және беттік тұзақтар) рөлін және олардың фотофизикалық қасиеттерге әсерін бағалау;

6. Қалайы негізіндегі перовскиттердегі «ыстық» тасымалдаушылардың релаксациялық ерекшеліктерін және оларды жоғары тиімді фотоэлектрлік құрылғыларда қолдану мүмкіндіктерін талдау;

7. Қалайы негізіндегі перовскиттердің қорғасын перовскиттерімен салыстырғандағы экологиялық қауіпсіздігі мен функционалдық артықшылықтарын анықтау;

8. Құрылғы архитектурасын (мезоскопиялық, жазық n-i-p және p-i-n) және тиімділікке әсер ететін факторларды қоса алғанда, күн батареяларындағы қалайы негізіндегі перовскиттердің әлеуетті қолданылуын зерттеу.

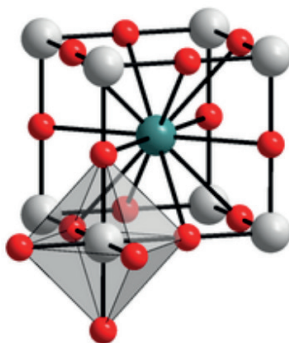
9. $\text{Sn}^{2+} \rightarrow \text{Sn}^{4+}$ тотығуын және ылғал мен оттегінің әсерін қоса алғанда, қалайы негізіндегі перовскиттердің тұрақтылығына әсер ететін негізгі ыдырау механизмдерін жүйелеу;

10. Қалайы бар перовскиттерге негізделген қорғасынсыз, жоғары тиімді және экологиялық таза перовскит күн батареяларын әзірлеудің болашақ бағыттарын белгілеу.

Әдіснама. Бұл шолу металл галогенидтері мен қалайы негізіндегі перовскиттерге арналған қазіргі заманғы ресейлік және халықаралық ғылыми басылымдардың жүйелі талдауына негізделген. Әдебиеттер Web of Science, Scopus және Google Scholar дерекқорларынан іріктеліп алынды және кристалдық құрылым, фазалық ауысулар, электрондық және оптикалық қасиеттер және фотоэлектрлік техникадағы әлеуетті қолданылуы бойынша талданды. Тәжірибелік және теориялық зерттеулер салыстырылды, әсіресе тығыздық функционалдық теориясы (DFT), GW жуықтауы және спектроскопиялық әдістерді қолдану арқылы алынған деректерге назар аударылды. Талдау қалайы негізіндегі перовскиттердің артықшылықтары мен негізгі қиындықтарын, соның ішінде тұрақтылыққа, тотығуға және ақауларға қатысты мәселелерді анықтады және оларды қорғасынсыз күн батареяларында қолдану әлеуетін бағалады.

Нәтижелер мен талқылау. *Перовскит.* Алғашқы перовскит 1839 жылы ашылған CaTiO_3 химиялық формуласы бар кальций титанаты минералы болды. Шамамен 140 жылдан кейін, 1978 жылы, құрамында қорғасын (Pb) бар перовскиттер туралы алғашқы есеп жарияланды. Осы кластағы материалдарға негізделген жұмыс істейтін күн батареясын көрсету үшін тағы үш онжылдық қажет болды.

Бұл зерттеуде қызығушылық тудыратын перовскиттер - жалпы химиялық формуласы ABX_3 болатын гибриді органикалық-бейорганикалық қосылыстар, мұндағы А - органикалық немесе бейорганикалық бір валентті катион (әдетте метиламмоний, формамидиний немесе цезий), В - екі валентті металл ионы (Sn^{2+} , Ge^{2+} , Pb^{2+}), ал Х - галогенид анионы (Cl^+ , Br^+ немесе I^+). 1-суретте табиғи перовскиттің құрылымы көрсетілген.



Сурет 1. Перовскиттің құрылымы (көгілдір түспен — кальций атомы, сұр түспен — титан атомы, қызыл түспен — оттегі атомы).

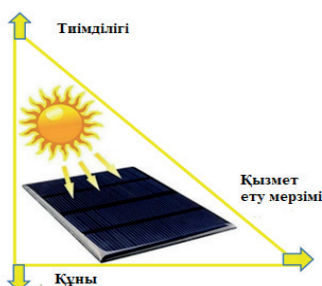
Бастапқыда перовскиттің кристалдық құрылымы кубтық болып саналды, бұл бірнеше жүз химиялық қосылыстарға тән перовскиттің құрылымдық түрін анықтауға негіз болды. Дегенмен, кейінірек $CaTiO_3$ құрылымы идеалды кубтық түрінен сәл ауытқып кететіні анықталды: бөлме температурасында ол орторомбтық, $R_{\overline{3}m}$ кеңістіктік тобы бар, ал кальций титанатының кубтық құрылымы тек $1260\text{--}1300^\circ\text{C}$ жоғары температурада фазалық ауысу нәтижесінде пайда болады. Перовскит – Жер бетіндегі салыстырмалы түрде сирек кездесетін минерал. Оның кристалдары куб (псевдокуб) пішінді, куб беттері шеттеріне параллель орналасқан қысқа сызықтармен жабылған (2-сурет).



Сурет 2. Перовскит минералы. Сол жақта — Википедиядан, қоғамдық игілік; оң жақта — Үлкен Ресей энциклопедиясынан.

Перовскит негізінен тальк және хлорит тақтатастарында кездеседі. Оны микроскоп арқылы жанартау жыныстарында, соның ішінде мелилит-базальт және базальт лавасында да анықтауға болады. Негізгі кен орындары Уралда, Тирольде (Австрия), Швейцарияда және Финляндияда орналасқан.

Күн энергиясындағы перовскиттер. Күн батареялары CaTiO_3 -тың өзі емес, перовскит құрылымы бар қосылыстарды пайдаланады. Ең көп таралған перовскиттер қорғасын галогенидтеріне негізделген. Бұл қорғасын құрылымдары туралы алғашқы есепті Дитер Вебер 1978 жылы жариялады. Осы кластағы материалдарға негізделген жұмыс істейтін күн батареясын жасау үшін шамамен 30 жыл қажет болды. 2009 жылы Цутому Миясака және оның әріптестері 3,8% тиімділігі бар алғашқы шынайы перовскит күн батареяларын (PSC) жасап, көрсетті. Бұл көрсеткіш кремний негізіндегі күн батареяларына қарағанда төмен болғанымен, перовскиттерді пайдалану келесі буын фотоэлектрлік құрылғыларды әзірлеу үшін жаңа жол ашты. Бұл серпіліс құрылғылардың синтез әдістерін, құрылымын, құрамын, стехиометриясын және өндіріс технологияларын жетілдіруге бағытталған бүкіл әлемде қарқынды зерттеулер толқынын тудырды. Бұл саладағы кең ауқымды зерттеулер бірқатар тамаша нәтижелерге әкелді: перовскит күн батареяларының тиімділігі мыс индий галлий селенидінен (23,4%), кремнийден (22,3%) және кадмий теллуридінен (22,1%) асып түсті. Қазіргі уақытта қорғасын негізіндегі перовскит фотоэлектрлік құрылғылар тиімділігі мен ватт құны бойынша бірінші буын күн батареяларымен салыстыруға болады. Дегенмен, перовскит күн батареяларының тағы бір кемшілігі - олардың қызмет ету мерзімі бастапқыда коммерциялық қолжетімді кремний, галлий арсениді немесе сынап кадмий теллуридті күн батареяларына қарағанда қысқа болды. 3-суретте күн батареялары үшін «алтын үшбұрыш» көрсетілген, ал перовскиттер оның екі негізгі талабына - тиімділік пен құнына сай келеді. Жаңартылатын энергия көздері нарығында кеңінен қолдану үшін үш талаптың барлығы бір уақытта орындалуы керек. Қалған шешуші фактор - өмір сүру ұзақтығы, бұл перовскит күн батареяларының бәсекелестік ортада өмір сүре алатындығын анықтайды.

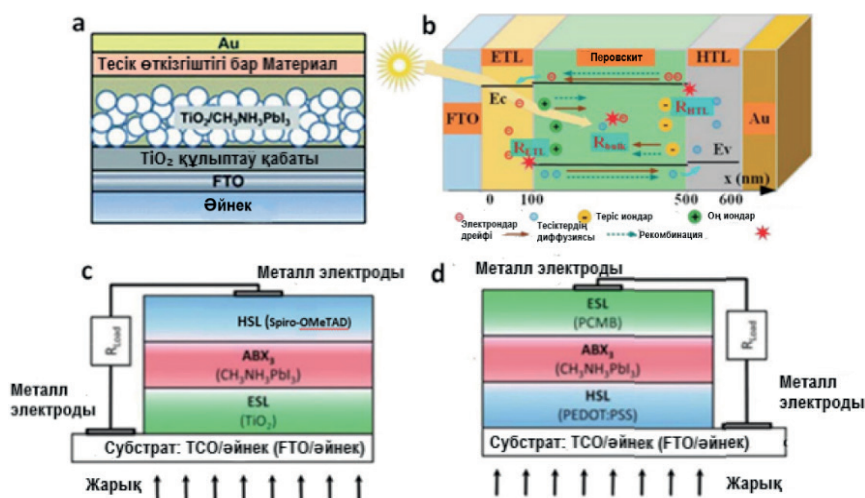


Сурет 3. Күн элементтері үшін «алтын үшбұрыш».

Морфологиясы, құрылымдық вариациялары және өндіріс әдістері әртүрлі болатын бұл күн батареяларының жоғары қуатты түрлендіру тиімділігі (ЖКТТ) зертханалық жағдайларда перспективалы нәтижелер көрсетті. Қазіргі уақытта

Ұлттық жаңартылатын энергия зертханасы (NREL) және Фраунгофер күн энергиясы жүйелері институты сияқты аккредиттелген тәуелсіз зертханалармен тексерілген ЖТК мәндері жұқа қабықшалы фотоэлектрониканың, сондай-ақ басқа да оптоэлектрондық технологиялардың осы жаңа және тез дамып келе жатқан саласының үмітіне сенімділік береді.

Мезоскопиялық архитектура. Ең алғашқы перовскиттік күн батареялары бояғышқа сезімтал күн батареяларынан (DSSC) алынған төмен кеуекті конфигурацияны пайдаланды. Бұл құрылым бояғышқа сезімтал қатты күйдегі күн батареяларының архитектурасына ұқсады, тек бояғышқа сезімталдықты арттыратын құрылғы перовскит галогенидімен ауыстырылды. Алғашқы көрсетілген перовскиттік күн батареялары типтік үш өлшемді (3D) перовскитке — метиламмоний қорғасын йодидіне (MAPbI_3) — негізделген және 6-10% аралығында конверсия тиімділігіне қол жеткізді. Бұл мәндер кейіннен 31%-дан астамға дейін арттырылды. Әдеттегі мезоскопиялық құрылғы архитектурасында фтормен легирленген қалайы оксидімен (FTO) қапталған шыны негізге жұқа, тығыз TiO_2 қабаты (~50 нм) тұндырылады, ол мөлдір өткізгіш оксид және электронды-селективті байланыс ретінде әрекет етеді. Бұл ықшам қабаттың үстінде мезокеуекті TiO_2 қабаты тұндырылады, ол перовскит сіңіргішінің негізі және электронды тасымалдаушы қабат (ETL) немесе электронды-селективті қабат (ESL) ретінде қызмет етеді. Шамамен 450 °C температурада жоғары температурада күйдіруден кейін ерітіндіні өңдеу немесе вакуумдық тұндыру арқылы қалыңдығы 300–600 нм болатын перовскит сіңіргіш қабаты түзіледі. Құрылғының құрылымын аяқтау үшін (4a-сурет) тесік тасымалдаушы қабат (HTL) немесе тесік-селективті қабат (HSL) тұндырылады, содан кейін ол әдетте алтын (Au) немесе күміс (Ag) металл электродпен қапталады.



Сурет 4. (a) мезоскопиялық перовскитті күн элементтерінің типтік құрылғы архитектурасы; (b) перовскитті күн элементтерінің жұмыс істеу сызбасы; (c) электрондарды өткізгіш төсемеде жинайтын PSC-тің стандартты планарлы (n-i-p) конфигурациясы; (d) FTO төсемесінде тесіктерді жинайтын инверттелген планарлы (p-i-n) архитектура.

Бұл құрылғылардың жұмыс принципі перовскит сіңіргішінің жарықты сіңіруіне, сіңіргіш қабатта заряд тасымалдаушы жұптардың пайда болуына, зарядтардың диссоциациялануына және бөлінуіне, содан кейін оларды сәйкес электродтарға ауыстыруға негізделген (4b-сурет). Жоғары тиімділікке қол жеткізу үшін перовскит сіңіргішінің жолақ аралығы шамамен 1,55–1,6 эВ және жоғары сіңіру коэффициенті ($\sim 10^5 \text{ см}^{-1}$) болуы керек, бұл оған көрінетін жарықтың үлкен бөлігін сіңіруге мүмкіндік береді. Мөлдір өткізгіш оксид (TCO) және үстіне қойылған тасымалдау қабаты арқылы жарықтың жұтылуы елеусіз болуы керек, сонда түскен сәулеленудің көп бөлігі электрон-тесік жұптары фотогенерацияланатын перовскит сіңіргішіне жетеді. Бұл жұптар кейіннен бос заряд тасымалдаушыларға ыдырайды. Перовскит сіңіргіштеріндегі төмен экситон байланыс энергиясы, әдетте бірнеше мэВ, бос заряд тасымалдаушылардың пайда болуына әкеледі. Демек, күн батареялары жоғары тиімділікпен жұмыс істейді, себебі фотогенерацияланған электрон-тесік жұптарын бөлу үшін сыртқы қозғаушы күш қажет емес. Әрбір электродта тек бір типті заряд тасымалдаушыны жинауға мүмкіндік беретін зарядты таңдамалы қабаттар интерфейстік рекомбинацияны азайтуға, зарядты бөлуді және экстракцияны жақсартуға және нәтижесінде қажетті фотоэлектрлік параметрлерге қол жеткізуге көмектеседі.

Тек мезокеуекті TiO_2 (немесе басқа металл оксиді) бар мезоскопиялық құрылымдардан басқа, TiO_2 және цирконий оксиді (ZrO_2) сияқты екі түрлі мезокеуекті оксидтерден тұратын үш қабатты перовскит негізіндегі фотоэлектрлік құрылғылар, көміртегі негізіндегі фотоэлектрлік құрылғылар сияқты, сәтті көрсетілді. Біріншісінде құрылғы толығымен басып шығару арқылы жасалды: перовскит прекурсорының ерітіндісі басылған көміртегі (C) қабаты арқылы кеуекті $\text{TiO}_2/\text{ZrO}_2$ қаңқасына құйылды, ол жоғарғы катод ретінде қызмет етті. Тесік тасымалдау қабатының болмауына қарамастан, бұл құрылғының энергияны түрлендіру тиімділігі 12,84% құрады және ол ұзақ мерзімді тұрақтылықты көрсетті. Дегенмен, үш қабатты қаңқаның күрделі құрылымына байланысты мұндай құрылғыларда перовскит кристалдануын басқару қиын болып қала береді.

Жазық архитектура. Соңғы жылдары стандартты жазық (n-i-p) және инверттелген жазық (p-i-n) перовскит күн батареяларының архитектуралары қарапайымдылығымен жоғары энергия түрлендіру тиімділігіне байланысты басым бола бастады. Бұл құрылымдарда жазық перовскит сіңіргіші электрон өткізгіш (n-i-p) немесе тесік өткізгіш (p-i-n) материалға тікелей орналастырылады (4c, d сурет), ол арқылы фотогенерацияланған зарядтар сәйкесінше анодқа және катодқа ауысады. Бұл жазық құрылғыларда мезокеуекті TiO_2 қабаты болмағандықтан, оларды 150°C -тан төмен температурада өңдеуге болады, бұл оларды ірі көлемді өндіріс үшін тартымды етеді.

Стандартты жазық (n-i-p) архитектурасы электрондарды жинауға арналған төменгі мөлдір контактіден (анод деп те аталады), жұқа ықшам n-типті ETL (немесе ESL), перовскит сіңіргіш қабатынан, p-типті HTL (немесе HSL) және тесіктерді жинайтын жоғарғы металл катодынан тұрады. Ең тиімді құрылғылар төменгі ETL ретінде TiO_2 орнына қалайы оксидін (SnO_2) пайдалануға негізделген. Төңкерілген p-i-n фотондық кристалдарда ETL және HTL қабаттарының реті

стандартты n-i-p орналасуына қарама-қарсы. Мұндай құрылғыларда ETL және HTL қабаттары кері ретпен орналасқан. Төменгі HTL қабаты WO_x , NiO_x және CuO_x сияқты p-типті органикалық жартылай өткізгіш немесе p-типті өтпелі металл оксидтерінен тұруы мүмкін. Соңғыларының тиімділігі айтарлықтай жақсарғанымен, олардың ең маңызды кемшілігі - ауаға ұшыраған кездегі тұрақсыздық. Айта кету керек, бұл құрылғылардың барлығында жоғарғы электродтар ретінде алтын (Au) немесе күміс (Ag) сияқты металл контактілер пайдаланылады. Көміртегі қарасы мен графит қоспасына негізделген көміртекті композиттер сияқты қолжетімді өткізгіш материалдарды металл электродтарға балама ретінде пайдалануға болады. Олар тотығуға және химиялық реакцияларға төзімді және сонымен қатар перовскит сіңіргішіне ылғалдың енуіне жол бермейтін қорғаныс тосқауылы ретінде қызмет ете алады.

Қорғасын бар перовскиттердің уыттылығы. Өкінішке орай, қорғасын өте улы және ылғалға ұшыраған кезде $Pb(OH)_2$ сияқты қосылыстар түзеді, олар да өте улы және суда жақсы ериді. PbI_2 интерфейсында қорғасынның тотығуы Pb және I иондары арасындағы байланыстардың үзілуіне әкеледі. Бұл бөліну астындағы метиламмоний йодиді (MAI) қабатын ашады. Су молекулалары бұл қабатқа еніп, гидратация арқылы перовскиттің қайтымсыз ыдырауына әкеледі. Егер қорғасынмен ластанған мұндай улы су экожүйеге немесе тамақ тізбегіне енсе, ол адамдарға да, басқа тірі организмдерге де кең ауқымды токсикологиялық әсер етуі мүмкін. 5-суретте қорғасынның адам ағзаларына ықтимал токсикологиялық әсері көрсетілген.

Қорғасынмен улану жүйке, ас қорыту және қан айналым жүйелерінің функционалдық бұзылыстарына әкеледі. Қорғасын адам ағзасына енген кезде ферменттермен байланысады және жұмсақ тіндер мен сүйектерде жиналуы мүмкін. Қан ағымы арқылы ол көкбауырға, бүйрекке, бауырға және миға жете алады. Көптеген адамдар күн сайын шамамен 0,5 мг қорғасын қабылдағаннан кейін қорғасынмен улану белгілерін дамытады. Сондықтан, адамдар үшін қауіпсіз және экологиялық таза күн батареяларын жасау үшін перовскит сіңіргіштеріндегі қорғасынды алмастыратын улы емес немесе уыттылығы төмен металл иондарын жасау қажет.



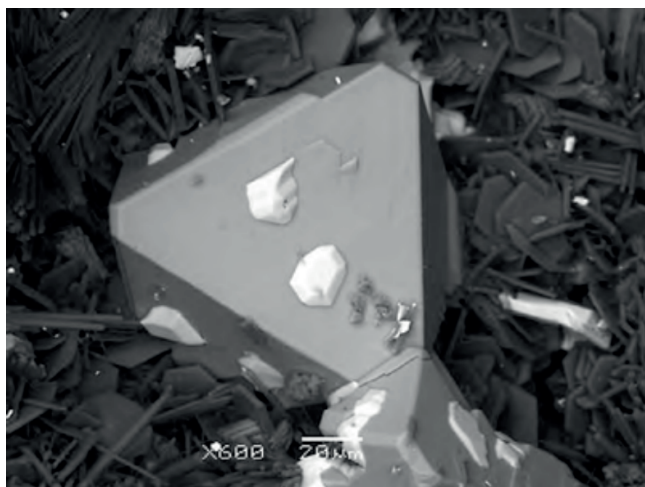
Сурет 5. Қорғасынның (Pb) адам ағзасының мүшелеріне ықтимал токсикологиялық әсері.

Ғылыми әдебиеттерде көрсетілгендей, перовскиттердегі Pb^{2+} -ға балама ретінде Sn^{2+} , Bi^{3+} , Ge^{2+} , Sb^{3+} , Mn^{2+} және Cu^{2+} сияқты уыттылығы төмен иондарды пайдалануға болады, бұл жаңа қорғасынсыз перовскит құрылымдарын жасауға мүмкіндік береді. Қалайы (Sn) улы қорғасын қосылыстарын алмастыруға ең перспективалы кандидат болып табылады, себебі ол күн батареяларында қолдануға өте қолайлы тамаша оптикалық және электрлік қасиеттерге ие. Теориялық тұрғыдан алғанда, 1,2-1,4 эВ диапазонындағы оптикалық жолақ аралығы бар қалайы негізіндегі перовскиттер 33%-ға дейін энергияны түрлендіру тиімділігіне қол жеткізе алады. Сонымен қатар, қалайы негізіндегі перовскиттер қорғасын негізіндегі перовскиттермен салыстыруға болатын немесе тіпті олардан жоғары электрондық және оптикалық қасиеттерді көрсетеді, атап айтқанда, заряд тасымалдаушылардың жоғары қозғалғыштығы және ұзақ қызмет ететін «ыстық» тасымалдаушылар.

Дегенмен, қалайы бар перовскиттердің қауіпсіздігіне Конингс және оның әріптестері күмән келтірді (Babayigit et al., 2016a, Babayigit et al., 2016b). PbI_2 және SnI_2 әсеріне ұшыраған зебра балықтарын зерттеу барысында PbI_2 үшін 0,83 mM және SnI_2 үшін 0,09 mM LC_{50} мәндері (50% өлімге әкелетін концентрация) алынды (Babayigit et al., 2016a, Babayigit et al., 2016b). SnI_2 үшін LC_{50} төмен мәніне сүйене отырып, авторлар қалайы негізіндегі галогенидті перовскиттер қорғасын бар галогенидті перовскиттерге қарағанда одан да улы деген қорытындыға келді. Дегенмен, бұл зерттеулерде өте жоғары концентрациялар қолданылды. Мұндай жағдайларда денсаулыққа негізгі қауіп PbI_2 немесе SnI_2 өздері емес, керісінше, олардың сумен әрекеттесуі нәтижесінде пайда болған улы HI (сутегі йодиді немесе гидриодты қышқыл) болып табылады. ФАО/ДДСҰ-ның тағамдық қоспалар жөніндегі бірлескен сарапшылар комитеті (JECFA) қалайы үшін дене салмағының килограммына 2 мг алдын ала рұқсат етілген тәуліктік тұтыну мөлшерін (PMTDI) ұсынды (Blunden et al., 2003). Перовскит күн батареяларын гипотетикалық пайдалануды талдау көрсеткендей, тіпті ең нашар жағдайда да қалайы галогенидті перовскиттерден алынатын тәуліктік қалайы тұтыну шамамен 90 мкг/кг болады. Тышқандардағы тәжірибелер көрсеткендей, қалайы галогенидті перовскит ($MASnI_3$) және SnI_2 тәуліктік қалайы концентрациясында бүйректің зақымдануына, бауыр дисфункциясына және иммунотоксикалық әсер етуі мүмкін. Дегенмен, (Xiao et al., 2023) мақаласында ұсынылған нәтижелер, соның ішінде органдардың салмағын, қан анализін, иммуногистохимияны және келесі буын секвенирлеуін (РНҚ секвенирлеу), қалайы галогенидті перовскиттерді кең көлемде қолдануды қамтитын ең нашар сценарийде де ешқандай айқын жедел уыттылық немесе генетикалық қауіптер анықталмады. Осылайша, қалайы галогенидті перовскиттер әдетте биологиялық тұрғыдан қауіпсіз болып саналады, ал галогенидті перовскиттерде қорғасынды қалайымен алмастыру мүмкін шешім болып көрінеді.

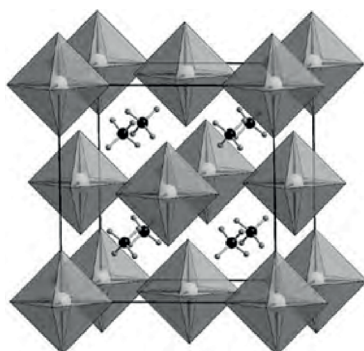
Қалайы негізіндегі перовскиттер. Перовскитке ұқсас құрылымы бар табиғи түрде кездесетін қалайы негізіндегі минерал - паницит, химиялық формуласы $(NH_4)_2SnCl_6$ болатын аммоний гексахлорстанаты(IV). (Demartin et al., 2006) бұл

жаңа минералдың Италиядағы Сицилиядағы Эол аралдарының бірі - Вулкано аралындағы Ла Фосса кратеріндегі орташа температурадағы (шамамен 250 °C) кратер ішіндегі фумаролда табылғанын хабарлады. Минерал кристалдарының диаметрі 200 мкм-ге дейінгі кішкентай, түссіз октаэдрлердің агрегаттарынан тұрады (6-сурет).



Сурет 6. Алунит үстіндегі паничиит кристалдарының сканерлеуші электрондық микрофотографиясы.

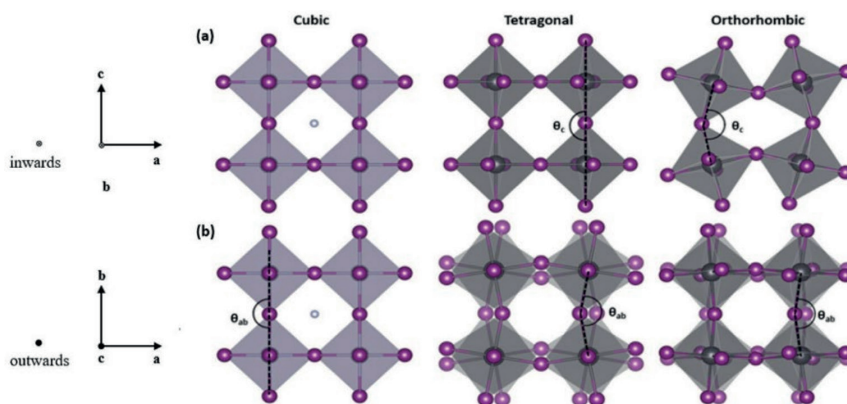
Паничиит кубтық жүйеге, $Fm\bar{3}m$ кеңістіктік тобына жатады (№ 225), $Z = 4$; Бірлік ұяшық параметрі $a = 10.064(1) \text{ \AA}$, ал бірлік ұяшық көлемі $V = 1019.4(2) \text{ \AA}^3$. Октаэдрлік SnCl_6^{2+} ионында алты эквивалентті $\text{Sn}-\text{Cl}$ арақашықтығы $2.429(1) \text{ \AA}$, ал $\text{Cl}-\text{N}$ арақашықтығы $3.559(1) \text{ \AA}$ құрайды. Кристалл құрылымының схемалық көрінісі 7-суретте көрсетілген.



Сурет 7. Паничииттің кристалдық құрылымы: онда $[\text{SnCl}_6]^{2+}$ октаэдрлері мен NH_4^+ иондары бейнеленген (Demartin et al., 2006).

Үш өлшемді (3D) перовскиттер. 3D қалайы негізіндегі перовскиттердегі кристалл құрылымы және фазалық ауысулар. Қорғасын негізіндегі перовскит-

тер сияқты қалайы негізіндегі перовскиттердің кристалл құрылымы олардың құрамдас иондарының табиғатымен, температурасымен, $[BX_6]^{4+}$ октаэдрлерінің бағытымен және В–Х–В байланыстарының бағытымен ұзындығымен анықталады. Мүмкін болатын кристалл құрылымдарының ішінде ең симметриялысы - жоғары температуралы кубтық құрылым, ол октаэдрлердің төбелерінде жанасуынан тұрады, идеалды В–Х–В байланыс бұрышы 180° (8a-сурет). Октаэдрлік қаңқаның $[BX_6]^{4+}$ бос орындарында А катиондары галогенид аниондарымен 12 есе кубоктаэдрлік координация түзеді. Тетрагональды фаза октаэдрлік айналулармен сипатталады, нәтижесінде В–Х–В байланыс бұрышы (θ_{ab}) 180° идеалды мәнінен ауытқиды (8b-сурет). Орторомбалық фазада қосымша деформация пайда болады: бір жазықтықта орналаспаған екі октаэдр арасындағы бұрыш (θ_c) да 180° -тан ауытқиды (8a-сурет).



Сурет 8. а) Бүйірінен көрініс және б) жоғарыдан көрініс: кубтық, тетрагональдық және орторомбалық құрылымдар. Тетрагональдық құрылымда октаэдрлер $\theta_{ab} < 180^\circ$ болатындай етіп бұрылған. Орторомбалық құрылымда октаэдрлердің қосымша еңкеюі байқалады, мұнда $\theta_c < 180^\circ$.

Енді үш түрлі 3D қалайы негізіндегі перовскиттердің: $FASnI_3$, $MASnI_3$ және $CsSnI_3$ кристалдық құрылымдарын егжей-тегжейлі қарастырайық. $FASnI_3$ -қа келетін болсақ, ғалымдар арасында бұл қосылыстың нақты кристаллографиялық фазасы туралы әлі де консенсус жоқ. $FASnI_3$ кристалдық құрылымын зерттеудің алғашқы зерттеулерінің бірін 1997 жылы Митци мен Лиан жүргізді. Олар жоғары температуралы кубтық кристалдық құрылымды сипаттады (Mitzi et al., 1997). Олар $MASnI_3$ және $FASnI_3$ изоқұрылымдық екенін, бірақ олардағы формамидиний молекулаларының кездейсоқ орналасқанын анықтады, себебі олардың симметриясы кубтық перовскит құрылымындағы O_h учаскесінің симметриясына сәйкес келмейді. $FASnI_3$ -тағы Sn-I байланыс ұзындығы 3,158 Å құрайды, бұл үлкен FA катионымен байланысты стерикалық әсерлерге байланысты MA құрамындағы перовскитке қарағанда шамамен 1,2%-ға ұзын (Mitzi et al., 1997). 340 K температурада $FASnI_3$ жалған кубтық $Amm2$ кристалдық құрылымын түзеді және 180 K-ден төмен орторомбтық фазалық ауысуға ұшырайды, полярлық $Imm2$ кеңістік тобында кристалданады. Шамамен 100 K температурада қарабайыр

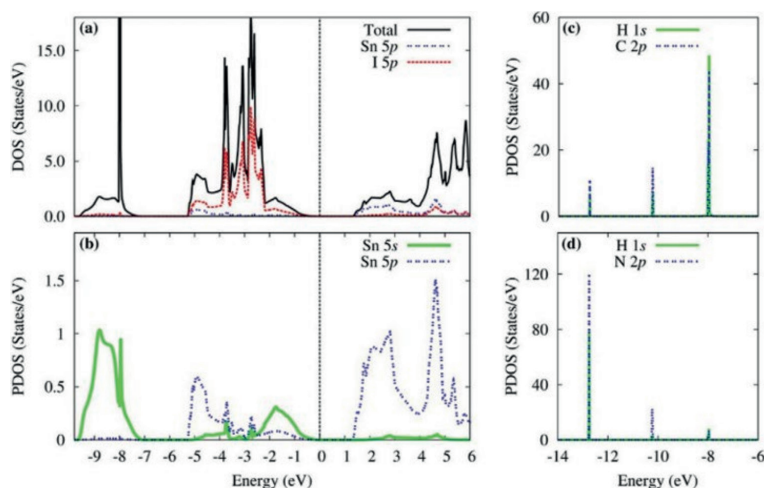
моноклиникалық құрылымға қосымша фазалық ауысу байқалады. Сонымен қатар, Шуэллер және оның әріптестері бөлме температурасынан салқындаған кезде 225-250 К температура диапазонында кубтық $Pm3m$ фазасынан тетрагональды $P4/mbm$ фазасына бірінші фазалық ауысуды анықтады (Schueller et al., 2018). Кейінгі фазалық ауысу 125 және 150 К аралығында жүреді және орторомбалық $Pnma$ құрылымының пайда болуына әкеледі. Дегенмен, Кахманн және т.б. бөлме температурасындағы кубтық фазаның Шуэллер және т.б. сипаттаған орторомбиялық құрылымның орнына шамамен 255 К температурада және 155 К-ден төмен тетрагональды фазаға екінші тетрагональды фазаға ауысатынын анықтады (Kahmann et al., 2020). Әдебиеттердегі бұл сәйкессіздіктерді зерттелген үлгілердің табиғатындағы айырмашылықтармен, мысалы, монокристалдар мен поликристалды жұқа қабықшалармен түсіндіруге болады. 2010 жылы Такахашиде және оның әріптестері $MASnI_3$ кристалдық құрылымын сипаттап, 295 К температурада кубтық фазаны және 275 К температурада кубтық ($Pm3m$) құрылымнан төмен симметриялы тетрагональды ($I4/mcm$) құрылымға фазалық ауысуды хабарлады (Takahashi et al., 2011). Авторлар тетрагональды құрылымның snI_6 октаэдрінің тік ось бойымен еңкейуіне байланысты кубтық тордың $2a \times 2a \times 2a$ суперұяшыққа кеңеюімен сипатталатынын көрсетті. Температура 108–114 К дейін төмендеген кезде тетрагональдыдан орторомбалыққа ($Pbn2_1$ немесе $Pbnm$) тағы бір фазалық ауысу байқалды; бұл деректерді кейінірек Лаурита және т.б. растады (Takahashi et al., 2011). Ма және т.б. $masnI_3$ кристалдық құрылымын Пердью-Бурк-Эрнзергоф жалпыланған градиент жуықтауымен (PBE-GGA) бірінші принципті DFT тәсілін қолдана отырып зерттеді (Takahashi et al., 2011). Есептелген тор тұрақтысы 6,34 Å болды, бұл 6,24 Å тәжірибелік мәнінен сәл үлкен, бұл PBE-GGA әдісінің типтік шамадан тыс бағалануымен түсіндіріледі. Авторлар сонымен қатар C-N байланыстарының екі түрлі бағытын: параллель (TETP) және өзара перпендикуляр (TETV) ескере отырып, тетрагональды құрылымдағы МА катиондарындағы C-N байланысының рөлін зерттеді және параллель бағыттың тұрақтырақ екенін көрсетті (Ma et al., 2016).

$CsSnI_3$ төрт полиморфты фазаны құрайды: үш қара және бір сары. 425 К жоғары температурада қара кубтық фаза (B- α) пайда болады; 426 К төмен температурада ол қара тетрагональды фазаға (B- β), ал 351 К температурада қара орторомбалық фазаға (B- γ) айналады. Қызығы, төмен температуралы қара фазаларда SnI_6 октаэдрлері фазалық ауысулар кезінде еңкеймейді, дегенмен $Sn-I-Sn$ байланыстары енді мінсіз сызықты болмайды. Сары (Y) фазасы бір өлшемді қос тізбекті құрылымы бар перовскит емес орторомбиялық жасушамен сипатталады және бөлме температурасында орторомбиялық B- γ фазасымен ($Pnma$) бірге өмір сүре алады. 425 К температурада Y фазасы қара кубтық B- α фазасына айналады. Есептеулер көрсеткендей, қалаусыз сары фазаны құрылымға Br және Rb қосу арқылы басуға болады, бұл бір уақытта Sn^{2+} тотығу дәрежесін Sn^{4+} -ға дейін төмендетеді және күн батареяларында қолдануға жарамды тұрақты перовскит, γ -Rb $yCs_{1-y}SnI_3$ түзілуіне әкеледі.

Электрондық қасиеттер. Оптоэлектрондық құрылғыларда қалайы негізіндегі

перовскиттерді пайдалану олардың электрондық және оптикалық қасиеттерін мұқият түсінуді қажет етеді. Атап айтқанда, бұл қасиеттер көбінесе валенттілік және өткізгіштік жолақтарының (VB және CB) энергетикалық деңгейлерінің орналасуымен, күйлердің толық және ішінара тығыздығымен (TDS және PDS) және тиімді массалармен анықталады. Бұл бөлімде біз MASnI_3 , FASnI_3 және CsSnI_3 осы физикалық сипаттамалары бойынша қолжетімді теориялық және эксперименттік ақпаратты қарастырамыз.

Аймақтық құрылым. Тығыздық функционалдық теориясы мен пертурбация теориясы әдістерін, соның ішінде спин-орбиталық өзара әрекеттесуді (SOI) қолдана отырып, MASnI_3 жолақ құрылымын есептеу кубтық фазада Бриллюэн аймағының R нүктесінде 1,55 эВ тікелей жолақ аралығы бар екенін көрсетті. Тетрагональды және орторомбалық құрылымдарда тікелей жолақ аралығы C нүктесінде орналасқан. Гибридті функционалды пайдаланып есептелген жолақ аралығы 1,3 эВ құрайды, бұл эксперименттік деректермен жақсы сәйкес келеді (Bernal et al., 2014). Есептеулер валенттік аймақтың максимумы (VBM) негізінен Sn 5s және I 5p күйлері арасындағы антибайланыс гибридизациясына байланысты екенін, ал өткізгіштік аймақтың минимумы (CBM) Sn 5p және I 5p күйлеріне байланысты қалыптасатынын көрсетеді (9a, b сурет) (Bernal et al., 2014). 9c және 9d суреттерінде органикалық мыс моноамид молекулалары валенттік аймақтың төменгі бөлігінде -14-тен -7 эВ-қа дейінгі үш дискретті энергия деңгейін құрайтыны көрсетілген, бұл мыс моноамид катиондарының валенттікке және конъюгативті аймақ шеттеріне тікелей әсер етпейтінін көрсетеді. Осылайша, қалайы негізіндегі перовскиттердегі тыйым салынған аймақ саңылауы негізінен қалайы-X байланысымен анықталады. Біз бұл нәтижелерді спин-орбиталық әсерлерді ескеретін көп электронды жуықтауға негізделген релятивистік GW әдісін қолдана отырып растадық және Бриллюэн аймағының Γ нүктесінде тікелей тыйым салынған аймақ саңылауын анықтадық.



Сурет 9. MASnI_3 үшін есептелген DOS және PDOS. Қара пунктир сызық валенттік зонаның максимал мәнін көрсетеді (Bernal et al., 2014).

Тасымалдаушының тиімді массасы — тасымалдау қасиеттерін анықтайтын маңызды параметр. Ол валенттік зонаның максимумы (VBM) мен өткізгіштік зонаның минимумы (CBM) маңындағы жолақтың электрондық дисперсиясының қисықтығынан келесі теңдеу арқылы есептеледі:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} \quad (1)$$

мұнда E — энергияның дисперсиялық қатынасы, ал k — тордың толқындық векторы. Бұл тәсіл жалпы алғанда жарамды болғанымен, релятивистік әсерлер Pb және Sn негізіндегі перовскиттерде осы есептеулерден елеусіз емес ауытқулар туындатуы мүмкін. Теориялық тұрғыдан есептелген тиімді массалар тек жолақ дисперсиясына ғана емес, сонымен қатар қолданылатын есептеу әдісіне де байланысты екені анықталды. Фэн мен Сяо HSE06 гибриді функционалын пайдаланып, төмен изотропты деформация кезінде орторомбалық MASnI_3 -тағы Γ нүктесіндегі жолақ дисперсиясына және заряд тасымалдаушылардың тиімді массаларына спин-орбита өзара әрекеттесуінің әсерін зерттеді (Feng et al., 2014). 1-кестеден көрініп тұрғандай, тиімді массалар, әдетте, орторомбалық MAPbI_3 үшін алынған массаларға ұқсас.

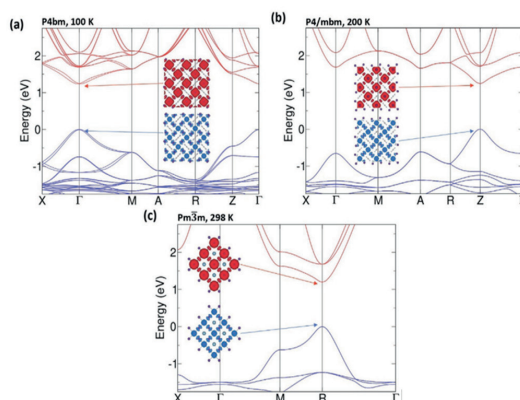
Кесте 1. MASnI_3 үшін үш түрлі кристаллографиялық бағыт бойымен есептелген тесіктер мен электрондардың тиімді массалары электрон массасына m_0 қатысты түрде көрсетілген (Feng et al., 2014).

Тиімді массалар	Кристаллографиялық бағыттар		
	[100]	[010]	[001]
m_{e}^*	3.74	0.81	5.77
m_{h}^*	0.59	1.14	0.53

SOC әсерін қосу өткізгіштік жолақтың төменгі бөлігінің екі бөлек жолаққа, $p_{1/2}$ және $p_{3/2}$ -ға бөлінуіне әкеледі, бұл жолақ саңылауының тарылуына және электронның тиімді массасының анизотропиясына әкеледі. Валенттілік жолағының жоғарғы бөлігіндегі кемтіктер үшін дегенерация негізінен сақталады, дегенмен жолақ дисперсті бола бастайды, бұл кемтіктердің тиімді массасының азаюына әкеледі. Умари және т.б. сонымен қатар алынған тиімді масса мәндеріне әртүрлі есептеу пакеттерінің әсерін атап өтті (2-кесте). Авторлар спин-орбита өзара әрекеттесуін ескеретін GW әдісі тиімді массаларды дәл модельдеу үшін ең қолайлы тәсіл деген қорытындыға келді (Бернал және т.б., 2014). MASnI_3 сияқты, FASnI_3 -та тікелей тыйым салынған аймақ бар, жоғарғы және төменгі валенттілік жолақтары қалайы мен ионның бірдей орбитальдарынан тұрады (10-сурет) (Kahmann et al., 2020, Ma et al., 2016).

Кесте 2. Әртүрлі есептеу тәсілдерін қолдана отырып есептелген электрон мен тесік үшін тиімді массалардың орташа мәндері (электрон массасына m_0 қатысты): спин-орбиталық байланыс–GW (SOC–GW), спин-орбиталық байланыс–DFT (SOC–DFT) және скалярлық релятивистік–DFT (SR–DFT) (Bernal et al., 2014).

Тиімді массалар	Есептеу әдісі		
	SOC-GW	SOC- DFT	SR-DFT
m_e^*	0.28	0.24	0.63
m_h^*	0.13	0.15	0.18



Сурет 10. DFT есептеулері негізінде алынған FASnI₃-тің есептелген зоналық құрылымдары: а) 100 K — P4bm, б) 200 K — P4/mbm, в) 298 K — Pm3m.

Ши және т.б. Sn-I байланыс ұзындығы валенттілік жолағының максимумының энергетикалық орнын анықтайтынын көрсетті (Shi et al., 2017). FA катионының иондық радиусы үлкен болғандықтан, FASnI₃-тағы Sn-I байланысының ұзаруы I ионының 5p және 5s орбитальдары арасындағы антибаланс өзара әрекеттесуін әлсіретеді, осылайша MASnI₃-пен салыстырғанда валенттік жолақ максимумының орнын төмендетеді. Нәтижесінде, FASnI₃-тың тыйым салынған аймақ саңылауы сәл үлкенірек. Тао және т.б. FASnI₃ және MASnI₃-тың тетрагональды фазалары үшін, сондай-ақ CsSnI₃-тың орторомбиялық фазасы үшін есептелген күй тығыздығын талдады. Есептелген нәтижелерді эксперименттік деректермен салыстыра отырып, авторлар пленка бетінің кемшіліктері немесе ақауларынан туындаған жолақ шеттерінің жанында қосымша күйлердің пайда болуымен байланысты есептеулердің ықтимал кемшіліктерін атап өтті (Tao et al., 2019). Филиппетти және т.б. FASnI₃ және MASnI₃ электрлік және оптикалық қасиеттерін кешенді зерттеу ab initio есептеулері мен сіңіру өлшемдерін қолдану арқылы жүргізілді (Filippetti et al., 2021). Есептелген және өлшенген деректерді салыстыру осы материал түріне тән жоғары ақау концентрациясына байланысты қиын болды. Дегенмен, қолданылған есептеу әдістері ақауға тәуелсіз қасиеттерді, мысалы, негізгі тыйым салынған аймақты дәл болжай алады. Рокнуззаман және т.б. есептеулеріне сәйкес, I аниондарын Br немесе Cl-мен ауыстыру электрондардың да, кемтіктердің де тиімді массасын арттырады, бұл 3-кестеде көрсетілген (Roknuzzaman et al., 2019).

Кесте 3. FASnI_3 , FASnBr_3 және FASnCl_3 үшін электрондардың m_e^* және тесіктердің m_h^* тиімді массалары электрон массасының бірліктерімен көрсетілген (Roknuzzaman et al., 2019).

материал	m_e^*	m_h^*
FASnI_3	0.28	0.11
FASnBr_3	0.39	0.26
FASnCl_3	0.51	0.35

Заряд тасымалдаушылардың төмен тиімді массасы олардың жоғары қозғалғыштығын көрсетеді, бұл FASnI_3 -ты фотоэлектрлік жүйелер үшін перспективалы материал етеді. Sn-ді Pb-мен ауыстыру тиімді массаны айтарлықтай арттырмайды, ал германий негізіндегі перовскиттер Sn- және Pb негізіндегі қосылыстармен салыстырғанда жоғары тиімді массаларды көрсетеді.

Қызығы, Ma және т.б. көлемді перовскиттердегі тасымалдаушылардың тиімді массалары галогенид атомдарына, органикалық молекулаларға және органикалық-бейорганикалық галогенид қосылыстарының құрылымына да байланысты екенін анықтады (Ma et al., 2016). Галогенид ионының мөлшері I-ден Br-ге дейін азайған сайын, перовскиттің тыйым салынған аймағы артады (4-кесте).

Кесте 4. MASnI_3 және MASnBr_3 үшін есептелген тиімді массалар мен тыйым салынған аймақ ендері (Ma et al., 2016).

Элементар ұяшықтың түрі	MASnI_3			MASnBr_3		
	Eg, эВ	m_e^*	m_h^*	Eg, эВ	m_e^*	m_h^*
Кубтық	0.83	0.17	0.11	1.12	0.19	0.14
Тетрагональдық (примитивті)	0.73	0.11	0.10	1.06	0.17	0.14
Тетрагональдық (көлемдік-центрленген)	0.93	0.15	0.14	1.36	0.25	0.19
Орторомбалық	1.08	0.19	0.18	1.53	0.22	0.23

Хуан мен Ламбрехт CsSnI_3 кубтық фазасының жолақ құрылымын спин-орбита өзара әрекеттесуін ескермей, квазибөлшектердің өзіндік үйлесімді GW (QSGW) жуықтауымен тығыздық функционалдық теориясы әдісін қолдана отырып талдады (Huang et al., 2013). Гибридті органикалық-бейорганикалық құрылымдардағыдай, валенттік жолақтың максимумы Sn 5s және I 5p орбитальдарының антибайланыс күйлерімен, ал өткізгіштік жолақтың минимумы Sn 5p және I 5p орбитальдарының антибайланыс күйлерімен қалыптасады. Cs 5d орбитальдарының үлесі шамамен ≈ 5 эВ энергияда көрінеді. Барлық CsSnI_3 құрылымдарының тікелей тыйым салынған аймақ саңылауы бар, бірақ ол k-кеңістігіндегі әртүрлі нүктелерде орналасқан: кубтық фаза үшін R, тетрагональды фаза үшін Z және орторомбалық фаза үшін Г. Кубтық симметриядан орторомбалық симметрияға фазалық ауысу кезінде октаэдрдің көлбеу бұрышының артуымен тыйым салынған аймақтың біртіндеп ұлғаюы байқалады. Хуан мен Ламбрехт QSGW есептеулерінен алынған энергия жолақтарының параболалық дисперсия қисықтарын сәйкестендіру арқылы CsSnI_3 үшін тиімді массаларды есептеді; нәтижелер 5-кестеде келтірілген (Huang et al., 2013).

Кесте 5. Кубтық фазадағы CsSnI_3 үшін [100] және [111] бағыттары бойымен электрондардың жеңіл (m_e) және ауыр (m_h) тиімді массалары есептелген. Тесіктің тиімді массасы үшін тек бір ғана мән берілген, себебі валенттік зона дегенерацияланбаған, ал VBM маңындағы зонаның дисперсиясы изотропты және параболалық сипатқа ие.

m_e^*	$m_{h\epsilon}^*[100]$	$m_{h\epsilon}^*[111]$	$m_{ie}^*[100]$	$m_{ie}^*[111]$
0.069	0.573	0.154	0.041	0.068

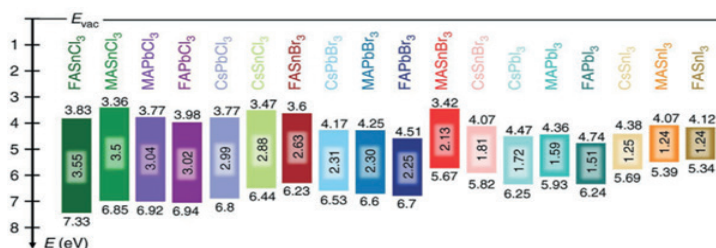
VBM маңында жолақ дегенерацияланбаған және оның дисперсиясы изотропты; сондықтан тек бір тесіктің тиімді массасы алынды. 0,069 төмен тиімді тесік массасы шамамен $585 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ деп бағаланған өте жоғары тесіктің қозғалғыштығын көрсетеді. Спин-орбиталық байланыс болмаған кезде өткізгіштік жолағының максимумы үш есе дегенерацияланады, ал спин-орбиталық байланыс болған кезде бұл күйлер синглеттік және дублеттік болып бөлінеді, бұл тиімді массаның анизотропиясына әкеледі.

Осылайша, қалайы негізіндегі перовскиттерде валенттік аймақтың максимумы және өткізгіштік аймақтың минимумы негізінен йодтың 5p орбитальдарымен будандастырылған Sn-нің 5s және 5p орбитальдарына байланысты. Тиісінше, тыйым салынған аймақ пен тиімді массалар бейорганикалық құрылыммен тығыз байланысты. Осылайша, тетрагональды және орторомбиялық құрылымдарда В–Х–В байланыс бұрыштары 180° -тан ауытқыған сайын, орбитальды қабаттасу біртіндеп азаяды, бұл тиімді массалардың артуына әкеледі.

Оптикалық қасиеттері. Энергетикалық аймақ шеттерінің орбитальды құрамына байланысты кристалдық құрылым перовскит қосылыстарының оптикалық қасиеттеріне тікелей әсер етеді. Бегі ортақ октаэдрлік құрылымдарда тыйым салынған аймақ құрылымның симметриясымен тікелей байланысты: октаэдрлік бұрмалану неғұрлым күшті болса, тыйым салынған аймақ соғұрлым кең болады. Сонымен қатар, А учаскесіндегі катионның өлшемінің ұлғаюы оптикалық тыйым салынған аймақты да кеңейтеді, себебі үлкен катион қосымша құрылымдық бұрмалануды тудырады және орбитальды қабаттасуды азайтады. Бұл құбылыс электрондық тыйым салынған аймақ контекстінде талқыланды. Мысалы, бөлме температурасында MASnI_3 тетрагональды кристалды құрылымы FASnI_3 орторомбалық құрылымына қарағанда тар жолақты саңылауға ие (Takahashi et al., 2011). Керісінше, Х орнында анионның өлшемін ұлғайту жолақты саңылаудың тарылуына әкеледі. Кейбір перовскиттік емес құрылымдарда жолақты саңылаудың сипаты әртүрлі болуы мүмкін. Мысалы, MASnI_3 алтыбұрышты фазасында жолақты саңылау текше және тетрагональды фазалардағы тікелей жолақты саңылаудан айырмашылығы жанама. 11-суретте әртүрлі қалайы негізіндегі перовскиттердің жолақты саңылаулары қорғасын негізіндегі аналогтарының жолақты саңылауларымен салыстырылады (Tao et al., 2019).

Қалайы негізіндегі материалдардың ішінде тек CsSnI_3 , MASnI_3 , FASnI_3 және FASnI_2Br жолақты саңылаулары 1,2–1,6 эВ диапазонында, бұл оларды бір түйіспелі күн батареялары үшін ең қолайлы етеді. А учаскесіндегі катионды ауыстыру тыйым салынған аймаққа айтарлықтай әсер етпейді, ал Х учаскесіндегі

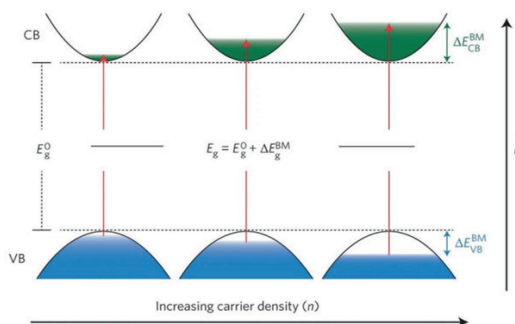
галогендерді немесе В учаскесіндегі иондарды ауыстыру айтарлықтай өзгерістерге әкеледі (Huang et al., 2013). Бұл қосылыстарда І-ді Вг-мен ауыстыру тыйым салынған аймақты 1,3-тен 2,4 эВ-қа дейін біркелкі реттеуге мүмкіндік береді, бұл бір түйіспелі және тандемді күн батареялары үшін тиімді. Нагана және т.б. $\text{MASn}_{1-x}\text{Ge}_x\text{I}_3$ -ты германиймен легирлеу сіңіру шетінің жоғары энергияларға қарай монотонды ығысуына әкелетінін көрсетті (Nagane et al., 2018).



Сурет 11. Ең кең таралған 18 металлогалогенидті перовскиттердің энергетикалық деңгейлерінің сызбалық диаграммасы. Барлық қосылыстар оптикалық тыйым салынған аймақ енінің кему ретімен реттелген.

Қалайы негізіндегі перовскиттердің фотофизикалық қасиеттерін түсіну құрылғыны одан әрі оңтайландыру үшін өте маңызды. Абсорбция және фотолюминесценция (PL) спектрлері материалдың сапасы туралы құнды ақпарат береді. Атап айтқанда, PL шыңының орналасуы, жартылай максимумдағы толық ені (FWHM) және фотолюминесценцияның кванттық шығымдылығы (PLQY) сәулелену үлгісін, ақаулар мен біркелкі еместіктердің болуын және электрон-фонондық байланыс беріктігін анықтауда шешуші рөл атқарады. Қалайы негізіндегі перовскиттер ыдырауға бейім болғандықтан, үлгілерді өңдеу кезінде олардың ішкі оптикалық қасиеттерін анықтау үшін ерекше сақ болу керек.

Озаки және т.б. MASnI_3 және FASnI_3 қосылыстарының оптикалық қасиеттерін зерттеп, олардың пленка сапасына тәуелділігін атап өтті (Ozaki et al., 2017). Авторлар сіңіру мен фотолюминесценцияның тотығуға сезімтал екенін анықтады, бұл пленкадағы тесік тасымалдаушысының концентрациясын арттырады. Пленканы легирлеу сіңіру жиегінің көкшіл ығысуына әкеледі, бұл Берштейн-Мосс әсеріне сәйкес келеді (12-сурет).



Сурет 12. Бурштейн–Мосс эффектісінің сызбалық бейнесі.

SnF_2 қоспасы ретінде авторлар тесік тасымалдаушысының тығыздығы төмен пленкалар алды. Бұл жағдайда FASnI_3 фотолюминесценция шыңы 1,44 эВ-тан 1,40 эВ-қа дейін ығысты, ал жартылай қуаттағы жартылай ені 110 мЭВ-қа дейін төмендеді, ал қоспасыз дайындалған пленкалардағы 160 мЭВ болды. Милот және т.б. Біз тесіктердің легирлеу тығыздығын сандық түрде анықтадық және оның айқын Бернштейн-Мосс әсеріне әкелетінін көрсеттік: тесік тығыздығы шамамен 10^{20} см^{-3} жеткенде, сіңіру шегі 300 мЭВ-қа артады (Milot et al., 2018). Бұл әсер сонымен қатар FASnI_3 -тың ішкі тыйым салынған жолағын «жасырады», ол бөлме температурасында 5 К температурада 1,2 эВ және 1,35 эВ құрайды деп хабарланған.

Қорытынды. Қорғасын негізіндегі перовскиттер қоршаған ортаға айтарлықтай аз әсер ете отырып, салыстырмалы, ал кейбір жағдайларда тіпті жоғары оптоэлектрондық қасиеттерді сақтайды. Беттік ақау күйлерінің таралуы және ұзақ мерзімді ыстық заряд тасымалдаушылардың болуы фотоэлектрлік құрылғылардың дәстүрлі тиімділік шектеулерін жеңу әлеуетін айқын көрсетеді. Дегенмен, осы артықшылықтарға қарамастан, оларды кең көлемде қолданудағы негізгі кедергі Sn^{2+} ионының ішкі тұрақсыздығы, атап айтқанда, оның Sn^{4+} -ға дейін тотығуға бейімділігі болып қала береді. Композициялық дизайндағы, аддитивті енгізудегі, интерфейстік пассивациядағы және құрылғы архитектурасын оңтайландырудағы соңғы жетістіктер деградацияны азайтудың және жұмыс тұрақтылығын жақсартудың тиімді жолдарын анықтады. Жалпы алғанда, қалайы негізіндегі перовскиттер тиімді және экологиялық таза перовскит күн батареяларын жасаудың перспективалы кандидаттары болып табылады. Болашақ зерттеулер Sn^{2+} тотығу күйін тұрақтандыруға, ақаулардың химиялық табиғатын бақылауға және келесі буын фотоэлектрлік технологияларында қалайы негізіндегі перовскиттердің әлеуетін толық жүзеге асыру үшін озық құрылғы архитектураларын біріктіруге бағытталуы керек.

References

- Babayigit A., Duy Thanh D., Ethirajan A., Manca J., Muller M., Boyen H.-G. (2016) Conings Assessing the toxicity of Pb-and Sn-based perovskite solar cells in model organism *Danio rerio*. Scientific reports. – No. 6. – P. 18721. <https://doi.org/10.1038/srep18721> (in Eng.).
- Babayigit A., Ethirajan A., Muller M., Conings B. (2016) Toxicity of organometal halide perovskite solar cells. Nature materials. – No. 15. – P. 247-251. <https://doi.org/10.1038/nmat4572> (in Eng.).
- Bernal C., Yang K. (2014) First-principles hybrid functional study of the organic–inorganic perovskites $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnBr}_3$ and $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$. The Journal of Physical Chemistry C. – No. 118. – P. 24383-24388. <https://doi.org/10.1021/jp509358f> (in Eng.).
- Blunden S., Wallace T. (2003) Tin in canned food: a review and understanding of occurrence and effect. Food and chemical toxicology. – No. 41. – P. 1651-1662. [https://doi.org/10.1016/S0278-6915\(03\)00217-5](https://doi.org/10.1016/S0278-6915(03)00217-5) (in Eng.).
- Demartin F., Campostrini I., Gramaccioli C. M. (2009) Panichiite, natural ammonium hexachlorostannate (IV), $(\text{NH}_4)_2\text{SnCl}_6$, from La Fossa crater, Vulcano, Aeolian Islands, Italy. The Canadian Mineralogist. – No. 47. – P. 367-372. <https://doi.org/10.3749/canmin.47.2.367> (in Eng.).
- Feng J., Xiao B. (2014) Effective masses and electronic and optical properties of nontoxic MASnX_3 ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{and I}$) perovskite structures as solar cell absorber: a theoretical study using HSE06. The Journal of Physical Chemistry C. – No. 118. – P. 19655-19660. <https://doi.org/10.1021/jp506498k> (in Eng.).



Filippetti A., Kahmann S., Caddeo C., Mattoni A., Saba M., Bosin A., Loi M.A. (2021) Fundamentals of tin iodide perovskites: a promising route to highly efficient, lead-free solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*. – No. 9. – P. 11812-11826. <https://doi.org/10.1039/D1TA01573G> (in Eng.).

Huang L., Lambrecht W. R. L. (2013) Electronic band structure, phonons, and exciton binding energies of halide perovskites CsSnCl_3 , CsSnBr_3 , and CsSnI_3 . *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*. – No. 88. – P. 165203. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.88.165203> (in Eng.).

Kahmann S., Nazarenko O., Shao S., Hordiichuk O., Kepenekian M., Even J., Kovalenko M.V., Blake G.R., Loi M.A. (2020) Negative thermal quenching in FASnI_3 perovskite single crystals and thin films. *ACS energy letters*. – No. 5. – P. 2512-2519. <https://doi.org/10.1021/acsenergylett.0c01166> (in Eng.).

Ma Z.Q., Pan H., Wong P.K. (2016) A first-principles study on the structural and electronic properties of Sn-based organic–inorganic halide perovskites. *Journal of Electronic Materials*. – No. 45. – P. 5956-5966. <https://doi.org/10.1007/s11664-016-4822-9> (in Eng.).

Milot R.L., Klug M.T., Davies C.L., Wang Z., Kraus H., Snaith H.J., Johnston M.B., Herz L.M. (2018) The effects of doping density and temperature on the optoelectronic properties of formamidinium tin triiodide thin films. *Advanced Materials*. – No. 30. – P. 1804506. <https://doi.org/10.1002/adma.201804506> (in Eng.).

Mitzi D.B., Liang K. (1997) Synthesis, resistivity, and thermal properties of the cubic perovskite $\text{NH}_2\text{CH}=\text{NH}_2\text{SnI}_3$ and related systems. *Journal of Solid State Chemistry*. – No. 134. – P. 376-381. <https://doi.org/10.1006/jssc.1997.7593> (in Eng.).

Nagane S., Ghosh D., Hoyer R.L.Z., Zhao B., Ahmad S., Walker A.B., Saiful Islam M., Ogale S., Sadhanala A. (2018) Lead-free perovskite semiconductors based on germanium–tin solid solutions: structural and optoelectronic properties. *The Journal of Physical Chemistry C*. – No. 122. – P. 5940-5947. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b00480> (in Eng.).

Ozaki M., Katsuki Y., Liu J., Handa T., Nishikubo R., Yakumaru S., Hashikawa Y., Murata Y., Saito T., Shimakawa Y., Kanemitsu Y., Saeki A., Wakamiya A. (2017) Solvent-coordinated tin halide complexes as purified precursors for tin-based perovskites. *ACS omega*. – No. 2. – P. 7016-7021. <https://doi.org/10.1021/acsomega.7b01292> (in Eng.).

Roknuzzaman M., Alarco J.A., Wang H., Du A., Tesfamichael T., Ostrikov K.K. (2019) Ab initio atomistic insights into lead-free formamidinium based hybrid perovskites for photovoltaics and optoelectronics. *Computational Materials Science*. – No. 169. – P. 109118. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109118> (in Eng.).

Schueller E.C., Laurita G., Fabini D.H., Stoumpos C.C., Kanatzidis M.G., Seshadri R. (2018) Crystal structure evolution and notable thermal expansion in hybrid perovskites formamidinium tin iodide and formamidinium lead bromide. *Inorganic chemistry*. – No. 57. – P. 695-701. <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b02576> (in Eng.).

Shi T., Zhang H.S., Meng W., Teng Q., Liu M., Yang X., Yan Y., Yip H.L., Zhao Y.J. (2017) Effects of organic cations on the defect physics of tin halide perovskites. *Journal of Materials Chemistry A*. – No. 5. – P. 15124-15129. <https://doi.org/10.1039/C7TA02662E> (in Eng.).

Takahashi Y., Obara R., Lin Z.Z., Takahashi Y., Naito T., Inabe T., Ishibashi S., Terakura K. (2011) Charge-transport in tin-iodide perovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$: origin of high conductivity. *Dalton Transactions*. – No. 40. – P. 5563-5568. <https://doi.org/10.1039/C0DT01601B> (in Eng.).

Tao S., Schmidt I., Brocks G., Jiang J., Tranca I., Meerholz K., Olthof S. (2019) Absolute energy level positions in tin- and lead-based halide perovskites. *Nature communications*. – No. 10. – P. 2560. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10468-7> (in Eng.).

Xiao L., An T., Deng C., Xu X., Sun H. (2023) On biosafety of Sn-containing halide perovskites. *Energy & Environmental Science*. – No. 16. – P. 2120-2132. <https://doi.org/10.1039/D2EE02510H>

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the «Central Asian Academic Research Center» LLP (Almaty)

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.

Requirements for articles design for publication in the journal are available on the websites:

www.nauka-nanrk.kz

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

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

Managing Editor: T. Apendiev
Editors: D.S. Alenov, A. Shormakova
Computer layout: G.D. Zhadyranova

Signed for print: June 22, 2026
Format: 70×90 1/16. 24.5 printed sheets. Order No. 2.

*«Central Asian Academic Research Center» LLP
Almaty, Shevchenko Street, 28*