

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

**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

**№3
2026**

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

2026 • 3



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%2638>; <https://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>

ТИГІНЬАНУ 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 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>, <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 Жабағаевич, 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

Aliuly A., Kaltayev A.

Aliuly A., Kaltayev A. Assessment of the Applicability of Similarity Laws for Centrifugal Pump Scaling Based on Hydrodynamic Modeling.....14

Baratov A.G., Sailaubek A., Serik A.S.

Synthesis and Investigation of a Narrow-Bandgap SrTaO₂N-Based Photocatalyst.....33

Nurbayev B., Dmitriyeva E., Kemelbekova A.

Modern Methods of Selective Lithium Leaching from Spent Lithium-Ion Batteries.....45

Seitov A., Amanzholov T.

Comparative Analysis of One-Dimensional Physical-Hydrodynamic Models of Centrifugal Flow in an Impeller for Mineralized Media.....60

Syzdykova A.M., Serikbayev N.S., Kutum B.B.

Local Kodama-Type Transformations and Integrability Limits of the Extended Fifth-Order Korteweg-de Vries Equation.....83

Ualikhanova U.A., Ussipkyzy T., Altayeva G.S., Razina O.V.

Calculation of the Screened $f(T)$ Gravity Model.....101

Zhadyranova A.A., Tsyba P.Yu., Ismail U.K., Yerzhan B.

Divergence-Free Deceleration Parameter, Kinematic Constraints from DESI DR2 and Cosmic Chronometers.....123

Zhenishan K., Bekov S.S., Syzdykova A.M.

The Influence of Gaussian Process Parameters on Reconstructing the Hubble Constant.....146

CHEMISTRY

Amangeldi B., Zhanikulov N., Taimasov B., Aitureev M., Dauletiyarov M.

Research of the Firing Processes and Whiteness of White Cement Clinkers.....155

Baisalova G.Zh., Bauyrzhanova G.B., Niyaz G.A., Taltenov A.A., Ainabayev A.A.

Study of the Chemical Composition of Ethanol Extracts of Lady's Mantle by Gas Chromatography-Mass Spectrometry.....169

Bishimbaev V.K., Kapsalyamov B.A.

Hydrogeochemical Indicators of Sulfuric-Acid Uranium Leaching Impact on Groundwater in Shieli and Zhanakorgan Districts.....183

Darmenbayeva A.S., Aubakirova R.A. Nurgaliyeva D.A., Abylkassova G.E., Abilmazhinova G.A.

Structural and Morphological Features of Polymer-Metal Functional Materials.....205

Dyusebaeva M.A., Berganayeva A.E., Ibragimova N.A., Utaraliev D.M., Berganayeva G.E.

Green synthesis of silver nanoparticles using the n-butanol fraction of Galega officinalis L.....223

Dyussembekova S.B., Utarova D.A., Kuspanov Zh.B., Daulbayev Ch.B., Abdikarimova U.A. Investigation of the Effect of SrTiO ₃ Heat Treatment on the Photocatalytic Efficiency of the \	
Decomposition of an Amphoteric Antibiotic.....	239
Issayeva U.B., Akhmetova G.S., Praliyev K.D., Malmakova A.E., Seilkhanov T.M. 1-Benzyl-4-(p-Fluorobenzoyloxyimino)Piperidine Hydrochloride as a Candidate for	
an Anti-Infective Agent.....	252
Kamunur K., Yskak M., Mussapyrova L. Effect of Chemical Modification of Sodium Lignosulfonate on Flotation Properties in the	
Barite – Calcite System.....	264
Kononov A., Kamunur K., Mussapyrova L., Assylkhanova D., Batkal A. Obtaining and Studying the Inorganic Flocculant Al–Fe–Mn Based on Modified Bentonite.....	276
Kurmangaliyeva A.1, Akhmetova F.2, Kareshova Zh.1, Iskakov R. PDMA-Modified Tagan Bentonite for Hydrogen Production in Catalytic Conversion	
of Hydrocarbons.....	292
Kurtebayeva A.A., Silvia Álvarez-Torrellas., Noor Haida Mohd Kaus., Gomes H.T., Kalmakhanova M.S. Corn-Cob-Derived Fe-Modified Activated Carbons for Paracetamol and Sulfamethoxazole	
Removal by Adsorption and Oxidative Treatment.....	307
Nadirov R.K., Nurtazina N.D., Ryskaliyeva R.G. Response Surface Modelling and Optimisation of Ilmenite Flotation Using a Modified	
Lignosulphonate Reagent.....	334
Nefedov A.N., Taikenova A.T., Imashev B.K., Nurislamov R.M., Leontyeva X. Quantum Computing in the Modeling of Corrosion Processes.....	350
Nurkenov O.A., Fazylov S.D., Syzdykov A.K., Kabiyeva S.K., Zhaslan R.K. Synthesis and Structural Study of 3,5-Dimethylisoxazole Sulfone Derivatives with Secondary	
Amines.....	365
Orazbekova R.S., Tungatarova S.A., Baizhumanova T.S., Kaumenova G.B., Zhumabek M. Influence of Reaction Mixture Composition in Steam Reforming of Bioethanol on a High-Entropy	
Oxide Catalyst.....	382
Ryskaliyeva R.G., L.K. Beisembayeva, Osserov T.B. Hydrocyclone Classification of Balkhash Processing Plant Tailings.....	398
Sass A.S., Torlopov I.I., Rakhmetova K.S., Kenzin E.N., Zhurinov M. Formation and Maturation of Phosphate Coatings on Steel from an Alcohol-Based	
Phosphating Solution.....	418
Sdikova G.Zh., Dalabayeva N.S., Balkembay A.S., Sarova N.B., Zhaltyrbayeva N.K. Effect of Electrolyte Formulation on the Characteristics of Zinc-Based	
Electroplated Coatings.....	435
Seitkaliyeva N., Kussainova G., Zhursumbayeva M., Mohamad Ibrahim M.N., Abdiyev K. Study of the Flocculation Properties of Itaconic Acid-Based Copolymers.....	448

Sergazina S.M., Nurmukhanbetova N.N., Ostretsova I.B., Kamze A.R., Kassenova N.B. Comprehensive Assessment of Natural Drinking Water Quality and Statistical Analysis of Physicochemical Parameters.....	460
Talgatkyzy A., Nazhipkyzy M., Otenov A., Seitkazinova A., Issanbekova A. Wood Waste-Derived Organosolv Lignin-Based Carbon Nanofibers For Energy Storage Applications.....	475
Toktabayeva A.K., Makhayeva D.N., Rakhmetullayeva R.K., Rvaidarova G.O., Issenova G.D. Synthesis, Structure, and Physicochemical Properties of Sulfur-Containing Composites Based on Aniline, p-Phenylenediamine, Phenol, and Formaldehyde.....	498
Yeshmanova G.B., Smagulov D.U. Effect of Silicon-Based Particles on the Formation and Composition of PEO Coatings.....	517
Zhortarova A.A., Kubicek V., Ibrayev M.K., Panshina S.Y., Seidakhmetova R.B. N-Phosphorylation of Amino-thiazoles and Amino-Thiadiazoles with P(III)- and P(V)-Reagents: Synthesis, Structure, and Biological Activity.....	538
Zhussupova A., Tyumentseva O., Antonyuk V. Comparative Study of the Kinetics and Energy Characteristics of Planetary Milling of Copper Smelting Dump Slag and Granulated Lead-Smelting Slag.....	552

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

Әлиұлы А., Калтаев А.

Гидродинамикалық модельдеу негізінде ортадан тепкіш сорғыларды масштабтауда ұқсастық заңдарының қолданылуын бағалау.....14

Баратов А.Ғ., Сайлаубек А., Серік А.С.

SrTaO_2N негізіндегі тар тыйым салынған аймақты фотокатализаторды алу және зерттеу.....33

Нұрбаев Б., Дмитриева Е., Кемелбекова А.

Пайдаланылған литий-ионды аккумуляторлардан литийді селективті шаймалаудың заманауи әдістері.....45

Сейтов А.Н., Аманжолов Т.Е.

Минералданған орталарға арналған жұмыс дөңгелегіндегі ортадан тепкіш ағыстың бірөлшемді физикалық–гидродинамикалық модельдерін салыстырмалы талдау.....60

Сыздыкова А.М., Серикбаев Н.С., Кутум Б.Б.

Кенетейлген бесінші ретті Кортевег-де Фриз тендеуінің локалды кодам типті түрлендіруі мен интегралдану шектері.....83

Уалиханова У.А., Үсіпқызы Т., Алтаева Г.С., Разина О.В.

Экрандалған $f(T)$ – гравитация моделінің есебі.....101

Жадыранова А.А., Цыба П.Ю., Исмаил Ү.Қ., Ержан Б.

Дивергенциясыз бәсеңдеу параметрі, DESI DR2 және космикалық хронометрлер деректері бойынша кинематикалық шектеулер.....123

Жеңіскан Қ., Беков С.С., Сыздыкова А.М.

Хаббл тұрақтысын реконструкциялауға Гаусстық процестер параметрлерінің әсері.....146

ХИМИЯ

Амангелді Б., Жаникулов Н., Таймасов Б., Айтүреев М., Даулетияров М.

Ақ цемент клинкерлерінің күйдіру процестерін және ақтығын зерттеу.....155

Байсалова Г.Ж., Бауыржанова Г.Б., Нияз Г.А., Талтенов А.А., Айнабаев А.А.

Газ хроматография-масс-спектрометрия әдісімен кәдімгі теңгежапырақ өсімдігінің этанолды сығындыларының химиялық құрамын зерттеу.....169

Бишимбаев В.К., Капсаямов Б.А.

Шиелі және Жаңақорған аудандарындағы уранды күкірт қышқылымен шаймалаудың жер асты суларына әсерінің гидрогеохимиялық көрсеткіштері.....183

Дарменбаева А.С., Аубакирова Р.А., Нурғалиева Д.А., Абылқасова Г.Е., Абилямжинова Г.А.

Полимер-металл функционалдық материалдардың құрылымдық-морфологиялық ерекшеліктері.....205

Дюсебаева М.А., Берганаева А.Е., Ибрагимова Н.А., Утаралиев Д.М., Берганаева Г.Е.

Galega Officinalis L. өсімдігінің N-бутанолдық фракциясы арқылы күміс нанобөлшектерін жасыл синтездеу.....223



Дюсембекова С.Б., Утарова Д.А., Құспанов Ж.Б., Даулбаев Ч.Б., Әбдікәрімова Ұ.Ә. Термиялық өңделген SrTiO ₃ фотокатализаторларының екідайлы антибиотикті тиімді ыдыратуын зерттеу.....	239
Исаева Ұ.Б., Ахметова Г.С., Пірәлиев Қ.Ж., Малмакова А.Е., Сейлханов Т.М. Жұқпалы ауруларға қарсы кандидат ретінде 1-бензил-4-(П-фторбензоилоксиимино) пиперидин гидрохлориді.....	252
Қамұнұр Қ., Ысқақ М., Мусапирова Л. Барит–кальцит жүйесіндегі натрий лигносульфонатының флотациялық қасиеттеріне химиялық модификацияның әсері.....	264
Кононов А., Қамұнұр Қ., Мусапирова Л., Асылханова Д., Батқал А. Модификацияланған бентонит негізіндегі Al–Fe–Mn бейорганикалық флокулянтын алу және зерттеу.....	276
Қурманғалиева А.1, Ахметова Ф., Карешова Ж., Исаков Р. Көмірсутектердің каталитикалық конверсиясы арқылы сутек алуға арналған ПДМА-модификацияланған таған бентониті.....	292
Қуртебаева А.А., Álvarez-Torrellas S., Noor Haida Mohd Kaus., Gomes H.T., Калмаханова М.С. Жүгері собықтарынан алынған темірмен модификацияланған белсендірілген көмірлермен парацетамол мен сульфаметоксазолды адсорбциялық-тотығу жолымен жою.....	307
Надиров Р.К., Нуртазина Н.Д., Рыскалиева Р.Г. Модификацияланған лигносульфонатты реагентті қолдану арқылы ильменит флотациясының жауап бетін модельдеу және оңтайландыру.....	334
Нефедов А.Н., Тайекенова А.Т., Имашев Б.К., Нурисламов Р.М., Леонтьева К.А. Коррозиялық процестерді модельдеудегі кванттық есептеулер.....	350
Нүркенов О.А., Фазылов С.Д., Сыздықов А.К., Қабиева С.Қ., Жаслан Р.К. Екіншілік аминдермен 3,5-диметилизоксазолдың сульфотуындыларын синтездеу және құрылымдық зерттеу.....	365
Оразбекова Р.С., Тунгатарова С.А., Байжұманова Т.С., Кауменова Г.Б., Жұмабек М. Жоғары энтропиялық оксид катализаторы қатысында биоэтанолдың бу риформингісіне реакциялық қоспа құрамының әсері.....	382
Рыскалиева Р.Г., Бейсембаева Л.К., Осеров Т.Б. Балқаш байыту фабрикасының байыту қалдықтарын гидроциклондық классификациялау.....	398
Сасс А.С., Торлопов И.И., Рахметова К.С., Кензин Э.Н., Жұрынов М. Спирт негізіндегі фосфаттау ерітіндісінен болат бетінде фосфатты жабындардың қалыптасуы және жетілуі.....	418
Сдикова Г.Ж., Далабаева Н.С., Балкембай А.С., Сарова Н.Б., Жалтырбаева Н.К. Мырыш негізіндегі гальваникалық қаптамалардың қасиеттеріне электролит құрамының әсері.....	435

Сейтқалиева Н., Құсаинова Г., Жүрсімбаева М., Мохамад Ибрагим М.Н., Әбдиев Қ. Итакон қышылы негізіндегі сополимерлердің флокуляциялық қасиеттерін зерттеу.....	448
Сергазина С.М., Нұрмұханбетова Н.Н., Острцова И.Б., Камзе А.Р., Касенова Н.Б. Табиғи ауыз су сапасын кешенді бағалау және физика-химиялық көрсеткіштерге статистикалық талдау.....	460
Талгатқызы Ә., Нажиқызы М., Өтенов Ә., Сейтқазинаева Ә., Исанбекова А. Ағаш қалдықтарынан алынған органосольв лигнин негізіндегі көміртекті талшықтарды энергия сақтау жүйелерінде қолдану.....	475
Тоқтабаева Ә.Қ., Махаева Д.Н., Рахметуллаева Р.Қ., Рвайдарова Г.О., Исенова Г.Д. Анилин, п-фенилендиамин, фенол және формальдегид негізіндегі күкіртқұрамды композиттердің синтезі, құрылымы және физика-химиялық қасиеттері.....	498
Ешманова Г.Б., Смағұлов Д.У. Кремний негізіндегі бөлшектердің ПЭО жабындарының қалыптасуы мен құрамына әсері.....	517
Жортарова А.А., Kubicek V., Ибраев М.Қ., Паньшина С.Ю., Сейдахметова Р.Б. Р(III) және Р(V) реагенттерімен аминотиазолдар мен аминок-тиадиазолдарды N-фосфорлирлеу: синтезі, құрылымы және биологиялық белсенділігі.....	538
Жусупова А., Тюменцева О., Антонюк В. Үйінді мыс балқыту шлагы мен қорғасын балқытудың түйіршіктелген шлагын планетарлық ұнтақтау кинетикасы мен энергетикасын салыстырмалы зерттеу.....	552

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Әлиұлы А., Калтаев А.

Оценка применимости законов подобия при масштабировании центробежных насосов на основе гидродинамического моделирования.....14

Баратов А.Г., Сайлаубек А., Серік А.С.Получение и исследование узкозонного фотокатализатора на основе SrTaO_2N33**Нұрбаев Б., Дмитриева Е., Кемелбекова А.**

Современные методы селективного выщелачивания лития из отработанных литий-ионных аккумуляторов.....45

Сейтов А.Н., Аманжолов Т.Е.

Сравнительный анализ одномерных физико-гидродинамических моделей центробежного течения в рабочем колесе для минерализованных сред.....60

Сыздыкова А.М., Серикбаев Н.С., Кутум Б.Б.

Локальные преобразование типа кодамы и пределы интегрируемости расширенного уравнения Кортевега-де Фриза пятого порядка.....83

Уалиханова У.А., Усипкызы Т., Алтаева Г.С., Разина О.В.Расчёт экранированной модели $f(T)$ -гравитации.....101**Жадыранова А.А., Цыба П.Ю., Исмаил У.Қ., Ержан Б.**

Дивергентно-свободный параметр замедления, кинематические ограничения по данным DESI DR2 и космических хронометров.....123

Женискан К., Беков С.С., Сыздыкова А.М.

Влияние параметров Гауссового процесса на реконструкцию постоянной Хаббла.....146

ХИМИЯ

Амангелди Б., Жаникулов Н., Таймасов Б., Айтурсев М., Даулетияров М.

Исследование процессов обжига и белизны клинкеров белых цементов.....155

Байсалова Г.Ж., Бауыржанова Г.Б., Нияз Г.А., Талтенов А.А., Айнабаев А.А.

Изучение химического состава этанольных экстрактов манжетки обыкновенной методом газ хроматографии-масс-спектрометрии.....169

Бишимбаев В.К., Капсалямов Б.А.

Гидрогеохимические индикаторы воздействия сернокислотного выщелачивания урана на подземные воды районов Шиели и Жанакоргана.....183

Дарменбаева А.С., Аубакирова Р.А., Нургалиева Д.А., Абылкасова Г.Е., Абилямажинова Г.А.

Структурно-морфологические особенности полимер-металлических функциональных материалов.....205

Дюсебаева М.А., Берганаева А.Е., Ибрагимова Н.А., Утаралиев Д.М., Берганаева Г.Е. Зеленый синтез серебряных наночастиц с использованием N-бутанольной фракции Galega Officinalis L.....	223
Дюсембекова С.Б., Утарова Д.А., Куспанов Ж.Б., Даулбаев Ч.Б., Абдикаримова У.А. Исследование влияния термической обработки SrTiO ₃ на фотокаталитической эффективности разложения амфотерного антибиотика.....	239
Исаева У.Б., Ахметова Г.С., Пралиев К.Д., Малмакова А.Е., Сейлханов Т.М. Гидрохлорид 1-бензил-4-(п-фторбензоилоксиимино) пиперидина в качестве кандидата в противомикробное средство.....	252
Қамұнұр Қ., Ысқақ М., Мұсапирова Л. Влияние химической модификации лигносульфоната натрия на его флотационные свойства в системе барит–кальцит.....	264
Кононов А., Қамұнұр Қ., Мұсапирова Л., Асылханова Д., Батқал А. Получение и исследование неорганического флокулянта Al–Fe–Mn на основе модифицированного бентонита.....	276
Курмангалиева А., Ахметова Ф., Карешова Ж., Исаков Р. ПДМА-модифицированный таганский бентонит для получения водорода при каталитической конверсии углеводородов.....	292
Куртебаева А.А., Álvarez-Torrellas S., Noor Haida Mohd Kaus., Gomes H.T., Калмаханова М.С. Модифицированные железом активированные угли из кукурузных початков для адсорбционно-окислительного удаления парацетамола и сульфаметоксазола.....	307
Надиров Р.К., Нуртазина Н.Д., Рыскалиева Р.Г. Моделирование поверхности отклика и оптимизация флотации ильменита с использованием модифицированного лигносульфонатного реагента.....	334
Нефедов А.Н., Тайекенова А.Т., Имашев Б.К., Нурисламов Р.М., Леонтьева К.А. Квантовые вычисления в моделировании коррозионных процессов.....	350
Нуркенов О.А., Фазылов С.Д., Сыздыков А.К., Кабиева С.К., Жаслан Р.К. Синтез и структурное исследование сульфопроизводных 3,5-диметилизоксазола совторичными аминами.....	365
Оразбекова Р.С., Тунгатарова С.А., Байжұманова Т.С., Кауменова Г.Б., Жумабек М. Влияние состава реакционной смеси в паровом риформинге биоэтанола на высокоэнтропийном оксидном катализаторе.....	382
Рыскалиева Р.Г., Бейсембаева Л.К., Осеров Т.Б. Гидроциклонная классификация хвостов обогащения Балхашской обогажительной фабрики.....	398
Сасс А.С., Торлопов И.И., Рахметова К.С., Кензин Э.Н., Журинов М. Формирование и созревание фосфатных покрытий на стали из фосфатирующего раствора на основе спирта.....	418

Сдикова Г.Ж., Далабаева Н.С., Балкембай А.С., Сарова Н.Б., Жалтырбаева Н.К. Влияние состава электролита на свойства гальванических покрытий на основе цинка.....	435
Сейткалиева Н., Кусаинова Г., Журсумбаева М., Мохамад Ибрагим М.Н., Абдиев К. Исследование флокулирующих свойств сополимеров на основе итаконовой кислоты.....	448
Сергазина С.М., Нурмуханбетова Н.Н., Острцова Н.Б., Камзе А.Р., Касенова Н.Б. Комплексная оценка качества природной питьевой воды и статистический анализ физико-химических показателей.....	460
Талгаткызы А., Нажибкизы М., Отенов А., Сейтказинова А., Исанбекова А. Углеродные волокна на основе органосольв лигнина, полученного из древесных отходов, для применения в системах хранения энергии.....	475
Токтабаева А.К., Махаева Д.Н., Рахметуллаева Р.К., Рвайдарова Г.О., Исенова Г.Д. Синтез, структура и физико-химические свойства серосодержащих композитов на основе анилина, п-фенилендиамина, фенола и формальдегида.....	498
Ешманова Г.Б., Смагулов Д.У. Влияние частиц на основе кремния на формирование и состав ПЭО покрытий.....	517
Жортарова А.А., Kubicek V., Ибраев М.К., Панышина С.Ю., Сейдахметова Р.Б. N-фосфорилирование аминотиазолов и аминок-тиадиазолов с помощью реагентов Р(III) и Р(V): синтез, структура и биологическая активность.....	538
Жусупова А., Тюменцева О., Антонюк В. Сравнительное исследование кинетики и энергетики планетарного измельчения отвального медеплавильного шлака и гранулированного шлака свинцовой плавки.....	553

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 3.
Number 359 (2026), 350-364

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.480>

UDC: 620.193:004.855

IRSTI: 31.15.33

©Nefedov A.N., Taikenova A.T.*, Imashev B.K., Nurislamov R.M.,
Leontyeva X., 2026.

JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”,
Almaty, Kazakhstan.

*E-mail: a.taikenova@gmail.com

QUANTUM COMPUTING IN THE MODELING OF CORROSION PROCESSES

Nefedov Alexander — Candidate of Chemical Sciences, Scientific Consultant, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: a.nefedov@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0002-9070-0398>;

Taikenova Arailym — Master’s degree, Leading Engineer, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: a.taikenova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8354-1704>;

Imashev Bauyrzhan — Junior Researcher, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: imashev_b_88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-8452-8584>;

Nurislamov Ruslan — Leading Engineer, Modeling Department, Competence Center for Corrosion Issues, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: r.nurislamov@ifce.kz, <https://orcid.org/0009-0007-3654-0315>;

Leontyeva Xeniya — Junior Researcher, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: x.leontyeva@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0002-4740-1720>.

Abstract. Corrosion of metals and alloys remains one of the most significant scientific and technological challenges facing modern industry, resulting in substantial economic losses, reduced equipment reliability, and increased environmental and technological risks. Effective prediction of the corrosion behavior of materials requires a detailed understanding of processes occurring at the atomic and electronic levels. The purpose of this work is to analyze the potential application of quantum computing to corrosion process modeling and to assess its prospects in corrosion science and materials engineering. The study was conducted as an analytical review of scientific publications in computational chemistry, quantum information science, and electrochemical corrosion. The capabilities and limitations of classical quantum-chemistry methods, including Density Functional Theory (DFT) and post-Hartree–Fock approaches, were considered together with modern quantum algorithms, including the



Variational Quantum Eigensolver (VQE), Quantum Phase Estimation (QPE), methods for modeling periodic systems, and quantum molecular dynamics. The analysis indicates that quantum computing has considerable potential for more accurate descriptions of the electronic structure of protective oxide and sulfide films, elementary electrochemical reactions, hydrogen embrittlement processes, and interactions of corrosion inhibitors with metal surfaces. Computational resources and possible time horizons for the practical application of quantum technologies were assessed. Hybrid quantum-classical approaches are identified as the most realistic near-term direction, whereas modeling realistic corrosion interfaces will require further development of fault-tolerant quantum systems. The results identify promising directions for applying quantum computing to improve corrosion prediction accuracy and advance corrosion protection technologies.

Keywords: quantum computing; corrosion processes; density functional theory; electronic structure; electrochemical modeling; corrosion inhibitors; quantum chemistry

Funding: This research was financially supported by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan within the framework of Program BR24992812 “Development of materials and technologies aimed at comprehensive corrosion protection of technological equipment in the petrochemical, machine-building and instrument-making industries”.

For citations: Nefedov A.N., Taiekenova A.T., Imashev B.K., Nurislamov R.M., Leontyeva X. Quantum Computing in the Modeling of Corrosion Processes. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.3. Pp. 350-364. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.480>

©Нефедов А.Н., Тайекенова А.Т.*, Имашев Б.К., Нурисламов Р.М.,
Леонтьева К.А., 2026.

«Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты»
АҚ, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: a.taiekenova@gmail.com

КОРРОЗИЯЛЫҚ ПРОЦЕСТЕРДІ МОДЕЛЬДЕУДЕГІ КВАНТТЫҚ ЕСЕПТЕУЛЕР

Нефедов Александр — химия ғылымдарының кандидаты, ғылыми кеңесшісі, «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: a.nefedov@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0002-9070-0398>;

Тайекенова Арайлым — магистр, аға инженер, «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: a.taiekenova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8354-1704>;

Имашев Бауыржан — кіші ғылыми қызметкер, «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: imashev_b_88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-8452-8584>;

Нурисламов Руслан — аға инженер, «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,

E-mail: r.nurislamov@ifce.kz, <https://orcid.org/0009-0007-3654-0315>;

Леонтьева Ксения — кіші ғылыми қызметкер, «Д.В.Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,

E-mail: x.leontyeva@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0002-4740-1720>.

Аннотация. Металдар мен қорытпалардың коррозиясы қазіргі өнеркәсіптің елеулі экономикалық шығындарға, жабдықтар сенімділігінің төмендеуіне және экологиялық әрі технологиялық қауіптердің туындауына әкелетін маңызды ғылыми-техникалық мәселелерінің бірі болып қала береді. Материалдардың коррозиялық әрекетін тиімді болжау атомдық және электрондық деңгейлерде жүретін процестерді терең түсінуді талап етеді. Осы жұмыстың мақсаты – коррозиялық процестерді модельдеуде кванттық есептеулерді қолдану мүмкіндіктерін талдау және олардың коррозия ғылымы мен материалтанудағы пайдалану перспективаларын бағалау. Зерттеу есептеу химиясы, кванттық информатика және электрохимиялық коррозия салаларындағы ғылыми жарияланымдарға аналитикалық шолу түрінде орындалды. Тығыздық функционалы теориясын (DFT) және Хартри–Фоктан кейінгі тәсілдерді қамтитын классикалық кванттық химия әдістерінің мүмкіндіктері мен шектеулері, сондай-ақ вариациялық кванттық меншікті мәндер шешушісі (VQE), кванттық фазаны бағалау (QPE), периодтық жүйелерді модельдеу әдістері және кванттық молекулалық динамика қарастырылды. Талдау нәтижелері кванттық есептеулердің қорғаныш оксидтік және сульфидтік қабықшалардың электрондық құрылымын, қарапайым электрохимиялық реакцияларды, сутектік морттану процестерін және ингибиторлардың металл бетімен әрекеттесуін дәлірек сипаттау үшін айтарлықтай әлеуетке ие екенін көрсетті. Кванттық технологияларды практикалық қолдануға қажетті есептеу ресурстары мен ықтимал уақыт көкжиектеріне бағалау жүргізілді. Жақын перспективада гибриді кванттық-классикалық тәсілдер неғұрлым шынайы бағыт болып табылатыны, ал нақты коррозиялық интерфейстерді модельдеу үшін ақауларға төзімді кванттық жүйелердің одан әрі дамуы қажет екені көрсетілді. Алынған нәтижелер коррозиялық процестерді болжау дәлдігін арттыру және коррозияға қарсы қорғау технологияларын жетілдіру үшін кванттық есептеулерді қолданудың перспективасы бағыттарын айқындауға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: кванттық есептеулер; коррозиялық процестер; тығыздық функционалы теориясы; электрондық құрылым; электрохимиялық модельдеу; коррозия ингибиторлары; кванттық химия

©Нефедов А.Н., Тайекенова А.Т.*, Имашев Б.К., Нурисламов Р.М.,
Леонтьева К.А., 2026.

АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского»,
Алматы, Казахстан.

*E-mail: a.taikenova@gmail.com

КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ В МОДЕЛИРОВАНИИ КОРРОЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Нефедов Александр — кандидат химических наук, научный консультант, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: a.nefedov@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0002-9070-0398>;

Тайекенова Арайлым — магистр, ведущий инженер, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: a.taikenova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8354-1704>;

Имашев Бауыржан — младший научный сотрудник, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: imashev_b_88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-8452-8584>;

Нурисламов Руслан — ведущий инженер, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: r.nurislamov@ifce.kz, <https://orcid.org/0009-0007-3654-0315>;

Леонтьева Ксения — младший научный сотрудник, АО «Институт Топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: x.leontyeva@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0002-4740-1720>.

Аннотация. Коррозия металлов и сплавов остаётся одной из наиболее значимых научно-технических проблем современной промышленности, приводящей к существенным экономическим потерям, снижению надёжности оборудования и возникновению экологических и технологических рисков. Эффективное прогнозирование коррозионного поведения материалов требует понимания процессов, протекающих на атомном и электронном уровнях. Целью настоящей работы является анализ возможностей применения квантовых вычислений для моделирования коррозионных процессов и оценка перспектив их использования в коррозионной науке и материаловедении. Исследование выполнено в формате аналитического обзора публикаций в области вычислительной химии, квантовой информатики и электрохимической коррозии. Рассмотрены возможности и ограничения классических методов квантовой химии, включая теорию функционала плотности (DFT) и пост-хартри-фоковские подходы, а также современные квантовые алгоритмы: вариационный квантовый солвер собственных значений (VQE), квантовая оценка фазы (QPE), методы моделирования периодических систем и квантовая молекулярная динамика. Анализ показывает, что квантовые вычисления обладают потенциалом для более точного описания электронной структуры защитных оксидных и сульфидных плёнок, элементарных электрохимических реакций, процессов водородного охрупчивания и взаимодействия ингибиторов с металлической поверхностью. Выполнена оценка вычислительных ресурсов и возможных временных горизонтов

практического применения квантовых технологий. Показано, что в ближайшей перспективе наиболее реалистичным направлением являются гибридные квантово-классические подходы, тогда как моделирование реалистичных коррозионных интерфейсов потребует развития отказоустойчивых квантовых систем. Полученные результаты позволяют определить перспективные направления использования квантовых вычислений для повышения точности прогнозирования коррозии и совершенствования технологий противокоррозионной защиты.

Ключевые слова: квантовые вычисления; коррозионные процессы; теория функционала плотности; электронная структура; электрохимическое моделирование; ингибиторы коррозии; квантовая химия

Введение. Коррозия металлов и сплавов является одной из наиболее серьёзных технико-экономических проблем современной промышленности. По различным оценкам, ежегодные потери, связанные с коррозионным разрушением материалов и оборудования, достигают 3–4 % валового внутреннего продукта промышленно развитых стран. В нефтегазовой, химической, энергетической и транспортной отраслях коррозия приводит не только к значительным экономическим затратам, связанным с ремонтом и заменой оборудования, но и создаёт риски возникновения аварийных ситуаций, экологических последствий и угроз безопасности персонала (Revie and Uhlig, 2008).

С фундаментальной точки зрения коррозия представляет собой совокупность электрохимических процессов, протекающих на границе раздела фаз «металл – окружающая среда» и сопровождающихся переносом электронов, адсорбцией реагентов, образованием промежуточных соединений и формированием продуктов коррозии (Marcus, 2011). Скорость и механизм протекания данных процессов определяются особенностями электронной структуры материалов, состоянием поверхности металла и взаимодействием с компонентами агрессивной среды (Nørskov et al., 2011). В связи с этим понимание коррозионных явлений на атомном и электронном уровнях является необходимым условием для разработки эффективных методов противокоррозионной защиты.

В последние десятилетия важным инструментом исследования коррозионных процессов стали методы вычислительного материаловедения, основанные преимущественно на классических вычислительных ресурсах. Наиболее широкое распространение получила теория функционала плотности (DFT), позволяющая рассчитывать электронную структуру материалов, энергии адсорбции, энергетические барьеры реакций и свойства защитных плёнок (Hafner, 2008; Taylor, 2012). Наряду с DFT применяются пост-хартри-фоковские методы, включая MP2, CCSD(T) и CASSCF, обеспечивающие более высокую точность для ряда многоэлектронных систем, но характеризующиеся значительно большей вычислительной сложностью (Helgaker et al., 2000). В настоящей работе данные методы рассматриваются как классические методы квантовой химии, в то время как под квантовыми вычислениями понимаются вычисления, выполняемые с использованием квантовых алгоритмов на квантовых вычислительных

устройствах. Такое разграничение позволяет отдельно оценить возможности традиционного вычислительного моделирования и перспективы его дополнения квантовыми технологиями. Несмотря на значительные успехи, возможности классических вычислительных подходов остаются ограниченными при описании систем со сложными электронными корреляциями, включая оксиды и сульфиды переходных металлов, а также многоэлектронные электрохимические процессы (Anisimov et al., 1991; Wang et al., 2006). Более точные пост-хартри-фоковские методы требуют значительных вычислительных ресурсов и практически неприменимы для моделирования коррозионных систем реального масштаба (Helgaker et al., 2000).

Развитие квантовых вычислений открывает новые возможности для моделирования многоэлектронных систем и решения задач, недоступных классическим компьютерам. Использование явлений квантовой суперпозиции и запутанности позволяет рассчитывать электронную структуру сложных материалов с потенциально более высокой точностью и благоприятным масштабированием вычислительных затрат (Nielsen and Chuang, 2010; McArdle et al., 2020). Современные квантовые алгоритмы, включая вариационный квантовый солвер собственных значений (VQE), квантовую оценку фазы (QPE) и методы квантового моделирования динамических процессов, рассматриваются как перспективный инструмент для решения задач вычислительной химии и материаловедения.

Несмотря на быстрое развитие квантовых технологий, вопросы их применения к моделированию коррозионных процессов остаются недостаточно систематизированными. В научной литературе отсутствует комплексный анализ потенциальных областей применения квантовых вычислений в коррозионной науке, а также оценка перспектив практического использования соответствующих алгоритмов для решения прикладных задач.

Целью настоящего обзора является систематический анализ возможностей и перспектив применения квантовых вычислений для моделирования коррозионных процессов, включая оценку существующих ограничений классических вычислительных методов, рассмотрение современных квантовых алгоритмов и определение наиболее перспективных направлений их использования в исследованиях коррозии материалов.

Литературный обзор. Коррозия металлов в водных средах представляет собой совокупность взаимосвязанных анодных и катодных электрохимических реакций, протекающих на границе раздела фаз «металл – окружающая среда» (Marcus, 2011). Скорость и механизм коррозионного разрушения определяются кинетикой элементарных процессов, включающих адсорбцию реагентов на поверхности металла, перенос электронов, образование промежуточных соединений, формирование продуктов коррозии и рост защитных плёнок. Согласно современным представлениям, все перечисленные стадии контролируются особенностями электронной структуры взаимодействующих веществ и характером межатомных взаимодействий на поверхности материала (Nørskov et al., 2011).

В последние десятилетия значительное развитие получили методы вычислительного моделирования коррозионных процессов. Наиболее широко применяется теория функционала плотности (DFT), которая позволяет рассчитывать электронную структуру материалов, энергии адсорбции, энергетические барьеры реакций и характеристики защитных плёнок (Hafner, 2008; Taylor, 2012). DFT успешно используется для исследования процессов анодного растворения металлов, катодного восстановления кислорода и водорода, формирования оксидных слоёв и взаимодействия ингибиторов коррозии с металлической поверхностью (Kokalj, 2021; Obot et al., 2015).

Особую сложность для моделирования представляют коррозионно-значимые материалы с сильными электронными корреляциями. К ним относятся оксиды переходных металлов (Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , Cr_2O_3 , NiO , TiO_2), являющиеся основными компонентами пассивных плёнок, а также сульфиды железа, образующиеся в сероводородсодержащих средах (Anisimov et al., 1991; Rickard and Luther, 2007). Электронная структура данных соединений характеризуется частично заполненными d-орбиталями, сложным магнитным упорядочением и выраженными корреляционными эффектами. Для таких систем стандартные функционалы DFT нередко демонстрируют существенные отклонения от экспериментальных данных, в частности при расчёте ширины запрещённой зоны, энергий дефектообразования и параметров электронного переноса (Wang et al., 2006).

Несмотря на широкое распространение DFT, данный подход обладает рядом фундаментальных ограничений. Ошибки обменно-корреляционных функционалов, проблемы самовзаимодействия электронов и недостаточно точное описание мультисостояний приводят к снижению точности расчётов для сложных коррозионных систем (Anisimov et al., 1991; Wang et al., 2006). Более точные пост-хартри-фоковские методы, включая MP2, CCSD(T) и CASSCF, обеспечивают более достоверное описание электронной структуры, однако требуют значительных вычислительных ресурсов и становятся практически неприменимыми для систем, содержащих сотни атомов (Helgaker et al., 2000; Reiher et al., 2017).

В связи с указанными ограничениями в последние годы активно развивается направление квантовых вычислений, ориентированное на решение задач квантовой химии и материаловедения. Наиболее перспективными считаются вариационный квантовый солвер собственных значений (VQE), квантовая оценка фазы (QPE), квантовая молекулярная динамика и гибридные методы вложения (Peruzzo et al., 2014; Kitaev, 1996; Lloyd, 1996; Rossmannek et al., 2021). Исследования показывают, что данные подходы обладают потенциалом преодоления вычислительных ограничений классических методов и могут обеспечить более точное моделирование электронной структуры сложных коррозионных систем.

Таким образом, анализ литературных данных свидетельствует о том, что дальнейшее развитие методов моделирования коррозионных процессов связано с применением квантовых вычислений, способных обеспечить более

точное описание электронных взаимодействий и расширить возможности прогнозирования коррозионного поведения материалов.

Материалы и методы. Настоящее исследование выполнено в формате аналитического обзора научной литературы, посвящённой применению квантовых вычислений для моделирования коррозионных процессов и электрохимических явлений. Анализ основан на публикациях в области квантовой химии, вычислительного материаловедения, электрохимии и квантовых вычислений. Поиск литературных источников осуществлялся в международных научных базах данных Scopus, Web of Science, Google Scholar и arXiv. Для поиска использовались ключевые слова и их комбинации: «quantum computing», «quantum chemistry», «variational quantum eigensolver», «quantum phase estimation», «corrosion modelling», «electrochemical reactions», «density functional theory», «hydrogen embrittlement», «corrosion inhibitors», «metal oxide films». В обзор были включены научные статьи, монографии и обзоры, опубликованные преимущественно в период 2000–2025 гг., а также фундаментальные работы, сформировавшие теоретические основы квантовых вычислений и моделирования электронной структуры. Основными критериями отбора являлись научная значимость публикации, цитируемость, наличие рецензирования и непосредственная связь с рассматриваемой тематикой.

Анализ литературы проводился по следующим направлениям: ограничения классических методов квантовой химии при моделировании коррозионных процессов; современные квантовые алгоритмы для расчёта электронной структуры веществ; возможности применения квантовых вычислений для исследования оксидных и сульфидных плёнок, электрохимических реакций, ингибиторов коррозии и процессов водородного охрупчивания. На основе сопоставления опубликованных данных выполнена оценка перспектив внедрения квантовых вычислительных технологий в коррозионные исследования и определены наиболее перспективные направления дальнейшего развития.

Результаты. По результатам анализа современных публикаций показано, что применение квантовых вычислений рассматривается как перспективное направление для исследования коррозионных процессов на атомном и электронном уровнях. Согласно опубликованным данным, одним из ограничений классических методов моделирования является снижение точности описания систем со сложной электронной структурой, к которым относятся оксидные и сульфидные плёнки переходных металлов, а также интерфейсы металл/раствор.

Показано, что широко используемая теория функционала плотности (DFT) обеспечивает приемлемую точность для многих задач вычислительного материаловедения, однако при моделировании коррозионно-значимых материалов может приводить к существенным ошибкам в расчётах энергетических характеристик. Наиболее заметные отклонения наблюдаются при описании оксидов переходных металлов, для которых характерны сильные электронные корреляции. В таких системах ошибки расчёта энергетических параметров могут достигать значений, способных существенно влиять на прогнозирование кинетики электрохимических процессов.

Согласно опубликованным данным, квантовые алгоритмы VQE и QPE обладают потенциалом для более точного описания электронной структуры многоэлектронных систем. При этом VQE рассматривается как один из наиболее перспективных алгоритмов для ранних этапов развития квантовых вычислений, поскольку его реализация допускает использование современных шумных квантовых устройств. Наиболее перспективным для ближайшей перспективы является алгоритм VQE, позволяющий выполнять расчёты на существующих квантовых устройствах класса NISQ. Алгоритм QPE обеспечивает более высокую точность, однако его практическая реализация связана с необходимостью использования отказоустойчивых квантовых компьютеров.

По результатам анализа литературных данных наибольший практический интерес для коррозионной науки представляют задачи расчёта электронной структуры защитных оксидных и сульфидных плёнок, моделирования элементарных электрохимических реакций, прогнозирования эффективности ингибиторов коррозии и исследования механизмов водородного охрупчивания. Для указанных направлений повышение точности расчёта энергетических характеристик рассматривается как важное условие получения более достоверных прогнозов.

Сравнение вычислительной сложности классических и квантовых методов расчёта электронной структуры в зависимости от размера системы представлено на рисунке 1.

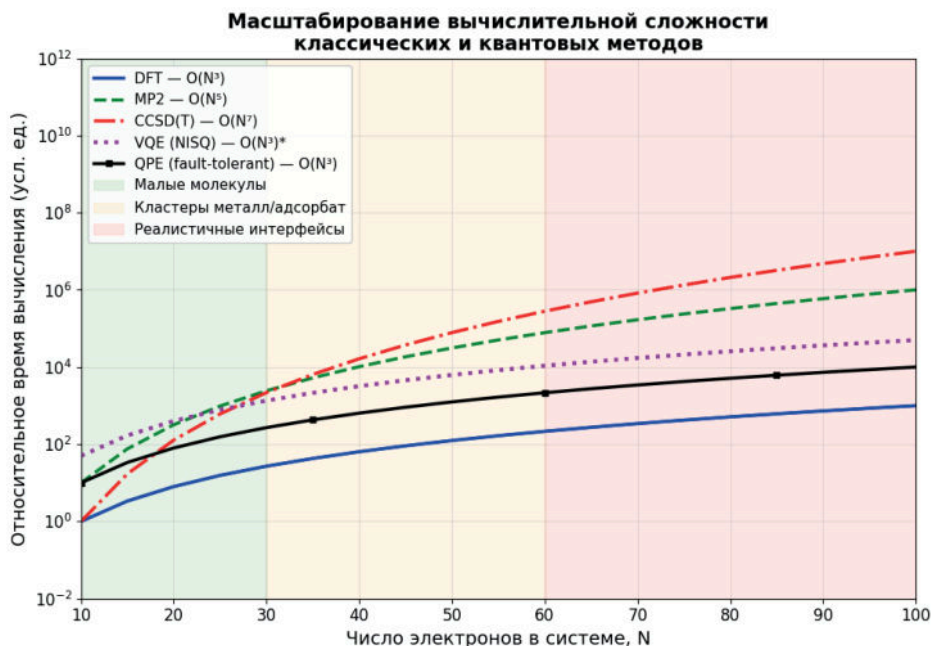


Рисунок 1. Сравнение вычислительной сложности классических и квантовых методов расчёта электронной структуры.

На полулогарифмическом графике показано масштабирование времени вычисления с числом электронов (N) для DFT ($O(N^3)$), MP2 ($O(N^5)$), CCSD(T) ($O(N^7)$), VQE на NISQ-устройствах и QPE на отказоустойчивых квантовых компьютерах. Цветовыми зонами выделены диапазоны размеров систем: малые молекулы (10-30 электронов), кластеры металл/адсорбат (30-60 электронов) и реалистичные коррозионные интерфейсы (60-100+ электронов). Рисунок иллюстрирует различия в характере масштабирования вычислительных затрат для рассматриваемых методов при увеличении числа электронов. Согласно приведённой оценке, рост размера системы приводит к значительно более быстрому увеличению вычислительной сложности высокоточных пост-хартри-фоковских методов по сравнению с DFT. Квантовые алгоритмы потенциально могут обеспечить преимущества при решении задач электронной структуры, однако их практическая эффективность зависит от количества доступных логических кубитов, точности квантовых операций, эффективности алгоритма и возможностей коррекции ошибок. Поэтому представленные зависимости следует рассматривать как качественную сравнительную иллюстрацию, а не как универсальные оценки вычислительной производительности.

Согласно выполненной оценке вычислительных ресурсов, решение задач моделирования простых адсорбционных процессов и отдельных электрохимических реакций потенциально может стать доступным на ранних этапах развития квантовых вычислительных технологий. Вместе с тем моделирование реалистичных интерфейсов металл/оксид/раствор, вероятно, потребует использования отказоустойчивых квантовых компьютеров с существенно большим числом логических кубитов.

Оценка вычислительных ресурсов для квантового моделирования коррозионных процессов приведена в таблице 1.

Таблица 1. Оценка вычислительных ресурсов для квантового моделирования коррозионных процессов.

Задача	Атомы	Активные орбитали	Логические кубиты	Горизонт
Адсорбция H_2S на кластере Fe	10-20	30-60	60-120	2025-2030
Барьер анодного растворения Fe	15-30	50-100	100-200	2028-2035
Электронная структура Cr_2O_3	20-50	80-200	160-400	2030-2038
Интерфейс Fe/FeS	50-100	200-500	400-1000	2035-2045
Реалистичный интерфейс металл/оксид/раствор	200-500	1000-2000	2000-4000	После 2040

С учётом необходимости коррекции ошибок количество физических кубитов может значительно превышать число логических кубитов; конкретное соотношение зависит от используемой архитектуры, схемы коррекции ошибок и характеристик аппаратной реализации (Lee et al., 2021). Для моделирования реалистичных коррозионных интерфейсов, вероятно, потребуются масштабируемые отказоустойчивые квантовые вычислительные системы с существенно большим

числом физических кубитов. Поэтому приведённые в настоящей работе временные горизонты следует рассматривать как ориентировочные сценарные оценки, зависящие от темпов развития квантового аппаратного обеспечения и методов коррекции ошибок (Babbush et al., 2021; Preskill, 2018). Результаты анализа также свидетельствуют о высокой перспективности гибридных квантово-классических подходов, позволяющих объединять преимущества существующих методов DFT и квантовых алгоритмов. Такие подходы рассматриваются как наиболее реалистичный путь внедрения квантовых вычислений в коррозионные исследования в ближайшие десятилетия.

Дорожная карта применения квантовых вычислений к моделированию коррозионных процессов представлена на рисунке 2.



Рисунок 2. Дорожная карта применения квантовых вычислений к моделированию коррозионных процессов.

Цветовые зоны выделяют три эры: NISQ (2024–2030), ранние отказоустойчивые квантовые компьютеры (2030–2040) и зрелые FTQC (после 2040). Рисунок представляет сценарную дорожную карту возможного развития применения квантовых вычислений в коррозионном моделировании. Период NISQ рассматривается как этап разработки и апробации гибридных квантово-классических методов, последующий этап связан с развитием отказоустойчивых квантовых вычислений, а дальнейшая перспектива — с возможным расширением масштаба моделируемых систем. Представленные временные интервалы являются ориентировочными и отражают возможные сценарии технологического развития, а не установленные сроки практического внедрения.

Энергетический профиль реакции анодного растворения железа: сравнение DFT и квантового расчёта (оценка) представлен на рисунке 3.

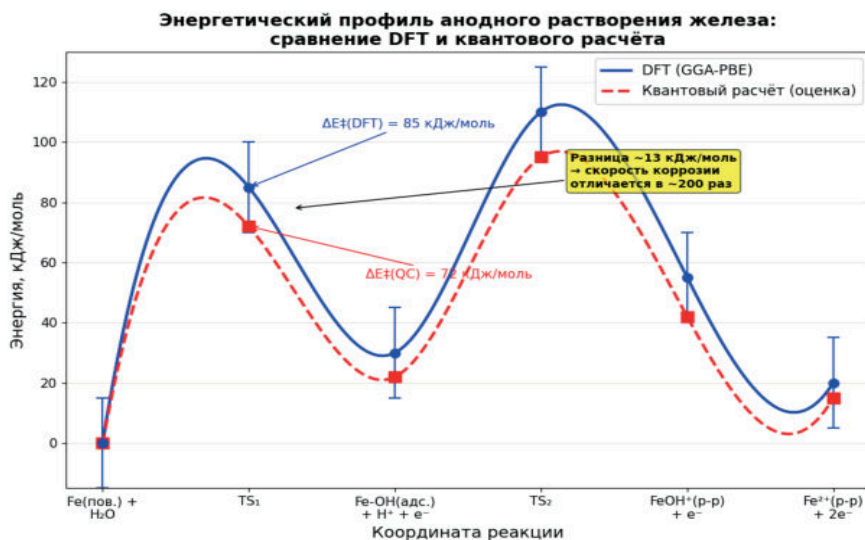
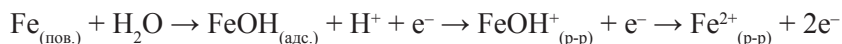


Рисунок 3. Энергетический профиль реакции анодного растворения железа: сравнение DFT и квантового расчёта (оценка).

На рисунке 3 показан энергетический профиль двухстадийной реакции растворения Fe в водной среде



Синяя линия - результат DFT (GGA-PBE), красная пунктирная линия - оценка на уровне квантового расчёта (аналог CCSD(T)). Полосы погрешностей для DFT (± 15 кДж/моль) отражают типичную неопределённость метода. Аннотацией показано, что разница в барьере первого переходного состояния ~ 13 кДж/моль приводит к различию в предсказанной скорости коррозии примерно в 200 раз (по уравнению Аррениуса при 25 °C), что демонстрирует критическую важность химической точности для коррозионного моделирования.

Ключевые реакции, для которых квантовая точность критически важна:

- анодное растворение Fe, Cr, Ni;
- катодное восстановление O_2 и H^+ ;
- уголекислотная коррозия ($\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} + \text{e}^-$);
- сероводородная коррозия ($\text{H}_2\text{S} + \text{Fe}(\text{пов.}) \rightarrow \text{FeS} + \text{H}_2$);
- адсорбция и восстановление Cl^- на поверхности пассивной плёнки.

Обсуждение. Проведенный анализ показывает, что квантовые вычисления могут расширить возможности теоретического исследования коррозионных процессов за счёт более точного описания электронной структуры сложных многоэлектронных систем. Практическое преимущество квантовых подходов заключается прежде всего в возможности моделирования систем, для которых применение высокоточных классических методов ограничивается

вычислительной сложностью. В коррозионной науке это имеет особое значение при исследовании защитных оксидных и сульфидных плёнок, элементарных электрохимических реакций и межфазных взаимодействий. Повышение точности расчёта электронных состояний и энергетических барьеров потенциально позволяет более достоверно оценивать механизмы протекания элементарных стадий коррозии, сравнивать устойчивость различных поверхностных состояний и прогнозировать эффективность защитных материалов и ингибиторов. При этом квантовые вычисления не следует рассматривать как непосредственную замену DFT и других классических методов: на современном этапе наиболее практичным является их совместное использование в рамках гибридных квантово-классических подходов.

Особое значение это имеет для моделирования защитных оксидных и сульфидных плёнок, определяющих коррозионную стойкость конструкционных материалов. Недостаточная точность традиционных методов расчёта электронной структуры может приводить к существенным отклонениям в прогнозировании механизмов формирования и разрушения пассивных слоёв. Использование квантовых вычислений создаёт предпосылки для получения более достоверных данных о свойствах таких материалов.

Перспективным направлением является применение квантовых вычислений для исследования элементарных электрохимических реакций на границе металл/раствор. Повышение точности расчёта энергетических барьеров может существенно улучшить прогнозирование скоростей коррозии и повысить надёжность разрабатываемых моделей коррозионного поведения материалов в различных средах.

Несмотря на значительный потенциал, практическое внедрение квантовых вычислений в коррозионную науку в настоящее время ограничивается уровнем развития аппаратного обеспечения. Большинство задач, представляющих непосредственный промышленный интерес, требуют вычислительных ресурсов, которые станут доступны лишь после создания масштабируемых отказоустойчивых квантовых компьютеров. В связи с этим наиболее перспективными в краткосрочной перспективе представляются гибридные квантово-классические методы, позволяющие постепенно интегрировать квантовые алгоритмы в существующие вычислительные схемы.

Таким образом, квантовые вычисления следует рассматривать не как замену традиционных методов моделирования, а как их дальнейшее развитие, способное обеспечить новый уровень точности при исследовании коррозионных процессов и разработке эффективных методов противокоррозионной защиты материалов.

Заключение. В работе проведён анализ возможностей применения квантовых вычислений для моделирования коррозионных процессов и оценки их перспектив в задачах коррозионной науки. Показано, что фундаментальные ограничения классических вычислительных методов, прежде всего теории функционала плотности и пост-хартри-фоковских подходов, затрудняют точное описание электронных свойств сложных коррозионно-значимых систем, включая оксидные

и сульфидные плёнки переходных металлов, межфазные границы и процессы переноса заряда.

По результатам анализа научной литературы показано, что квантовые алгоритмы, такие как вариационный квантовый солвер собственных значений (VQE), квантовая оценка фазы (QPE) и гибридные методы вложения, рассматриваются как перспективные инструменты для повышения точности расчётов электронной структуры и энергетических характеристик коррозионных систем.

Согласно рассмотренным литературным данным, в краткосрочной перспективе наибольший практический интерес могут представлять гибридные квантово-классические подходы, позволяющие сочетать возможности существующих методов вычислительного материаловедения с развивающимися квантовыми технологиями. Полномасштабное моделирование реалистичных коррозионных интерфейсов, вероятно, потребует дальнейшего развития отказоустойчивых квантовых вычислительных систем и увеличения доступного числа логических кубитов.

Таким образом, квантовые вычисления являются перспективным инструментом для решения фундаментальных и прикладных задач коррозионной науки. Их дальнейшее развитие может способствовать более глубокому пониманию механизмов коррозии и созданию новых подходов к прогнозированию долговечности материалов и разработке эффективных технологий противокоррозионной защиты.

References

- Anisimov V.I., Zaanen J., Andersen O.K. (1991). Band theory and Mott insulators: Hubbard U instead of Stoner I. *Physical Review B*. – Vol. 44 (3). – P. 943-954. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.44.943> (in Eng.).
- Babbush R., McClean J.R., Newman M., Wiebe N., Berry D.W., Neven H. (2021). Focus beyond quadratic speedups for error-corrected quantum advantage. *PRX Quantum*. – Vol. 2 (1). – P. 010103. <https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.2.010103> (in Eng.).
- Hafner J. (2008). Ab-initio simulations of materials using VASP: Density-functional theory and beyond. *Journal of Computational Chemistry*. – Vol. 29 (13). – P. 2044-2078. <https://doi.org/10.1002/jcc.21057> (in Eng.).
- Helgaker T., Jorgensen P., Olsen J. (2000). *Molecular electronic-structure theory*. Wiley. (in Eng.).
- Kitaev A.Y. (1996). Quantum measurements and the Abelian stabilizer problem. Report No. 96-003. *Electronic Colloquium on Computational Complexity*. (in Eng.).
- Kokalj A. (2021). DFT study of aqueous-phase adsorption of cysteine and penicillamine on Fe(110). *Applied Surface Science*. – Vol. 548. – P. 149274. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.149274> (in Eng.).
- Lee J., Berry D.W., Gidney C., Huggins W.J., McClean J.R., Wiebe N., Babbush R. (2021). Even more efficient quantum computations of chemistry through tensor hypercontraction. *PRX Quantum*. – Vol. 2 (3). – P. 030305. <https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.2.030305> (in Eng.).
- Lloyd S. (1996). Universal quantum simulators. *Science*. – Vol. 273 (5278). – P. 1073-1078. <https://doi.org/10.1126/science.273.5278.1073> (in Eng.).
- Marcus P. (Ed.). (2011). *Corrosion mechanisms in theory and practice*. 3rd ed. CRC Press. (in Eng.).
- McArdle S., Endo S., Aspuru-Guzik A., Benjamin S.C., Yuan X. (2020). Quantum computational chemistry. *Reviews of Modern Physics*. – Vol. 92 (1). – P. 015003. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.92.015003> (in Eng.).
- Nørskov J.K., Abild-Pedersen F., Studt F., Bligaard T. (2011). Density functional theory in surface chemistry and catalysis. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – Vol. 108 (3). – P. 937-943. <https://doi.org/10.1073/pnas.1006652108> (in Eng.).

Obot I.B., Macdonald D.D., Gasem Z.M. (2015). Density functional theory (DFT) as a powerful tool for designing new organic corrosion inhibitors. *Corrosion Science*. – Vol. 99. – P. 1-30. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2015.01.037> (in Eng.).

Peruzzo A., McClean J., Shadbolt P., Veitch D., Ferrie C., Peacock A.C., Barnes T., Kieling K., Rabeau J.R., O'Brien J.L. (2014). A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications*. – Vol. 5. – P. 4213. <https://doi.org/10.1038/ncomms5213> (in Eng.).

Preskill J. (2018). Quantum computing in the NISQ era and beyond. *Quantum*. – Vol. 2. – P. 79. <https://doi.org/10.22331/q-2018-08-06-79> (in Eng.).

Reiher M., Wiebe N., Svore K.M., Wecker D., Troyer M. (2017). Elucidating reaction mechanisms on quantum computers. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – Vol. 114 (29). – P. 7555-7560. <https://doi.org/10.1073/pnas.1619152114> (in Eng.).

Revie R.W., Uhlig H.H. (2008). *Corrosion and corrosion control: An introduction to corrosion science and engineering*. 4th ed. Wiley. (in Eng.).

Rickard D., Luther G.W. (2007). Chemistry of iron sulfides. *Chemical Reviews*. – Vol. 107 (2). – P. 514-562. <https://doi.org/10.1021/cr0503658> (in Eng.).

Rossmannek M., Barkoutsos P.K., Ollitrault P.J., Tavernelli I. (2021). Quantum HF/DFT-embedding algorithms for electronic structure calculations. *The Journal of Chemical Physics*. – Vol. 154 (11). – P. 114105. <https://doi.org/10.1063/5.0044687> (in Eng.).

Taylor C.D. (2012). Atomistic modeling of corrosion events at the interface between a metal and its environment. *International Journal of Corrosion*. – Vol. 2012. – Article 204640. (in Eng.).

Wang L., Maxisch T., Ceder G. (2006). Oxidation energies of transition metal oxides within the GGA+U framework. *Physical Review B*. – Vol. 73 (19). – P. 195107. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.195107> (in Eng.).

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: September 29, 2026
Format: 70×90 1/16. 34.5 printed sheets. Order No. 3.

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