

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

2024 • 1



ҚАЙЫРЫМДЫЛЫҚ ҚОРЫ

HALYK

CHARITY FOUNDATION

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

БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ

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

REPORTS

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

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK



ЧФ «ХАЛЫҚ»

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

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

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

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

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

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

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

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

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

БАС РЕДАКТОР:

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

РЕДАКЦИЈАЛЫҚ АЛҚА:

РАМАЗАНОВ Тілекқабил Сәбитұлы, (бас редактордың орынбасары), физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), Н = 26

РАМАНҚҰЛОВ Ерлан Мирхайдарұлы, (бас редактордың орынбасары), профессор, ҚР ҰҒА корреспондент-мүшесі, Ph.D биохимия және молекулалық генетика саласы бойынша Ұлттық биотехнология орталығының бас директоры (Нұр-Сұлтан, Қазақстан), Н = 23

САНГ-СУ Квак, Ph.D (биохимия, агрохимия), профессор, Корей биоғылым және биотехнология ғылыми-зерттеу институты (KRIBB), өсімдіктердің инженерлік жүйелері ғылыми-зерттеу орталығының бас ғылыми қызметкері, (Дэчон, Корея), Н = 34

БЕРСІМБАЕВ Рахметқажы Ескендірұлы, биология ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Еуразия ұлттық университеті. Л.Н. Гумилев (Нұр-Сұлтан, Қазақстан), Н = 12

ӘБИЕВ Руфат, техника ғылымдарының докторы (биохимия), профессор, Санкт-Петербург мемлекеттік технологиялық институты «Химиялық және биотехнологиялық аппаратураны онтайландыру» кафедрасының меңгерушісі, (Санкт-Петербург, Ресей), Н = 14

ЛЮКШИН Вячеслав Нотанович, медицина ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, «PERSONA» халықаралық клиникалық репродуктология орталығының директоры (Алматы, Қазақстан), Н = 8

СЕМЕНОВ Владимир Григорьевич, биология ғылымдарының докторы, профессор, Чуваш республикасының еңбек сіңірген ғылым қайраткері, «Чуваш мемлекеттік аграрлық университеті» Федералдық мемлекеттік бюджеттік жоғары білім беру мекемесі Акушерлік және терапия кафедрасының меңгерушісі, (Чебоксары, Ресей), Н = 23

ФАРУК Асана Дар, Хамдар аль-Маджида Хамдар университетінің шығыс медицина факультеті, Шығыс медицинасы колледжінің профессоры, (Карачи, Пәкістан), Н = 21

ЩЕПЕТКИН Игорь Александрович, медицина ғылымдарының докторы, Монтана штаты университетінің профессоры (Монтана, АҚШ), Н = 27

КАЛАНДРА Пьетро, PhD (физика), нанокұрылымды материалдарды зерттеу институтының профессоры (Рим, Италия), Н = 26

МАЛЫМ Анна, фармацевтика ғылымдарының докторы, профессор, Люблин медицина университетінің фармацевтика факультетінің деканы (Люблин, Польша), Н = 22

БАЙМҰҚАНОВ Дастан Асылбекұлы, ауыл шаруашылығы ғылымдарының докторы, ҚР ҰҒА корреспондент мүшесі, "Мал шаруашылығы және ветеринария ғылыми-өндірістік орталығы" ЖШС мал шаруашылығы және ветеринарлық медицина департаментінің бас ғылыми қызметкері (Нұр-Сұлтан, Қазақстан), Н = 1

ТИГИНИАНУ Ион Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, академик, Молдова Ғылым Академиясының президенті, Молдова техникалық университеті (Кишинев, Молдова), Н = 42

КАЛИМОЛДАЕВ Мақсат Нұрәліұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі (Алматы, Қазақстан), Н = 7

БОШКАЕВ Қуантай Авғазыұлы, Ph.D. Теориялық және ядролық физика кафедрасының доценті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 10

QUEVEDO Nemando, профессор, Ядролық ғылымдар институты (Мехико, Мексика), Н = 28

ЖУСНОВ Марат Абжанұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, теориялық және ядролық физика кафедрасының профессоры, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 7

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, физика-математика ғылымдарының докторы, Украина ҰҒА академигі, Қолданбалы математика және механика институты (Донецк, Украина), Н = 5

ТАКИБАЕВ Нұрғали Жабағаұлы, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 5

ХАРИН Станислав Николаевич, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Қазақстан-Британ техникалық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 10

ДАВЛЕТОВ Асқар Ербуланович, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті (Алматы, Қазақстан), Н = 12

«Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясының баяндамалары»

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

Меншіктеуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» Республикалық қоғамдық бірлестігі (Алматы қ.). Қазақстан Республикасының Ақпарат және қоғамдық даму министрлігінің Ақпарат комитетінде 29.07.2020 ж. берілген № КЗ93VPY00025418 мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы куәлік.

Тақырыптық бағыты: *өсімдік шаруашылығы, экология және медицина саласындағы биотехнология және физика ғылымдары.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет. Тиражы: 300 дана.

Редакцияның мекен-жайы: 050010, Алматы қ., Шевченко көш., 28; 219 бөл.; тел.: 272-13-19

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

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР:

БЕНБЕРИН Валерий Васильевич, доктор медицинских наук, профессор, академик НАН РК, директор Медицинского центра Управления делами Президента Республики Казахстан (Алматы, Казахстан), Н = 11

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

РАМАЗАНОВ Тлеккабул Сабитович, (заместитель главного редактора), доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), Н = 26

РАМАНКУЛОВ Ерлан Мирхайдарвич, (заместитель главного редактора), профессор, член-корреспондент НАН РК, Ph.D в области биохимии и молекулярной генетики, Генеральный директор Национального центра биотехнологии (Нур-Султан, Казахстан), Н = 23

САНГ-СУ Квак, доктор философии (Ph.D, биохимия, агрохимия), профессор, главный научный сотрудник, Научно-исследовательский центр инженерных систем растений, Корейский научно-исследовательский институт бионауки и биотехнологии (KRIBB), (Дэчон, Корея), Н = 34

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

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

ЛЮКШИН Вячеслав Нотанович, доктор медицинских наук, профессор, академик НАН РК, директор Международного клинического центра репродуктологии «PERSONA» (Алматы, Казахстан), Н = 8

СЕМЕНОВ Владимир Григорьевич, доктор биологических наук, профессор, заслуженный деятель науки Чувашской Республики, заведующий кафедрой морфологии, акушерства и терапии, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Чувашский государственный аграрный университет» (Чебоксары, Чувашская Республика, Россия), Н = 23

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

ЦЕПЕТКИН Игорь Александрович, доктор медицинских наук, профессор Университета штата Монтана (США), Н = 27

КАЛАНДРА Пьетро, доктор философии (Ph.D, физика), профессор Института по изучению наноструктурированных материалов (Рим, Италия), Н = 26

МАЛЫМ Анна, доктор фармацевтических наук, профессор, декан фармацевтического факультета Люблинского медицинского университета (Люблин, Польша), Н = 22

БАЙМУКАНОВ Дастанбек Асылбекович, доктор сельскохозяйственных наук, член-корреспондент НАН РК, главный научный сотрудник Департамента животноводства и ветеринарии (Нур-Султан, Казахстан), Н = 1

ТИГИНЯНУ Ион Михайлович, доктор физико-математических наук, академик, президент Академии наук Молдовы, Технический университет Молдовы (Кишинев, Молдова), Н = 42

КАЛИМОЛДАЕВ Максат Нурадилович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК (Алматы, Казахстан), Н = 7

БОШКАЕВ Куантай Авгазыевич, доктор Ph.D, преподаватель, доцент кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), Н = 10

QUEVEDO Hemando, профессор, Национальный автономный университет Мексики (UNAM), Институт ядерных наук (Мехико, Мексика), Н = 28

ЖУСУПОВ Марат Абжанович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и ядерной физики, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), Н = 7

КОВАЛЕВ Александр Михайлович, доктор физико-математических наук, академик НАН Украины, Институт прикладной математики и механики (Донецк, Украина), Н = 5

ТАКИБАЕВ Нургали Жаббаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), Н = 5

ХАРИН Станислав Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахстанско-Британский технический университет (Алматы, Казахстан), Н = 10

ДАВЛЕТОВ Аскар Ербуланович, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахский национальный университет им. аль-Фараби (Алматы, Казахстан), Н = 12

Доклады Национальной академии наук Республики Казахстан

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

Собственник: Республиканское общественное объединение «Национальная академия наук Республики Казахстан» (г. Алматы). Свидетельство о постановке на учет периодического печатного издания в Комитете информации Министерства информации и общественного развития Республики Казахстан № **KZ93VPY00025418**, выданное 29.07.2020 г.

Тематическая направленность: *биотехнология в области растениеводства, экологии, медицины и физические науки.*

Периодичность: 4 раз в год. Тираж: 300 экземпляров

Адрес редакции: 050010, г. Алматы, ул. Шевченко, 28; ком. 219; тел. 272-13-19

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

EDITOR IN CHIEF:

BENBERIN Valery Vasilievich, Doctor of Medicine, Professor, Academician of NAS RK, Director of the Medical Center of the Presidential Property Management Department of the Republic of Kazakhstan (Almaty, Kazakhstan), H = 11

EDITORIAL BOARD:

RAMAZANOV Tlekkabul Sabitovich, (Deputy Editor-in-Chief), Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), H = 26

RAMANKULOV Erlan Mirkhaidarovich, (Deputy Editor-in-Chief), Professor, Corresponding Member of NAS RK, Ph.D in the field of biochemistry and molecular genetics, General Director of the National Center for Biotechnology (Nur-Sultan, Kazakhstan), H = 23

SANG-SOO Kwak, PhD in Biochemistry, Agrochemistry, Professor, Chief Researcher, Plant Engineering Systems Research Center, Korea Research Institute of Bioscience and Biotechnology (KRIBB), (Daecheon, Korea), H = 34

BERSIMBAEV Rakhmetkazhi Iskendirovich, Doctor of Biological Sciences, Professor, Academician of NAS RK, L.N. Gumilyov Eurasian National University (Nur-Sultan, Kazakhstan), H = 12

ABIYEV Rufat, Doctor of Technical Sciences (Biochemistry), Professor, Head of the Department of Optimization of Chemical and Biotechnological Equipment, St. Petersburg State Technological Institute (St. Petersburg, Russia), H = 14

LOKSHIN Vyacheslav Notanovich, Professor, Academician of NAS RK, Director of the PERSONA International Clinical Center for Reproductology (Almaty, Kazakhstan), H = 8

SEMENOV Vladimir Grigorievich, Doctor of Biological Sciences, Professor, Honored Scientist of the Chuvash Republic, Head of the Department of Morphology, Obstetrics and Therapy, Chuvash State Agrarian University (Cheboksary, Chuvash Republic, Russia), H = 23

PHARUK Asana Dar, professor at Hamdard al-Majid College of Oriental Medicine. Faculty of Oriental Medicine, Hamdard University (Karachi, Pakistan), H = 21

TSHEPETKIN Igor Aleksandrovich, Doctor of Medical Sciences, Professor at the University of Montana (Montana, USA), H = 27

CALANDRA Pietro, PhD in Physics, Professor at the Institute of Nanostructured Materials (Monterotondo Station Rome, Italy), H = 26

MALM Anna, Doctor of Pharmacy, Professor, Dean of the Faculty of Pharmacy, Lublin Medical University (Lublin, Poland), H = 22

BAIMUKANOV Dastanbek Asylbekovich, Doctor of Agricultural Sciences, Corresponding Member of the NAS RK, Chief Researcher of the department of animal husbandry and veterinary medicine, Research and Production Center for Livestock and Veterinary Medicine Limited Liability Company (Nur-Sultan, Kazakhstan), H=1

TIGHINEANU Ion Mikhailovich, Doctor in Physics and Mathematics, Academician, Full Member of the Academy of Sciences of Moldova, President of the AS of Moldova, Technical University of Moldova (Chisinau, Moldova), H = 42

KALIMOLDAYEV Maksat Nuradilovich, doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), H = 7

BOSHKAYEV Kuantai Avgazievich, PhD, Lecturer, Associate Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), H = 10

QUEVEDO Hemando, Professor, National Autonomous University of Mexico (UNAM), Institute of Nuclear Sciences (Mexico City, Mexico), H = 28

ZHUSSUPOV Marat Abzhanovich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor of the Department of Theoretical and Nuclear Physics, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), H = 7

KOVALEV Alexander Mikhailovich, Doctor in Physics and Mathematics, Academician of NAS of Ukraine, Director of the State Institution «Institute of Applied Mathematics and Mechanics» DPR (Donetsk, Ukraine), H = 5

TAKIBAYEV Nurgali Zhabagaevich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), H = 5

KHARIN Stanislav Nikolayevich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, Kazakh-British Technical University (Almaty, Kazakhstan), H = 10

DAVLETOV Askar Erbulanovich, Doctor in Physics and Mathematics, Professor, Academician of NAS RK, al-Farabi Kazakh National University (Almaty, Kazakhstan), H = 12

Reports of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

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

Owner: RPA «National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan» (Almaty). The certificate of registration of a periodical printed publication in the Committee of information of the Ministry of Information and Social Development of the Republic of Kazakhstan No. **KZ93VPY00025418**, issued 29.07.2020.

Thematic scope: *biotechnology in the field of crop research, ecology and medicine and physical sciences.*

Periodicity: 4 times a year. Circulation: 300 copies.

Editorial address: 28, Shevchenko str., of. 219, Almaty, 050010, tel. 272-13-19

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

PHYSICAL SCIENCES

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 7–15

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.253>

© **Zh.S. Baiymbetova^{1*}, N.A. Sandibaeva¹, E.A. Sklyarova²,
N.Zh. Akhmetova¹, 2024**

¹Kazakh National Women's Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan;

²Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia.

E-mail: jaudir.93@mail.ru

THE SECONDARY SCHOOL PHYSICS LEARNING MANAGEMENT SYSTEM (LMS): LITERATURE REVIEW

Baiymbetova Zh.S. — 3rd year doctoral student, Kazakh National Women's Pedagogical University, 050000, Almaty, Kazakhstan

E-mail: jaudir.93@mail.ru. ORCID:0000-0002-3435-5489;

Sandibayeva N.A. — k.p.s., associate Professor, Tomsk Polytechnic University, Russia

E-mail: nazirasandibaeva@gmail.com. ORCID:0000-0002-0283-0273;

Sklyarova E.A. — k.p.s., Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Republic of Russia

E-mail: skea@tpu.ru. ORCID:0000-0003-4401-356X;

Akhmetova N.Zh. — 2nd year doctoral student, Kazakh National Women's Pedagogical University, 050000, Almaty, Kazakhstan

E-mail: nazko86@mail.ru. ORCID:0000-0001-5306-927X.

Abstract. This review centers its attention on the utilization of learning management systems (LMS) in the domain of school physics. Within this particular context, LMS function as central hubs that effectively organize various resources, assignments, and communication channels in order to streamline the overall physics learning experience. In the present-day educational landscape, LMS assume a crucial role in fostering dynamic and interactive teaching environments. Given the increasing emphasis on technology-enhanced learning, it becomes imperative to comprehend the specific implications of LMS in the realm of physics education. The objective of this review is to clarify the multifaceted role of LMS by exploring its theoretical foundations, pedagogical applications, and impact on student outcomes within the domain of physics education.

Keywords: LMS, secondary school, physics

© Ж.С. Байымбетова^{1*}, Н.А. Сандибаева¹, Е.А. Склярова²,
Н.Ж. Ахметова¹, 2024

¹Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан;

²Томск политехникалық университеті, Томск, Ресей.

E-mail: jaudir.93@mail.ru

ОРТА МЕКТЕП ФИЗИКА ПӘНІН ОҚЫТУДЫ БАСҚАРУ ЖҮЙЕСІ: ӘДЕБИЕТТЕРГЕ ШОЛУ

Байымбетова Ж.С. — 3 курс докторанты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, 050000, Алматы, Қазақстан

E-mail: jaudir.93@mail.ru. ORCID:0000-0002-3435-5489;

Сандибаева Н.А. — п.ғ.к., доцент, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, 050000, Алматы, Қазақстан

E-mail: nazirasandibaeva@gmail.com. ORCID:0000-0002-0283-0273;

Склярова Е.А. — п.ғ.к., Томск политехникалық университеті, Томск, Ресей Республикасы

E-mail: skea@tpu.ru. ORCID:0000-0003-4401-356X;

Ахметова Н.Ж. — 3 курс докторанты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, 050000, Алматы, Қазақстан

E-mail: nazko86@mail.ru. ORCID:0000-0001-5306-927X.

Аннотация. Бұл мақалада орта мектеп физикасын оқытуда оқытуды басқару жүйелерін пайдалануға назар аударады. Оқытуды басқару жүйесі жалпы физиканы оқыту тәжірибесін оңтайландыру үшін әртүрлі ресурстарды, тапсырмаларды және байланыс арналарын тиімді ұйымдастыратын орталық ретінде жұмыс істейді. Қазіргі білім беру ландшафтында оқытуды басқару жүйесінің динамикалық және интерактивті оқыту орталарын дамытуда шешуші рөл атқарады. Ақпараттық технологиялар арқылы жетілдірілген оқытуға баса назар аударылатынын ескере отырып, орта мектеп физикасының білім беру саласындағы оқытуды басқару жүйесінің нақты салдарын түсіну өте қажет. Бұл шолудың мақсаты оның теориялық негіздерін, педагогикалық қолдануларын және физика пәнін оқыту аясындағы оқушылардың нәтижелеріне әсерін зерттеу арқылы оқытуды басқару жүйесінің көп қырлы рөлін түсіндіру болып табылады.

Түйін сөздер: оқытуды басқару жүйесі, орта мектеп, физика

© Ж.С. Байымбетова^{1*}, Н.А. Сандибаева¹, Е.А. Склярова²,
Н.Ж. Ахметова¹, 2024

¹Казахский национальный женский педагогический университет,
Алматы, Казахстан;

²Томский политехнический университет, Томск, Россия.
E-mail: jaudir.93@mail.ru

СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ОБУЧЕНИЕМ ФИЗИКОЙ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ: ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

Байымбетова Ж.С. — докторант, Казахский национальный женский педагогический университет, 050000, Алматы, Казахстан

E-mail: jaudir.93@mail.ru. ORCID:0000-0002-3435-5489;

Сандибаева Н.А. — к.п.н., доцент, Казахский национальный женский педагогический университет, 050000, Алматы, Казахстан

E-mail: nazirasandibaeva@gmail.com. ORCID:0000-0002-0283-0273;

Склярова Е.А. — к.п.н., Томский политехнический университет, Томск, Россия

E-mail: skea@tpu.ru. ORCID:0000-0003-4401-356X;

Ахметова Н.Ж. — докторант, Казахский национальный женский педагогический университет, 050000, Алматы, Казахстан

E-mail: nazko86@mail.ru. ORCID:0000-0001-5306-927X.

Аннотация. Основное внимание в статье уделяется использованию систем управления обучением в области школьной физики. Системы управления обучением функционируют как центральные узлы, которые эффективно организуют различные ресурсы, задачи и каналы связи для оптимизации общего опыта обучения физике. В современном образовательном пространстве системы управления обучением играют ключевую роль в разработке динамичной и интерактивной среды обучения. Учитывая акцент на обучении с использованием информационных технологий, крайне важно понимать конкретные последствия системы управления обучением для школьного физического образования. Целью данной статьи является объяснение многогранной роли систем управления обучением путем изучения ее теоретических основ, педагогических приложений и влияния на результаты учащихся в физическом образовании.

Ключевые слова: система управления образованием, средняя школа, физика

Introduction

The introduction sets the stage by addressing the convergence of Learning Management Systems (LMS) and school physics. LMS, digital platforms facilitating educational content delivery and management, have become integral in modern education. This review focuses on their application within the realm of school physics. LMS in this context act as centralized hubs, organizing resources, assignments, and communication channels to streamline the physics

learning experience. In the contemporary educational landscape, LMS plays a pivotal role in fostering dynamic and interactive teaching environments. With the growing emphasis on technology-enhanced learning, understanding the specific implications of LMS in physics education becomes imperative. The review aims to elucidate the multifaceted role of LMS, exploring its theoretical underpinnings, pedagogical applications, and impact on student outcomes in the realm of physics education. By critically examining existing literature, this review seeks to provide educators, researchers, and policymakers with insights into the current state of LMS integration in school physics and offer directions for future advancements. As educational paradigms continue to evolve, the investigation into the interplay between LMS and physics education emerges as a crucial avenue for enhancing teaching methodologies and student engagement.

Historical Background of LMS in Education

The historical background of Learning Management Systems (LMS) unfolds a transformative journey in education technology. According to Turnbull et al., (2020), the roots of LMS can be traced back to the late 20th century when the emergence of computer-based learning paved the way for early forms of educational technology. In the 1990s, rudimentary course management systems laid the foundation for what would later evolve into comprehensive LMS (Fatmi et al., 2021). The early adoption of LMS in educational settings gained momentum in the early 2000s. Institutions recognized the potential of these systems to organize and deliver educational content efficiently. The shift towards online and blended learning models further propelled the integration of LMS. The 2000s witnessed the development of open-source LMS, democratizing access to these platforms and allowing customization to suit diverse educational needs (Gupta et al., 2021).

Key milestones in LMS evolution include the advent of Moodle in 2002, which popularized open-source learning platforms. The mid-2000s marked the rise of commercial LMS like Blackboard and Canvas, offering feature-rich solutions for educational institutions. Technological advancements, such as the incorporation of multimedia elements, mobile compatibility, and adaptive learning algorithms, have continually enhanced the functionality and accessibility of LMS (Nazhifah & Fathuroman, 2023). The evolution of LMS mirrors the broader technological shifts in education, transitioning from traditional classroom models to more flexible, technology-driven learning environments. As institutions increasingly recognize the need for scalable and user-friendly solutions, the historical trajectory of LMS reveals a continuous quest for innovative approaches to educational delivery and management (Kpolovie & Lale, 2017) Understanding this evolution is crucial for contextualizing the current landscape of LMS in school physics education.

Theoretical Frameworks in LMS and Physics Education

The integration of Learning Management Systems (LMS) in physics education is underpinned by various theoretical frameworks that guide its implementation and effectiveness. One prominent framework is the Constructivist Learning Theory, emphasizing active engagement and collaboration. In the context of LMS, this

theory aligns with the idea that students construct knowledge by interacting with digital content, participating in online discussions, and engaging in collaborative projects (Kibuku, 2021). LMS platforms provide tools for fostering such interactive and participatory learning experiences in physics. Connectivism is another relevant theoretical framework, emphasizing the role of networks and digital connections in learning. LMS, by facilitating online discussions, resource sharing, and collaborative projects, aligns with the principles of connectivism, providing a platform for students to navigate and create knowledge networks in the realm of physics (Kibuku, 2021).

Additionally, the Community of Inquiry framework, which focuses on the intersection of teaching, social, and cognitive presence, is pertinent to LMS integration. LMS platforms enable educators to establish a virtual community where students can actively engage with course content, peers, and instructors, fostering a supportive learning environment. According to Assar, (2015) these theoretical frameworks collectively contribute to effective teaching and learning in physics by promoting active engagement, collaborative learning, and the creation of meaningful connections between students, content, and instructors. Understanding and applying these frameworks in the context of LMS usage in physics education can enhance instructional design and optimize the overall learning experience for students (Assar, 2015).

Key Features and Components of LMS in Physics Education

Learning Management Systems (LMS) tailored for physics education incorporate key features that significantly impact the teaching and learning experience. One essential feature is content management, allowing educators to organize and deliver physics-specific materials such as simulations, videos, and interactive modules. This feature facilitates a structured presentation of curriculum content, ensuring easy access for both teachers and students (Bradley, 2021). Assessment tools within LMS play a vital role in gauging students' understanding of physics concepts. These tools can include quizzes, assignments, and discussion forums tailored to physics topics. Immediate feedback provided by LMS assessments aids in reinforcing learning and identifying areas that require further clarification.

Bergin et al., (2018) puts it forward that, collaboration features, including discussion forums and group projects, foster peer interaction and knowledge exchange. In physics education, collaborative learning can enhance problem-solving skills and deepen conceptual understanding through shared exploration. Integration with multimedia elements, such as virtual labs and simulations, is crucial in LMS platforms for physics. These features provide students with interactive experiences, allowing them to experiment with theoretical concepts in a virtual environment, reinforcing understanding and practical application. Furthermore, tracking and analytics tools enable educators to monitor students' progress and engagement in real-time. This feature allows for personalized interventions, ensuring that students receive timely support and guidance based on their individual needs. The integration of these features in LMS for physics education enhances the teaching and learning

experience by providing a structured and interactive platform (Weaver et al., 2018). It facilitates personalized learning, promotes collaborative engagement, and offers opportunities for practical application of theoretical concepts, contributing to a more comprehensive and effective physics education.

Pedagogical Approaches and Strategies with LMS in Physics Education

Learning Management Systems (LMS) tailored for physics education incorporate key features that significantly impact the teaching and learning experience. One essential feature is content management, allowing educators to organize and deliver physics-specific materials such as simulations, videos, and interactive modules (Singh, 2018). This feature facilitates a structured presentation of curriculum content, ensuring easy access for both teachers and students. Assessment tools within LMS play a vital role in gauging students' understanding of physics concepts. These tools can include quizzes, assignments, and discussion forums tailored to physics topics. Immediate feedback provided by LMS assessments aids in reinforcing learning and identifying areas that require further clarification (Hadyaoui & Cheniti-Belcadhi, 2023).

Collaboration features, including discussion forums and group projects, foster peer interaction and knowledge exchange. In physics education, collaborative learning can enhance problem-solving skills and deepen conceptual understanding through shared exploration. Integration with multimedia elements, such as virtual labs and simulations, is crucial in LMS platforms for physics. These features provide students with interactive experiences, allowing them to experiment with theoretical concepts in a virtual environment, reinforcing understanding and practical application. Furthermore, tracking and analytics tools enable educators to monitor students' progress and engagement in real-time. This feature allows for personalized interventions, ensuring that students receive timely support and guidance based on their individual needs (Baron & Bruillard, 2003). The integration of these features in LMS for physics education enhances the teaching and learning experience by providing a structured and interactive platform. It facilitates personalized learning, promotes collaborative engagement, and offers opportunities for practical application of theoretical concepts, contributing to a more comprehensive and effective physics education.

Case Studies and Best Practices

Numerous case studies underscore the successful integration of Learning Management Systems (LMS) in physics education. According to Schoppers, (2018) the Massachusetts Institute of Technology's (MIT) OpenCourseWare initiative serves as a pioneering example. By utilizing LMS to offer a plethora of physics courses online, MIT broadens access to quality education globally. Best practices from MIT's initiative include a well-organized LMS platform providing multimedia content, interactive simulations, and community forums, fostering collaborative learning. Similarly, the University of British Columbia's implementation of LMS in their physics curriculum exemplifies effective use. By incorporating real-time data visualization tools into the LMS, students engage in dynamic, hands-on

experiences, reinforcing theoretical concepts (Kennepohl, 2023). Best practices here involve leveraging LMS for interactive learning experiences and ensuring seamless integration with data-driven resources. Lessons learned from these case studies emphasize the importance of user-friendly interfaces, comprehensive resource databases, and clear navigation within LMS platforms. Additionally, fostering a sense of community through discussion forums and collaborative projects enhances student engagement and success.

Challenges and Barriers in Implementing LMS in Physics Education

Despite the evident benefits, integrating LMS into physics education faces challenges. Limited technological infrastructure, particularly in resource-constrained schools, poses a significant barrier (Barakabitze et al., 2019). Addressing this requires investment in technology and training for educators. Resistance to change among educators is another challenge. Some may be hesitant to embrace digital tools, fearing disruptions to traditional teaching methods. Providing comprehensive training programs, mentorship, and showcasing successful case studies can help overcome this resistance. Ensuring equitable access to LMS resources is a persistent challenge. Socioeconomic disparities can lead to unequal access to technology outside the classroom (Garcia et al., 2022). Solutions involve advocating for inclusivity, providing subsidized or loaned devices, and promoting community partnerships.

Impact on Student Learning Outcomes

Numerous studies demonstrate the positive impact of LMS on student learning outcomes in physics education. Research from Stanford University highlights increased student engagement and performance through the integration of LMS with personalized learning paths (Crosslin et al., 2018). Students accessing supplementary materials on the LMS platform exhibited improved conceptual understanding and problem-solving skills. A meta-analysis conducted by the Educational Technology Clearinghouse found that LMS integration correlated with increased student achievement across various subjects, including physics (Kuromiya et al., 2020). The analysis emphasized the importance of interactive features, personalized feedback, and collaborative tools within LMS for optimizing learning outcomes. Additionally, a longitudinal study conducted by the University of California, Berkeley, showcased that students exposed to LMS-driven interactive simulations exhibited sustained improvement in physics comprehension compared to traditional instruction methods. Generally the impact of LMS on student learning outcomes in physics education is substantial. Evidence from various studies underscores improvements in engagement, understanding, and performance. As technology continues to evolve, leveraging LMS in physics education emerges as a potent tool for enhancing educational outcomes and preparing students for a dynamic and technology-driven future.

Future Trends and Directions

The future of Learning Management Systems (LMS) in physics education is poised for exciting developments. Personalized learning, driven by adaptive learning

algorithms, is a prominent trend. LMS platforms are anticipated to dynamically tailor content based on individual student progress, ensuring a customized and efficient learning experience in physics. Furthermore, the integration of augmented reality (AR) and virtual reality (VR) within LMS holds tremendous potential (El Kabtane et al., 2020). Imagine students exploring complex physics concepts through immersive simulations or conducting virtual experiments. This trend is likely to revolutionize the way physics is taught, providing students with hands-on experiences in a virtual environment. Artificial intelligence (AI) is another frontier. LMS powered by AI can analyze student performance data to provide targeted interventions and personalized learning paths. Predictive analytics may enable educators to identify potential challenges early, enhancing support mechanisms and overall student success in physics education. In terms of research and development, investigating the impact of gamification within LMS in physics education remains an exciting prospect. Gamified elements can enhance engagement and motivation, turning the learning process into an interactive and enjoyable experience.

Conclusion

In summary, the literature review underscores the transformative role of Learning Management Systems (LMS) in shaping physics education. The historical evolution of LMS, theoretical frameworks guiding integration, key features enhancing teaching and learning, successful case studies, and challenges faced have been explored. The impact of LMS on student learning outcomes is evident through various studies, demonstrating its effectiveness in fostering engagement and comprehension in physics. Looking ahead, emerging trends such as personalized learning, AR/VR integration, and AI-driven analytics are set to redefine physics education through LMS. As we move into the future, research and development should focus on harnessing these trends to create more immersive, adaptive, and student-centered physics learning experiences. Emphasizing the significance of LMS in advancing physics education, it is clear that these platforms provide a transformative tool for educators and learners alike. Recommendations for future research include continuous exploration of innovative features, addressing challenges related to accessibility, and fostering collaborations between educators, technologists, and policymakers to ensure the effective integration of LMS in physics education. By embracing these advancements and continuously refining best practices, the educational landscape can leverage LMS to empower students and prepare them for the complexities of the physics discipline in the 21st century.

REFERENCES

- Assar S. (2015). Information and Communications Technology (ICT) and education.
- Barakabitze A.A., William-Andey Lazaro A., Ainea N., Mkwizu M.H., Maziku H., Matofali A.X. & Sanga C. (2019). Transforming African education systems in science, technology, engineering, and mathematics (STEM) using ICTs: Challenges and opportunities. — *Education Research International*, 2019, — 1–29. — <https://doi.org/10.1155/2019/6946809>
- Baron G.L. & Bruillard E. (2003). Information and communication technology: models of evaluation in France. — *Evaluation and program planning*, — 26(2), — 177–184.

Bergin S.D., Murphy C. & Shuilleabhain A.N. (2018). Exploring problem-based cooperative learning in undergraduate physics labs: student perspectives. — *European Journal of Physics*, — 39(2), — 025703. — DOI 10.1088/1361-6404/aa9585

Bradley V.M. (2021). Learning Management System (LMS) use with online instruction. — *International Journal of Technology in Education*, — 4(1), — 68–92. — ISSN: EISSN-2689–2758

El Kabtane H., El Adnani M., Sadgal M. & Mourdi Y. (2020). Virtual reality and augmented reality at the service of increasing interactivity in MOOCs. — *Education and Information Technologies*, — 25, — 2871–2897. — <https://doi.org/10.1007/s10639-019-10054-w>

Fatmi N., Muhammad I., Muliana M. & Nasrah S. (2021). The utilization of moodle-based learning management system (LMS) in learning mathematics and physics to students' cognitive learning outcomes. — *International Journal for Educational and Vocational Studies*, 3(2), — 155–162. — ISBN: 978-602-61045-0-2

Gupta P., Kulkarni T., Barot V. & Toksha B. (2021). Applications of ICT: Pathway to Outcome-Based Education in Engineering and Technology Curriculum. In *Technology and Tools in Engineering Education*. — Pp. 109–142. CRC Press.

Hadyaoui A. & Cheniti-Belcadhi L. (2023). Ontology-based group assessment analytics framework for performances prediction in project-based collaborative learning. *Smart Learning Environments*, — 10(1), — 43. — <https://doi.org/10.1186/s40561-023-00262-w>

Kennepohl D. (Ed.). (2023). *Teaching science online: Practical guidance for effective instruction and lab work*. Taylor & Francis.

Kibuku R.N. (2021). *An E-learning Theory for Interaction and Collaboration* (Doctoral dissertation, University of Nairobi). — <http://erepository.uonbi.ac.ke/handle/11295/155761>

Kpolovie P.J. & Lale N.E.S. (2017). Globalization and adaptation of university curriculum with LMSs in the changing world. — *European Journal of Computer Science and Information Technology*, — 5(2), — 28–89. — ISSN 2054-0957

Kuromiya H., Majumdar R. & Ogata H. (2020). Fostering evidence-based education with learning analytics. — *Educational Technology & Society*, — 23(4), — 14–29.

Nazhifah N. & Fathurohman A. (2023). Teachers' Perspectives on the Learning Management System (LMS) in Physics Subject: A Preliminary Study. — *Jurnal Ilmiah Pendidikan Fisika*, — 7(1), — 31–41. — <https://doi.org/10.20527/jjpf.v5i1.2718>

Schoppers P.A.C. (2018). *The Future of E-Learning in Higher Education: Using the scenario planning method to develop four scenarios on the futures of technology-enhanced higher education* (Master's thesis, University of Twente). — <https://purl.utwente.nl/essays/74962>

Singh M. (2018). Examining the use of a Personalized Learning Management System (PLMS) to Increase Student Engagement in High School Physics. — *Proceedings of the Canadian Engineering Education Association (CEEA)*. — <https://doi.org/10.24908/pceea.v0i0.13098>

Turnbull D., Chugh R. & Luck J. (2020). Learning Management Systems, An Overview. — *Encyclopedia of education and information technologies*, — 1052–1058. — <https://doi.org/10.17718/tojde.306552>

Weaver J.P., Chastain R.J., DeCaro D.A. & DeCaro M.S. (2018). Reverse the routine: Problem solving before instruction improves conceptual knowledge in undergraduate physics. — *Contemporary Educational Psychology*, — 52, — 36–47. — <https://doi.org/10.1016/j.cedpsych.2017.12.003>

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 16–30

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

UDC 549.3;

UDC 538.91

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

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

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

and alkyl spacers at the molecular level, elucidating the impact of these spacers on the photosensitive properties of WS₂. Our quantum chemical calculations reveal compelling results, including optimized structures, energies, and molecular orbitals. These findings strongly suggest that the addition of alkyl spacers induces a favorable modulation in the electronic structure of WS₂, thereby improving its photosensitive properties. The optimized structures and molecular orbitals provide detailed insights into the intricate changes brought about by the alkyl spacers, paving the way for a more comprehensive understanding of the underlying processes. As a significant outcome, the enhanced photosensitive properties of WS₂ nanosheets have profound implications for optoelectronic devices. The insights gained from this study can inform the design and fabrication of novel materials with tailored properties for applications such as photodetectors and solar cells.

Keywords: WS₂, nano sheets, alkyl spacer, photosensitive properties, PM6 methods, quantum calculations

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

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

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

АТОМДЫҚ ДЕҢГЕЙДЕ АЛКИЛ АРАЛЫҚТАРЫ АРҚЫЛЫ WS₂ НАНОПАРАҚТАРЫНЫҢ ФОТОСЕЗІМТАЛДЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН АРТТЫРУ

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

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

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

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

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

Аннотация. Ұсынылған мақалада атомдық деңгейде алкил аралықтарын стратегиялық біріктіру арқылы вольфрам дисульфидінің (WS₂) нанопарақтарындағы фотосезімталдық сипаттамаларының жоғарылауын зерт-

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

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

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

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

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

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Introduction

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

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

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

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

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

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

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

Methods and materials

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

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

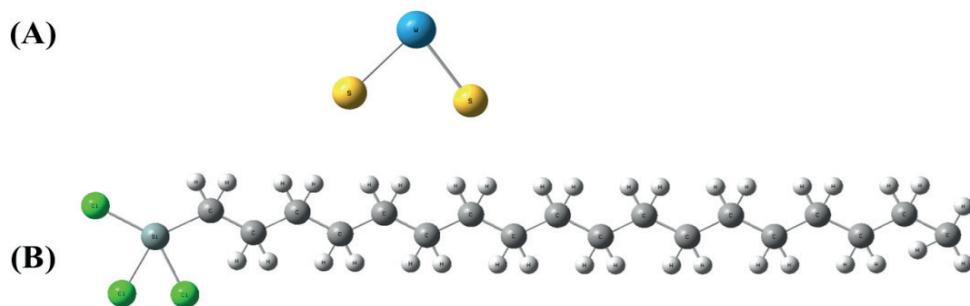


Fig 1. The 2D chemical structures.

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

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

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

Table 1 – The designed simulation system for study

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

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

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

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

Results and Discussions

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

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

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

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

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

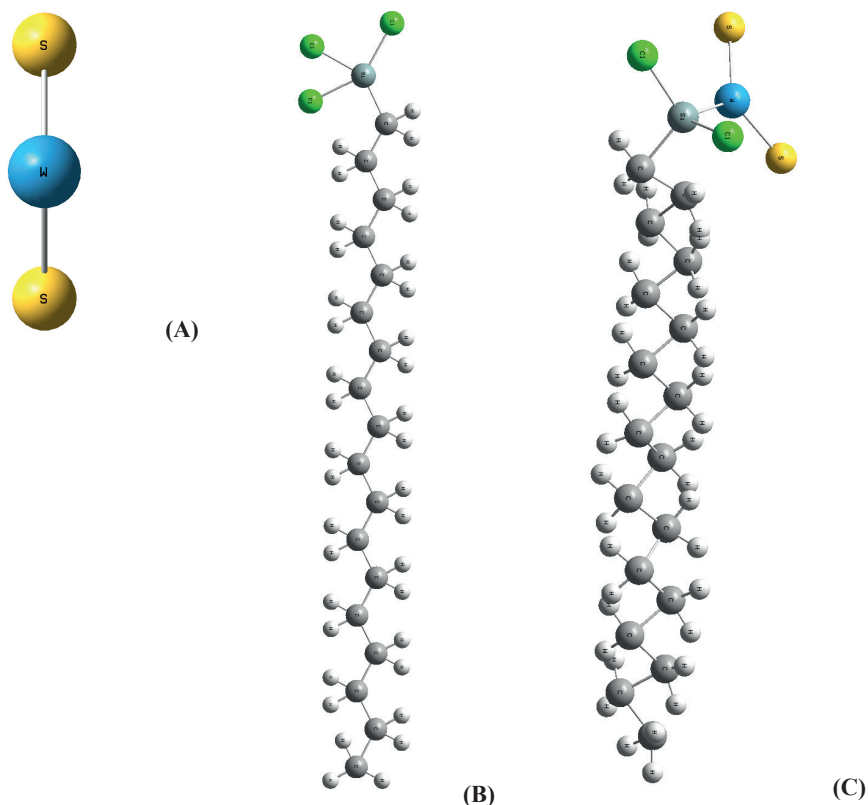


Fig 2. Optimized structures for (A) WS_2 , (B) octadecyltrichlorosilane, (C) WS_2 with octadecyltrichlorosilane.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

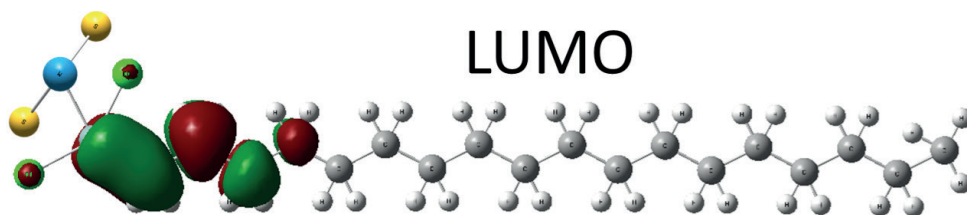
In summary, this work provides valuable insights into the atomistic modifications of WS_2 nanosheets using alkyl spacers. The combination of quantitative energy

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

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

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

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



HOMO

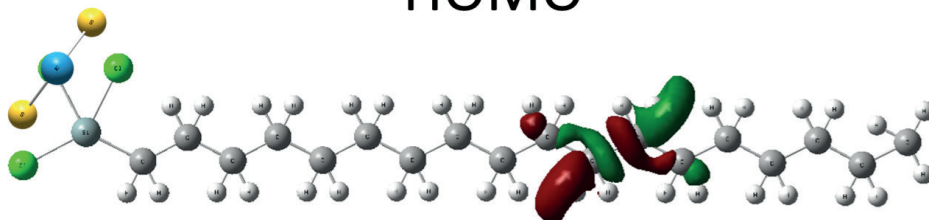


Fig 3. Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO) – Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO) of WS_2 with octadecyltrichlorosilane.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Conclusions

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

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

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

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

REFERENCES

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 31–49

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.255>

УДК 524.834 МПНТИ 29.05.45

© A.A. Zhadyranova*, D.K. Anshokova, 2024

Department of General and Theoretical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian
National University, Astana, Kazakhstan.

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com

MODIFIED EQUATION OF STATE OF A LOGARITHMICALLY VISCOUS FLUID WITH A POWER LAW

Zhadyranova Aliya Amirbekovna — senior lecturer of the department of general and theoretical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpayev str., Astana, Kazakhstan

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com. Orcid:0000-0003-1153-3438;

Anshokova Dina Kuanyshevna — student of the department of general and theoretical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satpayev str., Astana, Kazakhstan

E-mail: anshokova06@mail.ru. Orcid:0009-0005-1329-492X.

Abstract. Currently, the study of the influence of the types of interaction between dark energy and dark matter on cosmological parameters and on the evolution of the Universe is of great interest in cosmology. Using an exotic ideal liquid with negative pressure satisfying the barotropic equation of state, it is possible to describe the accelerating expansion of the universe. Most dark liquid models are described using an inhomogeneous equation of state. On a large cosmological scale, the standard Λ CDM model gives good results, but on a galactic scale it has some discrepancies. In the considered viscous liquid model, the liquid pressure is modeled by a formula describing the pressure of isotropic crystalline solids. The liquid pressure must be negative, because with a positive tensile stress, the pressure is negative. In the logarithmic model, when the volume of the universe exceeds a certain value, pressure becomes dominant. The interacting term implies a continuous exchange of energy between dark sectors, a modified equation will be written for dark matter $\nabla^\nu T_{\mu\nu}^{DM} = Q$ and dark energy $\nabla^\nu T_{\mu\nu}^{DE} = Q$. The interacting term Q shows the interaction between dark matter and dark energy if $Q > 0$, then the energy flow occurs from dark energy to dark matter when $Q < 0$ the energy flow goes from dark energy to dark matter. The dynamics of interacting models is investigated. Functional forms are selected for the interacting member with the correct physical size. Then the corresponding evolutionary equations are found. Using viscous fluid models, the Hubble tension problem can be solved. These models show that dark energy, the mysterious force causing the accelerated expansion of the universe, has viscosity, and it resists flow and acts to some extent like a liquid. This viscosity can

affect how dark energy interacts with matter, and, accordingly, can affect the rate of expansion of the universe. In these models, the viscosity of dark energy can lead to a stronger interaction with matter in the early universe, which, accordingly, slows down the rate of expansion. As the universe grows and cools, the viscosity of dark energy decreases, which means that it becomes dominant and leads to an increase in the rate of expansion. Viscous dark liquid models have been proposed as a possible solution to the Hubble tension problem, as they can explain the differences between the two measurements of the Hubble constant. However, these models still require further research to fully understand their importance for cosmology.

Keywords: Hubble constant, viscous liquid, dark energy, dark matter, expansion of the universe, viscosity, modified equation

«This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan grant number AP19674478 Influence of minimal and non-minimal coupling on the dynamics of evolution the universe in multifield cosmological models»

©А.А. Жадыранова*, Д.К. Аншокова, 2024

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com.

ДӘРЕЖЕЛІК ЗАҢЫ БАР ЛОГАРИФМДІК МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН СҰЙЫҚТЫҚ КҮЙІНІҢ ӨЗГЕРТІЛГЕН ТЕҢДЕУІ

Жадыранова Алия Амирбековна — Жалпы және теориялық физика кафедрасының аға оқытушысы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Сәтпаев көш. 2, Астана, Қазақстан

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com. Orcid:0000-0003-1153-3438;

Аншокова Дина Куанышевна — Жалпы және теориялық физика кафедрасының 4 курс студенті, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Сәтпаев көш. 2, Астана, Қазақстан

E-mail: anshokova06@mail.ru. Orcid:0009-0005-1329-492X.

Аннотация. Қазіргі уақытта күнгірт энергия мен күнгірт материя арасындағы өзара әрекеттесу түрлерінің космологиялық параметрлерге, ғаламның эволюциясына әсерін зерттеу космологияда үлкен қызығушылық тудырады. Баротропты күй теңдеуін қанағаттандыратын теріс қысымды экзотикалық идеалды сұйықтықты қолдана отырып, ғаламның үдемелі кеңеюін сипаттауға болады. Күнгірт сұйықтық модельдерінің көпшілігі біртекті емес күй теңдеуін қолдану арқылы сипатталады. Үлкен космологиялық масштабта стандартты Λ CDM модель жақсы нәтиже береді, бірақ галактикалық масштабта кейбір сәйкессіздіктер бар. Тұтқыр сұйықтықтың қарастырылып отырған моделінде сұйықтық қысымы изотропты кристалды қатты заттардың қысымын сипаттайтын формуламен модельденеді. сұйықтық қысымы теріс болуы керек, өйткені оң созылу кернеуінде қысым теріс болады. Логарифмдік

модельде ғаламның көлемі белгілі бір мәннен асып кетсе, қысым басым болады. Өзара әрекеттесетін термин күнгірт секторлар арасындағы энергияның

үздіксіз алмасуын білдіреді, өзгертілген тендеулер күнгірт материя $\nabla^{\nu} T_{\mu\nu}^{DM} = Q$

мен күнгірт энергия $\nabla^{\nu} T_{\mu\nu}^{DE} = Q$ үшін жазылады. Өзара әрекеттесетін термин күнгірт материя мен күнгірт энергияның өзара әрекеттесуін көрсетеді, Егер $Q > 0$ энергия ағыны күнгірт энергиядан күнгірт материяға ауысады, $Q < 0$ жағдайында энергия күнгірт энергиядан күнгірт материяға ауысады. Өзара әрекеттесетін модельдердің динамикасы зерттеледі. Дұрыс физикалық өлшемі бар өзара әрекеттесетін мүше үшін функционалды формалар таңдалады. Содан кейін сәйкес эволюциялық тендеулер анықталады. Тұтқыр сұйықтық модельдерін қолдана отырып, Хаббл кернеу мәселесін шешуге болады. Бұл модельдер күнгірт энергияны көрсетеді ғаламның жеделдетілген кеңеюін тудыратын жұмбақ күш тұтқырлыққа ие және ол ағынға қарсы тұрады және белгілі бір дәрежеде сұйықтық ретінде әрекет етеді. Бұл тұтқырлық күнгірт энергияның материямен әрекеттесуіне әсер етуі мүмкін және сәйкесінше ғаламның кеңею жылдамдығына әсер етуі мүмкін. Бұл модельдерде күнгірт энергияның тұтқырлығы ерте ғаламдағы материямен күштірек әрекеттесуге әкелуі мүмкін, бұл сәйкесінше кеңею жылдамдығын баяулатады. Ғалам ұлғайып, салқындаған сайын күнгірт энергияның тұтқырлығы төмендейді, яғни ол басым болады және кеңею жылдамдығының жоғарылауына әкеледі. Тұтқыр күнгірт сұйықтық модельдері Хаббл шиеленісінің ықтимал шешімі ретінде ұсынылды, өйткені олар Хаббл константасының екі өлшемі арасындағы айырмашылықтарды түсіндіре алады. Дегенмен, бұл модельдер космология үшін олардың маңыздылығын толық түсіну үшін әлі де қосымша зерттеулерді қажет етеді.

Түйін сөздер: Хаббл тұрақтысы, тұтқыр сұйықтық, күнгірт энергия, күнгірт материя, ғаламның кеңеюі, тұтқырлық, өзгертілген тендеу

«Осы зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті қаржыландырады грант № AP19674478 Мультиөрістік космологиялық моделдердегі ғалам эволюциясының динамикасына минималды және минималды емес байланыстың әсері»

© А.А. Жадыранова*, Д.К. Аншокова, 2024

Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,
Астана, Казахстан.

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com

МОДИФИЦИРОВАННОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЛОГАРИФМИЧЕСКИ СКОРРЕКТИРОВАННОЙ ЖИДКОСТИ СО СТЕПЕННЫМ ЗАКОНОМ

Жадыранова Алия Амирбековна — старший преподаватель кафедры общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева 2, Астана, Казахстан

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com. Orcid:0000-0003-1153-3438;

Аншокова Дина Куанышевна — студентка 4 курса кафедры общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева 2, Астана, Казахстан

E-mail: anshokova06@mail.ru. Orcid:0009-0005-1329-492X.

Аннотация. В настоящее время изучение влияния видов взаимодействия между темной энергией и темной материей на космологические параметры, на эволюцию Вселенной имеет большой интерес в космологии. С использованием экзотической идеальной жидкости с отрицательным давлением, удовлетворяющей баротропному уравнению состояния можно описать ускоряющееся расширение Вселенной. Большинство моделей темной жидкости описываются с применением неоднородного уравнения состояния. На большом космологическом масштабе стандартная Λ CDM модель дает хорошие результаты, однако на галактическом масштабе имеет некоторые несовпадения. В рассматриваемой модели вязкой жидкости давление жидкости моделируется формулой, описывающей давление изотропных кристаллических твердых тел. Давление жидкости должно быть отрицательным, поскольку при положительном растягивающем напряжении давление отрицательно. В логарифмической модели, когда объем Вселенной превышает определенное значение, давление становится доминирующим. Взаимодействующий член подразумевает непрерывный обмен энергией между темными секторами, модифицированное уравнения запишется для темной материи $\nabla^\nu T_{\mu\nu}^{DM} = Q$ и темной энергии $\nabla^\nu T_{\mu\nu}^{DE} = Q$. Взаимодействующий член Q показывает взаимодействие между темной материей и темной энергией, если $Q > 0$, тогда поток энергии происходит от темной энергии к темной материи, когда $Q < 0$ поток энергии идет от темной энергии к темной материи. Исследуется динамика взаимодействующих моделей. Подбираются функциональные формы для взаимодействующего члена с правильным физическим размером. Затем находятся соответствующие эволюционные уравнения. С применением моделей вязкой жидкости можно

решить проблему напряженности Хаббла. Эти модели показывают, что темная энергия таинственная сила, вызывающая ускоренное расширение Вселенной, имеет вязкость, и она сопротивляется потоку и в некоторой степени действует как жидкость. Эта вязкость может влиять на то, как темная энергия взаимодействует с материей, и, соответственно, может влиять на скорость расширения Вселенной. В этих моделях вязкость темной энергии может привести к более сильному взаимодействию с материей в ранней Вселенной, что, соответственно, замедляет скорость расширения. По мере того, как Вселенная увеличивается и остывает, вязкость темной энергии уменьшается, что означает, что она становится доминирующей и приводит к увеличению скорости расширения. Модели вязкой темной жидкости были предложены в качестве возможного решения проблемы напряженности Хаббла, поскольку они могут объяснить различия между двумя измерениями постоянной Хаббла. Тем не менее, эти модели все еще требуют дальнейших исследований, чтобы полностью понять их важность для космологии.

Ключевые слова: постоянная Хаббла, вязкая жидкость, темная энергия, темная материя, расширение вселенной, вязкость, модифицированное уравнение

«Настоящее исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан грант № AP19674478 Влияние минимальной и неминимальной связи на динамику эволюции вселенной в мультиполевых космологических моделях».

Кіріспе

Қазіргі уақытта ғалам жеделдетілген кеңею фазасында, бұл Ia типті суперновалардан (SNIa), ауқымды құрылымнан (LSS), ғарыштық микротолқынды фондық сәулеленуден (CMB), бариондық акустикалық тербелістерден (BAO) алынған бірнеше космологиялық бақылаулармен расталады. Спиральды галактикалардан және Галактика кластерлерінен алынған бақылаулармен бірге ғаламда күнгірт материя деп аталатын бақыланатыннан да көп материя бар және ол құрылымның пайда болуына жауап береді. Лямбда суық күнгірт материя Λ CDM деп аталатын қарапайым космологиялық модель бұл құбылыстарды күнгірт секторды құрайтын және Ғаламның шамамен 95% құрайтын екі компонент ретінде сипатталады. Жеделдетілген кеңею космологиялық тұрақтымен күй теңдеуімен сипатталады $p = -p$, ал құрылымның пайда болуы шаң затына байланысты ($p = 0$). Космологиялық бақылауларға сәйкес келетініне қарамастан, Λ CDM галактикалық масштабта бірнеше мәселелерді ұсынады және космологиялық тұрақтысының шығу тегі туралы сұрақтарды ашық қалдырады. Сондықтан мұндай Λ CDM сәйкессіздіктерін шешудің балама модельдері пайда болды. Күнгірт материяны түсіндіру үшін бірнеше аксиондар бар, ультра жеңіл скалярлық бөлшектер, суперсимметриялық бөлшектер және басқалар. Алайда, ғарыштық өлшемдер күнгірт сектордың екі күнгірт компоненттен

тұратындығын анықтай алмайды, өйткені ауырлық теориялары тек толық энергия-импульс тензорын бағалайды.

Осы мәселеге негізделген көптеген модельдер күнгүрт секторды ерекше компонент немесе сұйықтық ретінде түсіндіруді ұсынады, ол жоғары қызыл ығысу кезінде күнгүрт материя және төмен қызыл ығысу кезінде күнгүрт энергия сияқты әрекет етеді және осылайша ғаламның қазіргі үдеуін модельдейді. Бір қызығы, бұл модельдер космологиялық тұрақтысыменкүй теңдеуі баламаларын ұсынады. Екінші жағынан, күнгүрт материя және күнгүрт энергияны біріктіру механизмі идеалды сұйықтықтың орнына тұтқыр сұйықтықпен толтырылған ғаламды болжайды. Бұл шеңберде ғаламның жеделдетілген кеңеюі космологиялық тұрақты емес, тұтқыр сұйықтықтың қысымынан туындайды. Осылайша, бірыңғай күнгүрт материя модельдерінің бұл түрі космологиялық тұрақты мәселе және сәйкестік мәселесі сияқты космологиялық тұрақты мәселелерін болдырмайды.

Материалдар және негізгі әдістер

Ғалам логарифмдік модификациямен тұтқыр байланысқан сұйықтықпен толтырылған ретінде қарастырамыз. Үлкен масштабтағы күнгүрт энергия қасиеттерін есепке алудың қарапайым түрі, ол ғарыштық үдеуге жауапты сұйықтықты өзгерту тәсілі болуы мүмкін. Оны Чаплыгин ұсынған газ және әртүрлі күй теңдеулерінен байқай аламыз. Ғарыштық қысым теріс болғандықтан, ғаламның эволюциясының белгілі бір кезеңдерінде теріс қысымды қамтамасыз ету үшін тек материяны қолдануға бола ма деген ойға келеміз. Ол үшін табиғатта мүмкін болатын жағдайларды талдауымыз қажет. Мүмкін болатын жағдайлардың бірі-стандартты материяны оның қысымы нөлге айналатын әдеттегі жағдаймен салыстырғанда басқа күй теңдеуімен қарастыру. Заттың қысымсыз күй теңдеуінен теріс қысымға өтуіне мүмкіндік беретін процесс стандартты модельде қарастырылғандай ғарыштық кеңеюге байланысты. Осылайша, осы стратегияға жүгіне отырып, Дебайдың жуықтауындағы Антон-Шмидт күй теңдеуіне бағынатын материяны ұсынамыз (Капозицелло, 2019).

Дәрежелік заңы бар логарифмдік модификацияланған тұтқыр сұйықтық үшін өзгертілген күй теңдеуі қарастыра аламыз (Бревик, 2021).

Бұл жердегі мақсатымыз — күнгүрт энергияны дәрежелік заңы бар логарифмдік модификацияланған сұйықтық тұрғысынан зерттеу (Капозицелло, 2018) болып табылады. Осыған байланысты күй теңдеуіміз келесідей болады

$$p = A \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right); \quad (1)$$

мұндағы ρ_* -Планк тығыздығымен анықталатын анықтамалық тығыздық: $\rho_p = c^5 / \hbar G^2 \approx 5.16 \times 10^{99} \text{ g/m}^3$. $A > 0$ болған жағдайда, логотропты температураы білдіреді, ал $l = -\frac{1}{6} - \nu_G$.

Космологияға тұтқырлықты енгізу әр түрлі тұрғыдан зерттелді (Грон О.

1990). Күнгірт энергия моделі (Бревик, 2005), ғарыштық сингулярлық сияқты соңғы әзірлемелер бар. Күнгірт материя мен күнгірт энергияны тұтқыр ортамен біріктірілген (Бревик, 2005). Мұндай модельдерде ғалам тұтқыр, біртекті сұйықтықпен толтырылған деп болжанады. Ғарыштық тығыздық күнгірт энергияның бір бөлігіне және күнгірт заттың бір бөлігіне бөлінбейді (Мэн, 2009). Көлемдік тұтқырлық ғарыштық қысымға ықпал етеді және ғаламның үдеткіші рөлін атқарады.

Логотропты күнгірт энергия моделінің белгіленулерін қолдана отырып (1) күй теңдеуін қайта жазайық. Бұл үшін массалық тығыздық арқылы көлемді $V \sim \rho^{-1}$ қатынасы арқылы көрсетеміз (Чаванис, 2016)

$$p(V) = \beta \left(\frac{V}{V_0}\right)^{-\frac{1}{6} - v_G} \ln\left(\frac{V}{V_0}\right); \quad (2)$$

Мұндағы V_0 - әртүрлі қысым белгілері арасындағы тосқауылды ажырататын көлем, ал β - Грюнайзеннің өлшемдік параметрі болып келеді. Көлемді сығу модулі сыртқы күштердің әсерінен көлемнің қаншалықты өзгертетінін көрсетеді. Біртекті және изотропты ғаламдағы v_G параметрі теориядағы еркін параметр деп аталады. Егер қысым оң көлемді серпімділік модулі үшін оң болса. Егер $V < V_0$ болса, онда қысым оң көлемді серпімділік модулі үшін теріс болып табылады.

Егер күнгірт сұйықтықтың қысымы (2) теңдеуді қанағаттандырса, онда космологиялық үдеуді қамтамасыз ету үшін көлем $V \approx V_0$ кедергісінен өтуі қажет (Майер, 2003). Үш түрлі режимді ажырату керек :

1. V_0 тосқауылдан өткенге дейінгі аймақ, яғни $V < V_0$ болған кезде. Бұл аймақта қысым оң болып келеді және де Ғалам баяулайды. Бұл LCDM моделіндегі қысымсыз заттың жаңдайына сәйкес келеді.

2. $V \approx V_0$ аймақ. Бұл жағдайда баяулаудан үдеуге ауысу процесі орын алады.

3. $V > V_0$ болған кездегі, тосқауылдан өткеннен кейінгі аймақ V_0 . Осыдан кейін қысым теріс болады және де сұйықтық үйдей бастайды.

Осыған сәйкес, логарифмдік модификацияланған дәрежелік заңының моделінде ғаламның динамикалық эволюциясы оның көлемі $V \approx V_0$ тосқауылынан өткенде ғаламды жылдамдататын жалғыз сұйықтықпен сипатталады. Бұл осы модельді кейінгі ғаламды сипаттауға қолдануға мүмкіндік береді. Енді (1) күй теңдеуін қолдана отырып, ғаламның динамикалық эволюциясын толығырақ қарастырайық. Ғаламды кеңістіктік жазық, біртекті және изотропты деп қарастырып және көлемдік тұтқырлық бар деп есептейік (Авелино, 2010). Қысымға келесі мүшені қоссақ

$$\zeta(H, t) = \xi_1(t)(3H)^n; \quad (3)$$

Мұндағы $\zeta(H, t)H$ Хаббл параметріне және де t уақытқа байланысты болатын көлемді тұтқырлық болып табылады. Термодинамикалық себептерден

$\zeta(H, t) > 0$ шығады. Логарифмдік модификацияланған дәрежелік сұйықтық үшін кеңейтілген күй теңдеуі келесідей формаға ие болады

$$p = A \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l} - 3H\zeta(H, t); \quad (4)$$

Бұл формула жалпыланған күй теңдеуінің ерекше жағдайы болып табылады.

Әдетте, көлемдік тұтқырлық формасы уақытқа байланысты функция ретінде таңдалады (Мэн, 2007). Жұмыста тығыздыққа тәуелді тұтқырлық коэффициенті $\zeta(H, t)$ егжей-тегжейлі зерттелген. Біріктірілген күнгірт материя мен күнгірт энергияны модельдеу үшін көбінесе $A = 1$ параметрі тұтқыр сұйықтықтың қысымы нөлге тең, ал тұтқырлық термині тиімді қысымға ықпал етеді деп болжанады. Мұнда бірнеше мәселелер туындайды. Бақылау нәтижелері бойынша ғарыштық тығыздық ғарыштық қысымға тең (Бамба, 2012). Тұтқырлық моделінде тұтқырлық термині ғарыштық қысымға үстемдік етеді және дәстүрлі сұйықтық теориясына қайшы келетін ғарыштық заттардың басқа құрамдарының қысым үлесінен асып түседі. Тұтқыр космологияны зерттеудің берік негізін қалау маңызды екені анық.

Бұл бөлімде Фридман-Робертсон-Уокердің кеңістіктік-жазықтық кеңістігіндегі екі тұтқыр байланысқан сұйықтықтың формализмін қолдана отырып, кейінгі уақыт әлемін қарастырытын боламыз (Фараони, 2002). Күнгірт материямен біріктірілген (4) күйінің логарифмдік модификацияланған дәрежелік теңдеуін қолдана отырып, Фридман-Робертсон-Уокер динамикасы зерттеледі. Логарифмдік модификацияланған дәреже модельде ғаламның көлемі $V = V_0$ тосқауылынан өткен кезде үдемелі ғаламға жауап беретін бір ғана сұйықтық бар. Модель ерте ғаламды сипаттай алмайды, себебі бұл кезеңдегі температура қатты денелер үшін дебай температурасынан әлдеқайда жоғары болып келеді. Инфляция кезеңінде сұйықтықтағы қысым логотропты күнгірт энергия моделіндегідей кемиді, ал кейінгі уақытта қысым тұрақты теріс мәнге ұмтылады (Колдуэлл, 2002). Бұл жағдайда ғалам күнгірт сұйықтықпен толтырылған жағдайда өзара әрекеттесетін екі компонентпен толтырылған ғалам қарастырылады: тұтқырлығы бар логарифмдік модификацияланған дәрежелік заңының құрамдас бөлігі және масштабты факторы бар Фридман-Робертсон-Уокер кеңістіктегі жазық ғаламдағы күнгірт материяның құрамдас бөлігі (Элизальде, 2014).

Фондық теңдеулер

$$\dot{\rho} + 3H(p + \rho) = -Q, \quad (5)$$

$$\dot{\rho}_1 + 3H(p_1 + \rho_1) = Q, \quad (6)$$

және

$$\dot{H} = -\frac{k^2}{2}(p + \rho + p_1 + \rho_1). \quad (7)$$

Мұндағы, H Хаббл функциясы болып табылады, яғни $H(t) = \dot{a}(t)/a(t)$, ал $k^2 = 8\pi G$, G -Ньютонның гравитациялық тұрақтысы, p , ρ және p_r , p_l дегеніміз - байланысты сұйықтардың қысымы мен энергия тығыздығы, ал Q - өзара әрекеттесу мүшесі болып табылады. Формулада көрсетілген нүкте ол ғарыштық уақыт t бойынша туындыны білдіреді, Λ космологиялық тұрақты нөлге тең деп есептеледі. Келесідей метриканы қарастырамыз

$$ds^2 = -dt^2 + a^2(t) \sum_i dx_i^2. \quad (8)$$

Фридман метрикасы үшін Хаббл тұрақтысы келесідей [11]

$$H^2 = \frac{k^2}{3} (\rho + \rho_1). \quad (9)$$

Қазіргі уақытта космологияның шешілмеген мәселелерінің бірі ол, стандартты Λ CDM моделіндегі сәйкестік мәселесі болып табылады (Рен, 2006).

Алғашқыжуықтауретінде модельдетек бір сұйықтықты қарастырдық, алайда модельге сәулелену және күнгірт энергия сияқты көптеген компоненттерді қосып, $\zeta(H, t)$, кез-келген сұйықтықтың көлемдік тұтқырлығын тағайындау деградацияға әкеледі, яғни фондық деңгейде тұтқырлықты тудыратын нақты ғарыштық компонентті анықтау мүмкін емес (Рен, 2007). Екінші жағынан, шаң бөлшектері төмен қызыл ығысу кезінде релятивистік бөлшектерге ыдырауына байланысты тұтқырлық тудыруы мүмкін ($z < 1$). Мұндай соңғы бөлшектер энергетикалық фотондар болмауы керек, өйткені оларды анықтау оңай болар еді. Демек, ғарыштық компонентіміз қысымсыз ($p=0$) шаң тәрізді зат сияқты әрекет етеді деп сенеміз. Содан кейін үздіксіздік теңдеуі формула арқылы беріледі.

Күнгірт энергияның тығыздығы мен қазіргі ғаламдағы материяның энергия тығыздық шамасының реті бірдей болатындықтан, күнгірт энергия мен материя бір-бірімен белгілі бір дәрежеде өзара әрекеттеседі деп болжам жасай аламыз (Ноджири, 2005). Нақты космологиялық бақылаулар $r = p_r/p_l$ -ның бірлік реті бар екенің анықтайды. Тығыздық коэффициентін тұрақты деп есептеп (тұрақты қатынас CDM моделінің салдары), осыған сәйкес (9) теңдеуіміз келесідей болады

$$\rho = \frac{3H^2}{k^2(1+r)}. \quad (10)$$

Осыдан кейін өзара әрекеттесудің космологиялық моделін зерттейміз.

Мәселені қою

Ландау мен Лифшицтен ғарыштық эволюциядағы көлемдік тұтқырлық маңызды болып көрінетінін білеміз және оны макроскопиялық тұрғыдан

түсіндіре аламыз, бұл тепе-теңдік күйін қалпына келтірудің баяу процестерінің болуына тең. Ғарыштық сұйықтықтың көлемдік тұтқырлығы бөлшектердің сақталмайтын өзара әрекеттесуінің нәтижесі болуы мүмкін деп болжайды (Одинцов, 2018), ал басқалары ғарыштық орта компоненттерінің әртүрлі салқындату жылдамдығы көлемдік тұтқырлыққа әкелуі мүмкін екенін көрсетеді (Падманабхан, 1987). Сонымен қатар, CDM сұйықтығындағы бейтарап CDM үшін көлемдік тұтқырлық қысымы CDM сұйықтығынан сәулелену сұйықтығына берілетін энергияға байланысты пайда болады. Дискілі галактикалардың көптеген байқалатын қасиеттерін жасырын секторда тұрақты компонент ретінде көрінетін күнгірт материя диссипативті компоненті арқылы көбейтуге болады. Екінші жағынан, бұзылу деңгейінде тұтқыр сұйықтық динамикасы сипаттаманы сызықтық емес режимге тарату үшін қарапайым және дәл негіз береді. (Ноджири 2003) Бүгінгі таңға дейін күнгірт материя табиғаты белгісіз болғандықтан және космологиядағы диссипативті әсерді жоққа шығаруға болмайтындықтан, Λ CDM моделіндегі күнгірт материя түрінің сипаттамасын зерттеу физикалық қызығушылық тудырады.

Сұйықтық компоненттерінің өзара әрекеттесу түрін келесідей қарастыруға болады

$$Q = 3\alpha H \frac{\rho_1 \dot{\rho}}{\dot{\rho}_1 \rho - \rho_1 \dot{\rho}} \quad (11)$$

Мұндағы α – өлшемсіз тұрақты болып табылады. Энергия тығыздығының қатынасы тұрғысынан $r = p_1/p$ екенін ескеріп, өзара әрекеттесу мүшесін келесідей жазамыз

$$Q = 3\alpha H \frac{r}{\dot{r}} \quad (12)$$

Логарифмдік модификацияланған дәрежелік сұйықтығы үшін кеңейтілген күй теңдеуін қайта жазатын болсақ (4) формула келесі түрге келеді

$$p = A \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l} - 3H\zeta(H, t);$$

Қысымға $\zeta(H, t)$ көлемдік тұтқырлық қосылады, ол H Хаббл тұрақтысына және t уақытқа байланысты болып келеді

$$\zeta(H, t) = \xi_1(t)(3H)^n, \quad (13)$$

Осы жағдайда уақыт бойынша сызықтық түрде өзгеретін $\xi_1(t)$ функциясын келесідей жазуға болады

$$\xi_1(t) = dt + z, \quad (14)$$

Мұндағы d, z – тұрақты параметрлер.

(13) формуладығы $n = 1$ деп есептеп, содан кейін $p > p_*/2$ жағдайында тұтқырлық болған кездегі логарифмдік түзетуі бар дәрежелік заңымен байланысты сұйықтық үшін теңдеуді жазамыз

$$\zeta(H, t) = \xi_1(t)(3H)^1 = 3H(dt + z),$$

Кейін (5) теңдеуіне (12) теңдеуін қоятын болсақ келесідей өрнекті аламыз

$$\dot{\rho} + 3H(p + \rho) + \frac{3\alpha Hr}{\dot{r}} = 0 \quad (15)$$

Осы өрнекке ұлғаю күй өрнегінің мәнін қоятын болсақ өрнегіміз келесідей түрде болады

$$\dot{\rho} + 3H \left(A \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right) - 9HH(dt + z) + \rho \right) + \frac{3\alpha Hr}{\dot{r}} = 0 \quad (16)$$

(6) теңдеуінен $3H^2$ анықтайтын болсақ, ол келесідей түрге ие болады

$$3H^2 = k^2(\rho + r\rho) \quad (17)$$

Осыдан (17) өрнегін (16) теңдеуіне қойып, қайта анықтайтын болсақ

$$\dot{\rho} + 3H \left[\left(A \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l-1} - 3d(1+r)k^2t\rho + \rho - 3z(1+r)k^2\rho + \frac{\alpha r}{\dot{r}} \right) \right] = 0 \quad (18)$$

Кейін $\rho > \frac{\rho_*}{2}$: жағдайында тұтқырлық болған кезде логарифмдік модификациясы бар дәрежелік заңымен байланысқан сұйықтық үшін гравитациялық теңдеуін келесідей жазылады

$$\dot{\rho} + 3H \left[A \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l} - A \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l-1} + (\tilde{d}t + \tilde{z})\rho \right] = 0 \quad (19)$$

Мұндағы, $\tilde{d} = -3d(1+r)k^2$, ал $\tilde{z} = 1 - 3z(1+r)k^2\rho + \frac{\alpha r}{\dot{r}}$:

$$\frac{6H\dot{H}}{k^2(1+r)} + 3H \left[A \left(\frac{\rho}{\rho_*} \right)^{-l} \ln \frac{\rho}{\rho_*} \right], \quad (20)$$

$l = -1$ жағдайында өрнегіміз келесідей түрде болады

$$2\dot{H} + 3 \left(\tilde{d}t + \tilde{z} + \frac{A}{\rho_*} \right) H^2 = 0 \quad (21)$$

(21) теңдеуінің шешімі

$$H(t) = \frac{4\tilde{d}}{3(\tilde{d}t + \tilde{z} + \frac{A}{\rho_*})^2 + C_2}, \quad (22)$$

C_1 – интегралдау тұрақтысы болып табылады. $C_1 = 0$ жағдайында $H > 0$ болады, яғни ғалам кеңейеді. Сонымен бірге, $t_0 = -\frac{1}{\tilde{d}}\left(\tilde{z} + \frac{A}{\rho_*}\right)$ уақытында H алшақтайды және осылайша үлкен алшақтық сингулярлығы пайда болады (Ноджири, 2005).

(22) өрнегінен масштабты факторды анықтайтын болсақ, онда ол келесідей түрге ие болады

$$a(t) = a_0 \exp\left[-\frac{4}{3}\left(\tilde{d}t + \tilde{z} + \frac{A}{\rho_*}\right)^{-1}\right], \quad (23)$$

Мұндағы α_0 – интегралдау тұрақтысы деп аталады. Масштабты фактордың уақыт бойынша туындысы

$$\dot{a}(t) = \frac{4/3}{\left(t + \frac{\tilde{z}}{\tilde{d}} + \frac{A}{\tilde{d}\rho_*}\right)^2} a(t) \quad (24)$$

Уақыт бойынша туынды оң болғандықтан, ғалам кеңейеді деп тұжырымдаймыз. Уақыт бойынша екінші туындыны аламыз

$$\ddot{a}(t) = \left[1 - \frac{3}{2}\left(\tilde{d}t + \tilde{z} + \frac{A}{\rho_*}\right)\right] H^2(t) a(t). \quad (25)$$

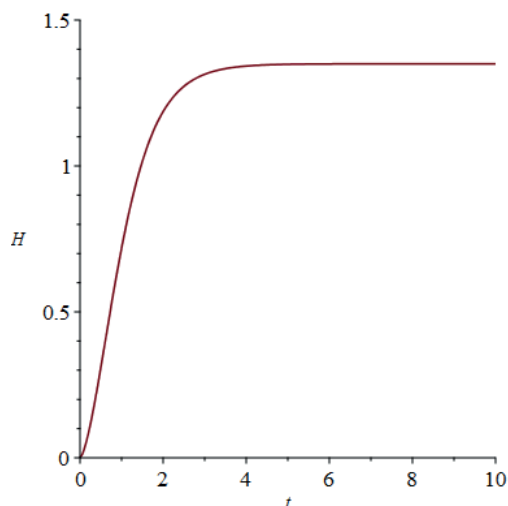
Демек, $t_1 = \frac{1}{\tilde{d}}\left(\frac{2}{3\tilde{d}} - \tilde{z} - \frac{A}{\rho_*}\right)$ жағдайында $\ddot{a}(t) = 0$. Осылайша, $t < t_1$, жағдайында, $\tilde{d} > 0$, яғни $\ddot{a}(t) > 0$ және ғалам кеш жеделдетілген дәуірге өтеді (Суэтин, 2018). Күнгірт материямен өзара әрекеттесусіз тұтқыр емес сұйықтық жағдайында (яғни $d = z = 0$ және $\alpha = 0$ параметрлерінде), $l = -l$ жағдайында өрнегіміз

$$H(t) = \frac{2/3}{\left(1 + \frac{A}{\rho_*}\right)t + C_3} \quad (26)$$

Мұндағы C_3 – интегралдау тұрақтысы.

Нәтижелер

Алынған модельдің (26) өрнегіне сәйкес Хаббл параметрінің уақытқа тәуелді графигі келесідей



Сурет 1 Хаббл параметрінің $H(t)$ уақытта тәуелділік графигі

Ғаламның қазіргі түсінігі-қазіргі уақытта оның кеңеюі жеделдейді. Бұл кейінгі үдеуді күнгірт энергия деп аталатын басым ғарыштық компоненттің болуымен түсіндіруге болады. Стандартты Λ CDM моделі, осы жеделдетілген кеңеюді түсіндірудің ең сәтті моделі күнгірт энергия ретінде космологиялық тұрақтыны қамтиды. Алайда, модель негізінен космологиялық тұрақтылық проблемасынан және кездейсоқтық проблемасынан зардап шегеді (Колдуэлл, 2003). 120-ға жуық космологиялық тұрақты тығыздықтың бақыланатын және болжанған мәндері арасындағы үлкен алшақтық космологиялық тұрақты проблема болып табылады. Күнгірт энергия компоненттері мен күнгірт материяның энергия тығыздығының ғаламның қазіргі дәуіріндегі сәйкестігі сәйкестік мәселесі ретінде қарастырылады (Фэн, 2009). Сонымен қатар, Λ CDM моделі классикалық қашықтық баспалдақтарымен өлшенген Хаббл параметрінің ағымдағы мәні мен Планктың CMB деректер мәні арасындағы айтарлықтай келіспеушіліктерден зардап шегеді. Дәлірек айтсақ, супернова бақылауларынан $H_0 = 74.03 \pm 1.42$ км/с·Мпк бар, ал Планк CMB деректерінен алынған Λ CDM космологиясы $H_0 = 67.4 \pm 0.5$ км/с·Мпк. Бұл мәселелерді шешу үшін күнгірт энергияның әртүрлі динамикалық модельдері ұсынылды. Күнгірт энергияның елес моделі, голографиялық модель, фантом, тахион, дилатон, квинтом және вакуумның динамикалық энергиясы бұлар күнгірт энергияның динамикалық модельдерінің бірнеше мысалдары (Колдуэлл, 2002). Олардың көпшілігі бақылаулармен жақсы үйлеседі. Тағы бір балама тәсіл-ауырлық теориясын өзгерту.

Ерекше жағдайда, $C_3 = 0$ болғанда, $H(t)$ уақыт бойынша туындысы

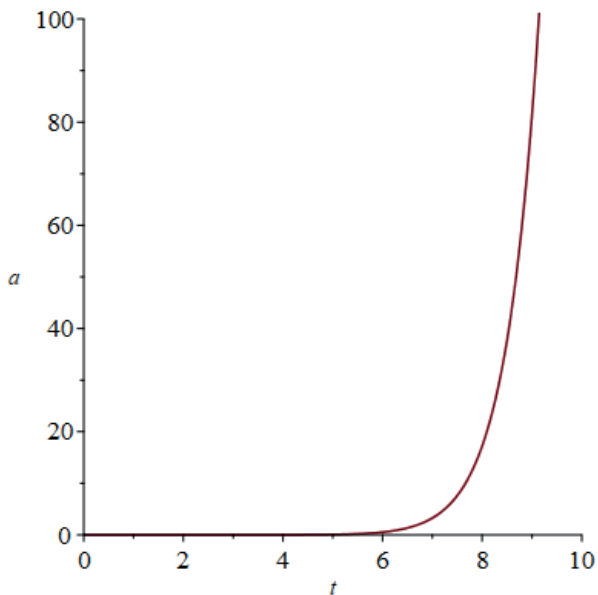
$$\dot{H}(t) = -\frac{2}{3\left(1+\frac{A}{\rho_*}\right)t^2}. \quad (27)$$

$\dot{H} < 0$ болған жағдайда, ғалам баяулайды. Осыдан масштабты факторды анықтайтын болсақ

$$a(t) = a_0 t^{\frac{2}{3(1+\frac{A}{\rho_*})}}, \tag{28}$$

Мұндағы a_0 – ерікті тұрақты.

Осы модельдің (28) теңдеуінде көрсетілген масштаб факторының графигі 2 суретте көрсетілген



Сурет 2 Масштаб факторының уақытқа тәуелділік графигі

2-суретте модификацияланған кері қарау уақытына қатысты масштабты коэффициент ретінде құрылған біріктірілген деректер жиынтығы көрсетілген. Сондай-ақ, графикте $\Omega_L = 0.73$ және $\Omega_L = 1 - 0,27$ тығыздығының параметрлері бар ең кіші квадраттар әдісімен Λ CDM сәйкестігі көрсетілген. Бұл мәндер серпімділік модулінің графигінде алынған мәндерге өте жақын, осылайша, кері санақ уақытын есептеудің дұрыстығы расталады. 2-суреттегі Λ CDM үшін R-квадраттың сәйкестік коэффициенті 0,98 құрайды. Сондай-ақ, графикте күнгірт материя $p = \frac{1}{3}\rho$ күй теңдеуі бар идеалды сұйықтық түрінде ұсынылған. Оның тығыздығы t тұрақтысы ретінде өзгереді және ол Фридман теңдеулеріне Ω_{dark}/t^2 ретінде енеді, тек Ω_{dark}/a^3 мүшесін Λ CDM-ге ауыстырады (Рен, 2006). Немесе, ол Λ CDM масштаб коэффициенті сияқты есептеледі. Бұл алмастыру арқылы $a(t)$ жаңа шешімін табуға болады.

Масштабты фактордың уақыт бойынша бірінші туындысы келесідей анықталады

$$\dot{a}(t) = \frac{2/3}{\left(1 + \frac{A}{\rho_*}\right)t} a(t). \quad (29)$$

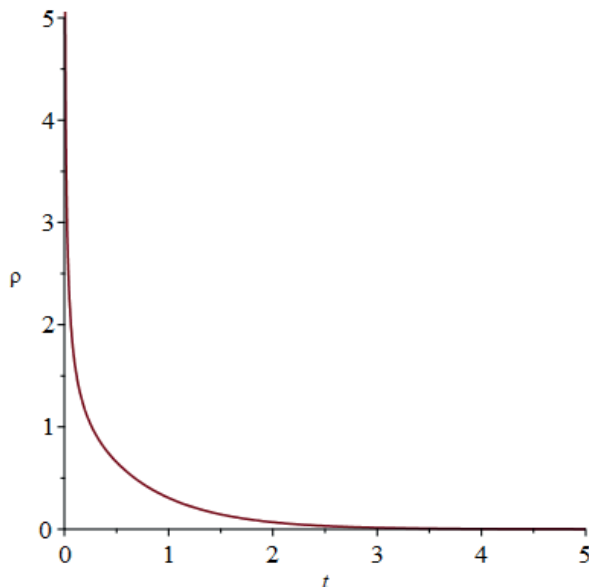
Туынды оң болғандықтан, ғалам кеңейуде (Бревик, 2009). Осыдан көретініміз, егер логарифмдік модификацияланған дәрежелік сұйықтығының тұтқырлығын және оның күнгірт материямен өзара әрекеттесуін ескермесек, қазіргі таңдағы ғаламның үдемелі ұлғаюын сипаттамайтын космологиялық модельді алдық.

Үздіксіздік теңдеуді шешу байланыс мүшесі бар күнгірт материя пен Хаббл функциясы келесідей өрнектеледі

$$\rho_1(t) = \left[\frac{A}{\tilde{a}C_4} \left(\frac{\alpha r}{\tilde{r}} - 1 \right) \arctan \left(\frac{\tilde{a}t + \tilde{z} + \frac{A}{\rho_*}}{C_4} \right) \right], \quad (30)$$

Мұндағы $C_4 \neq 0$ – ерікті тұрақты болып табылады, ал $\tilde{\rho}_0 = \rho_1(0)$. Кейінгі ғалам үшін $t \rightarrow \infty$ шегінде $\rho_1 \rightarrow \tilde{\rho}_0 \exp \left[\frac{2\pi}{\tilde{a}C_4} \left(\frac{\alpha r}{\tilde{r}} - 1 \right) \right]$. Осыған сәйкес, ұсынылған модель ғаламның эволюциясын бақылауларға сәйкес сипаттай алады, материяның үстемдік ету дәуірінен кейінгі үдеу дәуіріне ауысады.

Ал осы (30) теңдеуінде өрнектелген тығыздықтың модель графигі 3 суретте көрсетілген



Сурет 3 Тығыздықтың уақытқа тәуелді графигі

3 суретте бейнеленгендей, энергия тығыздығы әрқашан уақыттың оң және кему функциясы болып қала береді және ол $t \rightarrow \infty$ кезінде нөлге жақындайды. Бұл графиктен энергияның барлық тығыздығы кеңейіп жатқан ғаламды көрсететін, яғни уақыттың оң төмендейтін функциялар екенін көрсетеді.

Қазіргі таңда күнгірт материя және күнгірт энергия тығыздықтары бірдей шама ретіне ие (Бревик, 2021), бірақ Λ CDM моделінде бұл энергия тығыздықтары әртүрлі жолдармен дамиды, сондықтан екі тығыздық та қазіргі уақытта шама ретіне сәйкес келуі үшін ерте ғаламда олардың арасында нақты өлшемдерін алу қажет. Көлемдік тұтқырлық сұйықтықтың энергия тығыздығына тұрақты және пропорционалды екенін ескере отырып (Бревик, 2021), ерте және кейінгі уақыттық ерекшеліктерге әкелетін Λ CDM тәрізді тұтқыр модельдің нақты шешімдері зерттелуде.

Қорытынды

Бұл жұмыста көлемдік тұтқырлығы ζ бар, біртекті және изотропты кеңістіктік-жазықтық кеңістікте логарифмдік модификацияланған дәрежелік күй теңдеуіне негізделген ғаламның күнгірт энергия моделі қарастырылды. Дәрежелік заңы бойынша логарифмдік модификацияланған сұйықтық изотропты деформациялардағы кристалды қатты заттарға ұқсас қасиеттерге ие, тіпті қысым теріс болған жағдайда да. Бұл формализм модельді модельдеуге және кейінгі ғаламның жеделдетілген кеңеюін логотропты күнгірт сұйықтық тұрғысынан түсіндіруге мүмкіндік береді. Сондай-ақ күнгірт материямен өзара әрекеттесуді қарастырдық және екі сұйықтықтың энергия тығыздығы үшін аналитикалық өрнектер алдық. Масштабты фактор $\alpha(t)$ және оның бірінші және екінші туындыларының өрнектеріне сүйене отырып, әр түрлі сипаттама режимдеріне бөлінді: не жеделдетілген кеңейту (қазіргі кездегідей), не баяулайтын кеңейту. Күнгірт материямен өзара әрекеттесусіз тұтқыр емес логарифмдік модификацияланған дәрежелік сұйықтығынан айырмашылығы, модель қазіргі ғаламды сипаттауға қолайлы екендігі дәлелденді.

Көрсетілгендей, сұйықтықтың тұтқырлығы бар күнгірт энергия мен күнгірт материяның өзара әрекеттесуі әртүрлі типтегі ерекшеліктердің сипатына әсер етеді. Бұл жағдай нақты жұмысқа түрткі болды. Байланысты күнгірт сұйықтықтары бар космологиялық сценарий материяның үстемдік ету дәуірінен кейінгі үдеу дәуіріне ауысуды бастан кешіретін ғаламды тудыруы мүмкін екенін көрсетті. Бакылау деректерімен, атап айтқанда Ia (SN Ia) супернова деректерімен және Хаббл функциясымен жұмыста келтірілген логарифмдік модификация мен тұтқырлық жағдайлары жақсы келіседі. Осылайша, жеделдетілген кеңеюдің әртүрлі режимдерін зерттеп, кейінгі ғаламның бұл сипаттамасы қызықты нәтижелерге әкелуі мүмкін деген қорытындылауға болады.

Байланыс теңдеулеріне байланысты Q байланыс мүшесінің табиғаты физикалық тұрғыдан белгісіз екенін байқаймыз. Осы теңдеулердің соңғысы, егер $Q > 0$ болса, көлемдік тұтқырлық болған кезде энергияны сақтау теңдеуі түрінде болады. Алдағы уақытта кейінгі уақыт әлемінің эволюциясының термодинамикалық аспектілерін зерттеу қызығушылық тудырады.

ӘДЕБИЕТТЕР

Авелино А. (2010). Ғаламның үдемелі кеңеюін ынталандыру үшін жаппай тұтқырлығы бар материя үстемдік ететін модельді зерттеу / У.Нукаменди // *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*. — 2010. — № 8. — 009 p.

Бамба К. (2012). Күнгірт энергия космологиясы: әртүрлі теориялық модельдер мен космографиялық сынақтар арқылы баламалы сипаттама / С.Капозицелло, С. Ноджири, С. Д. Одинцов // *Astrophys. Space Sci.* — 2012. — № 342. — Б. 155–228.

Бревик И. (2005). Күнгірт энергия және тұтқыр космология / О.Горбунова // *General Relativity and Gravitation*. — 2005. — № 12. — Б. 2039–2045.

Бревик И. (2005). Тұтқыр космология, энтропия және Карди-Верлинде формуласы / А.Реймер // *Progress in General Relativity and Quantum Cosmology Research*. — 2005. — № 246. — Б. 165–183.

Бревик И. (2009). Болашақ сингулярлыққа жақын 4d және 5d тұтқыр космологияларындағы сингулярлықтарға қысқаша шолу / О.Горбунова *The Problems of Modern Cosmology: A volume in Honour of Professor S.D Odintsov in the Occasion of His 50th Dirthday*. — 2009. — Б.106–113.

Бревик И. (2021). Логарифмді түзетілген күй теңдеуі бойынша тұтқыр байланысқан сұйықтықтар / Мырзакулов К., Жадьранова А. // *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*. — 2021. — № 18. — 2150198 p.

Бревик И. (2021). Термиялық сәулеленудің күнгірт ғаламдағы сингулярлықтарға әсері / А.В. Тимошкин, Танму Пол // *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* — 2021. — №. 18. — 2150113 p.

Бревик И. (2021). Тұтқырлығы бар энтропикалық космологияның термодинамикалық аспектілері / А.В. Тимошкин, // *Int. J. Mod. Phys D*. — 2021. — № 30. — 2150008 p.

Грон О. (1990). Тұтқыр инфляциялық ғаламның модельдері // *Astrophysics and Space Science*. — 1990. — № 173. — Б.191–225.

Капозицелло С. (2018). Сұйықтықтың бір сипаттамасынан ғарыштық үдеу / Р.Д. Агостино, О. Луонго // *Physics of the dark Universe*. — 2018. — №. 20. — Б. 1–12.

Капозицелло С. (2019). Антон-Шмидт ғарыштық сұйықтығының тиімді өріс сипаттамасы / Р.Д. Агостино, Р. Джамбо, О. Луонго, // *Phys. Rev. D*. — 2019. — № 99. — 023532 p.

Колдуэлл Р.Р. (2002). Елес қауіп пе? Күйдің супер-теріс теңдеуі бар күнгірт энергия компонентінің космологиялық салдары // *Phys. Lett.* — 2002. — № 542. — Б. 23–29.

Колдуэлл Р.Р. (2003). Елес энергиясы: $w < -1$ бар күнгірт энергия ғарыштық ақырзаманды тудырады / М. Камионковский, Н.Н. Вайнберг // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — №. 91. — 071301 p.

Майер Б. (2003). Ab-initio лавалар фазаларының серпімді тұрақтылары мен термиялық кенею коэффициенттерін есептеу / Х.Антон, Э. Ботта, М. Метфессельб, Дж. Стихта, Дж. Харриск, П. С. Шмид // *Intermetallics*. — 2003. — №. 11. — Б. 23–32.

Мэн Х.-Х. (2007). Фридман космологиясы күй мен көлемдік тұтқырлықтың жалпыланған теңдеуімен / Дж. Рен, М.-Г. Ху // *Communications in Theoretical Physics*. — 2007. — №. 47. — Б. 379–384.

Мэн Х.-Х. (2009). Фридманның тұтқырлығы бар космологиясы: күнгірт энергияның нақты моделі / Х. Dou // *Communications in Theoretical Physics*. — 2009. — № 52. — Б. 377–382.

Ноджири С. (2003). Кванттық Де Ситтер космологиясы және елес материя / С.Д. Одинцов // *Phys. Lett. B*. — 2003. — № 562. — Б. 147–152.

Ноджири С. (2005). (Фантомдық) күнгірт энергетикалық ғаламдағы сингулярлықтардың қасиеттері / С.Д. Одинцов, С. Цуджикава // *Phys. Rev. D*. — 2005. — № 73. — 063004 p.

Одинцов С.Д. (2018). Күйінің логарифмдік теңдеуі бар космологиялық сұйықтықтар / В.К. Ойконому, А. В. Тимошкин, Е. Н. Саридакис, Р. Мырзакулов // *Annals of Physics*. — 2018. — № 398. — Б. 238–253.

Падманабхан Т. (1987). Тұтқыр ғаламдар / С.М. Читре // *Physics Letters A* – 1987. – № 120 – Б. 433–436.

Рен Дж. (2006). Күйдің тиімді теңдеуімен сипатталған тұтқырлық ортасы (күнгірт сұйықтық) бар космологиялық модель / Х.-Н. Meng // *Physics Letters B*. — 2006. — № 633. — Б. 1–8.

Рен Дж. (2006). Фридман әлеміндегі күйдің, скалярлық өрістің және сусымалы тұтқырлықтың өзгертілген теңдеуі / X.-H. Meng // *Physics Letters B.* — 2006. — № 636. — Б. 5–12.

Рен Дж. (2007). Космологиядағы күйдің бірыңғай теңдеуімен сипатталған күнгірт тұтқыр сұйықтық / X.-H. Meng // *International Journal of Modern Physics D.* — 2007. — № 16. — Б. 1341–1348.

Суэтин Д.В. (2018). Электрондық құрылым, алтыбұрышты субкарбидтердің механикалық және динамикалық тұрақтылығы M2C (M= Tc, Ru, Rh, Pd, Re, Os, Ir және Pt): Ab-initio есептеулері / И.Р. Шейн // *Physics of the Solid State.* — 2018. — № 60. — Б.213–224.

Фараони В. (2002). Фридман-Робертсон-Уокер ашық ғаламдарының жалпы энергиясы туралы // *Int. J. Mod. Phys. D.* — 2002. — № 11. — Б. 471–484.

Фэн Си Джей (2009). Тұтқыр Риччи күнгірт энергиясы / X.З. Ли // *Physics Letters B.* — 2009. — № 680. — Б. 355–358.

Чаванис П.Х. (2016). Логотропты күнгірт сұйықтық күнгірт материя мен күнгірт энергияның бірігуі ретінде // *Phys. Lett. B.* — 2016. — №758. — Б. 59–66.

Элизальде, Э.В. (2014). ФРУ әлеміндегі күнгірт материямен біріктірілген біртекті емес тұтқыр күнгірт сұйықтық / В.Обухов, А.В. Тимошкин, // *Mod. Phys. Lett. A.* — 2014. — № 29. —1450132 p.

REFERENCES

Avelino A. (2010). Exploring a matter-dominated model with bulk viscosity to drive the accelerated expansion of the Universe / U. Nucamendi // *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics.* — 2010. — No. 8. — 009 p.

Bamba K. (2012). Dark energy cosmology: the equivalent description via different theoretical models and cosmography tests / S. Capozziello, S. Nojiri, S. D. Odintsov // *Astrophys. Space Sci.* — 2012. — No. 342. — Pp. 155–228.

Brevik I. (2005). Dark energy and viscous cosmology / O. Gorbunova // *General Relativity and Gravitation.* — 2005. — No. 12. — Pp. 2039–2045.

Brevik I. (2005). Viscous cosmology, entropy, and the Cardy-Verlinde formula / A. Reimer // *Progress in General Relativity and Quantum Cosmology Research.* — 2005. — No. 246. — Pp. 165–183.

Brevik I. (2009). A brief review of the singularities in 4D and 5D viscous cosmologies near the future singularity / O. Gorbunova // *The Problems of Modern Cosmology: A volume in Honour of Professor S.D Odintsov in the Occasion of His 50th Dirthday.* — 2009. — Pp.106–113.

Brevik I. (2021). The effect of thermal radiation on singularities in the dark universe / A. V. Timoshkin, Tanmou PauL, // *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* – 2021. – No. 18 – 2150113 p.

Brevik I. (2021). Thermodynamic aspects of entropic cosmology with viscosity / A. V. Timoshkin, // *Int. J. Mod. Phys D.* — 2021. — No. 30. — 2150008 p.

Brevik I. (2021). Viscous coupled fluids in terms of a log-corrected equation-of-state / MyrzakuLov K., Zhadyranova A. // *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics.* — 2021. — No. 18. —2150198 p.

Caldwell R.R. (2003). Phantom energy: dark energy with $w < -1$ causes a cosmic doomsday / M. Kamionkowski, N. N. Weinberg // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — No. 91. — 071301 p.

Caldwell R.R. (2002). A phantom menace? Cosmological consequences of a dark energy component with super-negative equation of state // *Phys. Lett.* — 2002. — No. 542. — Pp. 23–29.

Capozziello S. (2018). Cosmic acceleration from a single fluid description / R. D’Agostino, O. Luongo // *Physics of the dark Universe.* — 2018. — No. 20. — Pp. 1–12.

Capozziello S. (2019). Effective field description of the Anton-Schmidt cosmic fluid / R. D’Agostino, R. Giamb’o, O. Luongo, // *Phys. Rev. D.* — 2019. — No. 99. — 023532 p.

Chavanis P.H. (2016). The logotropic dark fluid as a unification of dark matter and dark energy // *Phys. Lett. B.* — 2016. —No.758. — Pp. 59–66.

- Elizalde E.V. (2014). Inhomogeneous viscous dark fluid coupled with dark matter in the FRW universe / V. Obukhov, A. V. Timoshkin, // *Mod. Phys. Lett. A.* — 2014. — No. 29. — 1450132 p.
- Faraoni V. (2002). On the total energy of open Friedmann-Robertson-Walker universes // *Int. J. Mod. Phys. D.* — 2002. — No. 11. — Pp. 471–484.
- Feng C.-J. (2009). Viscous Ricci dark energy / X.-Z. Li // *Physics Letters B.* — 2009. — No. 680. — Pp. 355–358.
- Gron O. (1990). Viscous inflationary universe models // *Astrophysics and Space Science.* — 1990. — No. 173. — Pp.191–225.
- Mayer B. (2003). Ab-initio calculation of the elastic constants and thermal expansion coefficients of laves phases, Intermetallics / H. Antona, E. Botta, M. Methfesselb, J. Stichta, J. Harrisc, P. C. Schmid // *Intermetallics.* — 2003. — No. 11. — Pp. 23–32.
- Meng X.-H. (2007). Friedmann cosmology with a generalized equation of state and bulk viscosity / J. Ren, M.-G. Hu // *Communications in Theoretical Physics.* — 2007. — No. 47. — Pp. 379–384.
- Meng X.-H. (2009). Friedmann cosmology with bulk viscosity: a concrete model for dark energy / X. Dou // *Communications in Theoretical Physics.* — 2009. — No. 52. — Pp. 377–382.
- Nojiri S. (2005). Properties of singularities in the (phantom) dark energy universe / S. D. Odintsov, S. Tsujikawa // *Phys. Rev. D.* — 2005. — No. 73. — 063004 p.
- Nojiri S. (2003). Quantum de Sitter cosmology and phantom matter /S.D. Odintsov // *Phys. Lett. B.* — 2003. — No. 562. — Pp. 147–152.
- Odintsov S.D. (2018). Cosmological fluids with logarithmic equation of state / V. K. Oikonomou, A. V. Timoshkin, E. N. Saridakis, R. Myrsakulov // *Annals of Physics.* — 2018. — No. 398. — Pp. 238–253.
- Padmanabhan T. (1987). Viscous universes / S. M. Chitre // *Physics Letters A.* — 1987. — No. 120. — Pp. 433–436.
- Ren J. (2006). Cosmological model with viscosity media (dark fluid) described by an effective equation of state / X.-H. Meng // *Physics Letters B.* — 2006. — No.633. — Pp. 1–8.
- Ren J. (2007). Dark viscous fluid described by a unified equation of state in cosmology / X.-H. Meng // *International Journal of Modern Physics D.* — 2007. — No.16. — Pp. 1341–1348.
- Ren J. (2006). Modified equation of state, scalar field, and bulk viscosity in Friedmann universe / X.-H. Meng // *Physics Letters B.* — 2006. — No.636. — Pp. 5–12.
- Suetin D.V. (2018). Electronic structure, mechanical and dynamical stability of hexagonal subcarbides M₂C (M= Tc, Ru, Rh, Pd, Re, Os, Ir, and Pt): Ab-initio calculations / I. R. Shein // *Physics of the Solid State.* —2018. — No. 60. — Pp.213–224.

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 50–62

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.256>

UDK 52-384

© V.Yu. Kim*, Ch.T. Omarov, 2024

Fesenkov Astrophysical institute, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: kim@fai.kz

FIELD DEROTATOR FOR A TELESCOPE WITH ALTAZIMUTH MOUNT

Kim V.Yu. — candidate of physics and mathematics, a leading researcher at the Laboratory of physics of stars and nebulae at Fesenkov Astrophysical Institute. 050020, Observatoriya 23, Almaty, Kazakhstan
E-mail: kim@fai.kz, ORCID:0000-0003-1202-9751;

Omarov Ch.T. — professor, candidate of physics and mathematics, director of Fesenkov Astrophysical Institute. 050020, Observatoriya 23, Almaty, Kazakhstan
E-mail: chingis.omarov@fai.kz, ORCID:0000-0002-1672-894X.

Abstract. The article discusses a technique for determining the rotation angles and field rotation speed of a telescope's photographic sensors on an alt-azimuth mount. Rotation of the photographic sensors according to the specified parameters must be done to compensate for side effects associated with the non-parallelism of the axis of rotation of the celestial sphere and the axis of rotation of the telescope. Mechanical devices designed to compensate for these side effects are called field derotators. The relevance of the problem is due to the need to study dim deep space objects (active galactic nuclei, optical afterglows of gamma-ray bursts, etc.) on large telescopes with alt-azimuth mounts, on which it is impossible to carry out long-term observations without rotating the camera field. This technique can be used to design derotators and create accompanying programs necessary for obtaining high-quality photographic images of astronomical objects with long exposures.

Keywords: astronomical observations, derotator, telescope, observatory

Acknowledgments. *The research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (grant No. AP19676713 and program No. BR21881880).*

© В.Ю. Ким*, Ш.Т. Омаров, 2024

В.Г. Фесенков атындағы астрофизика институты.

E-mail: kim@fai.kz

АЛТ-АЗИМУТАЛДЫ МОНТАЖДАУДАН ӨТКЕН ТЕЛЕСКОПТЫҢ ДЕРОТАТОРЛЫ ӨРІСІ

Ким В.Ю. — физика-математика ғылымдарының кандидаты, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институтының жетекші ғылыми қызметкері. 050020, Обсерватория көш. 23, Алматы, Қазақстан

E-mail: kim@fai.kz, ORCID:0000-0003-1202-9751;

Омаров Ш.Т. — профессор, физика-математика ғылымдарының кандидаты, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институтының директоры. 050020, Обсерватория көш. 23, Алматы, Қазақстан

E-mail: chingis.omarov@fai.kz, ORCID:0000-0002-1672-894X.

Аннотация. Мақалада, альт-азимуталды монтаждаудан өткен телескоптың фотографиялық матрица өрісінің айналу жылдамдығы және бұрылу бұрыштарын анықтауға әдістер қарастырылған. Берілген параметрлер бойынша фотографиялық матрицаның айналуы аспан сферасының айналу осі мен телескоптың айналу осіне параллель болмауына байланысты жанама әсерлердің орнын толтыруға жасалуы керек. Көрсетілген жанама әсерлердің орнын толтыруға арналған механикалық өріс деротаторлары деп аталады. Тапсырманың өзектілігі камераның өрісін айналдырмай ұзақ мерзімді бақылаулар жүргізу мүмкін болмайтын альт-азимуталды қондырғылары бар үлкен телескоптарда алыс ғарыштың әлсіз объектілерін (ядролары белсенді галактикаларды, гамма-сәулелерінің оптикалық кейінгі жарқылдары және т.б.) зерттеу қажеттілігіне байланысты қарастырылды. Бұл әдісті деротаторларды жобалау және ұзақ экспозициялары бар астрономиялық объектілердің жоғары сапалы фотографиялық кескіндерін алуға қажетті ұқсас бағдарламаларды жасау кезінде қолдануға болады.

Түйін сөздер: астрономиялық бақылаулар, деротатор, телескоп, обсерватория

Алғыс. Зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті қаржыландырды (грант № AP19676713 және бағдарлама № BR21881880).

© **В.Ю. Ким***, **Ч.Т. Омаров**, 2024

Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова.

E-mail: kim@fai.kz

ДЕРОТАТОР ПОЛЯ ДЛЯ ТЕЛЕСКОПА НА АЛЬТ-АЗИМУТАЛЬНОЙ МОНТИРОВКЕ

Ким В.Ю. — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Лаборатории физики звезд и туманностей Астрофизического института им. В.Г. Фесенкова. 050020, ул. Обсерватория 23, Алматы, Казахстан

E-mail: kim@fai.kz, ORCID:0000-0003-1202-9751;

Омаров Ч.Т. — профессор, кандидат физико-математических наук, директор Астрофизического института им. В.Г. Фесенкова. 050020, ул. Обсерватория 23, Алматы, Казахстан

E-mail: chingis.omarov@fai.kz, ORCID:0000-0002-1672-894X.

Аннотация. В статье рассматривается методика определения углов поворота и скорости вращения поля фотографической матрицы телескопа на

альт-азимутальной монтировке. Вращение фотографической матрицы по указанным параметрам необходимо производить для компенсации побочных эффектов, связанных с непараллельностью оси вращения небесной сферы и оси вращения телескопа. Механические устройства, предназначенные для компенсации указанных побочных эффектов, называются деротаторами поля. Актуальность задачи обусловлена необходимостью исследования тусклых объектов дальнего космоса (активные ядра галактик, оптические послесвечения гамма-всплесков и пр.) на больших телескопах с альт-азимутальными монтировками, на которых невозможно проводить длительные наблюдения без ротации поля камеры. Данная методика может быть применена при проектировании деротаторов и создания сопутствующих программ, необходимых для получения качественных фотографических изображений астрономических объектов с длительными экспозициями.

Ключевые слова: астрономические наблюдения, деротатор, телескоп, обсерватория

Финансирование. Исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19676713 и программа № BR21881880).

Введение

Деротатор поля телескопа, также известный как ротатор поля зрения или изображения, является устройством, используемым в астрономии для компенсации вращения небесной сферы во время фотографических съемок с длительной выдержкой на телескопах с альт-азимутальной монтировкой. Это устройство необходимо для удержания поля изображения звезд без искажений, которые имеют место при непараллельности плоскости вращения телескопа и плоскости небесного экватора (Barboza, 2018; Brunelli, 2012; Keskin, 2020). Без деротатора, изображение звезд, располагающихся не на оптической оси, даже при точном ведении телескопа по азимуту и высоте, имели бы не точечные контуры, а представляли бы собой дуги окружностей с центром, совпадающим с точкой пересечения оптической оси и плоскости матрицы. В данной работе предлагается алгоритм для расчета вышеуказанных параметров, необходимых при проектировании деротатора поля телескопа и создания сопутствующего программного обеспечения. Актуальность задачи обусловлена необходимостью создания наземных телескопов с большими апертурами для исследования слабых объектов дальнего космоса (Bezawada, 2023; Green, 2023). Современные большие телескопы функционируют с использованием альт-азимутальных монтировок, что требует привлечения деротаторов поля для получения корректных астрономических снимков (Barboza, 2018; Brunelli, 2012; Keskin, 2020).

Материалы и основные методы

Деротатор квази-непрерывно вращает поле зрения (поле фотографической

матрицы) телескопа. На рисунке 1 показано положение фотографической матрицы относительно плоскости альмукантарата a для центральной точки O (точки пересечения оптической оси с плоскостью матрицы). Из геометрических соображений ясно, что горизонтальная линия матрицы d должна лежать в плоскости суточного круга точки O , соответственно вертикальная линия матрицы c должна быть касательной к кругу склонения точки O . Здесь под точкой O правильнее понимать ее проекцию на небесную сферу. Следовательно угол поворота поля γ соответствует углу между прямыми a и d , что эквивалентно углу между прямыми c и b на рисунке.

В последующих формулах будем придерживаться следующих обозначений:

LST - Локальное звездное время

α - Прямое восхождение (RA)

δ - Склонение (DEC)

t - Часовой угол

z - Зенитное расстояние

φ - Широта местности

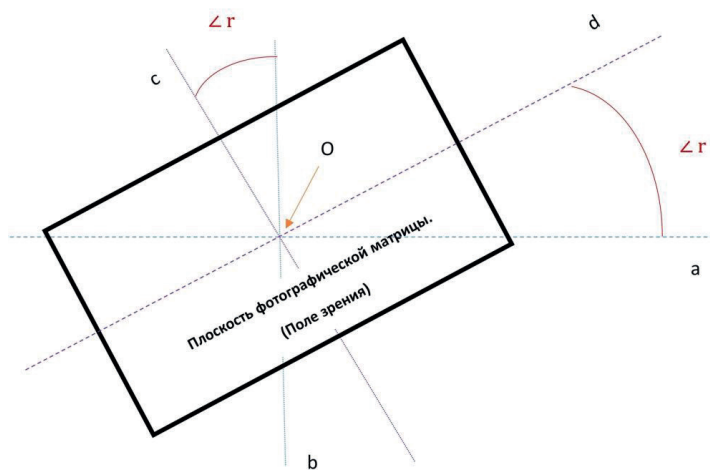


Рисунок 1. – Схематическое изображение поля матрицы относительно математического горизонта. Условные обозначения: a - линия альмукантарата, которая соответствует пересечению плоскостей альмукантарата для точки O (центра поля зрения) и плоскости поля зрения телескопа (плоскости матрицы), b - линия отвеса, c - вертикальная линия матрицы, d - горизонтальная линия матрицы. Все линии пересекаются в одной точке O . Угол γ и есть искомый угол поворота поля зрения, на который должна повернуться матрица деротатором поля для объекта с координатами α и δ , положением наблюдателя на широте φ и локальным звездным временем LST.

Вывод формулы для расчета угла поворота фотографической матрицы

Теорема синусов для сферического треугольника имеет следующий вид (Жаров, 2022; Кононович, 2022; Блажко, 1948):

$$\frac{\sin x}{\sin X} = \frac{\sin y}{\sin Y} = \frac{\sin z}{\sin Z} \quad (1)$$

В свою очередь теорема косинусов для сферического треугольника (Жаров, 2022; Кононович, 2022; Блажко, 1948):

$$\cos X = -\cos Y \times \cos Z + \sin Y \times \sin Z \times \cos x \quad (2)$$

Здесь X, Y, Z - двугранные углы; x, y, z - дуги сторон, выражаемые в угловой мере (см. Рис. 2). В сферическом треугольнике отношение синуса стороны к синусу противоположного угла есть величина постоянная.

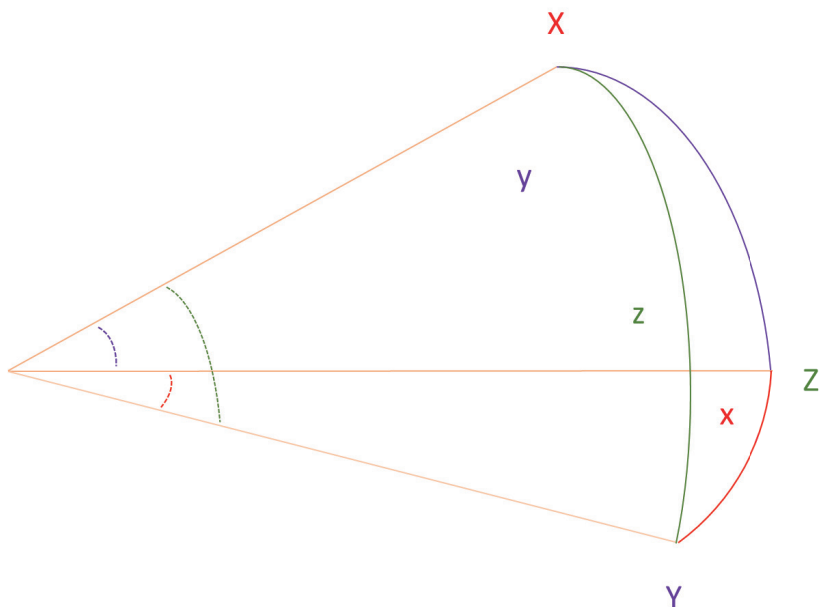


Рисунок 2. – Схематическое изображение сферического треугольника XYZ.

Теперь перенесем эти свойства на небесную сферу. На рисунке 3 нас интересует сферический треугольник с вершинами PZΣ. Используя формулу 1, выразим синус угла γ .

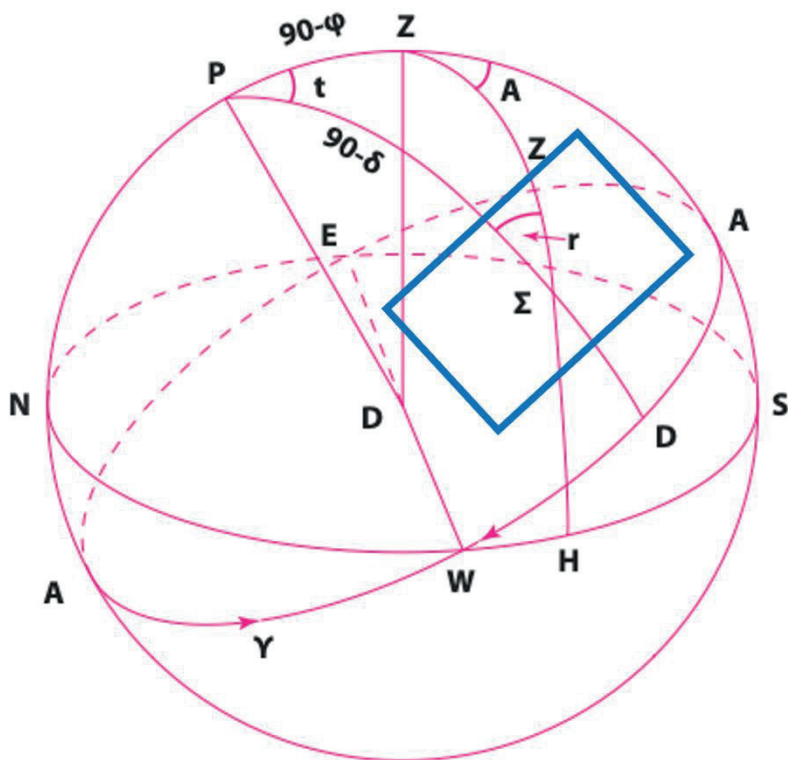


Рисунок 3. – Небесная сфера. Синяя рамка - проекция фотографической матрицы на небесную сферу. Точка Σ - проекция оптической оси телескопа (центральная звезда) на рисунке 1 обозначается как точка O, круг SWNE - математический горизонт, AWAE - небесный экватор, A - азимут точки Σ , δ - ее склонение, t - часовой угол, ϕ - широта места наблюдения, r - искомый угол поворота матрицы.

$$\sin r = \frac{\sin t \times \cos \phi}{\sqrt{1 - (\cos t \times \cos \delta \times \cos \phi + \sin \delta \times \sin \phi)^2}} \quad (3)$$

Так как часовой угол светила связан с локальным звездным временем (LST) и прямым восхождением α формулой: $t = LST - \alpha$, то произведем замену и выразим синус угла r:

$$\sin r = \frac{\sin(LST - \alpha) \times \cos \phi}{\sqrt{1 - [\cos(LST - \alpha) \times \cos \delta \times \cos \phi + \sin \delta \times \sin \phi]^2}} \quad (4)$$

Таким образом мы получили одну из формул для расчета угла поворота фотографической матрицы телескопа с альт-азимутальной монтировкой в зависимости от звездного времени для заданного центра и положения наблюдателя. Для устранения неопределённости квадранта угла r необходимо вычислить его косинус угла r из теоремы косинусов для сферического треугольника (используя формулу 2). Получаем:

$$\cos r = \cos t \times \cos A + \sin t \times \sin A \times \cos \phi \quad (5)$$

Из формулы (5) удобно найти производную по часовому углу (по времени) t :

$$\frac{dr}{dt} = - \frac{\sin A \times \cos t \times \cos \phi - \cos A \times \sin t}{\sqrt{1 - [\sin A \times \sin t \times \cos \phi + \cos A \times \cos t]^2}} \quad (6)$$

Обсуждение и результаты

Интересно рассмотреть крайние случаи. Например, когда телескоп наблюдает в момент кульминации светила, соответственно часовой угол равен нулю или 180° ($t = LST - \alpha = 0$ или 180°), в этом случае угол γ обращается в нуль. Когда наблюдатель находится на северном или южном полюсе (т. е. $\phi = 90^\circ$ или $\phi = -90^\circ$), то $\cos \phi = 0$ и тогда угол γ всегда равен нулю, что неудивительно, так как в этом случае установка альт-азимутальной монтировки телескопа будет совпадать с экваториальной.

Для создания программного обеспечения управления деротатором поля необходимо с достаточной точностью вычислять локальное звездное время (LST) из местного времени и координат места наблюдения. Для полноты информации в разделе Приложения размещены алгоритмы вычисления различных типов времени и юлианских дат (Duffett-Smith, 2011; Meeus, 1998; Brumberg, 2004). В совокупности с формулами, приведенными в предыдущем разделе это позволит создать полностью автономный программный пакет управления, не требующий привлечения внешних интернет-ресурсов.

Заключение

В сети интернет встречается множество различных предложений по уже готовым устройствам ротации астрономических камер, которые напрямую можно использовать для соответствующего оборудования (Optcorp; Prima luce lab; Swiss optic; Robotics, 2024). Однако, при необходимости самостоятельного изготовления такого устройства, возникают вопросы по вычислению угла поворота поля в зависимости от времени и координат звезд и наблюдателя, а также вопрос об угловой скорости вращения фотографической матрицы в конкретный момент времени. В данной работе мы приводим математическую интерпретацию параметров вращения поля зрения телескопа на альт-азимутальной монтировке. На этой основе возможно создание собственного автономного программного обеспечения для вычислений и управления ротацией поля, а также для предпроектных исследований и конструирования астрономических деротаторов.

Приложения

Вспомогательные алгоритмы, необходимые для корректной работы деротатора поля телескопа (Duffett-Smith, 2011; Meeus, 1998; Brumberg, 2004).

Алгоритм нахождения юлианской даты (JD) из календарной даты

Пусть дан год (year), месяц (month), день (day) и всемирное время UTC (hh:mm:ss). Необходимо найти юлианскую дату (JD), соответствующую этому времени.

Примечание: юлианская дата — это число суток, прошедших начиная с

полудня понедельника, 01 января 4713 года до н. э. юлианского календаря или, что то же самое, 24 ноября 4714 года до н. э. григорианского календаря до какой-либо даты.

Шаг 1. Если month равен 1 или 2, то положить $year = year - 1$, а также $month = month + 12$, для всех остальных случаев month ничего не менять.

Шаг 2. Вводим целочисленную переменную $int a = year / 100$. Здесь при целочисленном делении year на 100 отбрасываем остаток.

Шаг 3. Вводим целочисленную переменную $int b = 2 - a + [int](a / 4)$. Здесь при целочисленном делении отбрасываем остаток.

Шаг 4. Вводим целочисленную переменную $int c = (365.25 * year)$. Здесь при целочисленном умножении отбрасываем остаток.

Шаг 5. Вводим целочисленную переменную $int d = 30.6001 * (month + 1)$. Здесь при целочисленном умножении отбрасываем остаток.

Шаг 6. Вводим переменную с плавающей запятой float t и присваиваем ей значение равное времени UTC (hh:mm:ss), но в десятичной системе. Например, 14:30:00 будет соответствовать в десятичных единицах 14.5

Шаг 7. Рассчитываем юлианскую дату JD как переменную с плавающей запятой (float):

$$float JD = 1720994.5 + b + c + d + day + t/24$$

Шаг 8. Возвращаем юлианскую дату JD

Пример: для календарной даты 31 марта 2023 и времени UTC 12:17:45 (Здесь $year = 2023$, $month = 3$, $day = 31$, $t = 12.2958333$) юлианская дата соответствует: $JD = 2460035.0123264$

Алгоритм нахождения календарной даты из юлианской даты (JD)

Пусть дана юлианская дата (JD), необходимо найти календарную дату (year, month, day) и время UTC из нее.

Шаг 1. Положим $JD = JD + 0.5$

Шаг 2. Введем целочисленную переменную JD_{int} , присвоив ей значение целой части JD:

$$int JD_{int} = [int]JD$$

Шаг 3. Введем переменную с плавающей запятой $frac_{JD}$:

$$float frac_{JD} = JD - JD_{int}$$

Шаг 4. Объявляем целочисленную переменную $int A = 1$. Объявляем целочисленную переменную B:

$$int B = JD_{int} + 1 + A - [int](A/4)$$

Шаг 5. Если удовлетворяется условие $JD_{int} > 2299160$, тогда A присвоить значение с отбрасыванием дробной части:

$$A = [int]((JD_{int} - 1867216.25)/36524.25)$$

Если же условие не выполняется ($JD_{int} > 2299160$), тогда A остается равным единице ($A = 1$)

Шаг 6. Введем целочисленную переменную C:

$$\text{int } C = B + 1524$$

Шаг 7. Введем целочисленную переменную D (здесь также отбрасывается дробная часть):

$$\text{int } D = (C - 122.1)/365.25$$

Шаг 8. Введем целочисленную переменную E (здесь также отбрасывается дробная часть):

$$\text{int } E = 365.25 * D$$

Шаг 9. Введем целочисленную переменную G (здесь также отбрасывается дробная часть):

$$\text{int } G = (C - E)/30.6001$$

Шаг 10. Введем переменную с плавающей запятой, соответствующую дню с дробной частью (day_{wt}):

$$\text{float } \text{day}_{wt} = C - E + \text{frac}_{JD} - [\text{int}](30.6001 * G)$$

Шаг 11. Находим месяц (month) как целочисленную переменную. Если ($G > 13.5$), тогда:

$$\text{int } \text{month} = G - 13$$

Если не выполняется условие ($G > 13.5$), тогда:

$$\text{int } \text{month} = G - 1$$

Шаг 12. Находим год (year) как целочисленную переменную. Если ($\text{month} < 2.5$), тогда:

$$\text{int } \text{year} = D - 4715$$

Если не выполняется условие ($\text{month} < 2.5$), тогда:

$$\text{int } \text{year} = D - 4716$$

Шаг 13. Находим целочисленный день (day), путем отбрасывания дробного остатка от (day_{wt}):

$$\text{int } \text{day} = [\text{int}]\text{day}_{wt}$$

Шаг 14. Находим время UTC (часы с десятичной дробной частью)

$$\text{float } \text{hours}_{dec} = (\text{day}_{wt} - \text{day}) * 24$$

Шаг 15. Возвращаем значения трех переменных: year, month, day, hours_{dec}

Пример: для юлианской даты $JD = 2460035.0123264$, соответствующая календарная дата и время: year = 2023, month = 3, day = 31, $\text{hours}_{dec} = 12.295833595$ или 31 марта 2023 года UTC 12:17:45

Алгоритм нахождения глобального звездного времени (GST) из всемирного времени (UTC)

Пусть дан год (year), месяц (month), день (day) и всемирное время UTC (hh:mm:ss). Необходимо найти из этих данных глобальное звездное время (GST)

Шаг 1. Для year, month, day находим юлианскую дату JD (см. Предыдущий алгоритм) без учета UTC (здесь UTC не учитываем, то есть $UTC=0$, но только на этом шаге).

Шаг 2. Вводим переменную с плавающей запятой centuries:
 $float\ centuries = (JD - 2451545)/36525$

Шаг 3. Вводим переменную с плавающей запятой T_0 :
 $float\ T_0 = 6.697374558 + (2400.051336 * centuries) +$
 $+ (0.000025862 * centuries^2)$

Шаг 4. Находим остаток от деления на 24:
 $T_0 = T_0 \% 24$

Шаг 5. Если T_0 меньше нуля ($T_0 < 0$), тогда положить:
 $T_0 = T_0 + 24$

Шаг 6. UTC переводим в десятичную систему. Вводим новую переменную с плавающей запятой:

$$float\ UTC_{corr} = UTC * 1.002737909$$

Шаг 7. Находим глобальное звездное время (GST) в десятичной системе как переменную с плавающей запятой:

$$float\ GST = T_0 + UTC_{corr}$$

Шаг 8. Если GST больше 24 ($GST > 24$), то
 $GST = GST - 24$

или если GST меньше нуля ($GST < 0$), то:
 $GST = GST + 24$

Шаг 9 Возвращаем значение GST

Пример: 31 марта 2023 при UTC 12:17:45 соответствует GST = 0.87042835622799 или GST = 00:52:13.54

Алгоритм нахождения локального звездного времени (LST) из всемирного времени (UTC)

Пусть дан год (year), месяц (month), день (day), всемирное время (UTC) (hh:mm:ss) и долгота места наблюдения (λ) в градусах. Необходимо найти из этих данных локальное звездное время LST.

Примечание. Здесь важно учитывать тип долготы местности (восточная или западная).

Шаг 1. Для даты и времени, которое дано на входе находим глобальное звездное время (GST) (см. предыдущий алгоритм).

Шаг 2. Если долгота места наблюдения западная, то положить $\lambda = -\lambda$, если восточная, то ничего не менять.

Шаг 3. Вводим переменную с плавающей запятой LST, которая и будет локальным звездным временем.

$$float\ LST = GST + (\lambda/15)$$

Примечание. Здесь выражение ($\lambda / 15$) дает преобразование градусов долготы в часы. То есть 360 градусов это 24 часа, следовательно 15 градусов соответствуют 1 часу

Шаг 4. Если LST больше 24 часов ($LST > 24$), то $LST = LST - 24$. Или если LST меньше нуля ($LST < 0$), то $LST = LST + 24$

Шаг 5. Возвращаем значение LST

Пример: локальное звездное время LST на 01 апреля 2023, UTC 04:50:10 если наблюдатель находится на долготе $\lambda = 76.92$ восточной долготы (E) соответствует $LST = 22.583991918119$ или $LST = 22:35:02$

Примечание. Если требуется найти локальное звездное время (LST) из местного времени (LT), то из местного времени находим всемирное время (UTC) путем вычитания часового пояса ($UTC = LT - \text{Time_zone}$) и далее следуя этому алгоритму, находим LST

Алгоритм нахождения всемирного времени (UTC) из глобального звездного времени (GST)

Пусть дан год (year), месяц (month), день (day) и глобальное звездное время (GST) (hh:mm:ss). Необходимо найти из этих данных всемирное время UTC.

Шаг 1. Для year, month, day находим юлианскую дату JD (см. алгоритмы выше) без учета GST (здесь GST не учитываем, то есть $GST=0$, но только на этом шаге)

Шаг 2. Вводим переменную с плавающей запятой centuries:

$$\text{float centuries} = (JD - 2451545) / 36525$$

Шаг 3. Вводим переменную с плавающей запятой T_0 :

$$T_0 = 6.697374558 + (2400.051336 * \text{centuries}) + \\ + (0.000025862 * \text{centuries}^2)$$

Шаг 4. Находим остаток от деления на 24

$$T_0 = T_0 \% 24$$

Шаг 5. Если T_0 меньше нуля ($T_0 < 0$), тогда положить

$$T_0 = T_0 + 24$$

Шаг 6. GST переводим в десятичную систему (если еще не переведена). Вводим новую переменную с плавающей запятой UTC_{corr} :

$$\text{float } UTC_{corr} = GST - T_0$$

Шаг 7. Если UTC_{corr} больше 24 ($UTC_{corr} > 24$), то

$$UTC_{corr} = UTC_{corr} - 24$$

или если UTC_{corr} меньше нуля ($UTC_{corr} < 0$), то

$$UTC_{corr} = UTC_{corr} + 24$$

Шаг 8. Вводим переменную с плавающей запятой UTC, которая и соответствует времени UTC в десятичной системе:

$$UTC = UTC_{corr} * 0.9972695663$$

Шаг 9. Возвращаем значение UTC.

Пример: 02 апреля 2023 при глобальном звездном времени GST 16:27:15 время UTC = 3.7714908668499 или UTC = 03:46:17

Алгоритм нахождения всемирного времени (UTC) из локального звездного времени (LST)

Пусть дан год (year), месяц (month), день (day), локальное звездное время LST и долгота места наблюдения (λ) в градусах. Необходимо найти из этих данных всемирное время (UTC) (hh:mm:ss).

Шаг 1. Переводим локальное звездное время LST в десятичную систему (если еще не переведено).

Шаг 2. Если долгота места наблюдения восточная, то положить $\lambda = -\lambda$, если западная, то ничего не менять.

Шаг 3. Вводим переменную с плавающей запятой GST, которая будет глобальным звездным временем

$$\text{float GST} = \text{LST} + (\lambda/15)$$

Примечание. Здесь выражение $(\lambda/15)$ дает преобразование градусов долготы в часы.

Шаг 4. Если GST больше 24 часов (GST > 24), то отнять от GST 24, то есть GST = GST - 24. Или если GST меньше нуля (GST < 0), то прибавить к GST 24 часа, то есть GST = GST + 24

Шаг 5. Зная значение GST для определенного года (year), месяца (month), дня (day) по алгоритму, изложенному выше находим всемирное время UTC.

Шаг 5. Возвращаем значение UTC.

Пример: если наблюдатель находится на долготе $\lambda = 76.92$ восточной долготы (E) на 01 апреля 2023, локальное звездное время 14:34:10, то международное время будет соответствовать значению UTC = 20.777916417316 или UTC = 20:46:40

ЛИТЕРАТУРА

Barboza S., Pott J.-U., Rohloff R.-R., Müller F., Hofferbert R., Münch N., Mohr L., Ramos J., Ebert M., Glück M., Wagner J., Kärcher H. J., Schlossmacher W., Häberle M. (2018). The MICADO first light imager for ELT: derotator design status and prototype results., Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy VII, — 10702: 107028T. — DOI: <https://doi.org/10.1117/12.2311683> (in Eng.)

Bezawada N., George E., Ives D., Alvarez D., Serra B., Mehrgan L., Müller E., Haug M., Leveratto S., Pfuhl O., Guzman R., Guidolin I., Jost A., Popovic D., Moins C., Klein B., Conzelmann R., Accardo M., Brinkmann M. (2023). Infrared detectors for first generation extremely large telescope instruments and their characterization program, Astronomische Nachrichten, — 344:e20230061. — DOI: <https://doi.org/10.1002/asna.20230061> (in Eng.)

Brumberg V.A., Glebova N.I., Lukashova M.V., Malkov A.A., Pitjeva E.V., Rumjantseva L.I., Svshnikov M.L., Fursenko M.A. (2004). Ephemeris astronomy, Transactions of the Institute of Applied Astronomy RAS, — 10:1–479. — DOI: no DOI (in Russ.)

Brunelli A., Bergomi M., Dima M., Farinato J., Magrin D., Maraffatto L., Ragazzoni R., Viotto V., Bertram T., Bizenberger P., Conrad A., Herbst T., Meschke D. (2012). Tips and tricks for aligning an image derotator., Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy IV, — 8446: 84464L. — DOI: <https://doi.org/10.1117/12.926884> (in Eng.)

Duffett-Smith P., Zwart J. (2011). *Practical Astronomy with your Calculator or Spreadsheet. Fourth edition*, Cambridge University Press, United Kingdom. — ISBN 978-0-521-14654-8 (in Eng.)

Green R. (2023). Update on the US Extremely Large Telescope Program, The NOIRLab Mirror, — 5:44. — DOI: no DOI (in Eng.)

Keskin O., Unal A.C., Koc I.M., Jolissaint L., Yesilyaprak C. (2020). Advances for the 4m

DAG Telescope in Flange derotator., Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series, — 11445: 1144545. — DOI: <https://doi.org/10.1117/12.2560247> (in Eng.)

Meeus J. (1998). *Astronomical algorithms*. Second edition. Richmond: Willmann-Bell, USA. — ISBN: 0943396611 (in Eng.)

Optcorp (2024). — <https://optcorp.com/collections/camera-angle-adjusters-rotators>

Prima luce lab (2024). — <https://www.primalucelab.com/rotators/>

Robotics (2024). — <https://www.robotics.nl/en/8573-rotators>

Swiss optic (2024). — <https://swissopticsystem.com/portfolio-items/derotator-for-4m-ground-telescope-dag/>

Блажко С.Н. (1948). *Курс сферической астрономии*, — Москва, Гостехиздат. (in Russ.)

Жаров В.Е. (2022). *Сферическая астрономия*, — Москва, Изд. ДМК-пресс. — ISBN 978-5-89818-109-3 (in Russ.)

Кононович Э.В., Мороз В.И. (2022). *Общий курс астрономии*, — Москва, Изд. URSS. — ISBN 978-5-9519-2335-6 (in Russ.)

REFERENCES

Barboza S., Pott J.-U., Rohloff R.-R., Müller F., Hofferbert R., Münch N., Mohr L., Ramos J., Ebert M., Glück M., Wagner J., Kärcher H.J., Schlossmacher W., Häberle M. (2018). The MICADO first light imager for ELT: derotator design status and prototype results., *Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy VII*, — 10702: 107028T. — DOI: <https://doi.org/10.1117/12.2311683> (in Eng.)

Bezawada N., George E., Ives D., Alvarez D., Serra B., Mehrgan L., Müller E., Haug M., Leveratto S., Pfühl O., Guzman R., Guidolin I., Jost A., Popovic D., Moins C., Klein B., Conzelmann R., Accardo M., Brinkmann M. (2023). Infrared detectors for first generation extremely large telescope instruments and their characterization program, *Astronomische Nachrichten*, — 344:e20230061. — DOI: <https://doi.org/10.1002/asna.20230061> (in Eng.)

Brumberg V.A., Glebova N.I., Lukashova M.V., Malkov A.A., Pitjeva E.V., Rumjantseva L.I., Sveshnikov M.L., Fursenko M.A. (2004). Ephemeric astronomy, *Transactions of the Institute of Applied Astronomy RAS*, — 10:1-479. — DOI: no DOI (in Russ.)

Brunelli A., Bergomi M., Dima M., Farinato J., Magrin D., Maraffatto L., Ragazzoni R., Viotto V., Bertram T., Bizenberger P., Conrad A., Herbst T., Meschke D. (2012). Tips and tricks for aligning an image derotator., *Ground-based and Airborne Instrumentation for Astronomy IV*, — 8446: 84464L. — DOI: <https://doi.org/10.1117/12.926884> (in Eng.)

Duffett-Smith P., Zwart J. (2011). *Practical Astronomy with your Calculator or Spreadsheet. Fourth edition*, Cambridge University Press, United Kingdom. — ISBN 978-0-521-14654-8 (in Eng.)

Green R. (2023.). Update on the US Extremely Large Telescope Program, *The NOIRLab Mirror*, — 5:44. DOI: no DOI (in Eng.)

Keskin O., Unal A.C., Koc I.M., Jolissaint L., Yesilyaprak C. (2020). Advances for the 4m DAG Telescope in Flange derotator., Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) Conference Series, — 11445: 1144545. — DOI: <https://doi.org/10.1117/12.2560247> (in Eng.)

Meeus J. (1998). *Astronomical algorithms*. Second edition. Richmond: — Willmann-Bell, USA. — ISBN: 0943396611 (in Eng.)

Optcorp (2024). — <https://optcorp.com/collections/camera-angle-adjusters-rotators>

Prima luce lab (2024). — <https://www.primalucelab.com/rotators/>

Robotics (2024). — <https://www.robotics.nl/en/8573-rotators>

Swiss optic (2024). — <https://swissopticsystem.com/portfolio-items/derotator-for-4m-ground-telescope-dag/>

Blazhko S.N. (1948). *Course of spherical astronomy*, — Moscow, Gostekhizdat, — ISBN no (in Russ.)

Zharov V.E. (2022). *Spherical astronomy*, — Moscow, Publishing house. ДМК-пресс. — ISBN 978-5-89818-109-3 (in Russ.)

Kononovich E.V., Moroz V.I. (2022). *General course in astronomy*, — Moscow, Ed. URSS. — ISBN 978-5-9519-2335-6 (in Russ.)

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 63–78

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.257>

UDC 539.3

© **A. Marasulov^{1*}, I.I. Safarov², M.Kh. Teshae^{3,4,5}, A.S. Tolep¹, G.A. Abdraimova⁶, 2024**

¹Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University,
Turkestan, Kazakhstan;

²Tashkent Institute of Chemical Technology, Tashkent, Uzbekistan;

³Bukhara engineering-technological institute, Bukhara, Uzbekistan;

⁴Bukhara Branch of Mathematics Institute named after V.I. Romanovskiy of AS
RUz., Bukhara, Uzbekistan;

⁵Asian International University, Bukhara, Uzbekistan;

⁶Kazakh National Research Technical University named after K.I. Satpayev,
Almaty, Kazakhstan.

E-mail: abdurakhim.marassulov@ayu.edu.kz

PROPAGATION OF NON-STATIONARY WAVES IN A LAYERED VISCOELASTIC CYLINDER

Marasulov A. — Doctor of Technical Sciences, Faculty of Engineering. Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkestan, Kazakhstan, 161200

E-mail: abdurakhim.marassulov@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0001-7127-3987>;

Safarov I.I. — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Faculty of Management. Tashkent Institute of Chemical Technology. Tashkent, Uzbekistan. 100011

E-mail: safarov54@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-0983-8451>;

Teshae M.Kh. — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Faculty of Cotton Technology. Bukhara engineering-technological institute. Bukhara, Uzbekistan, 200117; Chief Scientific Officer, Bukhara Branch of Mathematics Institute named after V.I. Romanovskiy of AS RUz. Bukhara, Uzbekistan, 105017; Faculty of Humanities and Technology, Asian International University. Bukhara, Uzbekistan, 105017

E-mail: muhsin_5@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-1893-7902>;

Tolep A.S. — Candidate of Technical Sciences, Faculty of Engineering. Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkestan, Kazakhstan, 161200

E-mail: abdimuhan.tolep@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0002-0089-2446>;

Abdraimova G.A. — Candidate of Technical Sciences, Institute of Energy and Mechanical Engineering. Kazakh National Research Technical University named after K.I. Satpayev. Almaty, Kazakhstan, 050060

E-mail: gulnara409@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-7495-358X>.

Abstract. Studies of stationary (or steady-state) oscillations and wave propagation in deformable waveguides are of considerable interest in many fields of science and technology. The aim of the work is to study the problems of wave propagation in a viscoelastic two-layer cylinder, as well as the development of

effective methods for solving problems of the propagation of non-stationary waves in a layered viscoelastic cylinder for various relaxation kernels. It is assumed that there are no mass forces, and hard contact conditions are set at the boundaries of homogeneous layers. The problem is formulated and solved in a cylindrical coordinate system. The normal load or radial displacement is set at the boundaries. The materials of the layers are elastic or viscoelastic. On the contact surfaces between the layers, the conditions of continuity of displacement and stress vectors are accepted. The Laplace time transformation is used to solve the problem. The solution is constructed using the integral Laplace transform in time with subsequent reversal. A spectral boundary value problem is obtained for a system of ordinary differential equations and partial differential equations with complex coefficients, which reduces to a system of ordinary differential equations with complex coefficients. The semi-discretized problem is solved by Godunov's direct and orthogonal sweep method in combination with the Muller and Gauss methods. The dispersion curves of the first two vibration modes in an infinite viscoelastic cylinder are obtained. In the case of a cylinder with a radial crack, the first mode has a boundary frequency, and the phase velocity tends to infinity. For large wave numbers, the limiting phase velocity of this mode also coincides with the Rayleigh wave velocity. An example of numerical implementation is given.

Keywords: non-stationary waves, infinite cylinder, viscoelastic body, non-axisymmetric loading, contour integrals, Laplace transform

© А. Марасулов^{1*}, И.И. Сафаров², М.Х. Тешаев^{3,4,5}, Ә.С. Төлеп¹,
Г.А. Абдраимова⁶, 2024

¹Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті,
Түркістан, Қазақстан;

²Ташкент химиялық-технологиялық институты, Ташкент, Өзбекстан;

³Бұхара инженерлік-технологиялық институты, Бұхара, Өзбекстан;

⁴В.И. Романовский атындағы Математика институтының Бұхара бөлімшесі,
Бұхара, Өзбекстан;

⁵«Азия» Халықаралық университеті, Бұхара, Өзбекстан;

⁶Сәтбаев университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: abdurakhim.marassulov@ayu.edu.kz, gulnara409@mail.ru.

ҚАБАТТЫ ТҮТҚЫР СЕРПІМДІ ЦИЛИНДРДЕ СТАЦИОНАРЛЫҚ ЕМЕС ТОЛҚЫНДАРДЫҢ ТАРАЛУЫ

Марасулов А. — техника ғылымдарының докторы, Инженерия факультеті. Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті. Түркістан, Қазақстан. 161200

E-mail: abdurakhim.marassulov@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0001-7127-3987>;

Сафаров И.И. — физика-математика ғылымдарының докторы, Менеджмент факультеті. Ташкент химиялық-технологиялық институты. Ташкент, Өзбекстан, 100011

E-mail: safarov54@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-0983-8451>;

Тешаев М.Х. — физика-математика ғылымдарының докторы, Мақта технологиясы факультеті.

Бұхара инженерлік-технологиялық институты. Бұхара, Өзбекстан, 200117; бас ғылыми қызметкер, В. И. Романовский атындағы Математика институтының Бұхара бөлімшесі. Бұхара, Өзбекстан. 105017; Гуманитарлық ғылымдар және техника факультеті, «Азия» Халықаралық университеті. Бұхара, Өзбекстан. 105017

E-mail: muhsin_5@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-1893-7902>;

Төлеп Ә.С. — техника ғылымдарының кандидаты, Инженерия факультеті. Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті. Түркістан, Қазақстан. 161200

E-mail: abdimuhan.tolep@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0002-0089-2446>;

Абдраимова Г.А. — техника ғылымдарының кандидаты, Энергетика және машина жасау институты. Сәтбаев университеті, Алматы, Қазақстан. 050060

E-mail: gulnara409@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-7495-358X>.

Аннотация. Деформацияланатын толқын өткізгіштердегі стационарлық (немесе тұрақты) тербелістер мен толқындардың таралуын зерттеу ғылым мен техниканың көптеген салаларында үлкен қызығушылық тудырады. Жұмыстың мақсаты – тұтқыр серпімді екі қабатты цилиндрдегі толқындардың таралу мәселелерін зерттеу, сонымен қатар әртүрлі релаксация ядролары үшін қабатты тұтқыр серпімді цилиндрде стационарлық емес толқындардың таралу мәселелерін шешудің тиімді әдістерін жасау. Массалық күштер жоқ деп болжанады, ал біртекті қабаттардың шекараларында қатаң жанасу шарттары қойылады. Есеп цилиндрлік координаттар жүйесінде қойылады және шешіледі. Шекараларда қалыпты жүктеме немесе радиалды орын ауыстыру берілген. Қабаттардың материалдары серпімді немесе тұтқыр серпімді. Қабаттар арасындағы жанасу беттерінде орын ауыстыру және кернеу векторлары үшін үздіксіздік шарттары қабылданған. Есепті шешу үшін уақыт бойынша Лаплас түрлендіруі қолданылады. Шешім кейінгі айналыммен уақыт бойынша интегралды Лаплас түрлендіруі арқылы алынады. Комплекс коэффициенттері бар қарапайым дифференциалдық теңдеулер жүйесіне келтірілген қарапайым дифференциалдық теңдеулер және дербес туындылы дифференциалдық теңдеулер жүйесі үшін спектрлік шекаралық есеп алынады. Жартылай дискреттелген есеп Годуновтың тура және ортогональды кума әдісін Мюллер және Гаусс әдістерімен үйлестіре отырып шешіледі. Шексіз тұтқыр серпімді цилиндрдегі алғашқы екі тербеліс модасының дисперсиялық қисықтары алынады. Радиалды жарықшақты цилиндр жағдайында бірінші мода шекаралық жиілікке ие, ал фазалық жылдамдық шексіздікке ұмтылады. Үлкен толқын сандары жағдайында бұл моданың шекті фазалық жылдамдығы Рэлей толқынының жылдамдығына сәйкес келеді. Сандық нәтижелердің мысалы келтірілген.

Түйін сөздер: стационарлық емес толқындар, шексіз цилиндр, тұтқыр серпімді дене, осимметриялық емес жүктеме, контурлық интегралдар, Лаплас түрлендіруі

© А. Марасулов^{1*}, И.И. Сафаров², М.Х. Тешаев^{3,4,5}, А.С. Тулеп¹,
Г.А. Абдраимова⁶, 2024

¹Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави, Туркестан, Казахстан;

²Ташкентский химико-технологический институт, Ташкент, Узбекистан;

³Бухарский инженерно-технологический институт, Бухара, Узбекистан;

⁴Бухарское отделение Института математики им. В.И. Романовского, Бухара, Узбекистан;

⁵Международный университет «Азия», Бухара, Узбекистан;

⁶Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан.

E-mail: abdurakhim.marassulov@ayu.edu.kz

РАСПРОСТРАНЕНИЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ВОЛН В СЛОИСТОМ ВЯЗКОУПРУГОМ ЦИЛИНДРЕ

Марасулов А. — доктор технических наук, факультет Инженерии. Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави. Туркестан. Казахстан. 161200

E-mail: abdurakhim.marassulov@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0001-7127-3987>;

Сафаров И.И. — доктор физико-математических наук, факультет Менеджмента. Ташкентский химико-технологический институт. Ташкент. Узбекистан, 100011

E-mail: safarov54@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-0983-8451>;

Тешаев М.Х. — доктор физико-математических наук, факультет Технологии хлопка. Бухарский инженерно-технологический институт. Бухара. Узбекистан. 200117; главный научный сотрудник, Бухарское отделение института Математики им. В.И. Романовского. Бухара. Узбекистан. 105017; факультет Гуманитарных наук и техники, Международный университет «Азия». Бухара. Узбекистан. 105017

E-mail: muhsin_5@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-1893-7902>;

Тулеп А.С. — кандидат технических наук, факультет Инженерии. Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмеда Ясави. Туркестан. Казахстан. 161200

E-mail: abdimuhan.tolep@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0002-0089-2446>;

Абдраимова Г.А. — кандидат технических наук, Институт энергетики и машиностроения. Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева. Алматы. Казахстан. 050060

E-mail: gulnara409@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-7495-358X>.

Аннотация. Исследования стационарных (или установившихся) колебаний и распространения волн в деформируемых волноводах представляют значительный интерес во многих областях науки и техники. Целью работы является исследование задач о распространении волн в вязкоупругом двухслойной цилиндре, а также разработка эффективных методов решения задач о распространении нестационарных волн в слоистом вязкоупругом цилиндре для различных ядер релаксации. Предполагается, что массовые силы отсутствуют, а на границах однородных слоев ставятся условия жесткого контакта. Задача поставлена и решается в цилиндрической системе координат. На границах заданы нормальная нагрузка или радиальное перемещение.

Материалы слоев упругие или вязкоупругие. На контактных поверхностях между слоями приняты условия непрерывности векторов перемещений и напряжений. Для решения задачи используется преобразование Лапласа по времени. Решение строится с помощью интегрального преобразования Лапласа по времени с последующим обращением. Получена спектральная краевая задача для системы обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных с комплексными коэффициентами, которая сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений с комплексными коэффициентами. Полудискретизированная задача решается методом прямых и ортогональной прогонки Годунова в сочетании с методами Мюллера и Гаусса. Получены дисперсионные кривые первых двух мод колебаний в бесконечном вязкоупругом цилиндре. В случае цилиндра с радиальной трещиной первая мода имеет граничную частоту, а фазовая скорость стремится к бесконечности. При больших волновых числах предельная фазовая скорость этой моды также совпадает со скоростью волны Рэлея. Приведен пример численной реализации.

Ключевые слова: нестационарные волны, бесконечный цилиндр, вязкоупругое тело, не осесимметричное нагружение, контурные интегралы, преобразование Лапласа

Введение

Развитие ряда направлений промышленности положительно влияет на требования, предъявляемые к свойствам конструкционных материалов. В ряде случаев использование конструкций из кусочно-однородного или неоднородного строения, а именно, многослойных конструкций является оправданным. Изменяя реологические, а также физико-механические свойства материалов слоев, можно достичь существенного развития свойств конструкций. Это видно при нестационарных динамических воздействиях. Использование упругих и вязкоупругих слоев (диссипативно-неоднородная система) укрепляет прочностные свойства конструкций. Таким образом, исследование таких систем (конструкций) является актуальной задачей для оценки надежности и долговечности таких конструкций.

Исследование нестационарных волновых процессов в оболочках из линейно-вязкоупругого материала является весьма актуальным. Вместе с тем известные на сегодня результаты (часть которых содержится, например, в работах (Петрашень и др., 1982; Жигалько и др., 1975) не являются исчерпывающими. По-прежнему остается актуальным вопрос о том, как на переходные волновые процессы в оболочках влияет принадлежность вязкоупругих ядер тому или иному классу функций и какие параметры ядер проявляются при этом наиболее ярко. В работе (Петрашень и др., 1985) в качестве гипотезы были предложены (а затем нашли подтверждение в определенном диапазоне изменения исходных данных (Ardazishvili, 2014) соотношения, устанавливающие соответствие между ядрами релаксации,

принадлежащими разным классам функций, но влияющими на переходные волновые процессы схожим образом. Однако, эти соотношения предлагались для случая конечной области распространения возмущений при классической постановке нестационарной динамической задачи линейной вязкоупругости, а не теории оболочек. Наряду с этим, в статье (Destrade, 2004) была разработана эффективная методика динамических расчетов переходных волновых процессов в упругих цилиндрических оболочках на основе применения интегрального преобразования Лапласа с последующим вычислением оригиналов. Настоящая работа представляет собой естественное продолжение исследований, начатых в (Dowaikh, 1990; Fu, 2003).

В вышеприведенных работах, в основном, исследованы линейно-упругие среды. Достаточное количество исследований посвящено задачам распространения нестационарных волн в неоднородных или кусочно-однородных упругих средах, а исследования вязкоупругих сред – в работах (Ma и др., 2015; Zhang и др., 2013). Исследования воздействия нестационарных волн в вязкоупругих кусочно-однородных средах изучены в работах (Safarov и др., 2021). При описании нестационарных волновых процессов в слоистых средах, несмотря на значительные успехи (Wang и др., 2013; Sarrami-Foroushani и др., 2014), ряд вопросов остается открытым. Аналитические решения задач двумерной динамики многослойных линейно-упругих тел с не плоскопараллельными границами раздела слоев строятся в виде контурных интегралов (Anjomshoa и др., 2014). Исходя из этого актуальным является получение решения простой формы, удобной для реализации ее на ЭВМ (Pradhan и др., 2009; Hosseini Hashemi и др., 2016). Среди множества подходов к решению линейно-вязкоупругих динамических задач наиболее распространенным является метод интегрального преобразования Лапласа, используемый отдельно или в сочетании с другими методами. Из-за сложности инверсии решения из области Лапласа во временную область часто выполняется асимптотически или с существенными ограничениями на свойства материала. Ранее первый автор этой работы установил общие свойства решения нестационарных динамических задач вязкоупругости для кусочно-однородных тел в области Лапласа (Teshaei и др., 2019). При определенных условиях, накладываемых на исходные данные, на основании результатов (Teshaei и др., 2019) можно свести построение решения нестационарной динамической задачи нахождения собственных значений задачи о свободных колебаниях кусочно-однородного вязкоупругого тела под рассмотрение. Цель данной работы – продемонстрировать такой подход к построению решений нестационарных динамических задач линейной вязкоупругости для кусочно-однородных тел на конкретном примере трехслойной полости цилиндр. Здесь же мы предлагаем метод нахождения элементов множества полюса решения на изображениях вблизи предельных точек этого множества.

Методы

Постановка задачи и методика решения

Рассмотрим N -слойный цилиндр с радиусами слоев a_n , $0 < a_1 < a_2 < \dots < a_N$ со скоростями распространения продольных и поперечных волн $c_n^{(1)}, c_n^{(2)}$. Пусть в декартовых координатах (Охуz) слой имеет следующую область: $x \in (-\infty, +\infty)$, $y \in [0, a_N]$, $z \in [0, a_N]$. Рассмотрим краевую задачу динамических процессов в цилиндрической оболочке, сделанного из вязкоупругого материала в рамках гипотез Тимошенко. Тогда уравнения динамики оболочки принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_x}{\partial x} &= \rho h \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial Q_x}{\partial x} + \frac{1}{R} N_y &= \rho h \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \\ \frac{\partial M_x}{\partial x} - Q_x &= (\rho h^3 / 12) \frac{\partial^2 w}{\partial t^2}, \end{aligned}$$

где $N_x(x, t)$ и $N_y(x, t)$ – нормальные усилия в срединной поверхности оболочки, $M_x(x, t)$ – изгибающий момент.

Предположим, что в этом теле под воздействием нестационарных нагрузок распространяется волна. Распространение нестационарных волн в многослойном теле представлено уравнениями Ламе в перемещениях

$$\tilde{\mu}_k \nabla^2 \vec{u} + (\tilde{\lambda}_k + \tilde{\mu}_k) \text{grad div } \mathcal{G} \vec{u} = \rho_k \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2}, \quad (k=1, 2, 3..N), \quad (1)$$

где $\vec{u}(u_1, u_2, u_3)$ – вектор перемещений среды, ρ_k – плотность k -го слоя,

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_k f(t) &= \lambda_{0k} \left[f(t) - \int_0^t R_{\lambda k}(t-\tau) f(\tau) d\tau \right]; \quad \tilde{\mu}_k f(t) = \\ &= \mu_{0k} \left[f(t) - \int_0^t R_{\mu k}(t-\tau) f(\tau) d\tau \right], \end{aligned} \quad (2)$$

$f(t)$ – произвольная функция времени, $R_{\lambda k}(t-\tau)$ и $R_{\mu k}(t-\tau)$ – ядра релаксации, λ_{0k}, μ_{0k} – мгновенные модули упругости. При расчетах использовалось ядро Колтунова-Ржаницына: $R_k(t) = A_k e^{-\beta_k t} / t^{1-\alpha_k}$. Между слоями ставится условие жесткого контакта (Nazemnezhad и др., 2014):

$$\begin{aligned} \sigma_{nn}^{(1)} &= \sigma_{nn}^{(2)}, \quad \sigma_{ns_1}^{(1)} = \sigma_{ns_1}^{(2)}, \quad \sigma_{ns_2}^{(1)} = \sigma_{ns_2}^{(2)}, \\ u_n^{(1)} &= u_m^{(2)}, \quad u_{s_1}^{(1)} = u_{s_1}^{(2)}, \quad u_{s_2}^{(1)} = u_{s_2}^{(2)}. \end{aligned} \quad (3)$$

На свободной поверхности слоя ставится условие свободы от напряжений:

$$\sigma_{nn}^{(1)} = 0; \quad \sigma_{ns_1}^{(1)} = 0; \quad \sigma_{ns_2}^{(1)} = 0.$$

Для уравнений движения (1) выполняются следующая подстановка:

$$\vec{u}_\kappa = \text{grad } \phi_\kappa + \text{rot } \vec{\psi}_\kappa, \quad \text{div } \vec{\psi}_\kappa = \mathbf{0}. \quad (4)$$

Здесь ϕ_κ – продольный волновой потенциал; $\vec{\psi}_\kappa (\psi_{x\kappa}, \psi_{y\kappa}, \psi_{z\kappa})$ – поперечный волновой потенциал. Если подставить (4) в (1), тогда:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi_k - \int_0^t R_{kp}(t-\tau) \nabla^2 \phi_k(\tau) d\tau - \frac{1}{c_{pk}^2} \cdot \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial t^2} &= 0, \\ \nabla^2 \psi_{zk} - \int_0^t R_{ks}(t-\tau) \nabla^2 \psi_{zk}(\tau) d\tau - \frac{1}{c_{sk}^2} \cdot \frac{\partial^2 \psi_{zk}}{\partial t^2} &= 0, \\ \nabla^2 \psi_{\theta k} - \frac{\psi_{\theta k}}{r^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial \psi_{rk}}{\partial \theta} - \int_0^t R_{\psi ks}(t-\tau) \nabla^2 \bar{\psi}_{1k}(\tau) d\tau - \frac{1}{c_{sk}^2} \frac{\partial^2 \psi_{\theta k}}{\partial t^2} &= 0, \\ \nabla^2 \psi_{rk} - \frac{\psi_{rk}}{r^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial \psi_{\theta k}}{\partial \theta} - \int_0^t R_{\psi kcs}(t-\tau) \nabla^2 \bar{\psi}_{2k}(\tau) d\tau - \frac{1}{c_{sk}^2} \frac{\partial^2 \psi_{rk}}{\partial t^2} &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $c_{pk}^2 = (\lambda_{0k} + 2\mu_{0k}) / \rho_k$, $c_s^2 = \mu_{0k} / \rho_k$ соответственно мгновение скорости распространения продольных и поперечных волн в упругом теле. В качестве примера рассмотрим задачу многослойного цилиндра в плоском деформируемом состоянии. К внешней поверхности $R = a_N$ которого в момент $t = 0$ приложены нормальная $P_1(v, t)$ и тангенциальная $P_2(v, t)$ нагрузки, постоянные вдоль образующей (R, v – полярные координаты, $-\pi < v < \pi, n$ – номер слоя). Пусть

$$P_j(v, t) = 2G_n P_0 f(\tau) \theta_j v, \quad j = 1, 2; \quad \tau = tc_N^{(1)} / a_N.$$

Введем

$$r = R / a_N, \quad u_j^{(n)}(r, v, t) = w_j^{(n)}(R, v, t) / a_N,$$

$$\sigma_{jj}^{(n)}(r, v, \tau) = S_{jj}^{(n)}(R, v, t) / 2G_n, \quad \alpha_{jn} = c_N^{(1)} / c_n^{(f)}, \quad j, j' = 1, 2,$$

где $w_1^{(n)}, w_2^{(n)}$ – радиальные и угловые перемещения, $S_{11}^{(n)}, S_{22}^{(n)}, S_{11}^{(n)}$ – соответствующие физические компоненты тензора напряжений. Будем искать решение уравнений в потенциалах перемещений (4) и (5)

$$\begin{aligned} \Delta \varphi_j^{(n)}(r, v, \tau) - \alpha_{jn}^2 \frac{\partial^2 \varphi_j^{(n)}(r, v, \tau)}{\partial \tau^2} &= 0, \quad j = 1, 2, \quad n = 1, 2, \dots, N, \\ u_1^{(n)} &= \frac{\partial \varphi_1^{(n)}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi_2^{(n)}}{\partial v}, \quad u_2^{(n)} = \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi_1^{(n)}}{\partial v} - \frac{\partial \varphi_2^{(n)}}{\partial r} \end{aligned} \quad (6)$$

при нулевых условиях для $\varphi_j^{(n)}$ и условиях ($v = 1, 2, \dots, N - 1, j = 1, 2$)

$$\sigma_{1f}^{(N)}(1, v, \tau) = -P_0 f(\tau) \theta_f(v), \quad \tau > 0 \quad (7)$$

$$G_v \sigma_{1f}^{(v)} = G_{v+1} \sigma_{1f}^{(v+1)}, \quad u_j^{(v)} = u_j^{(v+1)} \text{ при } r = r_v = a_v / a_N. \quad (8)$$

Разложив $\theta_j, u_j^{(n)}, \varphi_f^{(n)}$ в ряды Фурье

$$\theta_j = (-1)^{j-1} \sum_{m=0}^{\infty} H_{mj} e^{imv}, \quad u_j^m = (-1)^{j-1} P_0 \sum_{m=0}^{\infty} v_{mj}^{(n)}(r, \tau) e^{imv},$$

$$\varphi_j^m = (-1)^{j-1} P_0 \sum_{m=0}^{\infty} \psi_{mj}^{(n)}(r, \tau) e^{imv},$$

и применив к (6) – (8) интегральное преобразование Лапласа

$$(\tau \Rightarrow s, f(\tau) \Rightarrow F(s), v_{mj}^{(n)}(r, \tau) \Rightarrow V_{mj}^{(n)}(r, s), \psi_{mj}^{(n)}(r, \tau) \Rightarrow \Psi_{mj}^{(n)}(r, s)),$$

будем иметь

$$\Psi_{mj}^{(n)}(r, s) = A_{mj}^{(n)}(s) I_m(rs\alpha_{jn}) + B_{mj}^{(n)}(s) K_m(rs\alpha_{jn}), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

где I_m, K_m – модифицированные функции Бесселя 1-го и 2-го рода m -го индекса. Определив $A_{mj}^{(n)}$ и $B_{mj}^{(n)}$ из преобразованных условий (7), (8), с учетом $B_{mj}^{(1)} = 0$, получим

$$V_{mj}^{(n)}(r, s) = F(s) W_{mj}^{(n)}(r, s) / Z_m(s), \quad (9)$$

где $W_{mj}^{(n)}$ – аналитическая функция при $|s| > 0$, Z_m – аналитическая функция на всей комплексной плоскости, обе однозначны и симметричны по s , хотя и выражаются через I_m, K_m .

Перейдем к построению оригинала. Выберем $f(\tau)$ в виде функции Хэвисайда $h(\tau)$ и будем искать $V_{mj}^{(n)}$ в классе функций, для которых существует такое $\lambda > 0$, что $v_{mj}^{(n)}(r, \tau) \tau^{-\lambda} \rightarrow 0$, при $\tau \rightarrow \infty$. В силу (9) все полюсы $V_{mj}^{(n)}$ расположены на мнимой оси, множество их не более чем счётной и не имеет предельной точки, кроме: $s = \infty$. Тогда справедливо

Утверждение: При $f(\tau) = h(\tau)$ для каждого m существует такая последовательность $\{L_k^{(m)}\}$ окружностей с радиусами $R_k^{(m)} \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow \infty$ и центрами в точке $s=0$, что для $s \in L_k^{(m)}$ $|V_{mj}^{(n)}| < \mu^{(m)}$, где $\mu^{(m)}$ – константа.

Выберем $f(\tau) = \tau^2 / 2$ и, пользуясь формулой Меллина и сформулированным утверждением, получим соответствующий оригинал в виде бесконечной суммы вычетов функции $W_{mj}^{(n)} Z_m^{-1} s^{-3} e^{s\tau}$, после чего по правилу дифференцирования оригиналов найдем $v_{mj}^{(n)}$ для $f(\tau) = h(\tau)$. Можно показать, что все нули Z_m однократны, поэтому

$$\begin{aligned}
 \check{\nu}_{mj}^{(n)} &= Y_{mj}^{(n)}(r) + \delta_m^1 Y_{1j}^{(0)}(r)\tau^2 + \delta_{m+1}^1 Y_{02}^{(0)}(r)\tau^2 + \\
 &+ g^{(n)} \sum_{k=1}^{\infty} X_{mj}^{(n)}(r, \omega_k^{(m)}) \cos \omega_k^{(m)} \tau
 \end{aligned} \tag{10}$$

где

$$\begin{aligned}
 X_{mj}^{(n)}(r, \omega) &= \omega^{N-n-2} \left\{ H_{m1} \left\| \begin{matrix} Q_{j1}^{nm} & Q_{j2}^{nm} \\ d_{21}^{(m)} & d_{21}^{(m)} \end{matrix} \right\| + H_{m2} \left\| \begin{matrix} d_{11}^{(m)} & d_{12}^{(m)} \\ Q_{j1}^{nm} & Q_{j2}^{nm} \end{matrix} \right\| \right\} \left(\frac{dD^{(m)}}{d\omega} \right)^{-1}, \\
 D^{(m)}(\omega) &= \left\| d_{jj}^{(m)} \right\|, \quad d_{jj}^{(m)} = e_{jl}^{(m)} \eta_{ij}^{Nm}, \quad Q_{jj}^{nm} = q_{jl}^{nm} \eta_{ij}^{nm}, \quad j, j' = 1, 2; \quad l = 1, 2, 3, 4, \\
 (\eta_{ij}^{lm}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \eta_{ij}^{\nu+1m} = h_{ll'}^{\nu m} \eta_{ij}^{\nu m}, \quad l' = 1, 2, 3, 4; \quad \nu = 1, 2, \dots, N-1;
 \end{aligned}$$

по повторяющимся l и l' – суммирование; $\delta_m^1, \delta_{m+1}^1$ – символы Кронекера,

$\| \|$ – знак детерминанта, $g^{(N)} = 2, g^{(n)} = 2\pi^{N-n} r_n \alpha_{2n+1}^2 r_{n+1} \alpha_{2n+2}^2 \dots r_{N-1} \alpha_{2N}^2, n < N.$

Элементы $e_{jl}^{(m)}, q_{jl}^{nm}$ имеют вид $(x_{jn} = r\omega\alpha_{jn}, \omega' = \alpha_{2N}\omega)$

$$e_{11}^{(m)} = J_m(\omega) \left[\frac{\alpha_{2N}^2}{2} + \frac{m(1-m)}{\omega^2} \right] - \frac{J_{m+1}(\omega)}{\omega},$$

$$e_{21}^{(m)} = -\frac{m}{\omega^2} [(1-m)J_m(\omega) + \omega J_{m+1}(\omega)],$$

$$e_{13}^{(m)} = \frac{m}{\omega^2} [(1-m)J_m(\omega') + \omega' J_{m+1}(\omega')],$$

$$e_{23}^{(m)} = \frac{\alpha_{2N}^2}{\omega'} J_{m+1}(\omega') - J_m(\omega') \left[\frac{\alpha_{2N}^2}{2} + \frac{m(1-m)}{\omega^2} \right],$$

$$q_{11}^{nm} = \alpha_{1n} [m x_{1n}^{-1} J_m(x_{1n}) - J_{m+1}(x_{1n})], \quad q_{21}^{nm} = -m \alpha_{1n} x_{1n}^{-1} J_m(x_{1n}),$$

$$q_{13}^{nm} = m \alpha_{2n} m x_{2n}^{-1} J_m(x_{2n}), \quad q_{23}^{nm} = \alpha_{2n} [J_{m+1}(x_{2n}) - m x_{2n}^{-1} J_m(x_{2n})],$$

Элементы $e_{j2}^{(m)}, e_{j4}^{(m)}, q_{j2}^{nm}, q_{j4}^{nm}$ получаются соответственно из $e_{j1}^{(m)}, e_{j3}^{(m)}, q_{j1}^{nm}, q_{j3}^{nm}, j = 1, 2,$ заменой функций Бесселя 1-го рода J_m, J_{m+1} на функции Бесселя 2-го рода N_m, N_{m+1} с теми же аргументами. Для них имеем

$$h_{11}^m = \gamma_\nu^m \left\{ N_{m+1}(\beta_{1\nu}') [a_{1\nu}^m \beta_{1\nu} J_{m+1}(\beta_{1\nu}) - a_{2\nu}^m \beta_{1\nu} J_m(\beta_{1\nu})] + \right. \\ \left. + (\beta_{1\nu}')^{-1} N_m(\beta_{1\nu}') [a_{3\nu}^m \beta_{1\nu} J_{m+1}(\beta_{1\nu}) - a_{4\nu}^m J_m(\beta_{1\nu})] \right\}, \gamma_\nu^m = \alpha_{1\nu+1}, \tag{11}$$

h_{12}^{vm} получается подстановкой в (11) $N_m(\beta_{1v}), N_{m+1}(\beta_{1v})$ вместо $J_m(\beta_{1v}), J_{m+1}(\beta_{1v})$, h_{21}^{vm} – подстановкой в (11) $-J_m(\beta'_{1v}), -J_{m+1}(\beta'_{1v})$ вместо $N_m(\beta'_{1v}), N_{m+1}(\beta'_{1v})$, а обе эти подстановки дадут h_{22}^{vm} . Остальные элементы получаются из $h_{1j}^{vm}, h_{2j}^{vm}, j=1,2$, соответственно: $h_{1j+2}^{vm}, h_{2j+2}^{vm}$ – заменой a_l^{vm} на b_l^{vm} и β_{1v} на β_{2v} при $\gamma_v^m = ma_{1v+1}$; h_{3j}^{vm}, h_{4j}^{vm} заменой a_l^{vm} на b_l^{vm} и β'_{1v} на β'_{2v} при $\gamma_v^m = ma_{2v+1}$; $h_{3j+2}^{vm}, h_{4j+2}^{vm}$ заменой β_{1v} на β_{2v} и β'_{1v} на β'_{2v} при $\gamma_v^m = ma_{2v+1}$.

Здесь

$$\begin{aligned} \beta_{jv} &= r_v a_{1v} \omega, \beta'_{jv} = r_v a_{1v+1} \omega, j=1,2, a_1^{vm} = -b_1^{vm} = G_v / G_{v+1} - 1, \\ b_2^{vm} &= -b_3^{vm} = (m-1)(1 - G_v / G_{v+1}), b_3^{vm} = a_3^{vm} - a_2^{vm}, \\ a_2^{vm} &= mb_2^{vm} + 0,5\beta_{2v}^2 G_v / G_{v+1}, a_3^{vm} = -mb_2^{vm} + 0,5(\beta'_{2v})^2, a_4^{vm} = mb_4^{vm}. \end{aligned}$$

Величины $\omega_k^{(m)}$ являются однократными положительными корнями уравнения $D^{(m)}(\omega) = 0$, определяющего собственные частоты колебаний цилиндра. Функции $Y_{01}^{(n)}$ и $Y_{mj}^{(n)}$, $m \geq 2$, суть решения соответствующих задач статики с граничным условием $\sigma_{11}^{(N)} = -P_0 H_{01}$ и $\sigma_{1j}^{(N)} = -P_0 H_{mj}$, $m \geq 2$, при $r = 1$. Функции $Y_{02}^{(n)} + Y_{02}^{(0)} \tau^2$ и $Y_{1j}^{(n)} + Y_{1j}^{(0)} \tau^2$ удовлетворяют уравнениям динамики в перемещениях, условиям (3) и граничным условиям $\sigma_{12}^{(N)} = -P_0 H_{02}$ и $\sigma_{1j}^{(N)} = -P_0 H_{mj}$ при $r = 1, \tau \geq 0$, а $Y_{02}^{(0)} \tau^2$ и $Y_{1j}^{(0)} \tau^2$ суть смещения цилиндра как целого при таких нагрузках.

Ряды (10) сходятся равномерно в области $0 < e \leq r \leq 1, 0 \leq \tau < \infty$, а остаточный член, соответствующий сумме первых K слагаемых, есть $O(1 / K\sqrt{e})$. Решение для произвольной $f(\tau)$ легко получить сверткой.

Результаты и анализ

Отметим, что согласно теории упругости при землетрясениях образуются сейсмические волны: продольная волна и поперечная волна. При прохождении продольной волны частицы перемещаются вперед и назад вдоль направления движения волны. При этом среда испытывает ряд сжатий и растяжений. В этом случае отсутствует вращение частиц. При прохождении поперечной волны частицы грунта перемещаются перпендикулярно к направлению движения. Существуют еще поверхностные волны: волна Лява и волна Релея. Эти волны распространяются медленнее, чем другие волны. Продольные и поперечные волны распространяются по объему и затухают обратно пропорционально кубу расстояния, а волна Лява распространяется вдоль поверхности и затухает обратно пропорционально квадрату расстояния, поэтому, начиная с определенного расстояния до эпицентра.

Приведем результаты численной реализации аналитического решения для полого трехслойного цилиндра ($N=4$) с параметрами:

$$r_1 = 0.75; r_2 = 0.80; r_3 = 0.85; r_4 = 0.9.$$

Верхний и внутренний слои полого трехслойного цилиндра сделаны из стали, характеристики материалов которых приведены ниже. Второй слой сделан из стали.

$$E_{01} = E_{03} = 2 \times 10^5 \text{ Mna}; \quad \nu_1 = \nu_3 = 0.26, \rho_1 = \rho_3 = 7800 \text{ кг} / \text{м}^3,$$

$$E_{02} = 6.67 \cdot 10^5 \text{ Mna}; \quad \nu_1 = \nu_3 = 0.20, \rho_1 = \rho_3 = 2280 \text{ кг} / \text{м}^3,$$

Параметры ядра релаксации приняты в виде $R_k(t) = Ae^{-\beta t} / t^{1-\alpha}$, $A_k = 0,048$; $\beta_k = 0,05$; $\alpha_k = 0,10$. Участок поверхности цилиндра $|v| \leq \pi / 8$ подвержен кратковременному воздействию радиальной нагрузки, определяемой как $\theta_1(v) = 0,5(1 + \cos 8v)$ для $|v| \leq \pi / 8$, $\theta_1(v) \equiv 0$, для $\pi / 8 < |v| \leq \pi$ и аппроксимируемой 15 членами ряда Фурье:

$$f(\tau) = \begin{cases} 15\tau, & 0 \leq \tau < 0.04 \\ 1 - 15\tau, & 0.04 \leq \tau < 0.1 \\ 0, & 0.1 \leq \tau, \end{cases}$$

всюду.

Результаты получены для безразмерных параметров.

На рис.1 представлены зависимости безразмерных контурных напряжений в зависимости от времени: 1. при $r = a_0$; 2. при $r = a_1$. 3. при $r = a_2$. Видно, что для наружного цилиндра контурные напряжения изменяют свой знак колебательным образом.

На рис.2 приведено изменение перемещений при ($r = a_1$) в зависимости от времени: 1. контурные перемещения при $r = a_0$. 2. Продольные перемещения при $r = a_0$. 3. Радиальные перемещения при $r = a_0$. Из рис.2 видно, что в течении времени отраженных волн от слоев значительно влияет на формировании перемещений. Отражение волны значительно влияет на радиальные перемещения.

На рис.3 приведено изменение касательных напряжений в зависимости от времени при скользящем контакте (1. При $r = a_2$; 2. При $r = a_1$). Все графики соответствуют расчетам при $K = 30$, $m = 0, 1, 2, \dots, 13$, и с увеличением K практически не меняются.

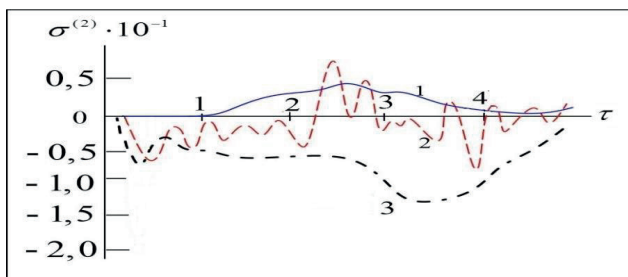


Рис.1. Изменение контурных напряжений в зависимости от времени:

1. $r = a_0$; 2. $r = a_1$; 3. $r = a_2$.

(Fig.1. Change of contour stresses depending on time:

1. $r = a_0$; 2. $r = a_1$; 3. $r = a_2$.)

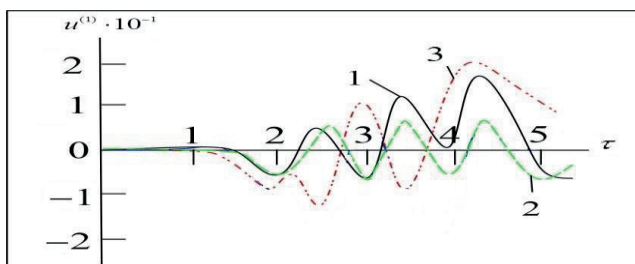


Рис.2. Изменение перемещений в зависимости от времени:

1. Контурные перемещения при $r = a_0$; 2. Продольные перемещения при $r = a_0$;

3. Радиальные перемещения при $r = a_0$.

(Fig.2. Change of displacements depending on time:

1. Contour displacements at $r = a_0$; 2. Longitudinal displacements at $r = a_0$;

3. Radial displacements at $r = a_0$.)

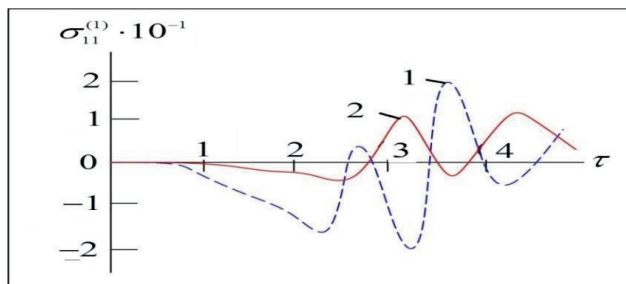


Рис.3. Изменение касательных напряжений в зависимости от времени при скользящем контакте:

1. При $r = a_2$; 2. При $r = a_1$.

(Fig.3. Change of tangential stresses depending on time during sliding contact:

1. At $r = a_2$; 2. At $r = a_1$.)

Подчеркивается, что приведенный выше способ отыскания оригинала позволяет получать аналогичные решения при различной геометрии, при наличии массовых сил и при разных типах граничных условий.

Заключение

Представленные результаты показывают принципиальную возможность найти среди ядер релаксации, состоящих всего из одной экспоненты, те, которые окажут на переходные волновые процессы в линейно-вязкоупругих оболочках практически такое же влияние, что и регулярные ядра в виде суммы нескольких экспонент. Условия соответствия между вязкоупругими ядрами, предложенные для задач о переходных волновых процессах в рамках классических постановок задач механики деформированного твердого тела при ограниченной области распространения возмущений, оказались правомерными и для цилиндрической оболочки бесконечной длины, подверженной воздействию нагрузки в виде одиночного импульса или функции Хевисайда. Заметим, что в данной работе приведены лишь отдельные характерные результаты выполненных расчетов. Их следует расценивать как предварительный этап дальнейших исследований влияния наследственных свойств материала на переходные волновые процессы в твердых деформируемых телах, рассматриваемые в рамках теории вырожденных систем – пластин и оболочек.

Таким образом, в ходе исследования были разработаны методика решения и алгоритм для решения задачи распространения нестационарных волн в слоистом вязкоупругом цилиндре. На основе численных результатов установлено, что отраженные волны значительно влияют на значения радиальных перемещений.

ЛИТЕРАТУРА

Петрашень Г.И., Молотков Л.А., Крауклис П.В. (1982). Волны в слоисто-однородных изотропных упругих средах. Метод контурных интегралов в нестационарных задачах динамики. — Л.: Наука, 1982. — 288 с.

Жигалько Ю.Н., Дмитриева Л.М. (1975). Реакция ортотропной цилиндрической оболочки на локализованный импульс внешнего давления // Исследования по теории пластин и оболочек. — Казань, 1975. — Вып. 11. — С. 254–261.

Петрашень Г.И., Молотков Л.А., Крауклис П.В. (1985). Волны в слоисто-однородных изотропных упругих средах. Оптимальные представления полей волн в моделях основного эталонного типа. Волновые поля в средах с цилиндрическими или сферическими границами. — Л.: Наука, 1985. — 302 с.

Ardazishvili R.V. (2014). Antisymmetric higher order edge waves in plates with fixed faces // Proc. of the XLII Summer School-Conference “Advanced problems in mechanics (APM)”, St. Petersburg (Repino), June 30 – July 5. — 2014. — 1 CD-ROM. — Pp. 199–204.

Destrade M. (2004). Surface waves in a deformed isotropic hyperplastic material subject to an isotropic internal constraint // Wave Motion. — 2004. — Vol. 40. № 4. — Pp. 347–357.

Dowaikh M. (1990). On surface waves and deformation in a pre-stressed, incompressible elastic solid // IMA Journal of Applied Mathematics (Institute of Mathematics and Its Applications). — 1990. — Vol. 44. — № 3. — Pp. 261–284.

- Fu Y. (2003). Existence and uniqueness of edge waves in a generally anisotropic elastic plate // *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*. — 2003. — Vol. 56. — Pp. 605–616.
- Ma Y., Zhang Q., Zhang D., Scarpa F., Liu B., Hong J. (2015). The mechanics of shape memory alloy metal rubber. *Acta Mater.* — 2015. — 96. — Pp. 89–100. (in Eng.)
- Zhang D., Scarpa F., Ma Y., Boba K., Hong J., Lu H. (2013). Compression mechanics of nickel-based superalloy metal rubber. *Mater. Sci. Eng. A.* — 2013. — 580. — Pp. 305–312. (in Eng.)
- Safarov I., Tessaev M., Marasulov A., Nuriddinov B.Z. (2021). Propagation of own non-axisymmetric waves in viscoelastic three-layered cylindrical shells. *Engineering journal*. — 2021. — 25(7). — Pp. 97–107.
- Wang K.F. and Wang B.L. (2013). “Effects of surface and interface energies on the bending behavior of nanoscale multilayered beams”, *Physica E.* — 2013. — 54. — Pp. 197–201.
- Sarrami-Foroushani S. and Azhari M. (2014). “Nonlocal vibration and buckling analysis of single and multi-layered graphene sheets using finite strip method including van der Waals effects”, *Physica E.* — 2014. — 57. — Pp. 83–95.
- Anjomshoa A., Shahidi A.R., Hasani B. and Jomehzadeh E. (2014). “Finite Element Buckling Analysis of Multi-Layered Graphene Sheets on Elastic Substrate Based on Nonlocal Elasticity Theory,” *Applied Mathematical Modelling*. — 2014. — 38. — Pp. 5934–5955.
- Pradhan S.C. and Phadikar J.K. (2009). “Small scale effect on vibration of embedded multilayered graphene sheets based on nonlocal continuum models”, *Physics Letters A.* — 2009. — 373. — Pp. 1062–1069.
- Hosseini Hashemi S. and Bakhshi Khaniki H. (2016). “Analytical solution for free vibration of a variable cross-section nonlocal nanobeam”, *International Journal of Engineering (IJE) Transactions B: Applications*. — 2016. — 29. — Pp. 688–696.
- M.Kh. Tessaev, I.I. Safarov, M.M. Mirsaidov (2019). “Oscillations of multilayer viscoelastic composite toroidal pipes”, *J. –of the Serbian Society for Computational Mechanics*. — 2019. — Vol. 13. — No. 2. — Pp. 105–116.
- Nazemnezhad R. and Hosseini-Hashemi Sh. (2014). “Free vibration analysis of multi-layer graphene nanoribbons incorporating interlayer shear effect via molecular dynamics simulations and nonlocal elasticity”, *Physics Letters A.* — 2014. — 378. — Pp. 3225–3232.

REFERENCES

- Petrashen G.I., Molotkov L.A., Krauklis P.V. (1982). *Waves in layered homogeneous isotropic elastic media. The method of contour integrals in non-stationary problems of dynamics*. — L.: Nauka, 1982. — 288 p. (in Russ.)
- Zhigalko Yu.N., Dmitrieva L.M. (1975). Reaction of an orthotropic cylindrical shell to a localized external pressure pulse // *Research on the theory of plates and shells*. — Kazan, 1975. — Vol 11. — P. 254–261. (in Russ.)
- Petrashen G.I., Molotkov L.A., Krauklis P.V. (1985). *Waves in layered homogeneous isotropic elastic media. Optimal representations of wave fields in models of the basic reference type. Wave fields in media with cylindrical or spherical boundaries*. — L.: Nauka, 1985. — 302 p. (in Russ.)
- Ardazishvili R.V. (2014). Antisymmetric higher order edge waves in plates with fixed faces // *Proc. of the XLII Summer School-Conference “Advanced problems in mechanics (APM)”*, St. Petersburg (Repino), June 30 – July 5. — 2014. — 1 CD-ROM. — Pp. 199–204. (in Eng.)
- Destrade M. (2004). Surface waves in a deformed isotropic hyperplastic material subject to an isotropic internal constraint // *Wave Motion*. — 2004. — Vol. 40. № 4. — Pp. 347–357. (in Eng.)
- Dowaikh M. (1990). On surface waves and deformation in a pre-stressed, incompressible elastic solid // *IMA Journal of Applied Mathematics (Institute of Mathematics and Its Applications)*. — 1990. — Vol. 44. № 3. — Pp. 261–284. (in Eng.)
- Fu Y. (2003). Existence and uniqueness of edge waves in a generally anisotropic elastic plate // *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*. — 2003. — Vol. 56. — Pp. 605–616. (in Eng.)

Ma Y., Zhang Q., Zhang D., Scarpa F., Liu B., Hong J. (2015). The mechanics of shape memory alloy metal rubber. *Acta Mater.* — 2015. — 96. — Pp. 89–100. (in Eng.)

Zhang D., Scarpa F., Ma Y., Boba K., Hong J., Lu H. (2013). Compression mechanics of nickel-based superalloy metal rubber. *Mater. Sci. Eng. A.* — 2013. — 580. — Pp. 305–312. (in Eng.)

Safarov I., Teshaev M., Marasulov A., Nuriddinov B.Z. (2021). Propagation of own non-axisymmetric waves in viscoelastic three-layered cylindrical shells. *Engineering journal.* — 2021. — 25(7). — Pp. 97–107. (in Eng.)

Wang K.F. and Wang B.L. (2013). “Effects of surface and interface energies on the bending behavior of nanoscale multilayered beams”, *Physica E.* — 2013. — 54. — Pp. 197–201. (in Eng.)

Sarrami-Foroushani S. and Azhari M. (2014). “Nonlocal vibration and buckling analysis of single and multi-layered graphene sheets using finite strip method including van der Waals effects”, *Physica E.* — 2014. — 57. — Pp. 83–95. (in Eng.)

Anjomshoa A., Shahidi A.R., Hasani B. and Jomehzadeh E. (2014). “Finite Element Buckling Analysis of Multi-Layered Graphene Sheets on Elastic Substrate Based on Nonlocal Elasticity Theory,” *Applied Mathematical Modelling.* — 2014. — 38. — Pp. 5934–5955. (in Eng.)

Pradhan S.C. and Phadikar J.K. (2009). “Small scale effect on vibration of embedded multilayered graphene sheets based on nonlocal continuum models”, *Physics Letters A.* — 2009. — 373. — Pp. 1062–1069. (in Eng.)

Hosseini Hashemi, S. and Bakhshi Khaniki, H. (2016). “Analytical solution for free vibration of a variable cross-section nonlocal nanobeam”, *International Journal of Engineering (IJE) Transactions B: Applications.* — 2016. — 29. — P. 688–696. (in Eng.)

M.Kh. Teshaev, I.I. Safarov, M.M. Mirsaidov. (2019). “Oscillations of multilayer viscoelastic composite toroidal pipes”, *J. of the Serbian Society for Computational Mechanics.* — 2019. — Vol. 13. No. 2. — Pp. 105–116. (in Eng.)

Nazemnezhad R. and Hosseini-Hashemi Sh. (2014). “Free vibration analysis of multi-layer graphene nanoribbons incorporating interlayer shear effect via molecular dynamics simulations and nonlocal elasticity”, *Physics Letters A.* — 2014. — 378. — Pp. 3225–3232. (in Eng.)

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 79–94

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.258>

УДК 532.542, 532.135

© M. Pakhomov¹, U. Zhabbasbayev², G. Ramazanova^{2*}, 2024

¹Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS, Novosibirsk, Russia;

²U.A. Joldasbekov Institute of Mechanics and Engineering, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: gaukhar.ri@gmail.com

RSM MODEL FOR CALCULATING NON-ISOTHERMAL TURBULENT FLOW OF A VISCOPLASTIC FLUID IN A PIPE

M. Pakhomov — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Chief Researcher, Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch of the Russian Academy of Science, Novosibirsk, Russia

E-mail: pakhomov@ngs.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8127-3638>;

U. Zhabbasbayev — Doctor of Technical Sciences, Professor, Chief Researcher, U.A. Joldasbekov Institute of Mechanics and Engineering, Almaty, Kazakhstan

Email: uzak.zh@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5973-5149>;

G. Ramazanova — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher, U.A. Joldasbekov Institute of Mechanics and Engineering, Almaty, Kazakhstan

E-mail: gaukhar.ri@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8689-9293>.

Abstract. The paper presents the results of Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) model calculations of non-isothermal turbulent flow of a viscoplastic fluid in a pipe. The Reynolds stress model (RSM) was used to simulate turbulence. The results of calculations of Newtonian and non-Newtonian fluids were compared with the data of direct numerical simulation (DNS) calculations of other authors. The calculated data of the RSM showed a significant anisotropy of the axial and radial velocity fluctuations (up to several times) and good agreement with the DNS data of other authors. Incorporating supplementary runoff and source terms into the transfer equations for both averaged and turbulent flow characteristics results in a more accurate alignment with the DNS calculations regarding the distribution of turbulent non-Newtonian flow properties. The results of calculations of non-isothermal turbulent flow show the transition of a Newtonian fluid to a viscoplastic state. An increase of turbulent kinetic energy in the flow core and attenuation in the zone of yield stress manifestation are obtained. The averaged and fluctuation profiles express the indicated transformation of non-isothermal turbulent flow.

Keywords: non-isothermal turbulent flow, viscoplastic fluid, RANS, Reynolds stress model, non-Newtonian fluid

Acknowledgements. *This research has been funded by the Committee of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan*

(Grant number BR20280990 for 2023-2025) and The Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (mega-grant 075-15-2021-575) (the RSM turbulence model).

© М. Пахомов¹, Ұ. Жапбасбаев², Г. Рамазанова^{2*}, 2024

¹РФА СБ С.С. Кутателадзе атындағы Жылуфизика институты,
Новосибирск, Ресей;

²Академик Ө.А. Жолдасбеков атындағы Механика және машинатану
институты, Алматы, Қазақстан.
E-mail: gaukhar.ri@gmail.com

ҚҰБЫРДАҒЫ ТҮТҚЫР-ПЛАСТИКАЛЫҚ СҰЙЫҚТЫҚТЫҢ ИЗОТЕРМИЯЛЫҚ ЕМЕС ТУРБУЛЕНТТІК АҒЫСЫН ЕСЕПТЕУГЕ АРНАЛҒАН РЕЙНОЛЬДС КЕРНЕУІ МОДЕЛІ

Пахомов М. — Физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, Ресей Ғылым академиясының Сібір бөлімшесінің С.С. Кутателадзе атындағы Жылуфизика институтының бас ғылыми қызметкері, Новосибирск, Ресей

E-mail: pakhomov@ngs.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8127-3638>;

Жапбасбаев Ұ. — Техника ғылымдарының докторы, профессор, Академик Ө.А. Жолдасбеков атындағы Механика және машинатану институтының бас ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

E-mail: uzak.zh@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5973-5149>;

Рамазанова Г. — Физика-математика ғылымдарының кандидаты, Академик Ө.А. Жолдасбеков атындағы Механика және машинатану институтының жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

E-mail: gaukhar.ri@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8689-9293>.

Аннотация. Бұл мақалада құбырдағы тұтқыр-пластикалық сұйықтықтың изотермиялық емес турбулентті ағынының RANS есептеулерінің нәтижелері берілген. Рейнольдс кернеуі моделі (RSM) турбуленттілік модельдеу үшін пайдаланылды. Ньютондық және Ньютондық емес сұйықтықтарды есептеу нәтижелері басқа авторлардың DNS есептеулерінің деректерімен салыстырылды. RSM есептелген деректер осьтік және радиалды жылдамдық ауытқуларының елеулі анизотропиясын (бірнеше есеге дейін) және басқа авторлардың DNS деректерімен жақсы сәйкестігін көрсетті. Орташа және турбулентті ағын қасиеттеріне арналған тасымалдау теңдеулеріне ағын және бастау бойынша қосымша шарттарды енгізу турбулентті Ньютондық емес ағын қасиеттерінің таралуына қатысты DNS есептеулерімен жақсырақ келісімге әкеледі. Изотермиялық емес турбулентті ағынды есептеу нәтижелері Ньютон сұйықтығының тұтқыр-пластикалық күйге өтуін көрсетеді. Ағынның ядросында турбуленттік кинетикалық энергияның жоғарылауы және аққыштық кернеуінің байқалу аймағында оның басылуы орын алды. Орташа және пульсациялық профильдер изотермиялық емес турбулентті ағынның көрсетілген түрленуін білдіреді.

Түйін сөздер: изотермиялық емес турбулентті ағын, тұтқыр-пластикалық сұйықтық, Рейнольдс бойынша орташаланған Навье-Стокс тендеулері (RANS), Рейнольдс кернеу моделі, Ньютондық емес сұйықтық

© М. Пахомов¹, У. Жапбасбаев², Г. Рамазанова^{2*}, 2024

¹Институт теплофизики имени С.С. Кутателадзе СО РАН,
Новосибирск, Россия;

²Институт механики и машиноведения имени академика
У.А. Джолдасбекова, Алматы, Казахстан.
E-mail: gaukhar.ri@gmail.com

МОДЕЛЬ НАПРЯЖЕНИЙ РЕЙНОЛЬДСА ДЛЯ РАСЧЕТА НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ТУРБУЛЕНТНОГО ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОПЛАСТИЧНОЙ ЖИДКОСТИ В ТРУБЕ

Пахомов М. — доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, Институт теплофизики имени С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия

E-mail: pakhomov@ngs.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8127-3638>;

Жапбасбаев У. — доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник, Институт механики и машиноведения имени академика У.А. Джолдасбекова, Алматы, Казахстан

Email: uzak.zh@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5973-5149>;

Рамазанова Г. — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт механики и машиноведения имени академика У.А. Джолдасбекова, Алматы, Казахстан
E-mail: gaukhar.ri@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8689-9293>.

Аннотация. В статье представлены результаты расчетов RANS неизоотермического турбулентного течения вязкопластичной жидкости в трубе. Для моделирования турбулентности использовалась модель напряжений Рейнольдса (RSM). Результаты расчетов ньютоновской и неньютоновской жидкостей сравнивались с данными прямого численного моделирования (DNS) других авторов. Расчетные данные RSM показали значительную анизотропию осевых и радиальных флуктуаций скорости (до нескольких раз) и хорошее согласие с данными DNS других авторов. Включение дополнительных условий стока и источника в уравнения переноса для осредненных и турбулентных характеристик потока приводит к более точному согласованию с расчетами DNS в части распределения турбулентных неньютоновских свойств потока. Результаты расчетов неизоотермического турбулентного потока свидетельствуют о переходе ньютоновской жидкости в вязкопластическое состояние. Получено увеличение турбулентной кинетической энергии в ядре потока и затухание в зоне проявления напряжения текучести. Осредненные и пульсационные профили выражают упомянутую трансформацию неизоотермического турбулентного потока.

Ключевые слова: неизоотермическое турбулентное течение, вязкопласти-

чая жидкость, уравнения Навье-Стокса, осреднённые по Рейнольдсу, модель напряжений Рейнольдса, неньютоновская жидкость

Introduction

Turbulent non-Newtonian fluid (NNF) flows are encountered in various engineering applications, in particular in pipeline transportation of viscoplastic (waxy) oil (Zhapbasbayev et al., 2021). Turbulence anisotropy, wall effects and stratification are characteristic of non-isothermal flow of a viscoplastic fluid and present difficulties in modeling.

Direct numerical simulation (DNS) and large eddy simulation (LES) are the main methods for studying non-Newtonian fluid (NNF). There are known works by LES (Gnambode et al., 2015), DNS (Gavrilov & Rudyak, 2016 a; Rudman & Blackburn, 2006; Rudman et al., 2004; Singh et al., 2017 a; Singh et al., 2017 b) on the study of turbulent power-law, viscoplastic and pseudoplastic non-Newtonian fluids. The results of average and fluctuations axial and radial velocities, wall friction and turbulent kinetic energy were obtained at Reynolds numbers Re from 5000 to 20000. Note that LES (Gnambode et al., 2015) and DNS (Gavrilov & Rudyak, 2016 a; Rudman & Blackburn, 2006; Rudman et al., 2004; Singh et al., 2017 a) dealt only with Buckley-Herschel fluids, and only the recent work (Singh et al., 2017 b) presents DNS prediction data for a viscoplastic yield stress fluid.

The high computational cost of the DNS model for predicting turbulent flows of viscoplastic fluids makes the RANS+RSM approach the viable alternative for engineering applications. Research into RANS modeling of wall effects on turbulence has seen significant progress since the seminal work of Durbin, 1991. This paper examines the effect of wall blocking using the elliptical relaxation method. Durbin presented a new rationale for modeling heterogeneity in the “pressure-strain” term. In a later paper (Durbin, 1993), Durbin successfully applied the second moment full closure procedure to a wide range of canonical flows. However, this resulted in an inordinately large number of equations, since there was a separate elliptic equation for each Reynolds stress. On the other hand, simple turbulence models could not adequately capture the anisotropy of turbulence compared to complete second moment closure (SMC).

Manceau & Hanjalic, 2002 developed a practical model to solve both wall blocking and anisotropic effects with a single elliptic relaxation equation for a full Reynolds stress model. There is already evidence in the literature of successful application of the model in various applications (Thielen et al., 2005, Fadaei-Ghotbi et al., 2008). These studies mainly concerned flows without heat exchange. The RSM model was also applied to forced convective heat transfer and generally gave good agreement with experimental results (Manceau & Hanjalic, 2000; Behnia et al., 1999).

Several papers have dealt with the study of heat transfer in turbulent NNF (Masoudian et al., 2016; Masoumi et al., 2019; Yigit et al., 2020). Turbulent flow

studies with viscoelastic polymer flow have been investigated (Masoudian et al., 2016). In (Masoumi et al., 2019), a numerical study of the natural convection of a Schwedoff-Bingham (SB) fluid between horizontal concentric cylinders was carried out. DNS study of the velocity and temperature spectra in Rayleigh–Benard convection was carried out in (Yigit et al., 2020). The authors showed that thermal convection weakens with increasing Rayleigh number.

In our work we consider axisymmetrical RANS modeling of turbulent non-isothermal flow with yield strength of a viscoplastic SB fluid. The turbulence of the fluid is modeled using RSM model. The novelty of the study is the transformation of the turbulent flow of a Newtonian fluid into a viscoplastic state due to heat transfer with the surrounding medium

Mathematical model

Physical Model of a Non-Newtonian Viscoplastic (Schwedoff-Bingham) Fluid

A schematic view of the flow configuration is shown in Figure 1. A non-isothermal viscoplastic non-Newtonian fluid (waxy crude oil) flow along an underground pipe with an inner diameter (I.D.) $D = 2R = 0.2$ m, length $L = 3$ m, and depth to pipe axis $H = 2$ m. The mean-mass velocity of the liquid flow at the pipe inlet was $U_{m1} = 0.2$ m/s and its initial temperature $T_1 = 298$ K. The ambient temperature (soil) was $T_{Soil} = 273–298$ K. The pipe material was stainless steel and the pipe wall thickness $\delta = 2$ mm. It was assumed that the temperature of the pipe wall from its outer side was equal to the soil temperature $T_{w2} = T_{Soil}$. The temperature of soil was a constant value. The density of fluid flow in the inlet cross-section $\rho_1 = 835$ kg/m³. The Reynolds number of the flow, determined from the flow parameters at the inlet (for a Newtonian fluid) $Re = U_{m1}D_1/\nu_{w1} = 8200$.

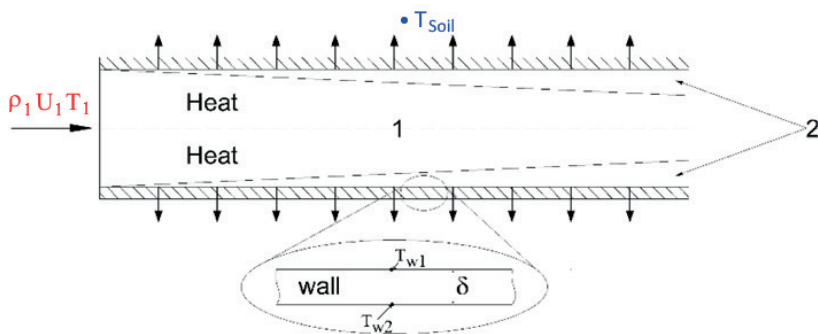


Figure 1 – Scheme of non-isothermal flow of paraffinic oil in a pipe:

1 – Newtonian fluid flow area; 2 – area of flow of the Schwedoff-Bingham non-Newtonian fluid.

Rheological Properties of a Non-Newtonian Fluid

In a non-Newtonian viscoplastic state, the effective molecular viscosity μ_{eff} can be modeled using the linear Schwedoff-Bingham rheological fluid model (Gavrilov & Rudyak, 2016 b; Finho, 2003). The effective molecular viscosity μ_{eff} of a fluid has the form

$$\mu_{eff} = \begin{cases} \mu_p + \tau_0 |\dot{\gamma}|^{-1}, & \text{if } |\tau| > \tau_0 \\ \infty, & \text{if } |\tau| \leq \tau_0 \end{cases} \quad (1)$$

Here τ_0 is the yield stress and μ_p is the plastic viscosity, $|\tau| = \sqrt{\tau_{ij}\tau_{ij}}$ is the second invariant of the deviatoric stress tensor, $\dot{\gamma} = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$ is the shear rate, $S_{ij} = 0.5 \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)$ is the shear rate tensor.

The effective molecular viscosity of the non-Newtonian fluid in turbulent flows depends not only on the average turbulent velocity of the flow, but also on fluctuations of the shear rate tensor (Gavrilov & Rudyak, 2016 b). The instantaneous value of viscosity is represented as a sum of the averaged and fluctuational components. The expression for the mean shear rate in the non-Newtonian fluid has the following form and consists of two terms. Let us the average value of the molecular viscosity is related to the average value of the shear rate such as the same rheological relationship as for the instantaneous quantities (1). Then, the expression for the averaged shear rate can be written as (Gavrilov & Rudyak, 2016 b):

$$\langle \dot{\gamma} \rangle^2 = 2 \langle S_{ij} \rangle \langle S_{ij} \rangle + (\rho \varepsilon) / \langle \mu_{eff} \rangle \quad \text{where} \quad \langle \mu_{eff} \rangle = \tau_0 \langle \dot{\gamma} \rangle + \mu_p \quad (2)$$

The main difficulty in the numerical modeling of viscoplastic flows, including a turbulent regime, with the help of expression (1), is associated with the existence of a singular molecular viscosity in regions where the shear stress is less than τ_0 . The approach of (Papanastasiou, 1987) was used in this work, where the effective viscosity was approximated by the following smooth function. It limits the value of effective viscosity as the shear rate tends to zero $\tau \rightarrow 0$:

$$\mu_{eff} = \mu_p + \tau_0 \frac{[1 - \exp(-10^3 |S|)]}{|S|}. \quad (3)$$

The Governing Equations for a Non-Newtonian Non-Isothermal Turbulent Fluid

The governing equations are given in symbols of vector analysis operations, although they are solved for an axisymmetric flow in cylindrical coordinates. The set of steady-state axisymmetric RANS equations of continuity, momentum in axial and radial directions, and the energy of a turbulent incompressible generalized Newtonian fluid has the form (Pakhomov & Zhabbasbayev, 2021; Pakhomov et al., 2023):

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (4)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla P + \nabla \cdot (2\mu_{eff} \mathbf{S}) + \nabla \cdot (-\rho \langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle) + \nabla \cdot (2\mu'_{eff} \mathbf{S}') \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\rho C_p T \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \nabla \cdot (-\rho C_p \langle \mathbf{u}' t' \rangle) + \boldsymbol{\tau} : \mathbf{S} \quad (6)$$

Here, ρ , μ_{eff} , λ , and C_p are the density, effective molecular viscosity, thermal conductivity coefficient, and heat capacity of the fluid, respectively; $\mathbf{U} \equiv (u_x, u_r)$ is the velocity vector, ($u_x = U$, $u_r = V$) are the fluid velocity components in the axial (x) and radial (r) directions, respectively; P is the mean pressure; $\langle u_i u_j \rangle$ and $\langle u_j t \rangle$ are the Reynolds stress and turbulent heat flux. The last terms in the equations of motion and energy of system (6) consider the effects of heat release during viscous dissipation of kinetic energy in a non-Newtonian fluid and have the form (Vinay et al., 2005).

The turbulent Reynolds stress $-\rho \langle \mathbf{u}' \mathbf{u}' \rangle = -\rho \langle u_i u_j \rangle$ and turbulent heat flux $-\rho C_p \langle \mathbf{u}' t' \rangle = -\rho C_p \langle u_j t \rangle$ were written according to Boussinesq hypothesis (Pakhomov & Zhabbasbayev, 2021, Pakhomov et al., 2023). The expression $\nabla \cdot \langle 2\mu'_{\text{eff}} \mathbf{S}' \rangle$ in equation (8) is found according to representation of (Gavrilov & Rudyak, 2016 b).

Turbulent viscosity μ_T is determined using the RSM model (Manceau & Hanjalic, 2002). The turbulent heat flux in the non-Newtonian fluid was obtained according to the Boussinesq hypothesis, which have the form:

$$\rho \langle u_j t \rangle = -\frac{\mu_T}{\text{Pr}_T} \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (7)$$

Here, Pr_T is the turbulent Prandtl number. It was determined in accordance with (Kays, 1994), where it was shown that for the range of variation of the molecular Prandtl number $\text{Pr} = 1-100$, the turbulent Prandtl number was $\text{Pr}_T = 0.85 + 0.7 / \text{Pe}_T$, where $\text{Pe}_T = \text{Pr}(v_T / \nu)$.

The RSM Turbulence Model

The elliptical relaxation RSM (Manceau & Hanjalic, 2002) considers anisotropy of complicated turbulent flows and is computationally more complicated than a well-known $k-\tilde{\varepsilon}$ turbulence model (Hwang & Lin, 1998). This model shows better results than the $k-\tilde{\varepsilon}$ turbulence isotropic model. The Reynolds stress components are derived from a system of partial differential equations, and the system of basic equations of the second-moment closure model of (Manceau & Hanjalic, 2002) is given:

$$\frac{D \overline{u_i u_j}}{Dt} = P_{ij} + D_{ij}^v + \Phi_{ij}^* - \varepsilon_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_l} \left(\frac{C_\mu T_T}{\sigma_k} \overline{u_l u_m} \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_m} \right) \quad (8)$$

$$\frac{D \varepsilon}{Dt} = \frac{C_{\varepsilon_1} P - C_{\varepsilon_2} \varepsilon}{T_T} + \frac{\partial}{\partial x_l} \left(\frac{C_\mu}{\sigma_\varepsilon} \overline{u_l u_m} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_m} \right) + \nu \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x_k \partial x_k} + C_{\varepsilon_3} \nu \frac{k}{\varepsilon} \overline{u_j u_k} \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j \partial x_l} \right) \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial x_k \partial x_l} \right) \quad (9)$$

$$\chi - L_T^2 \nabla^2 \chi = 1 / (\varepsilon T_T) \quad (10)$$

$$\Phi_{ij}^* = (1 - k\chi) \Phi_{ij}^w + k\chi \Phi_{ij}^h \quad (11)$$

$$\varepsilon_{ij} = (1 - Ak\chi) \frac{u_i u_j}{k} \varepsilon + Ak\chi \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \quad (12)$$

$$A = 1 - \frac{9}{8} (a_{ij} a_{ij} - a_{ij} a_{jk} a_{ki}), \quad a_{ij} = \frac{u_i u_j}{k} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{ij}^h = & - \left(g_1 + g_1^* \frac{P}{\varepsilon} \right) \varepsilon b_{ij} + g_2 \varepsilon \left(b_{ik} b_{kj} - \frac{1}{3} b_{kl} b_{kl} \delta_{ij} \right) + \left(g_3 - g_3^* \sqrt{b_{kl} b_{kl}} \right) k S_{ij} + \\ & g_4 k \left(b_{ik} S_{jk} + b_{jk} S_{ik} - \frac{2}{3} b_{lm} S_{lm} \delta_{ij} \right) + g_5 k (b_{ik} \Omega_{jk} + b_{jk} \Omega_{ik}) \end{aligned} \quad (14)$$

$$b_{ij} = \frac{\overline{u_i u_j}}{2k} - \frac{1}{3} \delta_{ij}; \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right); \quad \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (15)$$

$$\Phi_{ij}^w = -5 \frac{\varepsilon}{k} \left(\overline{u_i u_k n_j n_k} + \overline{u_j u_k n_i n_k} - \frac{1}{2} \overline{u_k u_l n_k n_l} (n_i n_j - \delta_{ij}) \right) \quad (16)$$

$$\bar{n} = \frac{\nabla \chi}{\|\nabla \chi\|}; \quad T_T = \max \left(\frac{k}{\varepsilon}, C_T \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \right); \quad L_T = C_L \max \left(\frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, C_\eta \frac{\nu^{3/4}}{\varepsilon^{1/4}} \right) \quad (17)$$

Here P_{ij} is the intensity of the energy transfer from the average velocity to the pulsating one; $P = 0.5P_{kk}$; T_T is the turbulent time macroscale; D_{ij}^ν is the viscous diffusion; Φ_{ij}^* is the redistribution term; ε_{ij} is the dissipation; ε is the dissipation rate. The constants and functions of the system of equations (8)–(17) are taken from (Manceau & Hanjalic, 2002).

The RSM model did not have additional sink and/or source terms taking the effect of non-Newtonian fluid on carrier phase turbulence.

Boundary conditions

The flow sketch is shown in the Fig. 1. No-slip conditions are set on the wall surface for the velocity and the condition of heat transfer with the environment medium is set for the temperature of the wall (Pakhomov & Zhabbasbayev, 2024):

$$r = R; \quad U = V = k = \tilde{\varepsilon} = 0; \quad -\lambda_w \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_w = \alpha_1 (T_m - T_w); \quad \overline{u_i u_j} = 0; \quad \varepsilon = 2\nu \frac{k}{y^2}; \quad \chi = 0 \quad (18)$$

The symmetry conditions are set on the pipe axis for all variables:

$$r = 0; \quad \frac{\partial U}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial k}{\partial r} = \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial r} = V = 0; \quad \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial r} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = \frac{\partial \chi}{\partial r} = 0 \quad (19)$$

In the inlet section ($x = 0$), the distributions of all variables over the pipe section were set, corresponding to the developed turbulent flow in the pipe. At the outlet edge ($x=L$) soft boundary conditions were given for all variables.

Thus, the system of equation (1)—(17) with the corresponding input and boundary conditions (18), (19) is a closed system of equations that describes the process of turbulent heat transfer in a waxy oil flow and allows the predictions of all the required quantities.

Thermal effects in rheological properties are taken into account by the dependence of viscosity $\mu(T)$ and yield stress $\tau_0(T)$ on temperature (Pakhomov & Zhabbasbayev, 2021). These dependencies are based on experimental data. In the Table 1 are given the values of the yield shear stress τ_0 , plastic viscosity μ_p , and Bingham number $Bm = \tau_0 R / (\mu_p U_{m1})$ vs fluid temperature.

Table 1
The dependence of yield shear stress, and plastic viscosity of non-Newtonian fluid

$t, ^\circ\text{C}$	T, K	τ_0, Pa	$\mu_p, \text{Pa}\cdot\text{s}$	Bingham number Bm
0	273	589.6	0.3585	822.32
5	278	34.62044	0.14634	118.29
10	283	2.03286	0.05974	17.01
15	288	0.11937	0.02438	2.45
20	293	0.00701	0.00995	0.35
25	298	4.1156E-4	0.00406	0.05
30	303	2.41662E-5	0.00166	0.007

Numerical realization

The numerical solution is obtained using a control volume method on a staggered grid. All numerical predictions are performed using the “in-house” code. The system of equations (3–5) is solved numerically using the QUICK scheme and the SIMPLEC algorithm. The simulations use a non-uniform mesh (streamwise and transverse directions) with refinement close to all walls. The cell closest to the wall is located at $yu^*/\nu_w = 0.4$, where $u_* = \sqrt{\tau_w / \rho}$ is the friction velocity of a Newtonian fluid in the inlet pipe, τ_w is the wall shear stress and ν_w is kinematic viscosity of a fluid at wall condition. The residual error for the continuity equation, momentum equations, and RSM model is 10^{-5} and for the energy equation the error is 10^{-7} .

The grid convergence test (GCT) for the radial profiles of turbulent kinetic energy (TKE) is performed on the grids: 500x40 (“coarse”), 1000x80 (“basic”) and 1500 x 120 (“fine”) (see Fig. 2).

The Reynolds and Prandtl numbers of the flow are $Re = U_1 D / \nu_{w1} = 0.82 \times 10^4$ and $Pr = \mu_{w1} C_{p1} / \lambda_1 = 42$. The difference between “basic” and “fine” grids is very small (up to 0.1%) and the grid with 1000 x 80 CVs is used in authors’ simulations as the basic grid.

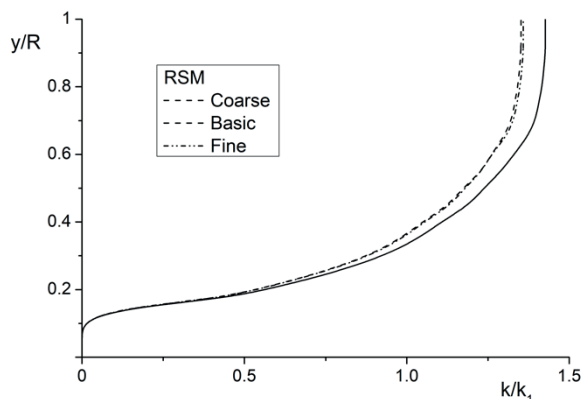


Figure 2 – The grid convergence test for RSM models of in-house numerical code:
 $L = 2 \text{ m}$, $Re = 8200$, $U_1 = 0.2 \text{ m/s}$, $T_1 = 298 \text{ K}$, $T_w = 273 \text{ K}$

Calculation results and discussion

Averaged and turbulent characteristics of the Schwedoff- Bingham fluid

The axial averaged velocity profile along the tube cross section is qualitatively similar to the one for a Newtonian fluid. This is characteristic both for the DNS data (Singh et al., 2017 a) and for our RANS calculations. For the axial averaged velocity distributions, it is possible to note an excess by RANS calculations (up to 10 %) in comparison to DNS data (Singh et al., 2017 a). The TKE distributions calculated by the author's model also agree satisfactorily with the DNS calculation both in the viscous sublayer and in the logarithmic region and the difference does not exceed 15 %. These data are given in (Pakhomov & Zhabbasbayev, 2021) and are not presented here in order to reduce the manuscript volume. However, the isotropic $k-\varepsilon$ – model (Hwang & Lin, 1998) does not even qualitatively describe the complex distribution of velocity fluctuations over the pipe cross section and significant anisotropy of axial and radial velocity fluctuations of SB fluid. This is especially noticeable in the profiles of the radial velocity fluctuation component.

For the Schwedoff-Bingham-fluid the results of the RSM model calculations of the axial $u'^+ = u' / u_*$ (a) and radial $v'^+ = v' / u_*$ (b) velocity fluctuation profiles are shown in Figure 3.

Here points are DNS (Singh et al., 2017 b), lines are RANS calculation of authors using RSM model (Manceau & Hanjalic, 2002). As can be seen from the data shown in Fig. 3, the RSM model qualitatively well describes the anisotropy of the axial and radial velocity fluctuation profiles. The positions of maximum values and practically coincide with DNS data (Singh et al., 2017 b). The obtained calculation data confirm the possibility of successful use of the RSM model (Manceau & Hanjalic, 2002) to describe the non-isothermal flow of the SB fluid. Further in our calculations of flow and heat transfer at transition of turbulent Newtonian fluid to non-Newtonian fluid we will use exactly RSM model (Manceau & Hanjalic, 2002).

The following crucial points can be noted in conclusion to these two subsections

concerning the validation a numerical model for describing turbulent isothermal power-law and Schwedoff-Bingham fluids. The use of the isotropic $k-\varepsilon$ model (Hwang & Lin, 1998) makes it possible to predict, in the first approximation, the distributions of the averaged parameters of the turbulent flow (averaged axial velocity and TKE) of non-Newtonian fluids with a reasonable degree of accuracy. However, this model is completely unsuitable for calculating the axial and radial components of the carrier phase velocity fluctuations (up to 300 %). The use of the Reynolds stress model (second-moment closure) (Manceau & Hanjalic, 2002) in describing turbulence makes it possible to calculate the behavior of the turbulent characteristics in axial and radial directions of non-Newtonian fluids with satisfactory accuracy (up to 20 %).

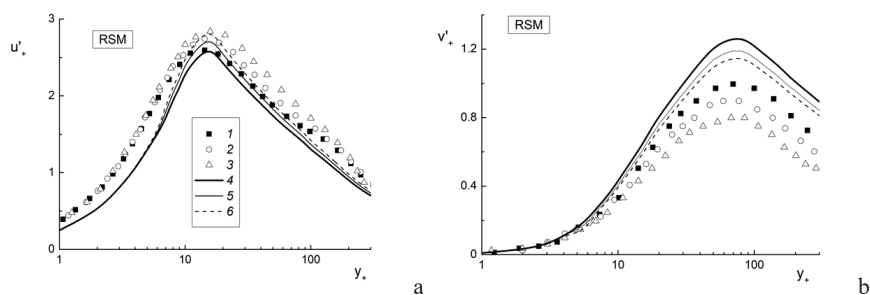


Figure 3 – Comparisons of the results of authors' RANS calculations using the RSM model (Manceau & Hanjalic, 2002) of axial $u'^+ = u' / u_*$ (a) and radial $v'^+ = v' / u_*$ (b) velocity fluctuations of the Schwedoff-Bingham fluid with the DNS results (Singh et al., 2017 b): Dots are the DNS (Singh et al., 2017 b), lines are the RANS calculation by the author using the RSM model (Manceau & Hanjalic, 2002). $Re = U_{m1}D_1/\nu_{w1} = 1.3 \times 10^4$, $Re_\tau = u_*R_1/\nu_w = 323$. 1, 3 – Newtonian fluid; 2, 4 – non-Newtonian fluid; $\tau_0/\tau_w = 1.1$; 5, 6 – non-Newtonian fluid $\tau_0/\tau_w = 1.2$.

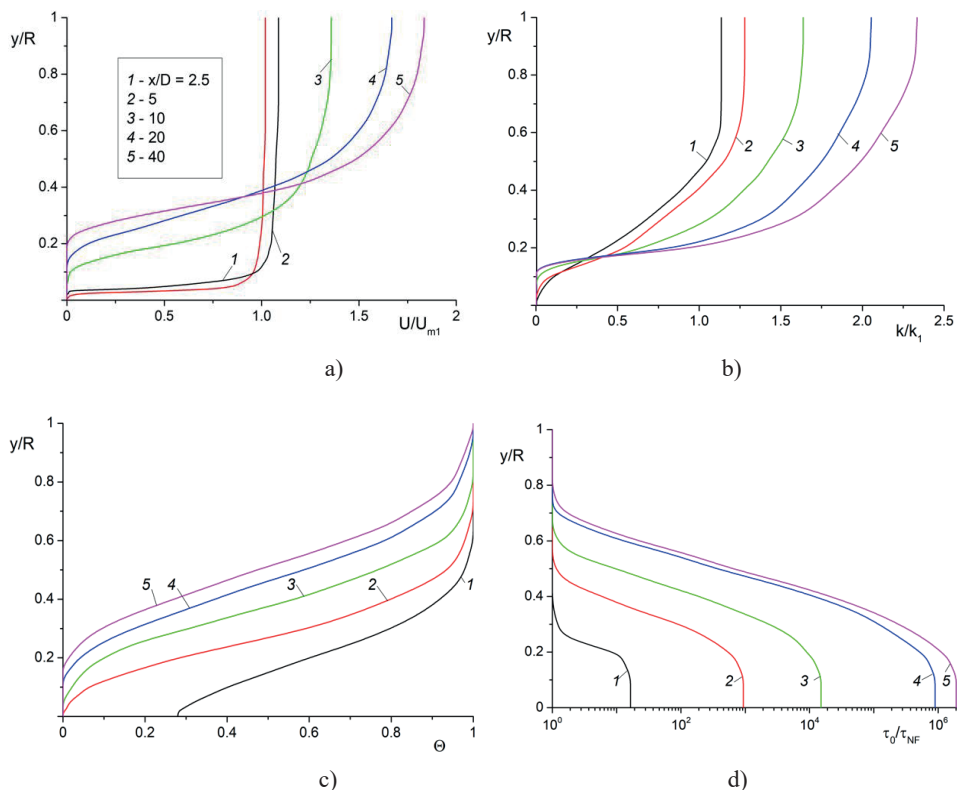
Predictions of turbulent non-isothermal flow structure

A non-isothermal waxy crude oil (WCO) flows along an underground pipe (see Fig. 1). The pipe inner diameter is $D = 2R = 0.2$ m, and length of computational domain $L = 20$ m ($x/D = 100$). Turbulent flow in the inlet cross-section considers as a Newtonian fluid. Then WCO cools down by flowing along the pipe length due to heat transfer through pipe wall with cold soil. The Reynolds and Prandtl numbers of the flow are $Re = U_{m1}D/\nu_{w1} = (0.4-1.2) \times 10^4$ and $Pr = \mu_{w1}C_{p1}/\lambda_1 = 42$. The Reynolds number has the same form as for a generalized Newtonian fluid. It based on the fluid viscosity determined under wall conditions and the viscosity is depends on the fluid temperature. Studies are carried out with a steady flow of fluid in the pipe.

Results of calculations of non-isothermal motion in the pipe show change of state of Schwedoff-Bingham fluid (paraffinic oil). Newtonian properties of liquid in initial sections of pipe gradually change to viscoplastic (non-Newtonian) state due to heat transfer between heated liquid in pipe through its wall and cold environment. In process of movement along the pipe the value of longitudinal velocity in zone

near axis increases (up to 1.7 times in comparison with entrance velocity level), and in the wall zone on the contrary decreases and height of section with zero value of liquid velocity increases (see Fig. 4a). Height of the section with zero liquid velocity in the pipe gradually increases as the oil moves along the pipe and reaches $y/R \approx 0.15$ at $x/D = 20$. The core area with maximum liquid velocity gradually decreases to $y/R \approx 0.9$ at $x/D = 20$.

There is a significant increase of turbulent kinetic energy in the near-wall area of the pipe (more than 1.75 times) and a noticeable decrease in the near-wall area (see Fig. 4b). For the axisymmetric flow, TKE is determined by the well-known equation: $2k \approx \langle u'^2 \rangle + 2\langle v'^2 \rangle$. The boundary of the region of Newtonian fluid properties has been determined. Profiles of evolution of dimensionless temperature $\Theta = (T - T_{w1}) / (T_1 - T_{w1})$ of liquid show cooling of paraffinic oil flow due to heat exchange with environment through the pipe wall (see Fig. 4c). Here T_{w1} is the wall temperature at the inlet section.



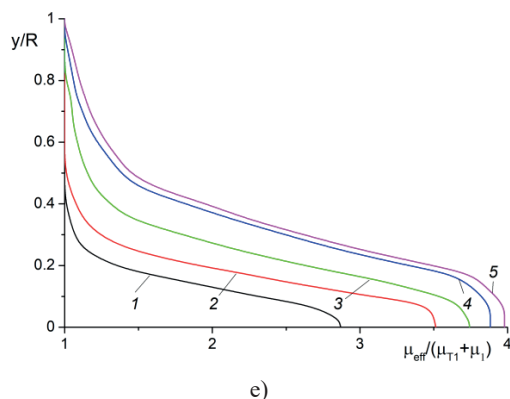


Figure 4 – Distributions of the dimensionless average axial velocity U/U_{m1} (a), turbulent kinetic energy k/k_1 (b), average temperature Θ (c) and yield shear stress τ_0/τ_{NF} (d) and averaged effective dynamic viscosity (e). $Re = 8200$, $T_1 = 298$ K, $T_s = 273$ K

Yield stress profiles $\tau_0/\tau_{0,1}$ are shown in Figure 4d, where $\tau_{0,1}$ is the yield stress at $T = 293$ K. The radial profiles of average dynamic viscosity coefficient distributions $\mu_{eff}/(\mu_{T1}+\mu)$ along the pipe length are given in Figure 4e. Here μ_{eff} is the effective averaged viscosity of the turbulent NNF and $(\mu_{T1}+\mu_1)$ is the sum of turbulent and molecular viscosities of the NF (waxy crude oil) at the inlet. This ratio is clearly showing the effect of appearance of non-Newtonian behavior of the fluid movement. The decrease in the fluid temperature in the near-wall zone by turbulent Newtonian fluid cooling causes significant increase in the value of average dynamic viscosity coefficient of the fluid.

It is known (Zhapbasbayev et al., 2021) that at fluid temperature $T \leq 293$ K, non-Newtonian fluid properties begin to appear and limit shear stress τ_0 arises. This leads to a sharp increase in mean dynamic viscosity and ultimate shear stress and leads to a decrease in the speed of waxy oil and even to a complete stop. It can be noted that the temperature, average dynamic viscosity and ultimate shear stress profiles evolution along the pipe length show that at temperature $T \geq 293$ K paraffinic oil has a Newtonian fluid property, whereas in the temperature region $T < 293$ K the properties of viscoplastic (non-Newtonian) Schwedoff-Bingham- fluid appear.

Earlier in works (Pakhomov & Zhapbasbayev, 2021; Pakhomov et al., 2023; Pakhomov & Zhapbasbayev, 2024) it was shown that heat transfer of moving liquid flow in pipe or channel and surrounding ground has the main influence on manifestation of non-Newtonian properties of SB liquid. The results of numerical calculations for the influence of the ambient ground temperature T_s on the turbulent characteristics of paraffinic oil are shown in Figure 5. For a Newtonian fluid, flow and heat transfer calculations were performed for paraffinic oil without taking into account the non-Newtonian properties at $T_s = 298$ K. Note that for the Newtonian fluid our numerical calculations are in good agreement with the known DNS calculations (Singh et al., 2017 a). These data are not shown in these figures.

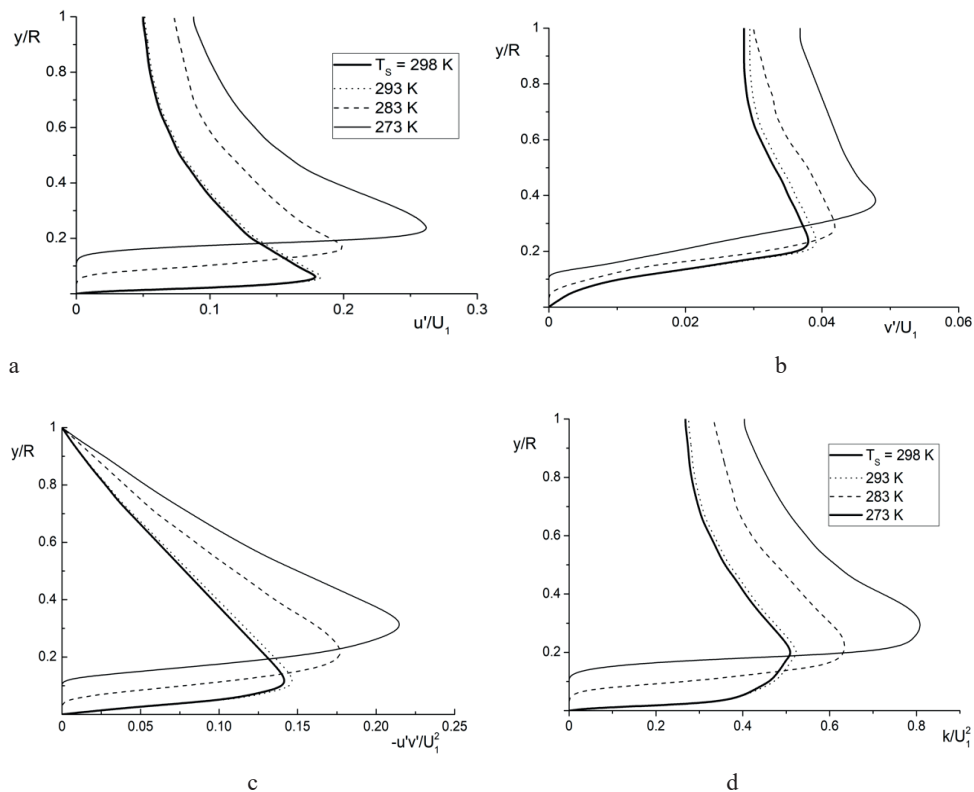


Figure 5 – Effect of soil temperature T_s on the profiles of axial u'/U_1 (a), radial v'/U_1 (b) turbulent fluctuations, Reynolds stresses $-u'v'/U_1^2$ (c) and turbulence kinetic energy k/U_1^2 (d): $Re = 8200, x/D = 20, T_1 = 298$ K

The lowering of the ambient ground temperature causes additional generation of turbulence in the near-wall zone of the pipe and its significant suppression in the wall part of the pipe (see Fig. 5). This is consistent with the data shown in Fig. 4. At the same time there is a shift of position point of turbulent pulsation level maximum, Reynolds stress and TKE towards the pipe axis. In Newtonian liquid it is located $y/R \approx 0.1$ for axial fluctuations, Reynolds stress and TKE (see Fig. 5). For a liquid with manifestation of non-Newtonian properties and ultimate shear stress ($T_s = 273$ K), the maximum is located at ($y/R \approx 0.23$). Also significant turbulence anisotropy is visible and the ratio of axial velocity fluctuations to radial fluctuations is $(u'/v')_{\max} \approx 5.3$ (see Fig. 5).

Heat transfer between of waxy crude oil (paraffinic oil) with the cold environment leads to the decrease in the temperature of the carrier fluid. It causes an increase in plastic viscosity, and the appearance of a yield stress in the near-wall zone of the pipe. The values of plastic viscosity and yield stress in in the near-wall region become larger for the colder carrier fluid. As the temperature decreases, the near-wall zone of the viscoplastic fluid expands, covering more and more parts of the

Newtonian fluid. The velocity of the carrier fluid slows down and loses their fluidity at high values of the yield stress in the near-wall zone. The decrease in the fluid temperature leads to crystallization of the wax, and the release of the heat of the phase transition. Figures 4, 5 clearly demonstrate the occurrence of a stagnation zone and the viscoplastic state of the fluid, and also illustrate the transition of paraffinic oil from the Newtonian state to the viscoplastic non-Newtonian Schvedoff-Bingham-state due to heat transfer with the cold environment.

Conclusion

A numerical study of the motion and heat transfer of a turbulent non-isothermal Schvedoff -Bingham fluid through a pipe wall with a cold environment has been carried out. Dependences of viscosity and ultimate shear stress on temperature were determined experimentally. The calculated data show the transition of an incompressible Newtonian fluid to a non-Newtonian (viscoplastic) state.

Calculation results for transition of turbulent Newtonian fluid to viscoplastic state are in satisfactory agreement with DNS data of other works for Schvedoff-Bingham fluid. A better agreement with the DNS calculations on the distribution of turbulent non-Newtonian flow characteristics is obtained by including additional runoff and source terms in the transfer equations for the averaged and turbulent flow characteristics. In the logarithmic layer velocity profile for the Schvedoff-Bingham fluid is qualitatively similar to that for the Newtonian fluid.

One of the significant results is an increase of turbulent kinetic energy in the flow core and damping in the zone of yield strength manifestation. The calculated data of the turbulent stress model qualitatively describes the anisotropy of the axial and radial velocity fluctuations well. The locations of maximum values of axial and radial velocity fluctuations are in agreement with the DNS data of other authors.

REFERENCES

- Behnia M., Parniex S., Shabany Y. & Durbin P. (1999). Numerical study of turbulent heat transfer in confined and unconfined impinging jets. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, — 20(1), — 1–9. — [https://doi.org/10.1016/S0142-727X\(98\)10040-1](https://doi.org/10.1016/S0142-727X(98)10040-1)
- Durbin P.A. (1991). Near-wall turbulence closure modeling without “damping functions”. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, — 3, — 1–13. — <https://doi.org/10.1007/BF00271513>
- Durbin P.A. (1993). Application of a near-wall turbulence model to boundary layers and heat transfer. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, —14, — 316–323. — [https://doi.org/10.1016/0142-727X\(93\)90004-7](https://doi.org/10.1016/0142-727X(93)90004-7)
- Fadai-Ghotbi A., Manceau R. & Boree J. (2008). Revisiting urans computations of the backward-facing step flow using second moment closures. Influence of the Numerics. *Flow, Turbulence and Combustion*, — 81, — 395–414. — <https://doi.org/10.1007/s10494-008-9140-8>
- Finho F.T. (2003). A GNF framework for turbulent flow models of drag reducing fluids and proposal for a k-e type closure. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, — 114 (2-3), — 149–184. — [https://doi.org/10.1016/S0377-0257\(03\)00120-4](https://doi.org/10.1016/S0377-0257(03)00120-4)
- Gavrilov A.A. & Rudyak V.Y. (2016 a). Direct numerical simulation of the turbulent flows of power-law fluids in a circular pipe. *Thermophysics and Aeromechanics*, — 23(4), — 473–486. — <https://doi.org/10.1134/S0869864316040016>
- Gavrilov A.A. & Rudyak V.Y. (2016 b). Reynolds-averaged modeling of turbulent flows of

power-law fluids, *Journal of Non-Newtonian. Fluid Mechanics*, — 227, — 45–55. — <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2015.11.006>

Gnambode P.S., Orlandi P., Ould-Rouiss M. & Nicolas X. (2015). Large-Eddy simulation of turbulent pipe flow of power-law fluids. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, — 54, — 196–210. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatfluidflow.2015.05.004>

Hwang C.B. & Lin C.A. (1998). Improved low-Reynolds-number $k-\varepsilon$ – model based on direct simulation data. *AIChE Journal*, — 36(1), — 38–43. — <http://dx.doi.org/10.2514/2.349>

Kays M. (1994). Turbulent Prandtl Number – Where We Are? *ASME Journal of Heat and Mass Transfer*, — 116(2), — 284–295 <https://doi.org/10.1115/1.2911398>

Manceau R. & Hanjalic K. (2002). Elliptic blending model: a new near-wall Reynolds-stress turbulence closure. *Physics of Fluids*, — 14(2), — 744–754. <https://doi.org/10.1063/1.1432693>

Manceau R. & Hanjalic K. (2000). A new form of the elliptic relaxation to account for wall effects in RANS modeling. *Physics of Fluids*, — 12(9), — 2345–2451. <https://doi.org/10.1063/1.1287517>

Masoudian M., Pinho F.T., Kim K. & Sureshkumar R. (2016). A RANS model for heat transfer reduction in viscoelastic turbulent flow. *International. Journal of Heat and Mass Transfer*, — 100, — 332–346. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.04.053>

Masoumi H., Aghighi M.S. & Ammar A. (2019). Laminar natural convection of yield stress fluids in annular spaces between concentric cylinders. *International. Journal of Heat and Mass Transfer*, — 138, — 1188–1198. — <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.04.092>

Pakhomov M.A. & Zhabbasbayev U.K. (2021). RANS modeling of turbulent flow and heat transfer of non-Newtonian viscoplastic fluid in a pipe. *Case Studies of Thermal Engineering*, — 28 (2), — 101455. — <http://dx.doi.org/10.1016/j.csite.2021.101455>

Pakhomov M.A., Zhabbasbayev U.K. & Bossinov D.Zh. (2023). Numerical simulation of the transition of a Newtonian to a viscoplastic state in a turbulent flow. *Journal of King Saud University – Science*, — 35(2), — 102522. — <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e24062>

Pakhomov M.A. & Zhabbasbayev U.K. (2024). Comparative predictions of turbulent non-isothermal flow of a viscoplastic fluid with yield stress. *Heliyon*, — 10, — e24062. — <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e24062>

Papanastasiou T.C. (1987). Flows of materials with yield. *Journal of Rheology*, — 31(5), — 385–404

Rudman M., Blackburn H.M., Graham L.J.W. & Pullum L. (2004). Turbulent pipe flow of shear-thinning fluids. *Journal of Non-Newtonian. Fluid Mechanics*, — 118(1), — 33–48. — <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2004.02.006>

Rudman M. & Blackburn H.M. (2006). Direct numerical simulation of turbulent non-Newtonian flow using a spectral element method. *Applied Mathematical Modelling*, — 30, — 1229–1248. — <https://doi.org/10.1016/j.apm.2006.03.005>

Singh J., Rudman M. & Blackburn H.M. (2017 a). The influence of shear-dependent rheology on turbulent pipe flow. *Journal of Fluid Mechanics*, — 822, — 848–879. — doi:10.1017/jfm.2017.296

Singh J., Rudman M. & Blackburn H.M. (2017 b). The effect of yield stress on pipe flow turbulence for generalised Newtonian fluids. *Journal of Non-Newtonian. Fluid Mechanics*, — 249, — 53–62. — <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2017.09.007>

Thielen L., Hanjalic K., Jonker H.J.J. & Manceau R. (2005). Predictions of flow and heat transfer in multiple impinging jets with an elliptic-blending second-moment closure. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, — 48 (8), — 1583–1598. — <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2004.10.025>

Vinay G., Wachs A. & Agassant J.-A. (2005). Numerical simulation of non-isothermal viscoplastic waxy crude oil flows. *Journal of Non-Newtonian. Fluid Mechanics*, — 128(2-3): — 144–62. — <https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2005.04.005>

Yigit S., Hasslberger J., Chakraborty N. & Klein M. (2020). Effects of Rayleigh-Bénard convection on spectra of viscoplastic fluids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, — 147, — 118947. — <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118947>

Zhabbasbayev U.K., Ramazanova G.I., Bossinov D.Zh. & Kenzhaliyev B.K. (2021). Flow and heat exchange calculation of waxy oil in the industrial pipeline. *Case Studies of Thermal Engineering*, — 26, — 101007. — <https://doi.org/10.1016/j.csite.2021.101007>

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 95–108

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.259>

UDC 629.78(075.8)

© **K. Saurova^{1*}, S. Nysanbaeva¹, N. Seidakhmet², G. Turlybekova³,
K. Astemesova³, 2024**

¹Almaty University of Energy and Communications named after. G. Daukeev,
Almaty, Kazakhstan;

²Boston University, Boston, MA, USA;

³Kazakh National Technical University named after K.I. Satbayev,
Almaty, Kazakhstan.

E-mail: k.saurova@aes.kz

SIMULATION MODELING OF ORBITAL MOTION DYNAMICS OF SPACECRAFT

Saurova Kamila — Master, Art. Lecturer at the Department of Space Engineering, Almaty University of Energy and Communications named after. G. Daukeev, 050013, Almaty, Kazakhstan

E-mail: k.saurova@aes.kz. ORCID:0009-0003-7960-8106;

Nysanbaeva Saltanat — PhD, Associate Professor of the Department of Space Engineering, Almaty University of Energy and Communications named after. G. Daukeev, 050013, Almaty, Kazakhstan

E-mail: s.nysanbaeva@aes.kz. ORCID:0000-0001-9254-3819;

Seidakhmet Nurpatsha — MSc, computer science, Boston University, Boston, USA

E-mail: nurrr@bu.edu. ORCID:0009-0006-7141-1538;

Turlybekova Gulzhan — candidate of technical sciences, senior lecturer. Kazakh National Technical University named after K.I. Satbayev, 050013, Almaty, Kazakhstan

E-mail: g.turlybekova@satbayev.university. ORCID:0000-0001-5522-4931;

Astemessova Kalamkas — PhD, senior lecturer, Kazakh National Technical University named after K.I. Satbayev, 050013, Almaty, Kazakhstan

E-mail: k.astemessova@satbayev.university. ORCID:0000-0002-4143-6084.

Abstract. This work is devoted to the study of simulation modeling of the dynamics of the orbital motion of a spacecraft. Simulation modeling is a powerful tool for analyzing and predicting the behavior of space objects under various conditions. The paper discusses the basic principles of constructing a model of orbital motion, including taking into account gravitational interaction with planets, the sun and other space objects, as well as aerodynamic and other external influences. Model verification and validation methods are also discussed, as well as possible applications of the results obtained for optimizing spacecraft missions and planning space operations. The work includes both theoretical reflections and practical examples of simulation modeling, making it useful for both researchers and engineers involved in the design and management of space missions. Calculations

of orbital motion were carried out and a simulation model of various types of orbital motion of the spacecraft was obtained.

Key words: Orbital movement. Spacecraft. Modeling. Dynamics. Gravitational influence. External influences. Mathematical models

© К. Саурова^{1*}, С. Нысанбаева¹, Н. Сейдахмет², Г. Турлыбекова³,
Қ. Астемесова³, 2024

¹Ғ. Дәукеев атындағы Алматы энергетика және байланыс университеті,
Алматы, Қазақстан;

²Бостон университеті, Бостон, АҚШ;

³Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті
Алматы, Қазақстан.

E-mail: k.saurova@aes.kz

ҒАРЫШ АППАРАТЫНЫҢ ОРБИТАЛДЫҚ ҚОЗҒАЛЫС ДИНАМИКАСЫН СИМУЛЯЦИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Саурова Камила — магистр, аға оқытушы «Ғарыштық инженерия» кафедрасы, Ғұмарбек Даукеев атындағы Алматы энергетика және байланыс университеті, 050013, Алматы, Қазақстан Республикасы

E-mail: k.saurova@aes.kz. ORCID:0009-0003-7960-8106;

Нысанбаева Салтанат — PhD, доцент, «Ғарыштық инженерия» кафедрасы, Ғұмарбек Даукеев атындағы Алматы энергетика және байланыс университеті, 050013, Алматы, Қазақстан Республикасы

E-mail: s.nysanbaeva@aes.kz. ORCID:0000-0001-9254-3819;

Сейдахмет Нұрпатша — Бостон университетінің компьютерлер ғылымының магистрі, Бостон, АҚШ

E-mail: nurlrr@bu.edu. ORCID:0009-0006-7141-1538;

Турлыбекова Гулжан — техника ғылымдарының кандидаты, аға оқытушы. Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті.050013, Алматы, Қазақстан

E-mail: g.turlybekova@satbayev.university. ORCID:0000-0001-5522-4931;

Астемесова Каламқас Сериковна — PhD, аға оқытушы. Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, 050013, Алматы, Қазақстан

E-mail: k.astemessova@satbayev.university. ORCID:0000-0002-4143-6084.

Аннотация. Бұл жұмыс ғарыш аппаратының орбиталық қозғалысының динамикасын имитациялық модельдеуді зерттеуге арналған. Имитациялық модельдеу – әртүрлі жағдайларда ғарыш объектілерінің әрекетін талдау және болжау үшін қуатты құрал. Жұмыста планеталармен, күнмен және басқа ғарыш объектілерімен гравитациялық әсерлесуді, сондай-ақ аэродинамикалық және басқа да сыртқы әсерлерді ескере отырып, орбиталық қозғалыс моделін құрудың негізгі принциптері талқыланады. Модельді тексеру және валидация әдістері, сондай-ақ ғарыш аппараттарының миссияларын оңтайландыру және ғарыштық операцияларды жоспарлау үшін алынған нәтижелердің ықтимал қолданылуы талқыланады. Жұмыс теориялық ойларды да, модельдеудің практикалық мысалдарын да қамтиды, бұл оны ғарыштық миссияларды

жобалаумен және басқарумен айналысатын зерттеушілер мен инженерлер үшін пайдалы етеді. Орбиталық қозғалыстың есептеулері жүргізілді және ғарыш аппаратының орбиталық қозғалысының әртүрлі типтерінің имитациялық моделі алынды.

Түйін сөздер: Орбиталық қозғалыс. Ғарыш кемесі. Модельдеу. Динамика. Гравитациялық әсер. Сыртқы әсерлер. Математикалық модельдер

© **К. Саурова^{1*}, С. Нысанбаева¹, Н. Сейдахмет², Г. Турлыбекова³,
К. Астемесова³, 2024**

¹Алматинский университет энергетики и связи им. Г. Даукеева,
Алматы, Казахстан;

²Университет Бостон, Бостон, США;

³Казахский национальный исследовательский технический университет
им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан.

E-mail: k.saurova@aes.kz

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ОРБИТАЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ КОСМИЧЕСКОГО АППАРАТА

Саурова Камила — магистр, ст. преподаватель кафедры «Космическая инженерия», Алматинский университет энергетики и связи имени Гумарбека Даукеева, 050013, Алматы, Казакстан

E-mail: k.saurova@aes.kz. ORCID:0009-0003-7960-8106;

Нысанбаева Салтанат — PhD, доцент, Алматинский университет энергетики и связи имени Гумарбека Даукеева, 050013, Алматы, Казакстан

E-mail: s.nysanbaeva@aes.kz. ORCID:0000-0001-9254-3819;

Сейдахмет Нурпатша — магистр компьютерных наук Бостонского университета, Бостон, США

E-mail: nurlrr@bu.edu. ORCID:0009-0006-7141-1538;

Турлыбекова Гулжан — кандидат технических наук, старший преподаватель, Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева, 050013, Алматы, Казахстан

E-mail: g.turlybekova@satbayev.university. ORCID:0000-0001-5522-4931;

Астемесова Каламкас — PhD, старший преподаватель, Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева, 050013, Алматы, Казахстан

E-mail: k.astemessova@satbayev.university. ORCID:0000-0002-4143-6084.

Аннотация. Работа посвящена исследованию имитационного моделирования динамики орбитального движения космического аппарата. Имитационное моделирование представляет собой мощный инструмент для анализа и прогнозирования поведения космических объектов в различных условиях. Авторами рассматриваются основные принципы построения модели орбитального движения, включая учет гравитационного взаимодействия с планетами, солнцем и другими космическими объектами, а также аэродинамические и другие внешние воздействия. Также обсуждаются методы верификации и валидации модели, включая возможные области

применения полученных результатов для оптимизации миссий космических аппаратов и планирования космических операций. Проведены расчеты орбитального движения и получены имитационный модель различные виды орбитального движения КА. Работа включает в себя как теоретические размышления, так и практические примеры имитационного моделирования, что делает ее полезной для исследователей и инженеров, занимающихся разработкой и управлением космическими миссиями.

Ключевые слова: орбитальное движение, космический аппарат, моделирование, динамика, гравитационное воздействие, внешние воздействия, математические модели

Введение

Моделирование орбитального движения космических объектов является необходимым как для решения задач проектной баллистики, так и планирования операций управления космическим аппаратом. Для космических аппаратов это позволяет запланировать сеансы управления и связи, организовать научные эксперименты, решать множество прикладных задач.

Имитационное моделирование при изучении сложной динамической системы, в частности космического аппарата, имеющего свой закон движения и особенности поведения, является основным методом получения информации о поведении системы в условиях неопределенности. Кроме того, имитационное моделирование — универсальный метод исследования и оценки эффективности системы, поведение которой зависит от действия случайных факторов.

Сегодня широко применяют различные типы измерительных систем: радиотехнические, оптические, гравиметрические, магнитометрические и т. д. Основными видами внешне траекторных измерений являются радиотехнические и оптические. Проведение радиотехнических и оптических измерений связано с определением некоторых геометрических и кинематических характеристик или временных сдвигов, отнесенных к фиксированному (базисным) в пространстве точкам.

Определение орбиты КА — один из важнейших разделов космической баллистики, занимающийся вопросами вычисления координат и составляющих скорости КА на некотором временном интервале и обеспечивающий получение требуемых данных о векторе состояния КА. Нужно различать методы решения задачи определения орбиты КА на этапе проектирования и в ходе реального полета. На этапе проектирования необходимо выбрать траекторию, наилучшим образом решающую поставленную задачу; в ходе реального полета определение орбиты характеризует фактическое состояние КА в полете.

Принципиальная особенность задачи определения орбиты в ходе реального полета заключается в том, что для решения обязательно требуется некоторая информация о движении КА, получаемая по результатам измерений. Точность

и оперативность решения задачи определения орбиты решающим образом зависят от состава, количества и качества измерительной информации, поэтому вопросы получения и обработки информации приобретают самостоятельное значение. Наиболее просто задачу определения орбиты решают в рамках теории невозмущенного движения КА. Наличие априорной информации в виде конечных соотношений, характеризующих параметры кеплеровой орбиты, позволяет найти искомый результат при задании в качестве известных различных сочетаний параметров: положения и скорости КА в начальный момент времени, двух фиксированных положений аппарата, фокального параметра его орбиты и т. д. Опишем решение поставленных задач для невозмущенного движения и эллиптической орбиты, наиболее важной с точки зрения практического применения для околоземных КА.

Результаты и обсуждение

В работе (Баринаова и др., 2019) были получены формулы для определения положений относительного равновесия динамически симметричного наноспутника формата CubeSat под действием аэродинамического и гравитационного моментов при движении по круговой орбите, когда центр масс смещён относительно геометрического по трём координатам. Работа посвящена определению положений равновесия углового движения наноспутника формата CubeSat на круговой орбите под действием аэродинамического и гравитационного моментов. Отличительной особенностью наноспутников формата CubeSat является то, что они имеют форму прямоугольного параллелепипеда и, как следствие, коэффициент аэродинамической силы лобового сопротивления зависит от ориентации спутника относительно набегающего потока (углов атаки и собственного вращения). Были определены положения равновесия динамически симметричного наноспутника формата CubeSat при смещении центра масс от геометрического центра по трём осям, при движении по круговой орбите под действием аэродинамического и гравитационного моментов. Определены условия, при которых изменяется число положений относительного равновесия в зависимости от соотношений таких параметров, как смещение центра масс от геометрического центра, моменты инерции, высота орбиты. Определены положения относительного равновесия наноспутника SamSat-QB50 для различных значений высоты орбиты.

В статье (Игнатова и др., 2022: 362–362) разработали модель движения спутника-инспектора в окрестности КА на орбите Земли. Проведены расчеты для частного случая такого движения спутника-инспектора, а затем и для маневра сближения с КА и дальнейшего пассивного движения. Осуществлена визуализация параметров движения. А также в работе была построена математическая модель движения спутника-инспектора, который безаварийно сближается с КА и сопровождает его в течение некоторого времени. Полученные результаты можно применять при проектировании систем управления движением КА, в задачи которых входят операции по сближению и сопровождению.

Разработанное программное обеспечение «VisualSpace» (Кезик, 2020) позволяет проводить расчеты: орбитальных параметров движения космических аппаратов в геоцентрических (планетоцентрических), орбитальных, топоцентрических системах координат (СК); стандартной баллистической информации для заданного пункта наблюдения с возможностью выбора параметров пролета. Программа предназначена для визуального наблюдения космических аппаратов и космических объектов солнечной системы. Моделирование производилось в трехмерном пространстве, что позволяло демонстрировать эволюцию орбит со временем.

В (Sarychev и др., 2007; Сарычев и др., 2012: 394–402; 2015: 488–496) был предложен символично-численный метод определения всех положений равновесия спутника в орбитальной системе координат.

В статье (Тулеkenова и др., 2015) рассмотрена математическая модель и синтез вращательного движения КА в орбитальной системе координат с учетом магнитного поля и атмосферы земли для наклонных орбит. Были использованы динамические уравнения Эйлера в системе координат, связанной со спутником, а именно, в осях Кенига, для построения уравнения движения спутника вокруг центра масс. Проведенный синтез модели вращательного движения космического аппарата с учетом магнитного поля и атмосферы Земли позволил получить данные, характеризующие долговременный полет по орбитальной орбите.

В пространстве КА движется согласно определенным физическим законам, испытывая воздействие различных возмущающих факторов (не сферичность Земли, гравитационное влияние Луны, Солнца и планет, аэродинамическое сопротивление атмосферы Земли, магнитное поле Земли, давление солнечного света), некоторые из которых имеют случайную природу и не поддаются прямому математическому описанию. Учет этих факторов при изучении движения КА является сложной задачей, кроме того, для их компенсации необходимо формировать управляющие воздействия. В подобных ситуациях невозможно создать реальную модель, описанную аналитически, поэтому, когда затруднительно учитывать нелинейности, стохастические переменные и необходимо имитировать поведение КА во времени, рассматривая различные сценарии его движения при изменении внешних и внутренних условий, применяют методы имитационного моделирования.

Существует большое количество различных методов численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений, к которым относят и уравнения движения КА.

Орбитальная механика (или астродинамика) включает в себя применение законов движения Ньютона и универсального закона тяготения к космическим кораблям (таким как ракеты и спутники). Он используется планировщиками миссий для прогнозирования движения космического корабля под действием гравитации, тяги и других сил.

Простейшей задачей небесной механики считается задача двух грави-

тационно-взаимодействующих тел. Если начало системы координат совместить с массивным телом, то вследствие его неподвижности такая система координат будет инерциальной.

Движение центра масс КА описывается векторными уравнениями:

$$m \frac{d\vec{V}}{dt} = \vec{F}, \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{V}, \quad (1)$$

где \vec{V} , \vec{r} - вектор скорости и радиус-вектор КА массой m . Сила притяжения определяется формулой Ньютона:

$$\vec{F} = -\gamma M \frac{m}{r^3} \vec{r} = -\mu \frac{m}{r^3} \vec{r},$$

$$\mu = \gamma M$$

где γ - универсальная гравитационная постоянная, m - масса, а μ - гравитационный параметр небесного тела. Разделив на массу аппарата левую и правую части первого уравнения системы (1), получим:

$$\frac{d\vec{V}}{dt} = -\frac{\mu}{r^3} \vec{r}, \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{V} \quad (2)$$

Проектируя уравнение (2) на оси инерциальной системы координат, получим уравнения невозмущенного движения в координатной форме:

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= -\frac{\mu}{r^3} x = 0 \\ \ddot{y} &= -\frac{\mu}{r^3} y = 0 \\ \ddot{z} &= -\frac{\mu}{r^3} z = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Основные характеристики задачи определения параметров движения КА, прогнозирование их для заданных моментов времени непосредственно зависят от свойств математической модели движения (ММД), рационального построения ее функциональной структуры, своевременности получения и точности навигационно-баллистической информации.

Одновременно с определением вектора состояния КА уточняют параметры модели по результатам наблюдений с наземных измерительных станций. В результате задачу идентификации решают с учетом дополнительных погрешностей (аномальные измерения, вычислительные ошибки, неполная реализация штатной схемы измерений). При такой постановке задачи расчеты проводят в условиях не моделируемого движения.

Для уточнения идентифицируемых параметров при наличии ошибок измерений предлагается использовать имитационно-моделирующий комплекс (ИМК).

Для определения параметров движения по измерениям текущих навигационных параметров необходимо иметь возможность вычисления расчетных значений вектора состояния в заданный момент времени. Для выполнения указанной процедуры используются ММД КА. Это совокупность дифференциальных уравнений движения КА с описанием математических моделей сил, действующих на КА в полете, и метода решения этой системы уравнений (4).

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= -\frac{\mu}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}}x \\ \ddot{y} &= -\frac{\mu}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}}y \\ \ddot{z} &= -\frac{\mu}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}}z\end{aligned}\quad (4)$$

где μ — гравитационный параметр первичной массы (планеты, луны, старта и т. д.).

x , y и z — декартовы координаты, определяющие положение космического корабля в инерциальном пространстве.

Точки представляют собой производные по времени, поэтому одна точка — это скорость, а две точки — ускорение. Будем использовать их в разделе кодирования статьи.

Это встроенная функция, которая принимает в качестве входных данных набор производных для интегрирования (определяемая пользователем функция), интересующий временной интервал, начальные условия и, возможно, допуск для численного интегрирования.

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ \dot{x} \\ \dot{y} \\ \dot{z} \end{pmatrix}\quad (5)$$

Набор производных будет производным по времени от вектора состояния Y , который включает компоненты положения и скорости космического корабля в векторной форме. И вектор состояния, и его производная по времени показаны ниже.

$$\dot{\vec{y}} = \frac{d\vec{y}}{dt} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ \dot{x} = -\frac{\mu}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}}x \\ \dot{y} = -\frac{\mu}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}}y \\ \dot{z} = -\frac{\mu}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}}z \end{pmatrix}\quad (6)$$

В процессе полета КА совершает сложное движение: его центр масс движется по определенной траектории (орбите), а сам КА — вокруг своего центра масс.

Основные участки движения КА:

- выведение на орбиту (активный участок);
- орбитальный полет (пассивный участок);

- маневры КА на орбите и коррекция орбит;
- спуск КА.

Выведение на орбиту осуществляется с помощью многоступенчатых ракетносителей (РН).

Для выведения на геостационарную орбиту (GEO) могут использоваться собственные разгонные блоки КА.

Методы выведения на орбиту:

- с одним активным участком (выход на орбиту без дожигания топлива);
- чередованием активных и пассивных участков (выход на орбиту с дожиганием топлива), что характерно для выведения на геостационарную орбиту.

При составлении и решении дифференциальных уравнений движения наглядно отображается совокупность сил, действующих на КА. Для описания движения КА выбираем систему координат (СК) на основе решаемой задачи космической баллистики и управления. Например, для слежения за КА с наземных пунктов управления и связи необходимо описывать его движение относительно наземного пункта. При управлении движением КА необходимо учитывать тип и схему измерительных датчиков и исполнительных органов, а также соответственно выбрать удобную систему координат.

Материалы и методы

Чтобы смоделировать орбиту, нам нужно будет использовать численное интегрирование. Чтобы численно интегрировать или решить уравнения движения космического корабля, необходимо использовать функцию `ode113` в MATLAB.

Листинг:

```
function dYdt = ODE2BP(t, Y)
mu = 3.986*10^5;
x = Y(1); % [km]
y = Y(2); % [km]
z = Y(3); % [km]
vx = Y(4); % [km/s]
vy = Y(5); % [km/s]
vz = Y(6); % [km/s]
xddot = -mu/(x^2+y^2+z^2)^(3/2)*x; % [km/s^2]
yddot = -mu/(x^2+y^2+z^2)^(3/2)*y; % [km/s^2]
zddot = -mu/(x^2+y^2+z^2)^(3/2)*z; % [km/s^2]
dYdt = [vx;vy;vz;xddot;yddot;zddot]; % Y'
end
function dYdt = ODE2BP(t, Y)
mu = 3.986*10^5;
x = Y(1); % [km]
y = Y(2); % [km]
z = Y(3); % [km]
vx = Y(4); % [km/s]
```

```

vy = Y(5); % [km/s]
vz = Y(6); % [km/s]
xddot = -mu/(x^2+y^2+z^2)^(3/2)*x; % [km/s^2]
yddot = -mu/(x^2+y^2+z^2)^(3/2)*y; % [km/s^2]
zddot = -mu/(x^2+y^2+z^2)^(3/2)*z; % [km/s^2]
dYdt = [vx;vy;vz;xddot;yddot;zddot]; % Y'
end

```

Для моделирования орбиты КА задаём начальные параметры и получаем изображение эллиптической орбиты как показано на рисунке 1.

```

Y0 = [20000; 0; 0; 0; 2.9; 1.8]; % [x; y; z; vx; vy; vz] [km, km/s]
tspan = [0 24*60*60]; % One day [s]
options = odeset('RelTol', 1e-13); % Setting a tolerance
% Numerical Integration
[t, Y] = ode113(@ODE2BP, tspan, Y0, options);
% Pulling Position Data from Output
x = Y(:, 1); % [km]
y = Y(:, 2); % [km]
z = Y(:, 3); % [km]

```

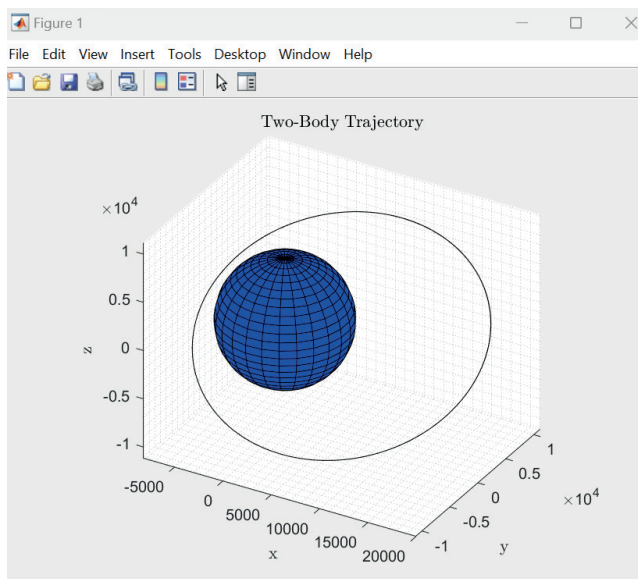


Рис. 1 - Эллиптическая орбита

Вывод изображения для отображения моделирования:

```

figure; hold on
title('Two-Body Trajectory', 'Interpreter', 'Latex')
xlabel('x', 'Interpreter', 'Latex')
ylabel('y', 'Interpreter', 'Latex')
zlabel('z', 'Interpreter', 'Latex')

```

```

axis equal
grid minor
view(30, 30)
% Creating/Plotting Spherical Earth
rm = 6378.14; % Radius of Earth [km]
[xEarth, yEarth, zEarth] = sphere(25);
surf(rm*xEarth,rm*yEarth,rm*zEarth, 'FaceColor', [0 0 1]);
% Plotting Trajectory
plot3(x, y, z, 'k')
hold off
    
```

Для определения закона орбитального движения спутника необходимо установить зависимость параметров движения от времени. Расстояние спутника от притягивающего центра и его скорость можно достаточно просто вычислить, если известна величина истинной аномалии ϑ .

Для моделирования полярной орбиты КА задаём начальные параметры: Высота 24км, скорость движение КА на орбите 1.8 км/с.

$Y0 = [0; 0; 24000; 0; 2.9; 1.8];$ % [x; y; z; vx; vy; vz] [km, km/s]

И получим как полярная орбита проходит над полюсами Земли (Рис. 2).

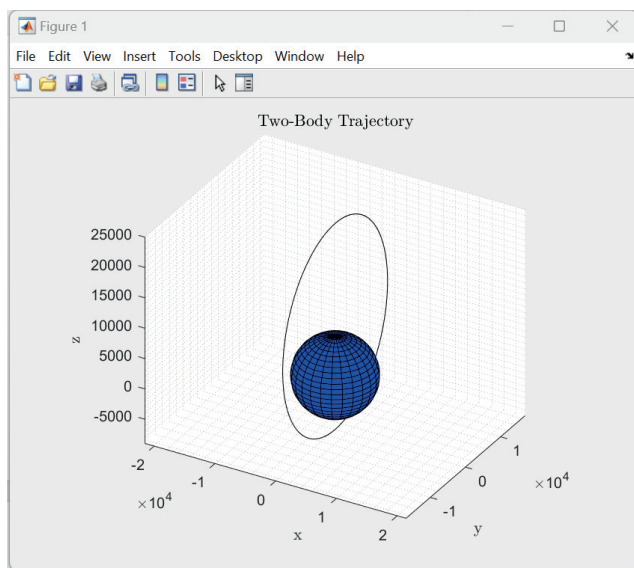


Рис. 2 – Полярная орбита проходит над полюсами Земли

Для высоких орбит КА (с высотой более 3000 км) основной особенностью методов расчета является необходимость учета возмущающего действия Луны и Солнца. В связи с этим для расчета элементов орбит наиболее целесообразно использовать систему уравнений в инерциальной геоцентрической системе координат.

Для моделирования круговой экваториальной орбиты задаём начальные параметры КА: 43км высоты 0.8 км/с скорость на орбите и получим геостационарную орбиту (круговую) как показано на рисунке 3.

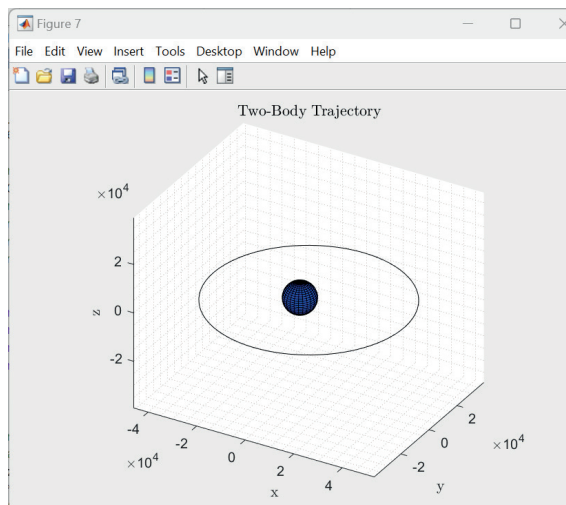


Рис. 3 – Геостационарная орбита (круговая)

В практике космических полетов получило наибольшее распространение определение орбит и параметров движения КА с использованием внешне-траекторных измерений (ВТИ). В этом случае измерительная информация прямо или косвенно связана с траекторией КА или параметрами его движения.

Были проведены расчеты орбитального движения и получены модели различных видов орбитальных движения КА. А также в работе изложены процесс создания орбиты или траектории двух тел с помощью MATLAB предназначенного для изучения орбитального движения КА.

Результаты приближенных решений широко применяют при проведении различного рода оценочных и проверочных расчетов в процессе баллистико-навигационного обеспечения полета КА, а также используют в качестве экспресс-оценок для оперативного анализа результатов самостоятельных инженерных исследований. Доработка и развитие ИМК позволят оптимизировать применение различных методов фильтрации данных и получать оценки устойчивости работы КА.

Выводы

Полученные в результате имитационного моделирования динамики орбитального движения космического аппарата, позволяют сделать следующие заключения:

Точное предсказание и анализ орбитальной динамики: Имитационное моделирование позволяет получить точные и надежные прогнозы перемещения космического аппарата в пространстве. Это важно для планирования миссий,

управления полетами и изучения долгосрочных эффектов воздействия различных факторов на орбиту.

Оптимизация ресурсов и рисков: Моделирование позволяет оптимизировать использование топлива и других ресурсов, минимизировать риски столкновений с космическим мусором или другими объектами, а также планировать резервные маневры для коррекции орбиты в случае необходимости.

Поддержка принятия решений: Результаты моделирования предоставляют ценную информацию для принятия стратегических и тактических решений в ходе миссии. Это может включать выбор оптимальной траектории полета, времени и места выполнения маневров и других операций.

Подтверждение концепций и проектирование: Моделирование позволяет проверить работоспособность и эффективность концепций проекта космического аппарата еще на стадии проектирования, что помогает избежать ошибок и улучшить качество конечного продукта.

Обучение и обучение персонала: Имитационные модели являются отличным инструментом для обучения пилотов и инженеров космических миссий, позволяя им практиковать различные сценарии и реагировать на непредвиденные ситуации в условиях безопасной симуляции.

Таким образом, имитационное моделирование динамики орбитального движения космического аппарата является ключевым компонентом успешной космической программы, обеспечивая безопасность, эффективность и успешное выполнение поставленных задач.

В заключении нужно отметить, что имитационное моделирование динамики орбитального движения космического аппарата представляет собой важный инструмент для понимания и управления космическим пространством. В ходе исследования были изучены основные принципы построения моделей орбитального движения, включая учет гравитационного воздействия, внешних воздействий и численные методы решения дифференциальных уравнений.

Анализ результатов моделирования позволяет делать точные прогнозы о состоянии и поведении космического аппарата в различных сценариях. Это важно для разработки и оптимизации миссий, обеспечения безопасности полетов, а также планирования долгосрочных операций в космосе.

Однако следует отметить, что имитационные модели всегда являются упрощенным представлением реальных систем, и их точность зависит от качества входных данных и используемых математических моделей. Поэтому важно проводить валидацию моделей на основе экспериментальных данных и корректировать их при необходимости.

В целом, имитационное моделирование динамики орбитального движения космического аппарата играет ключевую роль в различных аспектах космической деятельности, обеспечивая эффективное управление ресурсами, безопасность полетов и достижение поставленных целей. Развитие и совершенствование этого метода моделирования будет способствовать дальнейшему прогрессу в исследовании и освоении космоса.

ЛИТЕРАТУРА

Барина Е.В., Тимбай И.А. (2019). Положения относительного равновесия динамически симметричного наноспутника формата CubeSat под действием гравитационного и аэродинамического моментов/ Вестник Самарского университета. Аэрокосмическая техника, технологии и машиностроение. — Т. 18. — № 2. — 2019 г.

Игнатова А.А., Алексеев А.В. (2022). Математическое моделирование движения спутника-инспектора в окрестности космического аппарата // XLVIII Самарская областная студенческая научная конференция. — Том 1 (2022), — Стр. 362–362

Кезик А.Г. (2020). Моделирование орбитального движения космических объектов в программе visual space/ 77-я научная конференция студентов и аспирантов белорусского государственного университета. — Минск, — 11–22 мая 2020 года

Sarychev V.A., Mirer S.A., Degtyarev A.A., Duarte E.K. (2007). Investigation of equilibria of a satellite subjected to gravitational and aerodynamic torques // *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*. 2007. — V. 97. — Iss. 4. — Pp. 267–287. — DOI: 10.1007/s10569-006-9064-3

Сарычев В.А., Гутник С.А. (2012). Динамика осесимметричного спутника под действием гравитационного и аэродинамического моментов // *Космические исследования*. — 2012. — Т. 50. — № 5. — С. 394–402.

Сарычев В.А., Гутник С.А. (2015). Динамика спутника под действием гравитационного и аэродинамического моментов. Исследование положений равновесия / *Космические исследования*. 2015. — Т. 53. — № 6. — С. 488–496.

Тулкенова Д.Т., Ергалиев Д.С., Тулегулов А.Д. (2015). Математическая модель вращательного движения КА в орбитальной системе координат с учетом магнитного поля и атмосферы земли для наклонных орбит/ Труды Междунар. симп. Надежность и качество. — 2015. — Т. 1. — С. 117–119.

Тулкенова Д.Т., Ергалиев Д.С., Тулегулов А.Д., Ибраев О.С. (2015). Синтез модели вращательного движения космического аппарата с учетом магнитного поля и атмосферы Земли / Надежность и качество сложных систем. — 2015. — № 3 (11). — С. 10–16.

REFERENCES

Barinova E.V., Timbai I.A. (2019). Relative equilibrium positions of a dynamically symmetric CubeSat nanosatellite under the influence of gravitational and aerodynamic moments/ *Bulletin of Samara University. Aerospace engineering, technologies and mechanical engineering*. — Vol. 18. — No. 2. — 2019

Ignatova A.A., Alekseev A.V. (2022). Mathematical modeling of the motion of an inspector satellite in the vicinity of a spacecraft // XLVIII Samara Regional Student Scientific Conference. — Volume 1. (2022). — Pp. 362–362

Кезик А.Г. (2020). Modeling the orbital motion of space objects in the visual space program/ 77th Scientific Conference of students and postgraduates of the Belarusian State University. Minsk, — May 11–22, — 2020

Sarychev V.A., Mirer S.A., Degtyarev A.A., Duarte E.K. (2007). Investigation of equilibria of a satellite subjected to gravitational and aerodynamic torques // *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*. — 2007. — V. 97. — Iss. 4. — Pp. 267–287. — DOI: 10.1007/s10569-006-9064-3

Sarychev V.A., Gutnik S.A. (2012). Dynamics of an axisymmetric satellite under the influence of gravitational and aerodynamic moments // *Space Research*. — 2012. — Vol. 50. — No. 5. — Pp. 394–402.

Sarychev V.A., Gutnik S.A. (2015). Satellite dynamics under the influence of gravitational and aerodynamic moments. The study of equilibrium positions / *Space research*. — 2015. — Vol. 53. — No. 6. — Pp. 488–496.

Tulekenova D.T., Ergaliev D.S., Tulegulov A.D. (2015). A mathematical model of the rotational motion of a spacecraft in an orbital coordinate system, taking into account the magnetic field and the Earth's atmosphere for inclined orbits/ *Proceedings of the International simp. Reliability and quality*. — 2015. — vol. 1. — Pp. 117–119.

Tulekenova D.T., Ergaliev D.S., Tulegulov A.D., Ibraev O.S. (2015). Synthesis of a model of the rotational motion of a spacecraft taking into account the magnetic field and the Earth's atmosphere / *Reliability and quality of complex systems*. — 2015. — № 3 (11). — Pp. 10–16.

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 109–122

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.260>

УДК 538.9:620.91(44.37.03)

© **E.O. Shalenov¹, Ye.S. Seitkozhanov^{1,2}, M.M. Seisembayeva^{1,2},
K.N. Dzhumagulova^{1,2}, 2024**

¹Satbayev University, Almaty, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University, IETP, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: erik.shalenov@gmail.com

COMPARATIVE ANALYSIS OF SANDWICH AND BACK-CONTACT PEROVSKITE SOLAR CELLS

Shalenov Erik O. — PhD, associate professor of the Department of General Physics, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: Shalenov.erik@physics.kz, <http://orcid.org/0000-0001-6469-6623>;

Seitkozhanov Yeldos S. — doctoral student at Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: seytkozhanov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5123-4558>;

Seisembayeva Madina M. — doctoral student at Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: seisembayevamm@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3256-5957>;

Dzhumagulova Karlygash N. — Laureate of the al-Farabi State Prize of the Republic of Kazakhstan in the field of science and technology, corresponding member of the NAS RK, doctor of physical and mathematical sciences, professor, professor of the Department of Plasma Physics, Nanotechnology and Computer Physics of the Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: dzhumagulova.karlygash@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2937-4482>.

Abstract. The advent of hybrid halide perovskite materials has marked a significant breakthrough in photovoltaics (PV) over the last decade due to their remarkable optoelectronic properties, such as high absorption coefficients, tunable band gaps, low exciton binding energies, long carrier diffusion lengths, and high charge carrier mobility. Today, hybrid halide perovskite solar cells (PSCs) demonstrate record power conversion efficiencies (PCEs) of 25.5 % for single-junction cells and 29.1 % for monolithic perovskite/silicon tandem solar cells, surpassing other thin-film photovoltaic technologies (e.g., CIGS, CdTe), and comparable to well-established solar technologies such as crystalline silicon solar cells. To accelerate the development of PSCs towards commercialization, several critical issues such as reproducible high efficiency, long-term stability, hysteretic behavior, lead toxicity, and scalability need to be addressed comprehensively. The high versatility of thin-film fabrication technologies allows for significant flexibility in device architecture design, enabling PSCs to hold substantial potential for enhancing device performance. To further enhance the performance of perovskite

solar cells, a promising approach is to incorporate an integrated back-contact structure, which is expected to reduce light loss. This study employs numerical simulation methods to compare two structures and investigates factors influencing the power conversion efficiency of integrated back-contact perovskite solar cells, demonstrating their advantage over traditional multilayer perovskite solar cells. The presented results offer guidance for designing and fabricating high-efficiency integrated back-contact perovskite solar cells.

Keywords: perovskite solar cells; solar energy; modeling; $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$; Comsol Multiphysics

© **Е.О. Шаленов¹, Е.С. Сейткожанов^{1,2}, М.М. Сейсембаева^{1,2},
К.Н. Джумагулова^{1,2}, 2024**

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

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, ЭТФҒЗИ,
Алматы, Қазақстан.

E-mail: erik.shalenov@gmail.com

СЭНДВИЧ ПЕН КЕРІ КОНТАКТЫ ПЕРОВСКИТ КҮН ЭЛЕМЕНТТЕРІН САЛЫСТЫРМАЛЫ ТАЛДАУ

Шаленов Ерик Онгарович — PhD, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, жалпы физика кафедрасының доценті, Алматы, Қазақстан

E-mail: Shalenov.erik@physics.kz, <http://orcid.org/0000-0001-6469-6623>;

Сейткожанов Елдос Сериккалиұлы — әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университетінің докторанты, Алматы, Қазақстан

E-mail: seytkozhanov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5123-4558>;

Сейсембаева Мадина Маратовна — әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университетінің докторанты, Алматы, Қазақстан

E-mail: seisembayevamm@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3256-5957>;

Джумагулова Карлыгаш Нурмановна — ғылым және техника саласындағы Қазақстан Республикасының әл-Фараби атындағы Мемлекеттік сыйлығының лауреаты, ҚР ҰҒА-ның корреспондент-мүшесі, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университетінің плазма физикасы, нанотехнология және компьютерлік физика кафедрасының профессоры, Алматы, Қазақстан

E-mail: dzhumagulova.karlygash@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2937-4482>.

Аннотация. Гибридті галогенді перовскит материалдарының пайда болуы соңғы онжылдықта фотоэлектрикада (ФЭ) үлкен серпіліс жасады, олардың керемет оптоэлектрондық қасиеттері, мысалы, жоғары сіңіру коэффициенттері, қайта құрылатын жолақ, төмен экситондық байланыс энергиясы, тасымалдаушының үлкен диффузиялық ұзындығы және заряд тасымалдаушылардың жоғары қозғалғыштығы. Бүгінгі күнге дейін гибридті галогенді перовскитті күн элементтері (ПКЭ) энергияны конверсиялаудың рекордтық тиімділігін көрсетеді (power conversion efficiency (PCE)) бір ауыспалы үшін 25,5 % және басқа жұқа пленкалы фотоэлектрлік технологиялардан (мысалы,

CIGS, CdTe) асып түсетін монолитті перовскит/кремний тандемді күн элементтері үшін 29,1 % және салыстырмалы жақсы дәлелденген кристалды кремний күн элементтері сияқты күн технологиясы. Коммерцияландыру бағытында ПКЭ дамуын жеделдету үшін қайталанатын жоғары тиімділік, ұзақ мерзімді тұрақтылық, гистерезис әсері, қорғасынның уыттылығы және масштабталу сияқты бірқатар маңызды мәселелерді жақсы шешу қажет. Жұқа қабықшалы өндіріс технологияларының жоғары әмбебаптығы құрылғы архитектурасын жобалауда жоғары икемділікті тудырады, бұл ПКЭ құрылғылардың өнімділігін жақсартуға айтарлықтай мүмкіндік береді. Перовскитті күн элементтерінің өнімділігін одан әрі жақсарту үшін оларға жарықтың жоғалуын азайтуы мүмкін интеграцияланған кері байланыс құрылымын енгізу перспективалы нұсқа болып табылады. Бұл жұмыс екі құрылымды салыстыру үшін сандық модельдеу әдісін қолданады. Біз перовскитті күн элементтерінің интеграцияланған кері байланысының энергия түрлендіру тиімділігіне әсер етуі мүмкін факторларды зерттедік, олардың дәстүрлі көп қабатты перовскитті күн элементтерінен артықшылығы бар екенін көрсеттік. Ұсынылған нәтижелер жоғары тиімді перовскитті күн элементтерін жобалау және өндіру бойынша ұсыныстар береді.

Түйін сөздер: перовскит күн элементтері; күн энергиясы; модельдеу; $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$; Comsol Multiphysics

© **Е.О. Шаленов¹, Е.С. Сейтқожанов^{1,2}, М.М. Сейсембаева^{1,2},
К.Н. Джумагулова^{1,2}, 2024**

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

²Казахский национальный университет им. аль-Фараби, НИИЭТФ, Алматы, Казахстан.

E-mail: erik.shalenov@gmail.com

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СЭНДВИЧ И ОБРАТНО- КОНТАКТНЫХ ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Шаленов Ерик — PhD, ассоциированный профессор кафедры общей физики, Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

E-mail: Shalenov.erik@physics.kz, <http://orcid.org/0000-0001-6469-6623>;

Сейтқожанов Елдос Сериккалиевич — докторант Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: seytkozhanov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5123-4558>;

Сейсембаева Мадина Маратовна — докторант Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: seisembayevamm@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3256-5957>;

Джумагулова Карлыгаш — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики плазмы, нанотехнологий и компьютерной физики Казахского Национального Университета

им. аль-Фараби, лауреат государственной премии Республики Казахстан имени аль-Фараби в области науки и техники, член-корреспондент НАН РК, Алматы, Казахстан
E-mail: dzhumagulova.karlygash@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2937-4482>.

Аннотация. Появление гибридных галогенидных перовскитных материалов – огромный прорыв в фотоэлектрике (ФЭ) в последнее десятилетие благодаря их замечательным оптоэлектронным свойствам, таким как высокие коэффициенты поглощения, перестраиваемая запрещенная зона, низкая энергия связи экситонов, большие длины диффузии носителей и высокая подвижность носителей заряда. На сегодняшний день гибридные галогенидные перовскитовые солнечные элементы (ПСЭ) демонстрируют рекордную эффективность преобразования энергии (power conversion efficiency (PCE)) в 25,5 % для однопереходных и 29,1 % для монокристаллических перовскитовых/кремниевых тандемных солнечных элементов, которые превосходят другие тонкопленочные фотоэлектрические технологии (например, SiGS, CdTe), и сравнимы с хорошо зарекомендовавшими себя солнечными технологиями, такими как кристаллические кремниевые солнечные элементы. Чтобы ускорить развитие ПСЭ в направлении коммерциализации, необходимо решить ряд критических вопросов, таких как воспроизводимая высокая эффективность, долгосрочная стабильность, гистерезисное поведение, токсичность свинца и масштабируемость. Высокая универсальность тонкопленочных технологий изготовления создает высокую гибкость в проектировании архитектуры устройств, позволяя ПСЭ иметь значительные возможности для улучшения производительности устройств. Для дальнейшего повышения производительности перовскитных солнечных элементов многообещающим вариантом является внедрение в них структуры с интегрированным обратным контактом, которая, как ожидается, сможет снизить потери света. В этой работе используется метод численного моделирования для сравнения двух структур. Мы исследовали факторы, которые могут повлиять на эффективность преобразования энергии интегрированным обратным контактом перовскитных солнечных элементов, чтобы продемонстрировать, что они имеют преимущество перед традиционными многослойными перовскитными солнечными элементами. Представленные результаты дают рекомендации по проектированию и изготовлению высокоэффективных интегрированных обратным контактом перовскитных солнечных элементов.

Ключевые слова: перовскитные солнечные элементы, солнечная энергетика, моделирование, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, Comsol Multiphysics

Введение

Перовскиты — это класс кристаллической структуры титанита кальция, встречающийся в соединениях с формулой ABX_3 , где X - анион, А и В-катионы различных размеров (А больше В).

Наиболее эффективный перовскитовый солнечный элемент (ПСЭ) использует (Kumari et al., 2018; Green et al., 2014; Kim et al., 2014; Wang et al., 2016; Luo & Daoud, 2015; Rong et al., 2015), кристаллы перовскита MAPbX_3 , где $\text{MA} - \text{CH}_3\text{NH}_3^+$, а $\text{X} - (\text{Cl}, \text{Br} \text{ и } \text{I})$. Амбиполярная природа и способность к низкотемпературной обработке делают перовскитовые солнечные элементы менее дорогостоящим фотоэлектрическим устройством. Материалы MAPbX_3 также используются при изготовлении светодиодов, лазеров и различных оптоэлектронных устройств. По сути, солнечный элемент — это устройство, которое поглощает солнечное излучение и генерирует электронно-дырочные пары для выработки электроэнергии. В большинстве солнечных элементов в качестве преобразовательной среды используется полупроводниковый материал. Фотогенерированные носители разделяются с помощью поля, создаваемого p-n-переходом, для подачи электрического тока во внешнюю нагрузку. ПСЭ — это недорогой солнечный элемент нового поколения с простым процессом изготовления. Он состоит из четырех основных слоев (ETL, слой поглотителя, HTL и слой против электрода).

В последнее время большинство исследований по перовскитным солнечным элементам (ПСЭ) были основаны на сэндвич p-i-n или n-i-p структурах, как показано на рис. 1 (а) (Chen et al., 2014; Shi et al., 2014; Ma et al., 2015; Giesbrecht et al., 2016). Исследователи улучшили производительность ПСЭ путем изготовления высококачественных перовскитовых пленок, модифицирования интерфейсов и настройки состава перовскитовых материалов. В области видимого света внутренняя квантовая эффективность ПСЭ приближается к 100 % (Chen et al., 2014; Li et al., 2016). Таким образом, дальнейшее совершенствование коэффициент преобразования мощности (power conversion efficiency (PCE)) ПСЭ-ов на основе традиционной сэндвич структуры затруднено. Чтобы преодолеть это, необходимо фундаментальное изменение структуры.

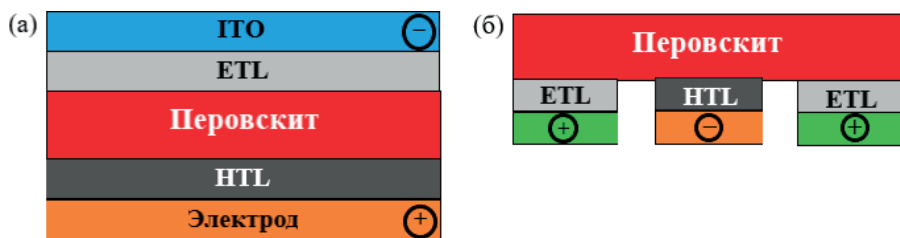


Рисунок 1. Структуры сэндвич-типового (а) и IBC-типового (б) ПСЭ.

Как показано на рис. 1 а, в традиционной сэндвич-структуре падающий свет проникает в солнечные элементы с верхней стороны, через стеклянную подложку, прозрачный проводящий оксид (transparent conductive oxide (TCO)) и слой переноса дырок (HTL) или слой переноса электронов (ETL), и в конечном итоге поглощается слоем перовскита. Когда свет проходит

через эти слои, часть фотонов будет отражена, рассеяна или поглощена и не будет вносить свой вклад в фототок ПСЭ-ов. Хотя можно использовать не отражающие покрытия для уменьшения отражения на поверхности стекла, но стоимость изготовления ПСЭ будет увеличиваться. Широко используемые НТЛ и ЕТЛ материалы, такие как TiO_2 и NiO , обычно демонстрируют сильное поглощение в УФ-области (300–400 нм). Поэтому эта часть света с трудом достигает слоя перовскита. На рис.2 показаны спектры поглощения голых и покрытых TiO_2 подложек ИТО. Мы видим, что более 10 % потерь света наблюдается в области видимого света. В коротковолновой области потери света, возникающие из-за подложки, еще выше. Кроме того, в модулях ПСЭ-ов большой площади электродные пальцы и соединительные полосы, которые необходимы для уменьшения последовательного сопротивления в солнечных элементах сэндвич-типа, могут привести к дополнительным потерям затенения в системе. Таким образом, можно дополнительно улучшить РСЕ ПСЭ-ов за счет уменьшения как потерь света, так и потерь затенения.

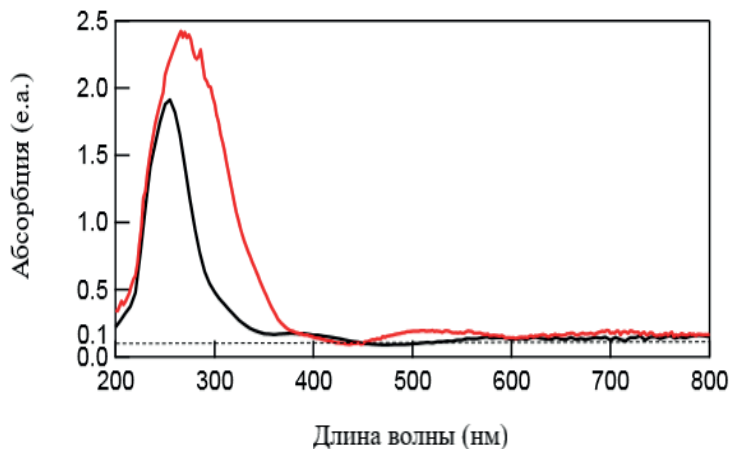


Рисунок 2. Измеренные спектры поглощения подложки TCO (черная) и покрытой TiO_2 подложки TCO (красная).

В кремниевых солнечных элементах была введена структура с интегрированным обратным контактом (IBC) для уменьшения потерь света и затенения за счет интеграции всех электродов с одной стороны активного слоя и достижения рекордной эффективности в мире (Yoshikawa et al., 2017). Поскольку перовскитные материалы обладают выдающимися характеристиками, такими как высокая подвижность и длительный срок службы заряда, можно будет изготовить высокоэффективные IBC-ПСЭ. Тем не менее, отчетные результаты работы IBC- ПСЭ-ов оказались не столь многообещающими, как мы ожидали.

Для того чтобы понять, что ограничивает производительность IBC- ПСЭ-ов и дать рекомендации по проектированию и изготовлению IBC-

ПСЭ, мы применили численное моделирование для исследования влияния структурных параметров, отражающих межфазное и объемное качество, на производительность ИВС-ПСЭ. Структура ИВС-ПСЭ, использованных в данной работе, изображена на рис. 1 б, в данной работе для моделирования используется основной перовскитовый материал $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$. Оптические и электрические свойства этого материала были извлечены из таблицы 1 NiO и TiO_2 , которые широко использовались в качестве слоев выбора заряда в сэндвич - типах ПСЭ, используются в качестве НТЛ и ЕТЛ соответственно. Металлические слои под селективными контактами, никель и титан, используются в качестве анода и катода, соответственно. ЕТЛ и НТЛ могут быть легко образованы путем окисления поверхности металлических электродов. Поскольку дальнейшее осаждение или травление не требуется, этот процесс может помочь снизить стоимость изготовления подложек ИВС. Падающий свет попадает в ячейку с верхней поверхности и сразу же поглощается перовскитовым слоем. Поэтому свет потери значительно снижаются по сравнению с традиционными сэндвич-ПСЭ.

Теоретический подход и детали моделирования

Оптическое моделирование. Для экспериментов по оптическому моделированию мы использовали COMSOL Multiphysics для моделирования установки рассматриваемых фотоэлектрических элементов для двух различных электромагнитных поляризаций (поперечно-магнитной и поперечно-электрической). Граничные условия рассеяния накладываются на нижнюю поверхность, чтобы предотвратить развитие отражающих волн, в то время как возбуждение плоской волны определяется путем прямого задания электрического или магнитного поля на верхней поверхности. Рассматривается одна часть обратного контакта, в то время как для вертикальных поверхностей используются периодические граничные условия, предписывающие непрерывность. Для слоев перовскита и никеля мы использовали значения дисперсионной диэлектрической проницаемости из хорошо зарекомендовавших себя баз данных и справочных материалов, определив кусочно-непрерывные функции в COMSOL. Значения диэлектрической проницаемости всех других материалов, используемых в конструкции устройства, с очень низкой зависимостью от частоты считались не дисперсионными и постоянными. Площадь базового блока сэндвич-модели выбирается такой же ширины, как и в устройстве с обратным контактом (5 мкм). На таблице 1 приведены все параметры, использованные в данном моделировании.

Таблица 1 – Используемые параметры

Параметры и единицы измерения	TiO_2	$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	NiO
Диэлектрическая постоянная	46	30	12
Запрещенная зона (эВ)	3.2	1.55	3.6
Сродство к электрону (эВ)	3.9	3.9	1.85
Толщина (нм)	100	500	100

Подвижность заряда (см ² /В*с)	0.006	20	0.141
Время жизни заряда (мкс)	0.006	10	0.141
Концентрация акцептора (см ⁻³)	0	0	3 x 10 ¹⁹
Концентрация донора (см ⁻³)	5 x 10 ¹⁹	2.8 x 10 ¹⁷	0
Эффективная плотность зоны проводимости (см ⁻³)	1 x 10 ²¹	2,5 x 10 ²⁰	2,5 x 10 ²⁰
Эффективная плотность валентной зоны (см ⁻³)	2 x 10 ²⁰	2,5 x 10 ²⁰	2,5 x 10 ²⁰

Электрическое моделирование. Для экспериментов по электрическому моделированию мы использовали стандартную дрейфово-диффузионную модель (Kumari et al., 2018), использующую скорость рекомбинации Шокли-Рида-Холла (ШРХ) (Shalenov et al., 2022; Shalenov et al., 2021; Shalenov et al., 2020). Для расчета различных электрических параметров устройств была решена следующая система уравнений для заданной архитектуры устройства, геометрии и физических параметров функциональных слоев:

1. *Уравнения Пуассона* (Shalenov et al., 2022; Shalenov et al., 2021; Shalenov et al., 2020)

$$\nabla \cdot (-\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla V) = \rho(x, y, z) \quad (1)$$

где,

$$\rho(x, y, z) = q(p(x, y, z) - n(x, y, z) + N_d^+(x, y, z) - N_a^-(x, y, z)) \quad (2)$$

здесь ε_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума, ε_0 - диэлектрическая проницаемость слоя поглотителя (перовскита), q - элементарный заряд. Также, $p(x, y, z)$, $n(x, y, z)$, $N_d^+(x, y, z)$ и $N_a^-(x, y, z)$ являются локальной концентрацией носителей заряда (p и n для дырок и электронов, соответственно), акцепторов и доноров, соответственно.

Значения равновесной концентрации носителей заряда получены из следующих уравнений:

$$n = \frac{1}{2} \left((N_d^+ - N_a^-) + \sqrt{(N_d^+ - N_a^-)^2 + 4n_i^2} \right) \quad (3)$$

$$p = -\frac{1}{2} \left((N_d^+ - N_a^-) + \sqrt{(N_d^+ - N_a^-)^2 + 4n_i^2} \right) \quad (4)$$

где

$$n_i = \sqrt{N_{c0} N_{v0}} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \quad (5)$$

Здесь n_i - внутренняя концентрация переносчиков заряда, N_{c0} и N_{v0} - эффективная плотность состояний в зонах проводимости и валентной зоне, E_g - ширина запрещенной зоны, $k_B T$ - постоянная Больцмана и T абсолютная температура.

2. *Токи носителей заряда для электронов и дырок:* (Shalenov et al., 2022; Kiani et al., 2023; Akhanuly et al., 2023)

$$\nabla \cdot J_n = 0 \quad (6)$$

$$\nabla \cdot J_{pn} = 0 \quad (7)$$

$$J_n = qn\mu_n E_c + \mu_n k_B T \nabla \cdot n \quad (8)$$

$$J_p = qn\mu_p E_v + \mu_p k_b T \nabla \cdot p \quad (9)$$

Где J_n и J_p - электронные и дырочные токи, μ_n и μ_p - подвижность электронов и дырок, E_c и E_v - энергия проводимости и валентной зоны, определяются следующим образом:

$$E_c = -\nabla \cdot (V + \chi_0) \quad (10)$$

$$E_v = -\nabla \cdot (V + \chi_0^- + E_g) \quad (11)$$

Здесь V - электрический потенциал и χ_0 - энергия сродства к электрону.

3. Уравнения непрерывности (Shalenov et al., 2021; Kakimov et al., 2022; Parkhomenko et al., 2022).

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - R_n + \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n \quad (12)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - R_p + \frac{1}{q} \nabla \cdot J_p \quad (13)$$

где, G_n и G_p - скорости генерации в единичном объеме для электронов и дырок, соответственно. R_n и R_p - скорости рекомбинации электронов и дырок, соответственно.

Результаты и обсуждение

На рис. 3 показаны расчетные ВАХ ПСЭ-ов сэндвич и ИВС структур. Расчетные и отчетные параметры производительности приведены в таблице 1. Плотность тока короткого замыкания (J_{sc}), напряжение разомкнутой цепи (V_{oc}), коэффициент заполнения (Fill Factor (FF)) и PCE традиционных сэндвич ПСЭ-ов составляют 21,8 мА/см², 1,072 В, 0,87 и 20.1% соответственно.

По сравнению с сэндвич ПСЭ, ИВС ПСЭ проявляют сходные V_{oc} и FF, предполагая, что структура ИВС не будет индуцировать значительную рекомбинацию в объеме перовскита или на границах раздела в идеальных условиях (низкая плотность дефектов, длительный срок службы). Кроме того, клетки ИВС производили заметно более высокое J_{sc} (24,3 мА/см²), что привело к значительному улучшению PCE на 22,71 %. Мы предполагаем, что увеличение J_{sc} в основном связано с уменьшением потерь света в структуре ИВС.

Чтобы подтвердить эти предположения, мы рассчитали внешнюю квантовую эффективность (EQE) ПСЭ на основе двух различных структур. Как показано на рис. 3 б, EQE сэндвич элементов составляет около 70–90 % в диапазоне поглощения, что согласуется с теоретическими данными. В сэндвич ПСЭ фотоны с короткими длинами волн частично отражаются на поверхности ИТО, а затем частично поглощаются слоем ETL (TiO₂). Поэтому эта часть света с трудом достигает слоя перовскита и вносит свой вклад в фототок. С другой стороны, в структуре ИВС потери света обусловлены главным образом отражением на поверхности перовскита. В результате, EQE ИВС-ПСЭ выше в большей части области поглощения. Даже в коротковолновой области (300–380 нм) EQE превышает 75 %. Мы также можем заметить пик на 400 нм в спектре EQE сэндвич ПСЭ. Такое

высокое значение EQE объясняется показателем преломления слоя TCO, соответствующим показателю преломления слоя TiO_2 около 400 нм. Кроме того, слой TCO действует как антиотражающий слой и уменьшает отражение. Однако уменьшить отражение в полном диапазоне поглощения перовскитовых материалов трудно, так как электрические, химические и оптические свойства слоев должны быть оптимизированы одновременно, тогда как в структуре ИВС при проектировании просветляющего покрытия необходимо учитывать только показатель преломления перовскитовых материалов. Таким образом, структура ИВС имеет преимущество в управлении светом по сравнению с сэндвич-структурой.

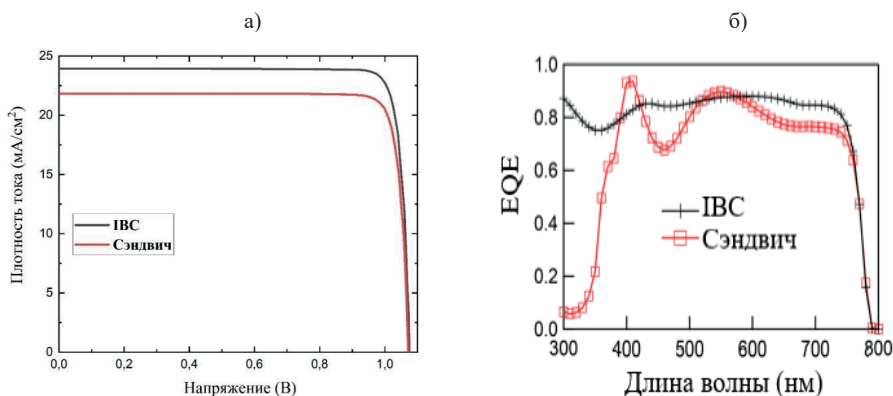


Рисунок 3. ВАХ (а) и EQE (б) сэндвич (красный) и ИВС (черный) ПСЭ-ов.

В ПСЭ-ах, когда свет поглощается перовскитовым слоем, образуются свободные заряды. Кроме того, заряды должны достигать и собираться электродами, чтобы генерировать фототок. Поскольку ширина контакта в структурах ИВС обычно намного больше толщины слоя перовскита в сэндвич-структурах, ожидается, что рекомбинация заряда в ИВС-ПСЭ-ах будет значительно более интенсивной. Чтобы понять, как и в какой степени структурные параметры, такие как ширина электрода и зазор между электродами, влияют на производительность ИВС-ПСЭ-ов, мы сначала зафиксировали зазор между электродами до 200 нм и рассчитали ВАХ ИВС-ПСЭ-ов с различной шириной контакта. Как показано на рис. 4 (а) и рис.1.9 (а), при изменении ширины контакта от 1 до 80 мкм не наблюдается заметного изменения V_{OC} и FF, в то время как J_{SC} значительно уменьшается с 24,3 до 10,74 mA/cm^2 . В результате PCE также сократился с 22,71 % до 10,1 %. Эти результаты свидетельствуют о том, что увеличение ширины контакта в основном влияет на J_{SC} ИВС-ПСЭ-ов. Также падение PCE происходит в основном за счет уменьшения J_{SC} . Хотя показано, что ПСЭ с меньшей шириной контакта будут производить более высокие ПСЭ, стоимость изготовления ИВС-ПСЭ может быть слишком высокой для массового производства,

поскольку для формирования интегрированных обратных контактов необходим дорогостоящий процесс субмикронной фотолитографии. На рис. 4 (а) также видно, что при увеличении ширины контакта от 1 до 5 мкм J_{SC} и PCE уменьшились только на $0,7 \text{ mA/cm}^2$ и $0,7 \%$ соответственно. В этом масштабе (5 мкм) можно сформировать интегрированные электроды с помощью недорогого процесса изготовления, такого как технология печати. Таким образом, структура ИВС с шириной контакта 5 мкм может быть компромиссом между производительностью и стоимостью изготовления. В следующих моделях ширина контакта по умолчанию устанавливается равной 5 мкм, если не указано иное.

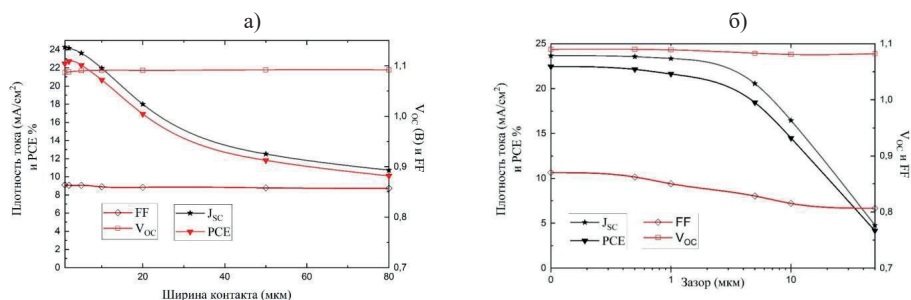


Рисунок 4. Рабочие параметры ИВС-ПСЭ с различной шириной контакта (а) и зазорами (б).

На рис. 4 (б) и рис. 5 (б) показано влияние размера зазора между электродами на производительность ИВС. Замечено, что V_{OC} не сильно меняется, когда мы меняем зазор между электродами. Однако J_{SC} и PCE уменьшились с $23,6 \text{ mA/cm}^2$ и $22,3 \%$ до $4,73 \text{ mA/cm}^2$ и $4,16 \%$ при изменении зазора от $0,1$ до 50 μm . Сравнивая рис. 4 (а) с рис. 4 (б), можно заметить, что размер зазора оказывает более значительное влияние на FF, чем размер ширины контакта. Это связано с тем, что увеличение зазора приведет к уменьшению электрического поля между электродами, а в дальнейшем и к снижению эффективности сбора заряда в солнечных элементах (Bartese et al., 2015). Поэтому для достижения высокой эффективности использования структуры ИВС нам необходимо сократить разрыв. Бах и др. была предложена квази-интердигитированная электродная структура, в которой два электрода были разделены тонким изолирующим слоем. Поскольку зазор определяется толщиной изолирующего слоя, его можно легко уменьшить до нескольких сотен нанометров. Принимая эту структуру, мы можем игнорировать влияние разрыва на ИВС-ПСЭ в соответствии с нашими результатами моделирования, показанными на рис. 4 (б).

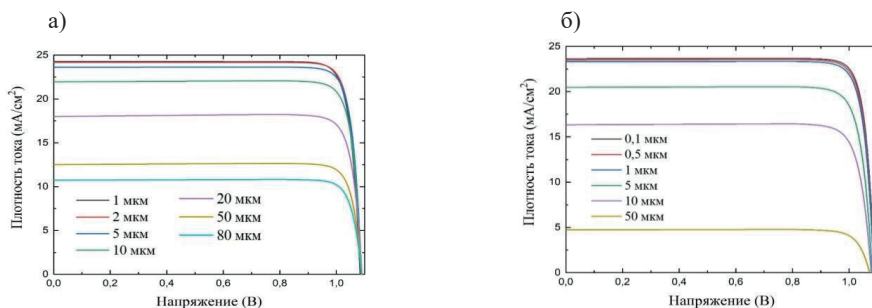


Рисунок 5. Изменение ВАХ в зависимости от ширины контакта (а) и зазора (б) ИВС-ПСЭ-ов.

Межфазный дефект может также влиять на процесс переноса заряда в ИВС-ПСЭ. Здесь мы используем параметр скорости поверхностной рекомбинации для представления рекомбинации, возникшей в результате поверхностных дефектов. В сэндвич-структурах, как показано на рис. 6, поверхностный дефект практически не может повлиять на работу ПСЭ из-за короткого пути переноса заряда. Однако для ИВС-ПСЭ J_{sc} , V_{oc} и PCE значительно уменьшились с 23,8 мА/см², 1,08 В и 22,2 % до 17,23 мА/см², 0,96 В и 13,8 %, когда скорость поверхностной рекомбинации с обеих сторон слоя перовскита увеличилась с 1 до 1000 см / с, как показано на рис. 1 в структуре ИВС путь переноса заряда значительно длиннее, чем в сэндвич-структурах и поверхностные дефекты распределяются вдоль пути переноса заряда. Поэтому структура ИВС более восприимчива к поверхностным дефектам. При изготовлении ИВС нам необходимо уменьшить поверхностные дефекты и скорость поверхностной рекомбинации. Кроме того, можно снизить скорость поверхностной рекомбинации мульти кристаллической пленки $CH_3NH_3PbI_3$ до 0,4 см/с.

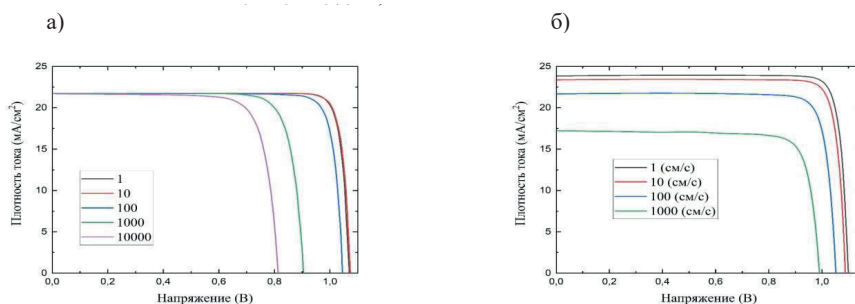


Рисунок 6. ВАХ сэндвич (а) и ВАХ ИВС (б) - ПСЭ с различными скоростями поверхностной рекомбинации.

Заключение

Сравнивая ИВС-ПСЭ с традиционной сэндвич-структурой, мы показали, что структура ИВС является выгодной с точки зрения использования света и производительности. Мы также исследовали факторы, которые могут

повлиять на работу ИВС-ПСЭ-ов. Результаты показали, что конструктивные параметры, включая ширину контакта и зазор, отрицательно связаны с J_{sc} и PCE ИВС-ПСЭ-ов, которое означает, что увеличение расстояния переноса заряда снижает эффективность сбора заряда в структуре ИВС. Тем не менее, можно уменьшить зазор, приняв квази-интердигитированную электродную структуру. Также замечено, что производительность ИВС-ПСЭ-ов, как ни удивительно, не столь чувствительна к значению ширины контакта в относительно широком диапазоне (1–5 мкм). Это позволило нам изготовить интегрированный электрод с использованием недорогих методов изготовления, таких как печать. Мы также проиллюстрировали, что дефекты в пленках перовскита и на поверхности не будут существенно влиять на производительность ИВС-ПСЭ-ов, если качество перовскитовой массы и поверхности раздела будет достаточно высоким. Что касается времени жизни заряда и подвижности заряда в перовскитовых материалах, то ИВС-ПСЭ-ов уменьшается быстрее, чем у сэндвич-ПСЭ, по мере уменьшения срока службы или подвижности. Однако стоит отметить, что при использовании в моделировании указанных параметров (время жизни ≥ 1 мкс, подвижность $\geq 10 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$) пленок перовскита и относительно широкой ширины контакта (5 мкм) ИВС-ПСЭ-ов структура ИВС демонстрирует явное преимущество перед сэндвич-структурой. Результаты этой работы открывают новые возможности для дальнейшего повышения производительности ПСЭ-ов и дают ценные рекомендации по проектированию и изготовлению ИВС-ПСЭ-ов.

REFERENCES

- Akhanuly A. et al. (2023). Modeling and Comparative Performance Analysis of Perovskite Solar Cells. *Physical Review Applied*, — 19(5). — <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.19.054039>
- Bartasaghi D., et al. (2015). Competition between recombination and extraction of free charges determines the fill factor of organic solar cells. *Nat. Commun.*, — 6(1), — 1–10. — <https://doi.org/10.1038/ncomms7440>
- Chen Q., et al. (2014). Planar heterojunction perovskite solar cells via vapor-assisted solution process. *J. Am. Chem. Soc.*, — 136(2), — 622–625. — <https://doi.org/10.1021/ja411509g>
- Giesbrecht N., et al. (2016). Synthesis of Perfectly Oriented and Micrometer-Sized MAPbBr₃ Perovskite Crystals for Thin-Film Photovoltaic Applications. *ACS Energy Lett.*, — 1(1), — 150–154. — <https://doi.org/10.1021/acseenergylett.5b00118>
- Green M.A., Ho-Baillie A. & Snaith H.J. (2014). The emergence of perovskite solar cells. *Nat. Photonics*, — 8(7), — 506–514. — <https://doi.org/10.1038/nphoton.2014.134>
- Kakimov A.G., et al. (2022). Passivation of perovskite layer surface states with pyridine in flexible and printed perovskite solar cells. *Flexible and Printed Electronics*, — 7(3). — <https://doi.org/10.1088/2058-8585/ac8753>
- Kiani M.S. et al. (2023). Stepping toward Portable Optoelectronics with SnO₂ Quantum Dot-Based Electron Transport Layers. *ACS Omega*, — 8(23), — 21212–21222. — <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c02341>
- Kim H.S., Im S.H. & Park N.G. (2014). Organolead halide perovskite: New horizons in solar cell research. *J. Phys. Chem. C*, — 118(11), — 5615–5625. — <https://doi.org/10.1021/jp409025w>
- Kumari N., Patel S.R. & Gohel J.V. (2018). Current progress and future prospective of perovskite solar cells: A comprehensive review. *Rev. Adv. Mater. Sci.*, — 53(2), — 161–186. — <https://doi.org/10.1515/rams-2018-0027>

- Li X. et al. (2016). A vacuum flash-assisted solution process for high-efficiency large-area perovskite solar cells. *Science*, — 353(6294), — 58–62. — <https://doi.org/10.1126/science.aaf8060>
- Luo S. & Daoud W.A. (2015). Recent progress in organic-inorganic halide perovskite solar cells: Mechanisms and material design. *J. Mater. Chem. A*, — 3(17), — 8992–9010. — <https://doi.org/10.1039/c5ta00599a>
- Ma T. et al. (2015). Annealing-induced chemical and structural changes in tri-iodide and mixed-halide organometal perovskite layers. *J. Mater. Chem. A*, — 3(27), — 14195–14201. — <https://doi.org/10.1039/c5ta03604f>
- Parkhomenko H.P., et al. (2022). Fabrication of Flexible Quasi-Interdigitated Back-Contact Perovskite Solar Cells. *Energies*, — 15(9). — <https://doi.org/10.3390/en15093056>
- Rong Y. et al. (2015). Beyond efficiency: The challenge of stability in mesoscopic perovskite solar cells. *Adv. Energy Mater.*, — 5(20). — <https://doi.org/10.1002/aenm.201500831>
- Shalenov E.O. et al. (2020). Performance optimization of back-contact perovskite solar cells with quasi-interdigitated electrodes. *Solar Energy*, — 205, — 102–108. — <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.05.034>
- Shalenov E.O. et al. (2021). Insights on Desired Fabrication Factors from Modeling Sandwich and Quasi-Interdigitated Back-Contact Perovskite Solar Cells. *ACS Applied Energy Materials*, — 4(2), — 1093–1107. — <https://doi.org/10.1021/acsaem.0c02120>
- Shalenov E.O. et al. (2022). Performance evaluation of different designs of back-contact perovskite solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, — 234. — <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2021.111426>
- Shi J. et al. (2014). Modified two-step deposition method for high-efficiency TiO₂/CH₃NH₃PbI₃ heterojunction solar cells. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, — 6(12), — 9711–9718. — <https://doi.org/10.1021/am501715d>
- Wang D. et al. (2016). Stability of perovskite solar cells. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, — 147, — 255–275. — <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2015.12.022>
- Yoshikawa K. et al. (2017). Silicon heterojunction solar cell with interdigitated back contacts for a photoconversion efficiency over 26%. *NatEn*, — 2(5), — 17032. — <https://doi.org/10.1038/nenergy.2017.32>

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 123–138

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.261>

UDC: 523.61; 523.64

IRSTI: 41.19.31

© **L.I. Shestakova, R.R. Spassiyuk***, 2024

V.G. Fesenkov Astrophysical Institute LLP, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: ruslan.spassiyuk10@gmail.com

DESTRUCTION OF COMETS BY THERMAL STRESSES

Shestakova Lyubov I. — Fesenkov Astrophysical Institute, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, head of the Laboratory of Physics of Stars and Nebulae

E-mail: shest1952@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2223-5332>;

Spassiyuk Ruslan R. — Fesenkov Astrophysical Institute, Bachelor of Nuclear Physics, engineer of the Laboratory of Physics of Stars and Nebulae

E-mail: ruslan.spassiyuk10@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7780-2533>.

Abstract. The problem of comet destruction has not yet been solved. Comets can unexpectedly break down in arbitrary places on their orbits. The mechanisms involved in explaining such phenomena do not provide satisfactory predictions on the possibility of the decay of each individual comet. In addition to existing mechanisms for comet destruction, we propose using the method of thermal stresses inside and on the surface of cometary nuclei as they approach the Sun on elongated orbits. We use a thermal diffusion equation to calculate the compression thermal stress on the surface and the discontinuous stress inside spherical comet nuclei as they move towards the Sun in a parabolic orbit. By comparing the strength limits of the material in the core with the obtained thermal stress, it is possible to predict the cracking of different-sized comet nuclei at different distances from the Sun. Calculations were performed for two different phases of ice: hexagonal crystalline ice (Ih) and amorphous ice. The main conclusions are based on crystal ice data. The observational flare phenomena' data and observed comets' decay were compared with calculation results. From observational cases of comet decay, one can also estimate the composition of the cometary material and its actual strength.

Keywords: comets, thermal stresses, destruction of comets, crystalline and amorphous ice

© Л.И. Шестакова, Р.Р. Спасюк*, 2024

"В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт" ЖШС,
Алматы, Қазақстан.

E-mail: ruslan.spassyuk10@gmail.com

КОМЕТАЛАРДЫҢ ТЕРМИЯЛЫҚ КЕРНЕУЛЕРМЕН ЖОЙЫЛУЫ

Аннотация. Кометалардың жойылу мәселесі әлі шешілген жоқ. Кометалар өз орбитасында кездейсоқ жерлерде күтпеген жерден ыдырауға қабілетті. Бұл құбылысты түсіндіру үшін қолданылатын механизмдер әрбір нақты кометаның ыдырау мүмкіндігі туралы қанағаттанарлық болжамды қамтамасыз етпейді. Кометалардың жойылуының қолданыстағы механизмдерінен басқа, біз ұзартылған орбиталарда Күнге жақындаған кезде кометалық ядролардың ішінде және бетінде пайда болатын термиялық кернеулер әдісін қолдануды ұсынамыз. Модельдік есептеулерде біз параболалық орбитада Күнге жақындаған кездегі сфералық кометалық ядролардың ішіндегі бетіндегі қысу термиялық кернеулерін және үзілу кернеулерін есептеу үшін термиялық диффузия теңдеуін қолданамыз. Негізгі материалдың беріктік шегін нәтижесінде пайда болатын термиялық кернеулермен салыстыра отырып, Күннен әртүрлі қашықтықтағы әртүрлі өлшемдегі кометалардың ядроларының жарылуы туралы болжам жасауға болады. Есептеулер мұздың екі түрлі фазалық күйлері үшін жүргізілді: алтыбұрышты кристалды мұз (Ih) және аморфты мұз. Негізгі қорытындылар кристалдық мұз деректерінен жасалған. Есептеулер нәтижелерімен нақты байқалған кометалардың тұтану құбылыстары мен ыдырауы туралы бақылау деректерін салыстыру жүргізілді. Кометалардың ыдырауын бақылау арқылы кометалар материалының құрамын және олардың нақты күшін анықтауға болады.

Түйін сөздер: кометалар, термиялық кернеулер, кометалардың бұзылуы, кристалды және аморфты мұз

© Л.И. Шестакова, Р.Р. Спасюк*, 2024

ТОО «Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова», Алматы,
Казахстан.

E-mail: ruslan.spassyuk10@gmail.com

РАЗРУШЕНИЕ КОМЕТ ТЕРМИЧЕСКИМИ НАПРЯЖЕНИЯМИ

Аннотация. Проблема разрушения комет до сих пор не решена. Кометы способны разрушаться неожиданно в произвольных местах орбиты. Механизмы, которые привлекаются для объяснения этого явления, не дают удовлетворительных прогнозов возможности распада каждой конкретной кометы. В дополнение к имеющимся механизмам разрушения комет мы

предлагаем использовать метод термических напряжений, возникающих внутри и на поверхности кометных ядер по мере их приближения к Солнцу по вытянутым орбитам. В модельных расчётах мы используем уравнение тепловой диффузии для расчёта компрессионных тепловых напряжений на поверхности и разрывных напряжений внутри кометных ядер шарообразной формы при их приближении к Солнцу по параболической орбите. Из сравнения пределов прочности материала ядра с полученными тепловыми напряжениями можно делать прогнозы о растрескивании кометных ядер разных размеров на различных расстояниях от Солнца. Расчёты проведены для двух различных фазовых состояний льда: гексагонального кристаллического льда (Ih) и аморфного льда. Основные выводы сделаны на основе данных кристаллического льда. Проведено сравнение данных наблюдений вспышечных явлений и распада реально наблюдаемых комет с результатами расчётов. Из наблюдений случаев распада комет можно также судить о составе материала комет и их реальной прочности.

Ключевые слова: кометы, термические напряжения, разрушение комет, кристаллический и аморфный лёд

Introduction

Despite comets being frequently discovered and well-observed, their formation mechanisms and mechanisms for their evolution and disintegration remain unclear. The agglomeration models of comet structure (Greenberg et al., 1995) suggest that these are loose and porous structures with a density of approximately 0.1 g/cm^3 , which can easily be destroyed by tidal forces. This model has some inconsistencies due to observations of Halley and Shoemaker-Levy-9 comets showing a density of about 0.6 g/cm^3 (Solem, 1995; Asphaug and Benz, 1996).

There are other mechanisms of comet destruction: disruption by centrifugal forces during rapid rotation, fracture by internal gas pressure during intense evaporation of gases inside the comet as it approaches the Sun and collisions with other small bodies. Despite the abundance of offered mechanisms, the problem is far from solved and requires the involvement of other mechanisms for the destruction of cometary nuclei. There is a list of disintegrated comets, and, according to Sekanina Z. (1997), many of them were destroyed for unknown reasons.

An interesting alternative to the mechanism of destruction by tidal forces may be the destruction of a comet by thermal stresses (Kührt, 1984), which can be calculated both analytically and numerically using the thermal diffusion equation (Kührt, 1984; Shestakova and Tambovtseva, 1997). The values of thermal stresses can be greater than the limits of the mechanical strengths of terrestrial materials and exceed by several orders of magnitude the stresses arising from the action of tidal forces.

The thermal destruction mechanism we are developing is worth considering because it assumes the decay of cometary nuclei at various distances, including large distances from the Sun, and can potentially explain the decay of long-periodic

comets in random places of their orbit. In the work of Shestakova and Serebryansky (2023), the mechanism of thermal destruction is proposed as a possible mechanism for forming debris disks at large distances from stars and as a source of material for rings near planets. Thus, applying this mechanism to the decay processes of small bodies may have various interesting consequences.

Our research will focus on analyzing the thermal stress inside and on the surface of comet-like bodies as they approach the Sun on parabolic orbits. By adopting this approach, we can use analytical solutions to the thermal diffusion equation for bodies of various sizes and monitor increases in internal and surface stress as these objects orbit at different distances from the Sun. Once the maximum strength in the nucleus material is reached, comets can be separated and fragmented.

Methods

Theoretical and numerical heat transfer analyses from the surface to the inner layers of a cometary body can be conducted using the heat diffusion equation (hereinafter — HDE). The HDE for a spherical body, according to Kührt (1984), has the form:

$$c_v \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{2}{x} \kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (1)$$

where T is temperature, t is the current time, x is the coordinate, which is calculated from the center of the ball, where $x = 0$, along the radius of the body up to r , and $c_v(T)$ is heat capacity per unit volume and $k(T)$ is the thermal conductivity of the material.

The above equation can be solved together with the initial condition for $t = 0$ and two boundary conditions: for the center of the body at $x = 0$ and its surface at $x = r$. The boundary condition for the center of a spherical body is universal because it follows from its symmetry: $dT/dx = 0$ when $x = 0$. We choose the initial and boundary conditions on the body's surface based on the physical conditions in which the body is situated. The initial condition is chosen because the whole body is isothermal at a certain starting distance R_0 , so $T(x) = T_s$ when $t = 0$, when T_s stands for equilibrium surface temperature. The main problem is the choice of the boundary condition on the body's surface because the surface temperature changes over time as the body approaches the Sun.

If the parameters k and c_v are constant, then Equation (1) is linear in T . When solving Equation (1), we use parameters $a^2 = k/c_v$ [cm²/sec] and $t_c = (r/\pi a)^2$, where τ_c determines the characteristic heating or cooling time of the body.

If, in the thermal balance of the body, we ignore the loss of sublimation and thermal conductivity towards the center of the body, then we get the surface boundary condition in the form of a blackbody approximation:

$$T_s(t) = \frac{T_{eff}}{\sqrt{2R/R_{\square}}}, \quad (2)$$

where T_{eff} is the temperature of the photosphere and R is the radius of the Sun. The phenomenon of temperature hysteresis, resulting from heat conduction into the core as the body approaches and recedes from perihelion, does not exceed daily fluctuations in the surface temperature (T_s). This T_s is $\sqrt{2}$ times greater than our assumed value at the point closest to the Sun.

The fundamental principle for getting an analytical solution to the HDE is the representation $T_s(t)$ as an explicit function of time. It is only possible for parabolic orbits with a perihelion distance $q \approx 0$. In this case, for parabolic orbits, the transit time from the distance R to the perihelion has the form:

$$\tau(R) = (2/GM_{\odot})^{1/2}R^{3/2}/3, \quad (3)$$

where G is the gravitational constant, and M_{\odot} is the mass of the Sun. As a result, we obtain the boundary condition necessary for solving HDE in the form of an explicit function of time:

$$T_s(t) = \frac{T_o}{(1 - t / \tau_o)^{1/3}}, \quad (4)$$

where $T_o(t) = \frac{T_{eff}}{\sqrt{2R_o/R_{\square}}}$, is the body's temperature at the starting distance

R_o , $t_o - \tau(R)$ is the current time.

The HDE solution makes it possible to calculate the temperature profile along the radius of a body $T(x)$, moving in a parabolic orbit at any given distance from the Sun and for any materials with known thermal parameters k and c_v .

The only parameter that is directly used in solving the thermal diffusion equation is the ratio of the coefficient of thermal conductivity k to the heat capacity $c_v = c_p \rho$, that is, the coefficient of temperature conductivity: $a^2 = k/(c_p \rho)$.

According to Klinger (1980a), for temperatures above 25 K, the thermal conductivity of crystalline ice can be represented as $k = 567/T \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$. The heat capacity determined from experimental data according to Giauque & Stout (1936) within the temperature range $16.43 \text{ K} \leq T \leq 267.77 \text{ K}$ is approximated by the expression (Klinger, 1981): $C_p = 7.49T + 90 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$. This C_p value is convenient because it mainly depends on the composition of the material, practically does not depend on the structure of the substance and can be used for both crystalline and amorphous ice. For crystalline ice, we will use the value $a^2 = 0.65 \text{ cm}^2/\text{sec}$, which corresponds to $T = 30 \text{ K}$. The thermal conductivity of amorphous ice as a function of temperature, obtained from the data by Klinger (1980, 1981), is represented by an approximate formula: $k = 2.34 \times 10^{-3} T + 0.028 \text{ W/m K}$. Substitution of

numerical values for a^2 of amorphous ice gives an almost constant value in the temperature range $T = [30K - 200K]$, namely $a^2 = 0.0034 \text{ cm}^2/\text{s}$,

Boley and Weiner (1960) got relations for radial and tangential stresses in solid spheres, which can be used to isolate functions with a temperature dimension. The analysis of thermal stresses would be greatly simplified if we used these functions instead of stresses, which only depend on the body's geometry and the temperature distribution within it. By using these temperature functions as analogues of thermal stresses, it is easy to move on to stresses themselves, using a simple form:

$$\sigma_{\varphi\varphi}(x) = \frac{E\alpha}{1-\mu} T_{\varphi\varphi}(x), \quad \sigma_{rr}(x) = \frac{E\alpha}{1-\mu} T_{rr}(x), \quad (1)$$

where the tangential stresses $\sigma_{\varphi\varphi}(x)$ are characterized as the function of $T_{\varphi\varphi}(x)$, and radial stresses $\sigma_{rr}(x)$ are characterized as the function $T_{rr}(x)$. We use the following parameters for the elasticity of bodies: E is Young's module, α is the linear expansion coefficient during the heating, and μ is Poisson's coefficient. The temperature functions obtained from the solution of Boley and Weiner (1960) will have the form:

$$T_{\varphi\varphi}(x) = \frac{2}{r^3} \int_0^r T(y)y^2 dy + \frac{1}{x^3} \int_0^x T(y)y^2 dy - T(x), \quad (6)$$

$$T_{rr}(x) = \frac{2}{r^3} \int_0^r T(y)y^2 dy - \frac{2}{x^3} \int_0^x T(y)y^2 dy, \quad (7)$$

where x is a coordinate along the body's radius, and $T(y)$ is the radial temperature profile obtained from the (HDE) solution. A more detailed description of the calculation method is described in the work by Shestakova and Tambovtseva (1997).

The radial and tangential stresses σ_{rr} and $\sigma_{\varphi\varphi}$, occurring during the heating or cooling of bodies are determined by temperature functions T_{rr} и $T_{\varphi\varphi}$ and parameters characterizing the elasticity of bodies. If σ_{rr} or $\sigma_{\varphi\varphi}$ are negative, the material is compressed; when they are positive, the material experiences breaking stresses (Campbell, 1956). The same rule applies to temperature functions: compression stresses, which are characteristic of the surface layers of a body approaching the Sun $T_{\varphi\varphi}(x)$, have a temperature dimension with a negative sign. Breaking stresses $T_{rr}(x)$ are positive in such case.

In our calculations, we use the value $\sigma_+ = (2 - 4) \text{ MPa}$ for the tensile strength of crystalline (hexagonal) ice, based on data from Haynes (1978), where strength values from 0.7 to 3.1 MPa were obtained within the temperature range from 0 to -50C. According to measurements, the tensile strength varies very slightly, and we can consider those values as acceptable for assessing comets' internal destruction. For the value of ice strength under compression stresses, we take the range of values $\sigma_- = (5 - 30) \text{ MPa}$ obtained from measurements (Haynes, 1978).

The values of the elastic parameters according to Kührt (1984) are the following: $E = 9 \times 10^3 \text{ MPa}$, $\mu = 0.33$ and $\alpha = 3.8 \times 10^{-5} \text{ grad}^{-1}$ and the lower value of the crystal ice strength limit is $\sigma_+ = 2 \text{ MPa}$. From Equation (5), we obtain the critical values of the temperature functions T_{rr} и $T_{\varphi\varphi}$. Tensile strength for breaking stresses: $T_+ = (4-8) \text{ K}$ and for compression stresses $T_- = (10-60) \text{ K}$. It should be noted that the strength of materials increases with decreasing temperature, especially for compression stresses (Haynes, 1978). The starting distance for calculating the motion of a body in a parabolic orbit is assumed to be $R_0 = 86.3 \text{ AU}$, which corresponds to the surface temperature $T_0 = 30 \text{ K}$ in the blackbody approximation. Calculations of temperature **and stress profiles along the radii of bodies were carried out for a number of intermediate positions of bodies in orbit corresponding to blackbody temperatures from 40K to 200K.**

Results

After calculating the temperature profiles inside cometary bodies of different sizes from $r = 10 \text{ m}$ to $r = 10 \text{ km}$ from the solution of Equation (1), we obtained the behavior of the rate of internal heating of these bodies during their approach to the Sun in a parabolic orbit. Figure 1 shows the temperature dependence near the center of the bodies at the profile point $x/r = 0.1$ at a distance of about 1.94 AU, corresponding to a surface temperature of $T = 200 \text{ K}$. The calculation data is given for crystalline and amorphous ice. Figure 1 shows that large bodies made of crystalline ice maintain a starting temperature of approximately 30K at their centers if their radii exceed 1 km, and those made of amorphous material at $r > 0.1 \text{ km}$. On the other hand, smaller bodies with a radius between 1 and 10 meters, rotating in orbit, are strongly heated toward the center to temperatures close to their surface temperatures.

Figure 2 shows the compression stresses that arise on the surface of crystalline ice bodies. For ease of understanding, we have changed the sign of negative compression stress to positive in Figure 2. The straight lines represent a range of compression stresses, $T = (10 - 60) \text{ K}$, which are limits of strength according to Haynes (1978). When these stresses are reached, the destruction of the surface layer and the formation of craters, as well as flash phenomena, are possible. Stress limits are reached for larger bodies with $T_{fr}(r) = T_s - T_0$, where T_s is the surface temperature, and T_0 (equal to 30° in our case) is the initial temperature of the entire body. The limiting stress is reached on the surfaces of bodies with a radius of 5 and 10 kilometers. Their curves merge in Figure 2.

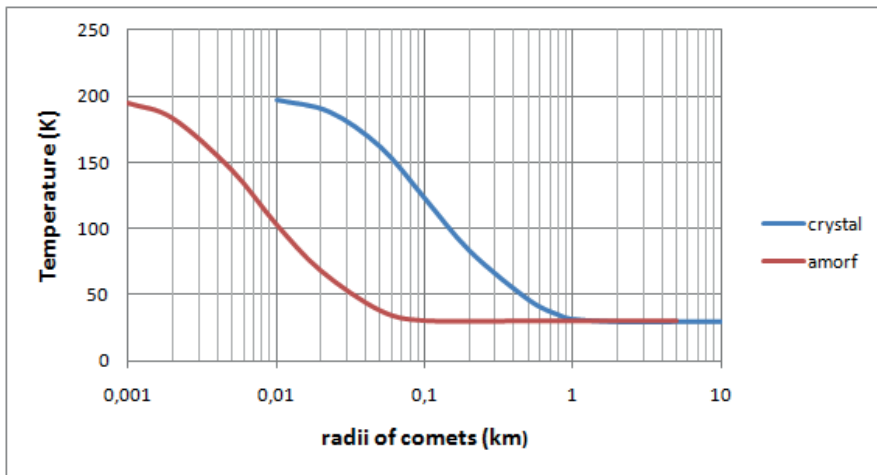


Figure 1. Temperature near the center of cometary bodies ($x/r = 0.1$) at a distance of 1.94 AU, where the blackbody surface temperature is $T = 200\text{K}$. The calculation results are given for crystalline and amorphous ice.

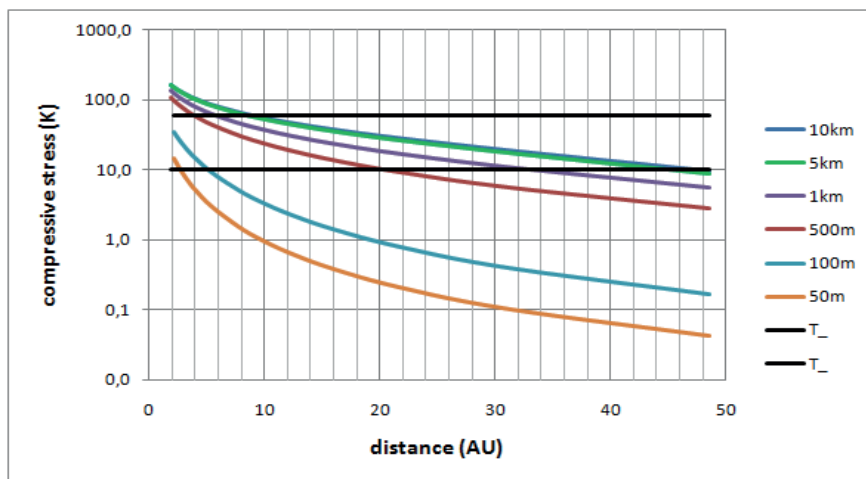


Figure 2. Compression stresses ($-T_{ff}$) on the surface of cometary bodies made of crystalline ice, depending on the distance, arising during the approach to the Sun in parabolic orbits.

Figures 3 and 4 show the increase in tensile stress inside comet bodies as they approach the Sun. These figures clearly demonstrate differences in the increasing behavior of tensile stress depending on the distance.

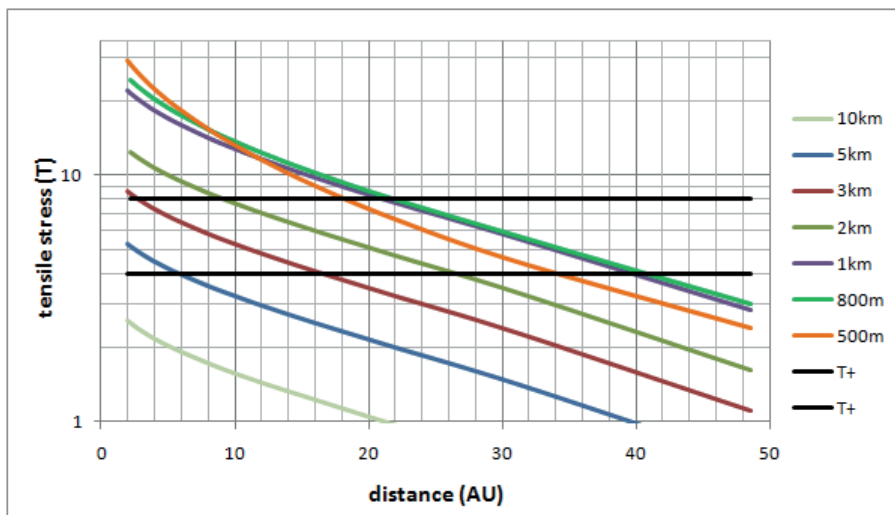


Figure 3. Radial (breaking) stresses near the center of large cometary bodies with radii from 500 m to 10 km, depending on the distance.

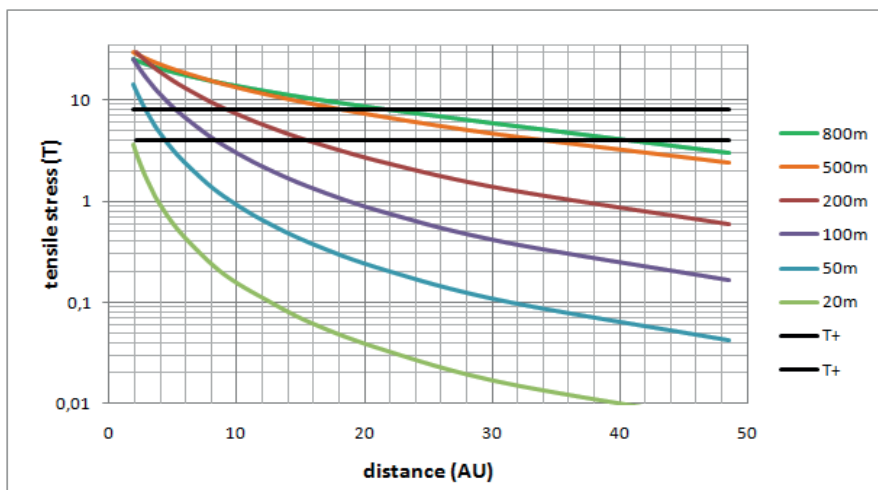


Figure 4. Radial (breaking) stresses near the center of small cometary bodies with radii from 20m to 800m, depending on the distance.

In Figure 3, the largest body with a radius of 10 km shows a slight increase in stresses. These stresses do not reach the lower tensile strength even at a closest distance of about 2 AU. A body with a radius of 5 km has the probability of collapsing from the inside at a distance of (5 – 6)AU, since the breaking internal stress exceeds the lower tensile limit $T_+ = 4K$, which corresponds to $\sigma_+ = 2$ MPa.

Bodies with radii smaller than 3 km will be subject to complete destruction. At maximum distances from the Sun, internal cracks in bodies with radii less than 800 m – 1 km will occur.

Figure 4 shows the internal stresses depending on the distance for bodies with a 20m to 800m radius. In contrast to Figure 3, the maximum stresses correspond to the largest bodies with radii of 500m and 800m. As the size decreases, the stresses decrease and become inessential for a body with a radius of 20 m.

By comparing the results presented in Figures 3 and 4, we have obtained estimates of the possible distances where crystalline bodies of different sizes can experience internal cracks. Figure 5 shows these results for two values of the tensile strength.

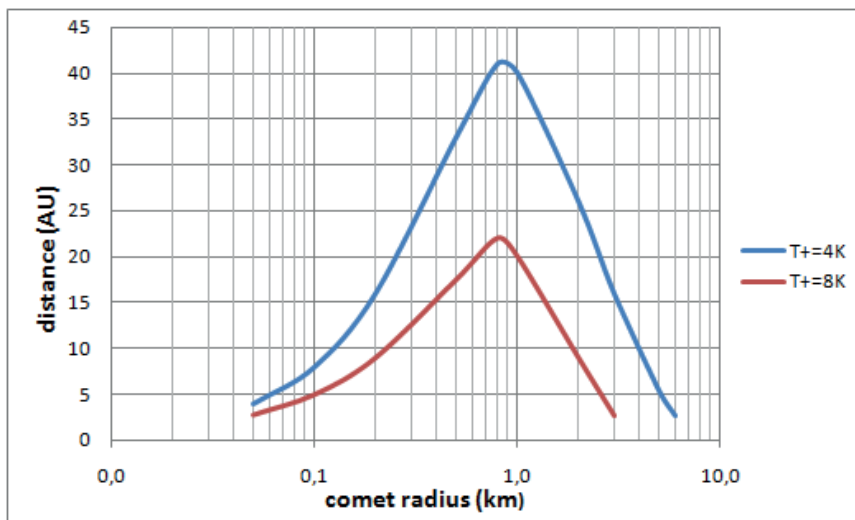


Figure 5. Distances where the internal stresses of crystalline cometary bodies reach two estimated values of tensile strength $T_+ = 4K$ and $T_+ = 8K$.

Bodies in the interval between the curves shown in Figure 5 are at risk of possible destruction due to internal stresses. Cometary bodies of low strength fall into the zone of possible destruction up to distances of about 40 AU, that is, up to the orbit of Neptune. Even denser cometary bodies can collapse near and inside the orbit of Uranus. Inside the orbit of Jupiter, the range of sizes of bodies capable of destruction is maximum. These are bodies with radii from 30m to 6 km.

Figure 6 shows the results of calculations of internal stresses for bodies of crystalline and amorphous ice at a distance of 1.94 AU, corresponding to the blackbody temperature $T_{bb} = 200K$. It can be seen that maximum stresses can be achieved inside bodies of sub-kilometer dimensions, especially bodies with radii (200 – 300) m. Strong stresses occur in bodies with radii less than 100 m for bodies made of amorphous ice, and the maximum stresses correspond to bodies with radii (10 – 30) m. Such bodies are practically inaccessible to observations due to their small size.

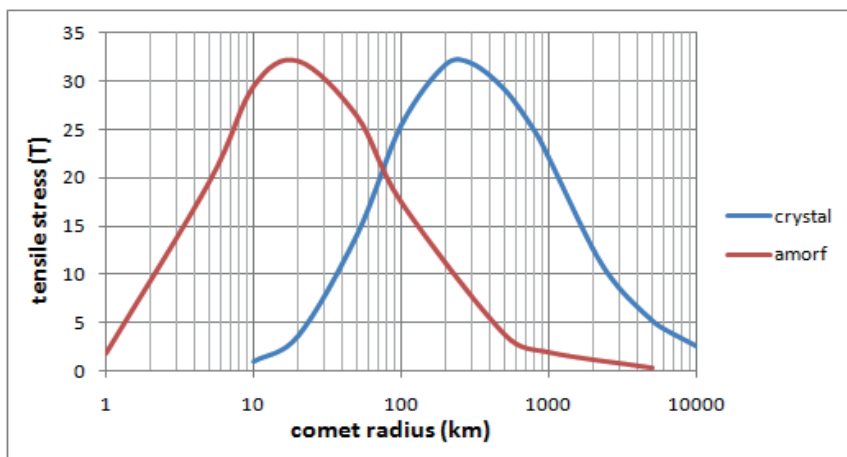


Figure 6. Radial (breaking) stresses near the center of cometary bodies at a distance of 1.94 AU, corresponding to the black body temperature $T_{bb}=200K$, depending on the radii of the bodies.

Discussion

It is generally believed that comet ice in the Oort cloud is amorphous and contains impurities of volatile gases that can evaporate at low temperatures. In their research (Schmitt et al., 1989) for the ice (H_2O) with impurities ($CO:H_2O$, $CO_2:H_2O$, $CH_4:H_2O$, $CO:CO_2:H_2O$ and $NH_3:H_2O$) has been researched in the temperature range from 10K to 180K. The sequence of evaporation under vacuum conditions is obtained: 25K for CO, 32K for CH_4 , 70K for CO_2 . At 120K, all molecules leave the ice, and the gas- H_2O ratio becomes less than 0.01 % for CO and CH_4 and less than 0.001 % for CO_2 . This evaporation is the trigger for ice crystallization. Finally, pure crystallized H_2O remains. Crystallization from the surface to the interior can be accelerated because this process is exothermic.

Kuiper belt objects are so cold that the estimated time of ice crystallization under these conditions exceeds the lifetime of the Solar System. Despite this, the exploration of satellite spectra in recent years has shown the presence of spectral features from crystalline ice for planetary satellites and Kuiper Belt objects (KBOs). In the research of Prialnik and Jevitt (2022), a deep crystallization simulation was made for the orbital parameters of different comets. The crystallization front inside the satellites of planetary objects in the Kuiper belt has been explored. It has been reported that objects of crystalline ice are present in the IR range at a wavelength of 1.65 microns in many objects. These objects indicate the presence of crystalline ice at temperatures ranging from 48 to 82 K, which is in the area of Uranus and even Neptune.

In the process of approaching the Sun, due to surface heating, an amorphous phase transition to crystalline ice occurs. Specifically, the work by Schmitt B. et al. (1989) states that at $T = 125 K$, crystallization occurs in 8 days or less than 5 minutes at 150 K. If the object rotates slowly or its axis of rotation is oriented

towards the Sun, then the heating at the circumsolar point will be stronger, and the temperature there may exceed the black-body temperature by as much as $\sqrt{2}$ times, greatly increasing the likelihood of ice crystallizing at greater distances from the Sun. In such cases, crystallization could be successful not only near Jupiter, where the blackbody radiation temperature is $T_{bb} \approx 125\text{K}$, but also at a distance of approximately 10 AU, or in the orbit of Saturn and its moons.

In the process of approaching the Sun, noticeable cometary activity should start to appear after the compressive stresses exceed the material's strength limits. According to our analysis, the surfaces that initiate the formation of comae and flare phenomena first reach critical levels in the largest objects whose radii exceed 5 kilometers. The most distant comets from the Sun should exhibit the most significant cometary activity. Really, observations of cometary activity at great heliocentric distances have been made in large comets, such as comet C/2014 UN271 Bernstein-Bardinelli (29 AU), comet Hale-Bopp (26 AU), comet C/2010 U3 Boattini (25.8 AU), and comet C/2017 K2 Pan-STARRS (24 AU). These comets were active at heliocentric distances greater than 20 AU (Bernardinelli et al., 2021). Such remote activity can be explained by the release of evaporating gases. Although this does not argue the effect of compression stresses, these processes can be connected. If the ice surface is amorphous at these distances, the compression stress barrier is virtually non-existent, and the evaporation of gases occurs without obstacles in line with the sublimation temperature. As we approach the sun, a phase change gradually occurs, forming a strong crystalline shell. It should be noted that the strength of this crystalline shell that forms on the comet's surface decreases with increasing temperature as it approaches perihelion. In this instance, outbursts of the cryo-volcanic type are possible. These can recur as they approach the sun, like comet 12P/Pons-Brooks, whose perihelion will occur on April 21st, 2024. The first detection of comet 12P/Pons-Brooks was announced by Green Daniel on the Central Bureau for Astronomical Telegrams on July 21st, 2023. The newly growing crystalline crust becomes less resistant after each burst and cannot withstand the increasing internal pressure. We can make an approximate calculation of the strength of the crust during the first outbreak. According to Green Daniel, the first eruption happened at a distance of 3.9 AU, where the black-body temperature is approximately 140 K. If the initial temperature of the comet body is approximately the black-body temperature at the aphelion distance of 33 AU, which is 50 K, then the surface temperature will be approximately 90 K. This means that the material's strength is approximately $\sigma_c = 45 \text{ MPa}$. Since estimates of the comet's diameter range from 17 km to 30 km in magnitude, complete disintegration of the body due to burst stresses is not expected.

The most severe destruction of cometary bodies occurs when the internal breaking stresses reach the tensile strength limit and cause the bodies to break into several large fragments. Figures 3 and 4 show how the radial (breaking) stresses

inside cometary bodies grow as they approach the Sun, with smaller bodies experiencing a sharp increase in stresses at closer distances. At the same time, the difference in stresses between the far and close distances is much greater for small bodies than for larger ones (Figures 3 and 4). A striking example of how our calculations match observations of real comets is demonstrated by long-periodic comet C/2019 Y4 (ATLAS), which was studied by Hui and Ye in 2020 using Sloan Digital Sky Survey observations between mid-January and early April 2020. Since mid-March 2020, decay has been observed at a distance of around 2 AU, and it was found that the C/2019 core had a radius of over 60 meters before it decayed. During this period, the comet became brighter at the beginning of observation and stopped increasing in brightness about 70 days prior to perihelion in late March 2020. This comet rapidly disintegrated into multiple pieces, suggesting an internal fracture. The results of calculations on breaking stresses based on the distance depicted in Figure 4 demonstrate a close match between the behavior of comet Atlas and a cometary object with a radius of 50 meters. The critical stress level of 8 MPa, corresponding to the tensile strength of crystalline ice, is reached for such an object at a distance of 3 AU. At a range of 2 AU, where the fracture of the comet was observed, the body's surface temperature was approximately 200K. Figure 6 demonstrates that the estimated dimension of the comet closely matches the point of interception of curves in this graph. Thus, no matter if the comet kept its amorphous form or changed structure while moving from the outer parts of the Solar system, it would still break apart because of thermal stresses.

Another long-period comet of a similar size, which disintegrated in May 2019 at a distance of 1.9 AU from the Sun, is comet C/2018 J2 (Palomar), reported by Jewitt and Luu (2019). The authors argue that the comet's disintegration cannot be caused by tidal forces or collisions. Therefore, the disintegration C/2009 J2 is preliminarily interpreted in this study as a violation of the core's rotation with a radius of $r \leq 0.1$ km due to the release of gas moments. Actually, the authors provided a possible explanation, which is not obvious. Because the comet disintegrated into many pieces and showed surface activity. Applying the theory of internal discontinuous thermal stresses to this case seems like a more logical explanation for the decay, like in the case of the C/1950 Y4 (ATLAS) comet.

A striking example of the complete disintegration of a long-period comet is comet C/2021 A1 (Leonard) as well. According to Jewitt et al. (2023), a comet with a radius of 0.6 ± 0.2 km did not preserve a single fragment of its nucleus larger than 0.06 km, which corresponds to the complete destruction of the nucleus in mid-December 2021, at a distance of approximately 0.8 AU. The authors argue that models of tidal disruption, collision, sublimation explosions, and pressure explosions provide improbable explanations for disintegration. They acknowledge that the rotational instability caused by released gases has a very short period (approximately 0.1 years) that does not allow for the rapid spin of the comet's nucleus, given its orbit and size. The most probable mechanism for destruction,

according to the authors' opinion, is the initial rotational decay accelerated by the impact and intense sublimation of deeply buried volatiles.

Such an assumption is a big stretch, as other possible options have not been considered. One possible explanation for the observed phenomenon may be thermal rupture due to the crystallization of the majority of the volume of the comet. A phase transition from amorphous to crystalline ice could occur on the surface and within the comet, especially if the initial crystalline structure of the object is excluded.

Since comet C/2021 A1 (Leonard) is larger than comets C/2019 Y4 (ATLAS) and C/2019 J2, core cracking could occur at a greater distance from the Sun, and debris dispersion may be initiated by gas flows as it approaches the Sun.

Another interesting case of comet decay is associated with the famous comet 73P/Schwassmann-Wachmann 3, from the Jupiter family. Its initial radius is estimated to be 0.4 km, according to the work of Graykowski and Jewitt (2019). That comet exhibited a beautiful four-stage decay on September 12, 1995, close to the perihelion point at 0.94 AU. It passed through this point on September 22. Graykowski and Jewitt (2019) doubted the previously suggested fragmentation mechanism due to rotational instability. Their argument was that the most likely rotation period of 10.38 ± 0.04 hours (20.76 ± 0.8 hours at double maximum) is much greater than the critical rotation period at any reasonable density or shape of the nucleus, even without considering tensile strength.

It is unknown when the comet was captured by Jupiter, but it is obvious that during its long stay in the Solar System, amorphous ice underwent a phase transition. After this, a comet of this size would start to warm up from the inside, increasing internal stresses and leading to fragmentation into large pieces. This can be expected as a final stage for any comet captured by Jupiter from the Oort cloud. The core would first break up into large fragments and then smaller ones, turning into a meteor shower.

Conclusion

The main conclusions of the research are the following:

1. The proposed mechanism for the thermal destruction of cometary nuclei could be considered a real mechanism for their destruction. Surface compression stresses contribute to the formation of a coma and could trigger flash events at the time of destruction. Internal bursting stresses lead to hierarchical disintegration of the nucleus into several large fragments, which then continue to break down to the stage of a meteor shower.

2. Maximum breaking stresses exceeding the strength limits of crystalline ice lead to the appearance of cracks inside cometary bodies. This process can begin at heliocentric distances (20 – 40 AU) inside nuclei with radii (0.8 – 1.0 km) (see Figure 6). Bodies of both large and smaller sizes will begin to collapse closer to the Sun.

3. Breaking stresses do not have time to develop inside large crystal nuclei with radii of more than 6 km when moving in a parabolic orbit to overcome the

material's ultimate strength. Such bodies are most likely to maintain their integrity during the passage of perihelion at distances of the order of 1 – 2 AU.

It can be concluded that the mechanism of thermal destruction of cometary nuclei should be taken into account when considering new comet passages into the inner Solar System. The available statistics on the destruction of comets at arbitrary points along their orbits, with the phrase “for unknown reasons”, may also undergo some changes and clarifications in relation to the proposed mechanism.

This research is funded by the Aerospace Committee of the Ministry of Digital Development, Innovations and Aerospace Industry of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR20381077).

REFERENCES

- Asphaug E. and Benz W. (1996). Size, density, and structure of comet Shoemaker-Levy 9 inferred from the physics of Tidal breakup. — *Icarus* 121, — 225–248. — <https://doi.org/10.1006/icar.1996.0083>
- Boley B.A., Weiner J.H., Prager W. (1961). Theory of Thermal Stresses. — *Journal of Applied Mechanics*. — 28, — 318. — DOI: 10.1115/1.3641699
- Bernardinelli P.H., Bernstein G.M., Montet B.T. et al. (2021). C/2014 UN271 (Bernardinelli–Bernstein): The Nearly Spherical Cow of Comets. *The Astrophysical Journal Letters* 921, — L37–L51. — doi:10.3847/2041-8213/ac32d3 .
- Campbell I.E., Nachtrieb N.H. (1956). High-temperature Technology. *Physics Today* 9, — 30–32. — <https://doi.org/10.1063/1.3060095>
- Giauque W.F. and Stout J.W. (1936). The entropy of water and third law of thermodynamics. The heat capacity of ice from 15 to 273°K. *J. Am.Chem. — Soc.* 58, — 1144–1150. — <https://doi.org/10.1021/ja01298a023>
- Graykowski A. and Jewitt D. (2019). Fragmented Comet 73P/Schwassmann-Wachmann 3. *The Astronomical Journal* 158, — 112–119. — DOI 10.3847/1538-3881/ab2f7a
- Greenberg J.M., Mizutani H. and Yamamoto T. (1995). A new derivation of the tensile strength of cometary nuclei: application to comet Shoemaker-Levy 9. — *Astron. Astrophys.* 295, — L35–L38. Bibcode: 1995A&A...295L..35G
- Kührt E. (1984). Temperature profiles and thermal stresses in cometary nuclei. — *Icarus* 60, — 512–521. — [https://doi.org/10.1016/0019-1035\(84\)90158-1](https://doi.org/10.1016/0019-1035(84)90158-1)
- Klinger J. (1980). Influence of a Phase Transition of Ice on the Heat and Mass Balance of Comets. *Science* 209, — 271–272. — DOI: 10.1126/science.209.4453.2
- Klinger J. (1981). Some consequences of a phase transition of water ice on the heat balance of comet nuclei. — *Icarus* 47, — 320–324. — DOI: 10.1016/0019-1035(81)90179-2
- Haynes F.D. (1978). Effect of temperature on the strength of snow-ice, Cold Regions Research and Engineering Laboratory, CRREL Report, — 78–87. Bibcode: 1978etss.rept....H
- Hui M.T.,Ye Q.-Z. (2020). Observations of Disintegrating Long-period Comet C/2019 Y4 (ATLAS): A Sibling of C/1844 Y1 (Great Comet). — *The Astronomical Journal* 160, — 91. — <https://doi.org/10.3847/1538-3881/ab9d81>
- Jewitt D. and Luu J. (2019). Disintegrating Inbound Long-period Comet C/2019 J2. *The Astrophysical Journal Letters* 883, L28–L34. — DOI 10.3847/2041-8213/ab4135
- Jewitt D., Kim Y., Mattiazzo M. et al. (2023). Disintegration of Long-period Comet C/2021 A1 (Leonard). *The Astronomical Journal* 165, — 122–132. — DOI 10.3847/1538-3881/acb53b
- Solem J.C. (1995). Cometary breakup calculations based on a gravitationally-bound agglomerative model: the density and size of Shoemaker- Levy 9. *Astron.Astrophys.* — 302, — 596–608. Bibcode: 1995A&A...302..596S
- Shestakova L.I., Tambovtseva L.V. (1997). The Thermal Destruction of Solids Near the Sun. *Earth, Moon, and Planets* 76, — 19–45. — <https://doi.org/10.1023/A:1005925214405>

Sekanina Z. (1997). The problem of split comets revisited. *Astron. Astrophys.* — 318, — L5–L8. Bibcode: 1997A&A...318L...5S

Shestakova L.I., Serebryanskiy A.V. (2023). On the new mechanism of planetary long-period debris formation around white dwarfs. *MNRAS* 524, — 4506–4520. — <https://doi.org/10.1093/mnras/stad2006>

Schmitt B. et al. (1989). Laboratory studies of cometary ice analogues. In *ESA, Phys. Mech. Cometary Mat., ESA Spec. Publ.*, 302, — 65–69. — SEE N90–19989. — 12–90. — Bibcode: 1989ESASP.302...65S

Prialnik D. and Jevitt D. (2022). Amorphous ice in comets: evidence and consequences. *arXiv:2209.05907v1 [astro-ph.EP]* — 13 Sep 2022

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 139–154

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.262>

ӨОЖ 52.1;37.022;374

© **S.A. Shomshekova***, **M.A. Krugov**, **Ch.T. Omarov**, **Y.K. Aimuratov**, 2024

Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: shomshekova@aphi.kz

POPULARIZATION OF SCIENCE WITHIN ASTROHUB

Shomshekova S.A. — PhD, Leading Researcher. Fesenkov Astrophysical Institute. Almaty, Kazakhstan

E-mail: shmshekva-saule@mail.ru; shomshekova@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-9841-453X>;

Krugov M.A. — Specialist. Engineer. Fesenkov Astrophysical Institute. Almaty, Kazakhstan

E-mail: krugov@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-2788-2176>;

Omarov Ch.T. — PhD, Chief Researcher, Director. Fesenkov Astrophysical Institute. Almaty, Kazakhstan

E-mail: chingis.omarov@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

Aimuratov Y.A. — PhD, Leading Researcher. Fesenkov Astrophysical Institute. Almaty, Kazakhstan

E-mail: aimuratov@fai.kz. <https://orcid.org/0000-0001-5717-6523>.

Abstract. This paper reviewed the methods and resources for promoting astronomical science within the Astronomical Hub (AstroHub) to be established at the Assy-Turgen Observatory in Kazakhstan. In combination with the National Virtual Observatory (NVO), young astronomy and astrophysics specialists can improve their skills by analyzing real observational data and conducting research. Our goal is to create conditions for promoting education and science: preparation of materials and tools and organizing master classes and science promotion in society. The development of digitalization and the use of Big Data in Kazakhstan will significantly improve the capabilities of modern astronomy and astrophysics. Step-by-step solutions of the set tasks within the framework of new programs, such as NVO and AstroHub, open opportunities for developing directions in astronomy and astrophysics at the international level. I would like to note that various international centers are now being built to study various objects and innovations. Only through joint interstate efforts, we will be able to develop and popularize this doctrine among the population. The possibilities of the development of astronomy and astrophysics at the international level open new perspectives. Combining the efforts of different countries and creating international centers for the study of space objects and innovations contributes to a deeper understanding of the Universe and its phenomena. International centers and scientific organizations are becoming important forums for the exchange of knowledge, experience, and ideas

in astronomy and astrophysics. Through this exchange and collaborative research, scientists can push the boundaries of their knowledge and pursue discoveries.

Keywords: AstroHub, science popularization, National Virtual Observatory, Big Data

© С.А. Шомшекова*, М.А. Кругов, Ч.Т. Омаров, Е.К. Аймуратов, 2024
В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт. Алматы, Қазақстан.
E-mail: shomshekova@aphi.kz

АСТРОХАБ ШЕҢБЕРІНДЕ ҒЫЛЫМДЫ НАСИХАТТАУ

Шомшекова С.А. — PhD, Жетекші ғылыми қызметкер. В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт. Алматы, Қазақстан

E-mail: shmshekva-saule@mail.ru; shomshekova@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-9841-453X>;

Кругов М.А. — Маман, Инженер. В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт. Алматы, Қазақстан

E-mail: krugov@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-2788-2176>;

Омаров Ч.Т. — PhD, Бас ғылыми қызметкер, Директор. В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт. Алматы, Қазақстан

E-mail: chingis.omarov@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

Аймуратов Е.К. — PhD, Жетекші ғылыми қызметкер. В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт. Алматы, Қазақстан

E-mail: aimuratov@fai.kz. <https://orcid.org/0000-0001-5717-6523>.

Аннотация. Берілген мақалада, қазақстандағы Ассy-Түрген обсерваториясында құрылатын Астромиялық хабтың (Астрохаб) аясында астрономия ғылымын насихаттау әдістеріне және ресурстарына шолу жүргізілген. Сонымен қатар, Ұлттық Виртуалды Обсерваторияны (ҰВО) қолдану арқылы астрономия және астрофизика салаларындағы жас мамандардың шынайы бақылау мәліметтеріне талдау және зерттеу жұмыстарын жүргізу арқылы біліктіліктерін арттыруға мүмкіндіктерінің бар екендігі айтылған. Біздің мақсатымыз – білім беру және ғылымды насихаттауға жағдай жасау: материалдар мен құралдарды дайындау, сондай-ақ шеберлік дәрістерді ұйымдастыру және қоғамға ғылымды-насихаттау. Қазақстанда цифрландыруды дамыту және үлкен мәліметтерді (Big Data) пайдалану заманауи астрономия мен астрофизиканың мүмкіндіктерін айтарлықтай жақсартады. ҰВО және Астрохаб сияқты жаңа бағдарламалар аясында қойылған міндеттерді кезең-кезеңімен шешу және халықаралық деңгейдегі астрономия мен астрофизика саласындағы бағыттарды дамытуға мүмкіндіктер ашады. Қазір әртүрлі объектілер мен инновацияларды зерттеумен айналысатын түрлі халықаралық орталықтар салынып жатқанын атап өткім келеді. Тек бірлескен, мемлекетаралық күш — жігермен ғана біз осы ілімді халық арасында дамытып, кеңінен насихаттай аламыз. Халықаралық деңгейде астрономия және астрофизика салаларын дамыту мүмкіндіктері шынымен де жаңа мүмкіндіктерді ашады. Әр түрлі елдердің күш-жігерін біріктіру және ғарыш объектілері мен инно-

вацияларды зерттеуге арналған халықаралық орталықтар құру Әлем мен оның құбылыстарын терең түсінуге ықпал етеді. Халықаралық орталықтар мен ғылыми ұйымдар астрономия мен астрофизика саласындағы біліммен, тәжірибемен және идеялармен алмасу үшін маңызды форумға айналуға. Осы алмасу және бірлескен зерттеулер арқылы ғалымдар өз білімдерінің шекараларын кеңейтіп, жаңа ашылуларға ұмтыла алады.

Түйін сөздер: Астрохаб, ғылымды-насихаттау, ұлттық виртуалды обсерватория, Үлкен Мәліметтер (Big Data)

Бұл мақала ҚР ЖБҒМ Ғылым Комитетімен қаржыландырылды (BR21881880).

© С.А. Шомшекова*, М.А. Кругов, Ч.Т. Омаров, Е.К. Аймуратов, 2024

Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан.

E-mail: shomshekova@aphi.kz

ПОПУЛЯРИЗАЦИЯ НАУКИ В РАМКАХ АСТРОХАБА

Шомшекова С.А. — PhD, ведущий научный сотрудник, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан

E-mail: shmshekva-saule@mail.ru; shomshekova@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-9841-453X>;

Кругов М.А. — специалист, инженер, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан

E-mail: krugov@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-2788-2176>;

Омаров Ч.Т. — PhD, главный научный сотрудник, директор, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан

E-mail: chingis.omarov@aphi.kz. <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

Аймуратов Е.К. — PhD, ведущий научный сотрудник, Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан

E-mail: aimuratov@fai.kz. <https://orcid.org/0000-0001-5717-6523>.

Аннотация. В статье проводится обзор методов и ресурсов популяризации астрономической науки в рамках Астрономического хаба (Астрохаб), который будет создан на базе обсерватории Ассы-Тургень в Казахстане. Отмечается, что с помощью Национальной виртуальной обсерватории (НВО) молодые специалисты в области астрономии и астрофизики имеют возможность повысить свою квалификацию, анализируя данные реальных наблюдений и проводя исследования. Цель — создание условий для популяризации образования и науки: подготовка материалов и инструментов, а также организация мастер-классов и популяризация науки для широкой общественности. Развитие цифровизации и использование больших данных (Big Data) в Казахстане значительно улучшат возможности современной астрономии и астрофизики. Поэтапное решение поставленных задач в рамках новых программ, таких как НВО и Астрохаб, открывает возможности для развития направлений в области астрономии и астрофизики международного уровня. Сейчас строятся различные международные центры, которые

занимаются изучением различных объектов и инноваций, и только совместными межгосударственными усилиями мы сможем развивать и популяризировать это учение среди населения. Возможности развития астрономии и астрофизики на международном уровне открывают новые перспективы. Объединение усилий разных стран и создание международных центров для изучения космических объектов и инноваций способствует более глубокому пониманию Вселенной и ее явлений. Международные центры и научные организации становятся важными форумами для обмена знаниями, опытом и идеями в области астрономии и астрофизики. Благодаря этому обмену и совместным исследованиям ученые могут расширять границы своих знаний и стремиться к новым открытиям.

Ключевые слова: Астрохаб, популяризация науки, Национальная виртуальная обсерватория, большие данные (Big Data)

Кіріспе

Жұлдызды аспан әрқашан адамзат баласына қызықты. Өте ерте кезеңнен бастап, аспандағы шырақтардың орнын анықтайтын “гномон” грек тілінен аударғанда “бағыт көрсеткіш” деген мағына білдіретін астрономиялық құрал белгілі болды. Уақыт өте келе бақылаудың мүмкіндіктерін арттыратын “астролябия”,¹ “квадрант”,² “секстант”³ тәрізді күрделі құралдар пайда болды. Негізі ғылымның дамуына ғалымдардың, қиялшыл-жазушылардың, ғылымды дәріптеушілердің үлестерін атап айтуға болады. Мысалы, Жюль Верн өзінің шығармаларында су асты қайық, ғарышқа ұшу, акваланг, т.б. ғылыми жаңа ашылуларды алдын-ала жазған.

Галилео Галилей 1609 жылы голландық оптиктердің көрінерлік дүрбі жасағандарын естіп, өз бетінше жазық-дөңес объективті және жазық-ойыс окулярлы, үш есе ұлғайтатын телескоп жасады, сол уақыттан бастап 415 жыл өтті және алысты жақындатып көптеген ғылыми ашылуларға негіз болды (Шомшекова, 2008). Ол, Айдың бетіндегі дақтарды, фазаларын, Юпитердің төрт серігін (Ио, Европа, Калисто, Ганимед) және аспандағы Құс жолының сансыз көп жұлдыздардан құралғанын көрсетті. Ғылымның және техниканың дамуының арқасында адамзат ғарышқа ұшты, енді адамзаттың ғарышты толық игеруінің қадамы да алыс емес.

Әрине тіршілік көзінің басты көзі су, осы мақсатта астрономдар Күн жүйесінің басқа планеталарын және олардың серіктерін зерттеуді қолға алды. Нәтижесінде, Юпитердің серігі Европаның беткі қабаты мұзды қабықшадан тұратындығына 1970 жылы ғарыштық зонд «Вояджер-2» зерттеген болатын. 1990 жылы «Галилео» ғарыш аппараты Юпитерді айналып өтіп, Европаны

¹ астролябия — жұлдыздардың орнын анықтайтын бұрыш өлшеуші аспап

² квадрант — аспан объектілерінің көкжиектен биіктігін және олардың арасындағы бұрыштық қашықтықты өлшеуге арналған бұрыштық астрономиялық аспап

³ секстант — бақылау жүргізілетін нүктенің географиялық координаталарын анықтау мақсатында ғарыш объектілерінің көкжиектен биіктігін өлшеу үшін қолданылатын навигациялық аспап

зерттеулер нәтижесінде беткі қабатының астында, сұйық мұхиттың бар екендігіне көз жеткізді. Еуропалық ғарыш агенттігі 2023 жыл 14 сәуірде Юпитердің мұзды Айларын зерттеуге (Jupiter Icy Moons Explorer JUICE) автоматты планетааралық станциясын Юпитердің жүйесін зерттеуге ұшырды (Логоватовская, 2022).

Марсты отарлау-күрделі механизм, ол көптеген жүйелі міндеттерден тұрады тіпті ондаған жылдардан кейін де адамға үлкен қажетті тәжірибе мен технология аздық етеді. Марс Жерге ең жақын планета болғандықтан, оны отарлау оңай болады деген түсініктер бар. Ондағы уақытқа тәуелділік Жерге ұқсас: күн 37 минутқа созылады, осыған байланысты жыл шамамен 700 күнді құрайды және қосымша төрт мезгілге бөлінеді. Планетаның атмосферасы толығымен көмірқышқыл газынан тұрады. Әрине, әйгілі өнертапқыш Илон Маск (SpaceX) 2016 жылы 67-ші ғарышкерлердің халықаралық кездесуінде “Марсты отарлау” жобасын айтқан болатын. Марсқа жету үшін бір жылға жуық уақыт керек, ал адам осы ұзақ уақыт аралығында жабық кеңістікте гравитациясыз, қозғалыссыз отыруға тура келеді. Планетаға жеткен күннің өзінде, денсаулықты қалыпқа келтіруге ұзақ уақыт керек болады. Егерде, ғарыштағы салмақсыздықтың мәселесін ғалымдар болашақта қандай да бір шешімін табатын болса, Илон Масктың идеясын жүзеге асыруға мүмкіндік туар. Қазіргі кезде, Марстың бетінде екі белсенді марсарбалары (марсходтар) бар: екеуі де АҚШ ғарыш агенттігі NASA басқаратын «Curiosity»⁴ және «Perseverance»⁵ марсарбалары. Қытай Ұлттық ғарыш басқармасының (CNSA) «Tianwen-1» миссиясының бөлігі болып табылатын «Zhurong rover» марсарбасы 20 мамыр 2022 жылға дейін белсенді болды. Үндістан 2024 жылы «Mars Orbiter Mission 2» ұшырады. Үндістан Марсты зерттеу мақсатында беткі қабатын картаға түсіру, климаттық жағдайларды зерттеу, сонымен қатар метанның іздерін іздеу және оның атмосферадағы концентрациясын анықтау болып табылады.

Сонымен қатар, тіршілік көзін өзге планеталардан (экзопланета – Күн жүйесінен тыс жұлдыздар айналасындағы планеталар) іздеу астрономия және астрофизика салаларында өзекті тақырыптың бірі болып табылады. Күн жүйесінен тыс пайда болатын планеталардың басты тәуелділігі олардың орталық жұлдыздарының массасына байланысты. Орталық жұлдыз және экзопланета арасында эволюция кезеңінде тығыз байланыс орнатылады. Планеталық жүйелер эволюциясының алғашқы кезеңдерінде орталық жұлдыз Бас тізбекте (Герцшпрунг — Рассел диаграммасы жұлдыздардың спектрлік кластарымен абсолюттік жұлдыздық шамасы арасындағы байланысты көрсететін диаграмма, бас тізбекте біздің Күн тәрізді жұлдыздар) орналасқан және протопланетарлық диск әлі де сақталған болуы керек. Бұл кезеңде, орталық жұлдыздың беткі қабатындағы протопланеталық дискіде заттың аккрециялануы эпизодтық сипатта болады, яғни массаның шығуы

⁴ <https://mars.nasa.gov/msl/home/>

⁵ <https://science.nasa.gov/mission/mars-2020-perseverance/>

және қайтуы анизатропты күйде, бұл планетаның қалыптасуына немесе жойылуына әсер етеді (Сафронов, 1969).

Басқа планеталардың табиғатын зерттеу үшін спектрлерін алу мақсатының бірі болып табылатын «Джеймс Уэбб» ғарыш телескобы (JWST).⁶ «Джеймс Уэбб» телескобы 17 мемлекеттің халықаралық ынтымақтастығының және оның басты ұйымы АҚШ ғарыштық кеңістікті зерттеу және аэронавтика бойынша ұлттық басқармасы болып табылатын ауқымды жұмыстың нәтижесінде жүзеге асты. «Джеймс Уэбб» телескобы 2021 жылы 25 желтоқсан айында «Ариан-5» зымыранының көмегімен Куру (French Guiana) ғарыш айлағынан ұшырылды. Ғарыш телескобы жеке айна сегменттерінен тұратын жалпы диаметрі 6.5 метр болатын ең үлкен ғарыш телескобы. Бастапқы мақсаты, алғашқы жұлдыздар мен галактикалардан жарық жинау, олардың пайда болуы және дамуын зерттеу, планеталық жүйелерді зерттеу. 2022 жылдың 2 сәуір айында «Джеймс Уэбб» телескопы ғылыми аспаптардың өсін туралаудың бірінші кезеңін аяқтады. Бұл кезеңде жақын инфрақызыл камера бапталды - near infrared camera, дәл бағыттау датчигі – fine guidance sensor, жақын инфрақызыл спектрометр – near infrared imager and slitless spectrograph және жақын инфрақызыл спектрометр – near infrared spectrograph. Орташа инфрақызыл камера – mid-infrared instrument – салқындатуды жалғастыруда. Жақын инфрақызыл камера негізгі құрылғы болып табылады, 0,6-дан 5 микронға дейінгі инфрақызыл толқын ұзындығының аймағын қамтиды.

Жалпы ғылымды қарапайым тілмен қоғамға жеткізу және қоғамның әлеуетін арттыру маңызды міндеттердің бірі болып табылады. Заманауи астрономия тек қана іргелі зерттеулерді қамтымайды, ол ғылымның басқа салаларында да маңызды орын алады. Астрономияның әлеуметтік қолданыстағы тиімділігі — жасанды жер серіктерімен байланысты, навигацияда, табиғи ресурстарды мониторингілеуде, климаттық өзгерістерді зерттеуде қолданылады. Ғылымды дәріптеу — қоғамның ғылыми ақпараттарды қабылдауға қол жетімді құралдарды қолдану арқылы ғылымның мәртебесін көтеру және сол арқылы қоғамға ғылымға қайшы келетін ақпараттардың таралуына жол бермеу (Сафронов, 2021).

Зерттеудің мақсаты

Білім беру және ғылымды насихаттауға жағдай жасау: материалдар мен құралдарды дайындау, сондай-ақ шеберлік дәрістерді ұйымдастыру және ғылымды-насихаттау үшін шеберлік-дәрістер өткізу.

Біз білім беру жүйесінің барлық деңгейлерінде ғылыми ақпаратты және оның экономикалық тұрғыда перспективтік үрдістері мен қоғамдық қажеттіліктерге сәйкестігін, сондай-ақ оның инвестициялық тартымдылығын арттыруды жеткізе аламыз.

Білім беру және ғылымды танымал ету үшін қолданылатын тәсілдер: білім беру (Әлем туралы ғылыми түсінік қалыптастыру, ғарыш туралы дүниетанымды қалыптастыру, негізгі астрономиялық ұғымдар мен заңдармен

⁶ <https://www.ama-science.org/proceedings/details/368>

таныстыру); тәрбиелік (ұйымдастырушылық дағдыларды, топта жұмыс істеу қабілетін қалыптастыру); дамытушылық (логикалық және дерексіз ойлауды дамыту, алынған білімді жалпылау және біріктіру қабілетін қалыптастыру).

Танымал ғылым кез келген қосымша білімі жоқ адамға түсінікті болуы керек. Танымал етудің негізгі функциясы бұл тек шынайы ақпаратты таратудан ғана емес, сонымен бірге әлемге жаратылыстану-ғылыми көзқарасты, танымның тиісті әдістерін қалыптастыру.

Әдістер мен материалдар, ресурстар

Астрономия және астрофизика бізге қоршаған ортаны жақсырақ түсінуге мүмкіндік беретін, өте қызықты және әсерлі ғылым болып табылады. Бізге Әлемнің қалай пайда болғанын, эволюциясын және құрылымын зерттеуге мүмкіндік береді. Негізінде заманауи астрономия және астрофизикада зерттеудің ауқымына байланысты бірнеше жүйеге бөліп қарастыруға болады:

- 1) Күн жүйесі;
- 2) галактикалық астрономия;
- 3) галактикадан тыс астрономия;
- 4) Әлемді ауқымды құрылымдарымен бірге зерттеу.

Астрономия және астрофизикада болған ауқымды ашылулар студенттер мен оқушылардың Әлемді түсінулері бойынша ой-өрістерін кеңейтеді және ынталандырады. Жас буынды бұл ғылымға тарту үшін, атаулы ашылулармен ақпараттандыру қажет:

1. Күн жүйесінің масштабындағы зерттеулер (гелиосейсмология, күн дақтары, SOHO миссиясы және т.б.) және Күн-Жер байланыстарына (магниттік дауылдар, Күндегі жарылыстар, ғарыштық ауа райы), планеталарға (судың және басқа да өмірлік элементтер мен қосылыстардың болуы) және олардың табиғи серіктеріне (Ай, Юпитердің серіктері және т.б.), оның ішінде оларды игеру және отарлау ықтималдылығы.

2. Әлемнің үдемелі түрде кеңейуінің ашылуы (Блинников, 2019);

3. Әлемнің ең алғашқы кезеңінен бастап дамуы туралы ақпарат алу үшін реликтік сәулеленуді зерттеу;

4. Экзопланеталар — Күн жүйесінен тыс планеталар: соңғы жылдары астрономдар біздің Жер тәрізді, басқа Күнді (жұлдызды) айналатын 6000-ға жуық планеталарды тапты. Бұл бізге, бізден басқа әлемнің бар болуы мүмкін, басқа планеталардың бар екендігіне және олардың бірінде тіршіліктің болуы мүмкін деген ой-өрісті кеңейте түсті (Маров, 2017).⁷ 2019 жылы экзопланеталардың ашылуына физика саласы бойынша Нобель сыйлығы берілді⁸. Қазіргі уақытта кәсіби астрофизиктер үлкен бақылау науқандарын жүргізуде және экзопланеталарды іздеу үшін аспанды сканерлеу миссияларын бастады. Бүгінгі күнге дейін жинақталған экзопланеталарды бақылау материалдарының үлкен көлемі көптеген кәсіби қауымдастықтар мен Ұлттық

⁷ <http://www.exoplanet.eu/catalog/>

⁸ <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2019/summary/>

ғарыш агенттіктерін азаматтық ғылым⁹ бастамасын көтеруге мәжбүр етеді, мұнда дербес компьютері мен Интернетке қол жетімділігі бар кез келген адам оларды анықтаудың жеткілікті сенімді транзиттік әдісін қолдана отырып, зерттелмеген жаңа экзопланеталардың ашылуына үлес қоса алады. Осылайша табылған барлық объектілер әрі қарай мұқият зерттеу үшін тізімге енгізіледі.

5. Қара құрдым — ғарыштың ерекше бір аймағы, бұл жерде гравитациялық тартылыс өте күшті, сондықтан ешқандай жарық оның шекарасынан аса алмайды. Күннің массасынан миллиард есе үлкен өте массивті қара құрдымдар бар, олар Сейферт галактикаларының орталарында орналасқан. 2019 жылы халықаралық ғылыми қаумдастықтың арқасында Event Horizon Telescope¹⁰ радиотелескоптар желісінің көмегімен қара құрдымның алғашқы суреті алынды.

6. Гравитациялық толқындар — бұл заманауи астрономиядағы ең ерекше ашылулардың бірі, ол компактты объектілердің — екі қара құрдымның немесе екі нейтрон жұлдыздарының — қосылу процесінің салдарынан пайда болады. Ұзақ уақыт бойы Эйнштейн теңдеуін шешудің математикалық салдары болып саналған гравитациялық толқындар бірқатар эксперименттерде сенімді түрде табылды және анықталды, нәтижесінде 2017 жылы физика саласы бойынша Нобель сыйлығына қол жеткізді.¹¹ Қазіргі кезде, гравитациялық толқындарды LIGO¹² — Laser Interferometer Gravitational-Wave Observatory (USA) және Virgo¹³ (Italy) интерферометрларымен тіркеледі және болашақта алпауыт KAGRA¹⁴ — Kamioka Gravitational wave detector (Japan) и IndIGO¹⁵ — Indian Interferometer Gravitational-Wave Observatory (India) құралдармен толықтырылады. Экзопланеталар тәрізді, гравитациялық толқындарды зерттейтін кәсіби қауымдастық қолданыстағы детекторлардың өнімділігін жақсарту және мәліметтер банкіне тіркелген оқиғаларды анықтау және жіктеу үшін белгілі бір білім саласындағы азаматтық ғылым бастамасына қызығушылық танытатын азаматтарды ашық түрде тартады¹⁶.

7. Қараңғы энергия және қараңғы материя Әлемнің құрылымына және дамуына үлкен әсерін туғызатын, Әлемнің көп бөлігі осы заттардан тұратын, бізге тура көрінбейтін ерекше құбылыстар. Оларды зерттеу бізге Әлемнің жалпы қалай дамып жатқандығын түсінуге көмектеседі.

Гамма-сәулелік жарқыл өте қысқа уақытта (бірнеше секундтан бірнеше жүз секундқа дейін созылуы мүмкін) және күтпеген мезетте болатын құбылыс. Оның қай жерде — қай галактикада — және жарқылдың қай уақытта

⁹ <https://exoplanets.nasa.gov/citizen-science/>

¹⁰ <https://eventhorizontelescope.org/press-release-april-10-2019-astronomers-capture-first-image-black-hole>

¹¹ <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/2017/summary/>

¹² <https://www.ligo.caltech.edu/>

¹³ <https://www.virgo-gw.eu/>

¹⁴ <https://gwcenter.icrr.u-tokyo.ac.jp/en/>

¹⁵ <https://www.gw-indigo.org/tiki-index.php>

¹⁶ <https://www.zooniverse.org/projects/zooniverse/gravity-spy>

пайда болатыны белгісіз себебі, бұл құбылыстың жарылыс табиғатымен сипатталады, өйткені бұл жарылыстар жұлдыздардың соңғы кезеңдеріндегі сығылу нәтижесінде босатылатын гравитациялық энергиясымен байланысты. Сонымен қатар, гамма-сәулелену жер атмосферасынан өтпейді, сондықтан оның жарқ етуін тек ғарыштық телескоптан бақылауға болады (Mészáros, 2019; Burgess, 2020; Komesh, 2023).

Бұл астрономия мен астрофизика салаларының зерттеуге ұсынатын бағыттарының кішкене бөлігі ғана. Жас ұрпаққа осы салалардағы ең соңғы жаңалықтар мен жетістіктер туралы ақпарат беру олардың көкжиектерін кеңейтуге және ғылымдағы өз бағыттарын таңдауға мүмкіндік береді.

Сонымен қатар, заманауи қазақстандағы астрономия және астрофизикадағы жаңалықтарды студенттерге, оқушыларға, жалпы қоғамға насихаттау маңызды міндеттердің бірі болып табылады. Қазақстандағы Астрономия оқу жоспарында: мектептерде астрономия арнайы жеке пән ретінде оқытылмайды, бірақ оқушылар бастауыш сыныптарда «Жаратылыстану» пәні — бұл барлық жаратылыстану ғылымдарының негізгі ұғымдарын жүйелейтін және түсіндіретін ғылым саласы, онда әлем туралы жалпы ақпарат беріледі. 7-сыныпта физика пәнімен бірге оқушыларға астрономияның жалпы ұғымдары үйретіледі. Күн жүйесі туралы, оның ішінде планеталардың өлшемдері, олардың орбиталары және күн мен Айдың тұтылуы туралы ақпараттар беріледі.

Астрономия саласы бойынша жоғары білімді Қазақстанның екі қаласында: Алматыда әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінде,¹⁷ сондай-ақ Петропавл қаласындағы М. Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университетінде¹⁸ алуға болады. Университеттер базасында Жалпы астрономия, практикалық астрофизика, Астрофизика негіздері, Күн жүйесі мен Галактика астрофизикасы, айнымалы жұлдыздар, астрометрия, галактикадан тыс астрономия пәндері бойынша дәрістер, практикалық және зертханалық сабақтар жүргізіледі.

Астрономиялық ғылыми зерттеулер Қазақстан Республикасы цифрлық даму, инновациялар және аэроғарыш өнеркәсібі министрлігінің Аэроғарыш комитетіне қарасты,¹⁹ В. Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институтта (ФАФИ) жүргізіледі. ФАФИ Қазақстандағы астрономия және астрофизика саласындағы іргелі зерттеулер бойынша жетекші ғылыми ұйым болып табылады.²⁰

Сонымен қатар, Каменка үстіртіндегі 1450 метр теңіз деңгейіндегі биіктікте орналасқан Астрофизикалық институтында астрономия және астрофизика бойынша ғылымды-насихаттау дәрістері өткізіледі.²¹

¹⁷ <https://www.kaznu.kz>

¹⁸ <https://www.nkzu.kz>

¹⁹ <https://www.gov.kz/memleket/entities/kazcosmos?lang=ru>

²⁰ <https://fai.kz>

²¹ <https://fai.kz/excurs/lect.html>

Сондай-ақ, әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті оқитын студенттерден тұратын астрономиялық клуб бар және еліміздің батысындағы Ақтөбе қаласында «Ақтөбе облыстық планетарийі» орналасқан. Планетарийде астрономия, ғарышкерлік бойынша танымал дәрістер өткізіледі, жұлдызды аспан мен аспан құбылыстарына әуесқой астрономдар бақылауларды ұйымдастырып отырады. Бұл планетарий Еуроазиялық планетарийлер Достастығының құрамына кіреді. Планетарийде астрономиядан қазақ және орыс тілдерінде дәрістер өткізіледі.²²

Астрономия ғылымын насихаттау нәтижелері

Қазақстанда ФАФИ 2021-2023 жылдарға арналған BR10965141 «Роботтандырылған телескоптар, Big Data технологиясы және жоғары өнімді есептеуші жүйелер негізінде ұлттық виртуалды обсерватория құру» (бұдан әрі – ҰВО) бағдарламасы шеңберінде виртуалды платформа құрылды.²³ Шыны мұрағатты цифрландырудың әдістемесі жасалды (Shomshekova, 2022). ФАФИ электронды-оптикалық түрлендіргішпен алынған сейферт галактикалары, планетарлық тұмандықтардың спектрограммалары (шамамен 10000 жуық) цифрланды. Сонымен қатар мұрағатағы басқа да объектілердің спектрлік мәліметтер толық цифрланып және оларды заманауи бағдарламада өңдеудің әдістемесі жасалды (Shomshekova, 2023). Біздің бақылаулардың артықшылығы, толқын ұзындығының қызыл аймағында, $H\alpha$ аймағында және оған жақын эмиссиялық сызықтарда орындалды. Сонымен қатар, қалған спектрлік мәліметтер (60% дейінгі), $H\beta$ + $[OIII]$ эмиссиялық сызықтарда алынды. 1970–1990 жылдары оптикалық бақылаулардың жалпы санынан спектрдің ~20–25 % бөлігін “қызыл” аймақтағы бақылаулар құрады. Сейферт галактикаларының мәліметтер базасына біздің $H\alpha$ эмиссиялық сызықтар үшін алынған нәтижелеріміз үлкен үлесін қосады.

ҰВО студенттер мен магистранттар, сондай-ақ докторанттар өздерінің зерттеулері үшін әртүрлі астрономиялық объектілер бойынша бақылау мәліметтерін пайдалана алатын тамаша қосымша ресурс болып табылады. Виртуалды платформа жұлдыздар, галактикалар, планеталар және т.б. сияқты әртүрлі астрономиялық объектілер туралы көптеген мәліметтерге қол жеткізуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, ҰВО мәліметтерін пайдалану студенттер мен зерттеушілерге астрономия туралы білімдері мен кәсіби дәрежелерін кеңейтуге, нақты мәліметтермен жұмыс істеуге және оларды өз зерттеулерінде қолдануға мүмкіндік береді. Бұл жас ғалымдардың кәсіби дамуындағы маңызды қадам және жалпы астрономия ғылымының дамуына ықпал етеді.

Осылайша, ҰВО студенттер мен зерттеушілерге ғылыми зерттеулерінде көмектесетін, олардың жұмысының сапасы мен тереңдігін арттыруға және астрономиялық қауымдастықтың дамуына ықпал ететін құнды құрал болып табылады. Осы аталған жұмыстардың нәтижесінде Астрофизикалық институт

²² <https://planeta-aktobe.kz>

²³ <https://vo.fai.kz>

Халықаралық виртуалды обсерваториялар альянсының құрамына кірді.²⁴ Бұл ВО өткізуге мүмкіндік беру үшін қажетті техникалық стандарттарды талқылайтын және келісетін ұйым. Бұл ұйымға 24 мемлекеттің астрономиялық мекемелері кіреді.

2021–2023 жылы, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт және Ионосфера институты бірлесе отырып, Ғарыштық жағдайдан хабардар болу (SSA – Space Situational Awareness) үшін ұлттық жүйені құру бағытталған бағдарламаны аяқтады. Осы бағдарлама аясында планетамызды аялау мақсатында Жермен шағын астероидтың (2013 жылы 15 ақпанда челябинск метеоритінің құлауы тәрізді) соқтығысуы адамзаттың өліміне және Жердегі айтарлықтай қирауына әкелуі мүмкін.

Жерге жақын объектілер (әрі қарай – ЖЖО) (Near-Earth object) - бұл Күн жүйесінің кез-келген кіші денелері, олардың орбиталары кейде оларды Жерге жақындатады. Аспан объектілерінің перигелиі (орбитаның ең жақын нүктесі), ЖЖО ретінде 0,983 тен 1,3 астрономиялық бірлікке дейінгі (astronomical unit (AU)) объектілер. ЖЖО бұл негізінен астероидтар, кометалар және ғарыштық қоқыстар. Кіші планеталар орталығы (Minor Planet Center) барлық ықтималды қауіпті астероидтар және басқа да кіші денелер туралы ақпаратты жариялап отырады.²⁵ Кіші планеталар орталығы Смитсон астрофизикалық обсерваториясында Халықаралық астрономиялық одақтың (IAU) F бөлімінің қамқорлығымен жұмыс жасайды. Мысалы, 2024 жылдың 14 ақпанында ықтимал қауіпті астероид BR4 Жерге жақын болады, бірақ астероид Жерге аса қауіп төндірмейді. Өлшемі 130–300 м болатын бұл астероид бізден өзінің минималды қашықтығына жетеді (4,6 млн.км, Айға дейінгі орташа қашықтығы шамамен 12 есе). Сондықтан астероидтардан Жерді қорғау мақсатында халықаралық алғашқы миссия DART (*Double Asteroid Redirection Test*) – қос астероидтың бағыт-бағдарын өзгертуді сынақтан өткізу миссиясы Falcon 9 (Space X) зымыранымен ұшырылған болатын. Бұл миссияның мақсаты DART зондының Диморфос астероидіне соқтығысуы арқылы, оның Дидим астероидына үдеу беру арқылы траекторияны өзгерту. Біздің Ассы-Түрген обсерваториясында диаметры 1.5 метрлік АЗТ-20 телескобының көмегімен соқтығысу уақытында және одан кейінгі алғашқы минуттарда алынған спектрлік бақылау мәліметтері және талдау нәтижелері алынды. Талдаулардың нәтижесінде әсер ету кезінде және одан кейін бірнеше минут ішінде пайда болған NaI, LiI және KI сілтілік металдар шығарындыларының белгілерін көрсетті (Shestakova, 2022). Нәтижесінде, 2023 жылы Астрофизикалық институт Халықаралық астероидтық қауіпті алдын алу (IAWN) ұйымының²⁶ құрамына кірді. Бұл ұйым БҰҰ қамқорлығымен басқарылады.

Заманауи астрономияның тағы бір мәселесі ғарыштық қоқыстар. Ғарыш қоқыстар – Жерді айналып өтетін, бірақ істен шыққан жасанды серіктер

²⁴ www.ivoa.net

²⁵ <https://www.minorplanetcenter.net/>

²⁶ www.iawn.net

немесе олардан қалған қалдық материалдар. Бұл материалдардың өлшемі аса кішкентай бояулы қалдықтан үлкен металл бөліктеріне дейін болуы мүмкін.²⁷ Қоқыстардың көп бөлігі жер бетіндегі 2000 километр қашықтықта орналасқан төмен жер орбитасында, кейбір қоқыстарды экватордан 35 786 километр жоғары геостационарлық орбитада табуға болады.²⁸ Ғылыми модельдер Жер орбитасындағы ғарыш қоқыстарының жалпы көлемін келесідей бағалайды:²⁹

1) 29 000 объект – 10 см асатын өлшемдер;

2) 670 000 объект – 1 см асатын өлшемдер;

3) 170 миллионнан астам объект – 1 мм асатын өлшемдер. Осы объектілердің кез-келгені жұмыс істеп тұрған ғарыш кемесіне зақым келтіруі мүмкін. Мысалы, 10 сантиметр объектімен соқтығыс әдеттегі жер серіктің апатты фрагментациясын тудыруы мүмкін, ал 1 сантиметр болатын қоқыс ғарыш аппаратын істен шығарып, Халықаралық ғарыштық станция қалқандарына енуі мүмкін, ал 1 миллиметр объект ғарыш кемесі бортындағы ішкі жүйелерді бұзуы мүмкін.

2023–2025 жылдары № BR21881880 "Қазақстандық және халықаралық оптикалық құралдарды және инновациялық технологияларды қолданып астрономиялық зерттеу хабын құру" (бұдан әрі – Астрохаб) бағдарламасы шеңберінде білім беру мен ғылымды насихаттауға жағдай жасау міндеті қойылды.

Осы себептен, Ассы-Түрген обсерваториясындағы Zeiss-1000 телескопын (1-сурет) жоғары білікті мамандарды даярлау мақсатында студенттер мен магистранттарға танымал/ғылыми дәрістер өткізу және тағлымдамадан өту мақсатында қолдануға қайта жаңғырту міндеті қойылды.



1 сурет. Ассы-Түрген обсерваториясындағы Zeiss-1000 телескопы

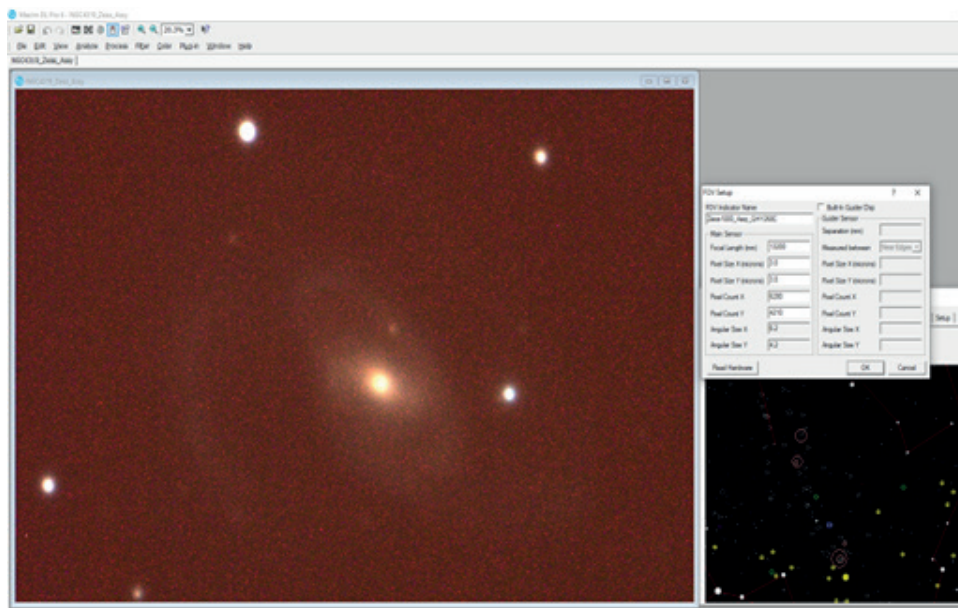
²⁷ <https://interconnectedrisks.org/unu-ehs>

²⁸ <https://www.britannica.com/technology/space-debris>

²⁹ https://www.esa.int/Space_Safety/Clean_Space/How_many_space_debris_objects_are_currently_in_orbit

Zeiss-1000 телескопын жаңғырту бойынша келесі жұмыстар жүргізілді: тура шарықтау осінің (RA) негіздемесі, моторы, басқарушы түйіні, камераны қосып-өшіретін модуль, телескопты басқаратын компьютерлік бағдарлама және т.б. жасақтамалары ауыстырылды.

Сонымен қатар, телескопты басқару және алатын суреттерінің сапасына сынақ жұмыстары жүргізілді және алғашқы астрономиялық кадрлар алынды (2-сурет) және жақсы нәтижелер көрсетті. NGC4219 галактикасы Центавр шоқжұлдызында орналасқан. 2011 жылы бұл галактикада екі рет аса жаңа жұлдыздар жарқ етті SN 2011hp - Ic және SN 2011am - Ib типтеріне жататын аса жаңа жұлдыздардың жарқ етулері болды.



2 сурет. Zeiss-1000 телескопын жаңғырту нәтижесінде алынған NGC 4219 галактикасы

Сонымен қатар бұл бағдарлама аясында астроклиматты зерттеу, бұл зерттеу бағыты маңызды себебі басқа да шет ел мемлекеттерінің Ассы-Түрген обсерваториясында өз телескоптарын орнату мақсатында қызығушылықтарының артуы, себебі жылына 200 жуық астрономиялық бақылау түндерінің болуы. Өзбекстанның Майданак обсерваториясында³⁰ арнайы астроклиматты мониторингілейтін DIMM аспабы бар. Бұл аспап Differential Image Motion Monitor (DIMM) Жұлдыздардың кескінінің дифференциалды дірілін өлшегіш аспап. Осы аспапты бізде орнату бағытында қызығушылықтар обсерваторияның астроклиматының нақты параметрлерін анықтаудан туындады. Бұл болашақта халықаралық ғылым мен технологияны ұштастыратын Астрохаб орталығын құруға негіз болады.

³⁰ <http://www.astrin.uz>

Қорытынды

Қазақстанда цифрландыруды дамыту және үлкен мәліметтерді (Big Data) пайдалану заманауи астрономия мен астрофизиканың мүмкіндіктерін айтарлықтай жақсартады. ҰВО және Астрохаб сияқты жаңа бағдарламалар аясында қойылған міндеттерді кезең-кезеңімен шешу және халықаралық деңгейдегі астрономия мен астрофизика саласындағы бағыттарды дамытуға мүмкіндіктер ашады. ҰВО мен Астрохаб қазақстандық университеттерді астрономия және астрофизика саласындағы мәліметтерді, әдістерді, бірлесіп пайдалануға және отандық ғылымды дамытуға ықпал ететін платформалар болып табылады. Бұл платформалар жас мамандар мен студенттерге ғылыми зерттеулер жүргізу, оқыту және тәжірибе алмасу бойынша бірегей ресурстар мен құралдарды ұсынады.

Қоғамға ғылымды насихаттау және салауатты ғылыми көзқарасты тәрбиелеу маңызды міндеттердің бірі болып табылады. Бұл ғылымды танымал етуге ықпал етеді және жас ұрпақты ғылыми қызметпен айналысуға тартады.

Жоғарыда айтылғандардың бәрін қорытындылай келе, Әлемде астрономия ғылымының даму тенденциясы байқалады. Қазіргі кезде әлемде шамамен 13 мың арнайы мамандандырылған астрономдар жұмыс жасайды. Қазір әртүрлі объектілер мен инновацияларды зерттеумен айналысатын түрлі халықаралық орталықтар салынып жатқанын атап өткім келеді. Тек бірлескен, мемлекетаралық күш - жігермен ғана біз осы ілімді халық арасында дамытып, кеңінен насихаттай аламыз.

Халықаралық деңгейде бірлесіп жұмыс жасаудың басты артықшылықтарының бірі ресурстарды, қаржыландыру мен сараптамалық білімді біріктіру мүмкіндігі болып табылады. Бұл үлкен ғылыми жобалар жасауға, жаңа технологиялар мен телескоптар жасауға, алыс ғаламның бұрыштарын зерттеуге және кең аудиторияның жаңа қырынан көрінуге мүмкіндік береді.

Сондай-ақ, астрономияны халық арасында дамыту және танымал ету маңызды міндеттер болып табылатынын атап өткен жөн. Халықаралық орталықтар мен ұйымдар білім беру бағдарламаларына белсенді түрде қосыла алады, көпшілік алдында дәрістер мен демонстрациялар өткізе алады, ғарышты зерттеуге көбірек адамдардың назарын аудару және қызығушылық таныту үшін публицистикалық іс-шаралар ұйымдастыра алады.

Осылайша, астрономия мен астрофизикадағы бірлескен мемлекетаралық күш-жігер біздің Ғаламды зерттеуге және түсінуге, сондай-ақ оны танымал етуге және осы қызықты ілімге көбірек адамдарды тартуға кең мүмкіндіктер ашады.

ӘДЕБИЕТТЕР

Блинников С.И., Долгов А.Д. (2019). Космологическое ускорение //УФН. — 2019. — Т. 189. — С. 561–602. — DOI: 10.3367/UFN.2018.10.038469

Burgess J. Michael Bégué, Damien et al. (2020). Gamma-ray bursts as cool synchrotron sources

// Nature Astronomy. — 2020. — Vol.4. — Pp. 174–179. — DOI: 10.1038/s41550-019-0911-z .

Komesh T., Grossan B., Maksut Z., Abdikamalov E., Krugov M., Smoot G.F. (2023). Evolution of the afterglow optical spectral shape of GRB 201015A in the first hour: evidence for dust destruction. // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society — 2023. — Vol. 520. — Pp. 6104–6110. — DOI: <https://doi.org/10.1093/mnras/stad538>

Логоватская Е.С. (2022). Архитектура и космос. Многофункциональный космический комплекс (Освоение Спутника Юпитера-Европы) // Материалы 57-х Научных чтений, посвящённых разработке научного наследия и развитию идей К.Э. Циолковского. Часть 2. Калуга, — 2022. — С.102–108.

Маров М.Я., Шевченко И.И. (2017). Экзопланеты. Экзопланетология. — М.; Ижевск: Институт компьютерных исследований. — 2017. — С.138.

Mészáros P. (2019). Gamma-Ray Bursts: Theoretical Issues and Developments // *Memorie della Societa Astronomica Italiana*. — 2019. — V.90. — P.57. — DOI:10.48550/arXiv.1904.10488

Саксонов С.В. (2021). мода на науку, или необходимость популяризации науки // Самарская Лука: проблемы региональной и глобальной экологии. — 2021.— Т. 30. — № 1. — С. 21–24.

Софронов В.С. (1969). Эволюция допланетного облако и образование Земли и планет. — М.: Наука. —1969. — С. 243.

Shomshekova S., Izmailova I., Umirbayeva A., Omarov C. (2022). A method for digitization of archival astroplates of the Fesenkov Astrophysical Institute. *New Astronomy*, — 2022. —V. 97. — P. 101881. — doi: <https://doi.org/10.1016/j.newast.2022.101881>.

Saule Shomshekova, Lyudmila Kondratyeva, Chingis Omarov, Ildana Izmailova, Adel Umirbayeva, Svetlana Moshkina (2023). Digital archival spectral data for Seyfert galaxies and their use in conjunction with modern FAI spectral data // *Experimental Astronomy*. — 2023. — V.56. — Pp.557–568.

Шомшекова С.А. (2009). Халықаралық астрономия жылы — 2009 // — *ҚР ҰҒА Хабаршысы*, — №4. — 2008. — С. 173–175. — DOI: <https://doi.org/10.1007/s10686-023-09916-6>.

<http://www.exoplanet.eu/catalog/> сұрау салынған күні 09.02.2024.

<https://planeta-aktobe.kz> сұрау салынған күні 09.02.2024.

<https://vo.fai.kz> сұрау салынған күні 09.02.2024.

Shestakova L.I., Serebryanskiy A.V., Krugov M.A., Aimanova G.K., and Omarov Ch.T. (2022). Signs of Emissions of Alkali Metals NaI, Li I, and KI During First Minutes After DART Probe Crash on Dimorphos. // *Research Notes of the AAS*. — 2022. — Vol. 6. — No 10. — P.223. — DOI: 10.3847/2515-5172/ac9d33

<https://www.minorplanetcenter.net/> сұрау салынған күні 01.02.2024

<http://www.astrin.uz/> сұрау салынған күні 01.02.2024

<https://interconnectedrisks.org/unu-ehs> сұрау салынған күні 03.02.2024

https://www.esa.int/Space_Safety/Clean_Space/How_many_space_debris_objects_are_currently_in_orbit сұрау салынған күні 03.02.2024

Спектрометр для космического телескопа Джеймса Уэбба. URL: <https://www.ama-science.org/proceedings/details/368> сұрау салынған күні 04.02.2024

REFERENCES

Blinnikov S.I., Dolgov A.D. (2019). Kosmologicheskoe uskorenie // *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*. —2019. — Vol. 189. — Pp. 561–602. — DOI: 10.3367/UFNr.2018.10.038469 (in Russian)

Burgess J. Michael Bégué, Damien et al. (2020). Gamma-ray bursts as cool synchrotron sources // *Nature Astronomy*. — 2020. —Vol. 4. — Pp. 174–179. — DOI: 10.1038/s41550-019-0911-z .

Komesh T., Grossan B., Maksut Z., Abdikamalov E., Krugov M., Smoot G.F. (2023). Evolution of the afterglow optical spectral shape of GRB 201015A in the first hour: evidence for dust destruction. // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 2023. — Vol. 520. — Pp. 6104–6110. — DOI: <https://doi.org/10.1093/mnras/stad538>

Logovatskaya E.S. (2022). Arkhitektura i kosmos. Mnogofunktsionalnyi kosmicheskii kompleks (Osvoenie Sputnika Yupitera-Evropy) // *Materialy 57-kh Nauchnykh chtenii, posvyashchennykh*

razrabotke nauchnogo naslediya i razvitiyu idei K.E. Tsiolkovskogo. Chast 2. Kaluga, — 2022. — Pp.102–108.

Marov M.IA., SHEVchenko I.I. (2017). Ekzoplanety. Ekzoplanetologiya. M.; Izhevsk: Institut komp'uternykh issledovaniy. — 2017. — P.138. (in Russ.)

Mészáros P. (2019). Gamma-Ray Bursts: Theoretical Issues and Developments // *Memorie della Società Astronomica Italiana*. — 2019. — Vol. 90. — P.57. — DOI:10.48550/arXiv.1904.10488

Saksonov S.V. (2021). moda na nauku, ili neobkhodimost' populiarizatsii nauki // *Samarskaia Luka: problemy regional'noi i global'noi ekologii*. —2021. —Vol. 30. — No. 1. — Pp. 21–24. (in Russ.)

V.S. Sofronov (1969). The evolution of the pre-planetary cloud and the formation of the Earth and planets. — Moscow.; Nauka. — 1969. — P.243. (in Russ.)

Shomshekova S., Izmailova I., Umirbayeva A., Omarov C. (2022). A method for digitization of archival astroplates of the Fesenkov Astrophysical Institute. *New Astronomy*, — 2022. — V. 977. — P.101881. — doi: <https://doi.org/10.1016/j.newast.2022.101881>.

Saule Shomshekova, Lyudmila Kondratyeva, Chingis Omarov, Ildana Izmailova, Adel Umirbayeva, Svetlana Moshkina (2023). Digital archival spectral data for Seyfert galaxies and their use in conjunction with modern FAI spectral data // *Experimental Astronomy*. — 2023 — V.56. — Pp. 557–568. — <https://doi.org/10.1007/s10686-023-09916-6>.

Shomshekova S.A. (2008). Khalykaralyk astronomia jyly - 2019 // *News of the NAS RK*. — 2008. — No. 4. — Pp. 173–175. (In Kaz.)

<http://www.exoplanet.eu/catalog/> Query date: 09.02.2024.

<https://planeta-aktobe.kz> Query date: 09.02.2024.

<https://vo.fai.kz> Query date: 09.02.2024.

Shestakova L.I., Serebryanskiy A.V., Krugov M.A., Aimanova G.K., and Omarov Ch.T. (2022). Signs of Emissions of Alkali Metals Na I, Li I, and KI During First Minutes After DART Probe Crash on Dimorphos. // *Research Notes of the AAS*. — 2022. — Vol. 6. — No.10. — P.223. —DOI: <https://10.3847/2515-5172/ac9d33>

<https://www.minorplanetcenter.net/> Query date: 01.02.2024

<http://www.astrin.uz/> Query date: 01.02.2024

<https://interconnectedrisks.org/unu-ehs> Query date: 03.02.2024

https://www.esa.int/Space_Safety/Clean_Space/How_many_space_debris_objects_are_currently_in_orbit Query date: 03.02.2024

Spectrometer for James Webb Space Telescope. — URL: <https://www.ama-science.org/proceedings/details/368> Query date: 04.02.2024

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 155–166

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.263>

УДК 541.132

© T.K. Jumadilov^{1,2}, G.T. Dyussebayeva^{1,2*}, Zh.S. Mukataeva²,
J.V. Gražulevicius³, I.S. Saparbekova⁴, 2024

¹A.B. Bekturov Institute of Chemical Sciences JSC, Almaty, Kazakhstan;

²Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan;

³Kaunas University of Technology, Kaunas, Lithuania;

⁴RGP on PVC "Kazakh National Women's Teacher Training University",
Almaty, Kazakhstan.

E-mail: g_gazinovna@mail.ru

FEATURES OF REMOTE INTERACTION BETWEEN HYDROGELS OF POLYMETHACRYLIC ACID AND POLY-2-METHYL-5-VINYLPYRIDINE

Jumadilov Talkybek Kozhatayevich — Doctor of Chemical Sciences, Professor, A.B. Bekturov
Institute of Chemical Sciences JSC

E-mail: jumadilov@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0001-9505-3719>;

Dyussebayeva Gulnur Toktargazinovna — PhD student, Abai Kazakh National Pedagogical
University

E-mail: g_gazinovna@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-2721-997X>;

Mukataeva Zhazira Sagatbekovna — Candidate of Chemical Sciences, associated Professor, Abai
Kazakh National Pedagogical University

E-mail: jazira-1974@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-1584-5810>;

Gražulevicius Juozas Vidas — Full professor, Kaunas University of Technology

E-mail: juozas.grazulevicius@ktu.lt. <https://orcid.org/0000-0002-4408-9727>;

Saparbekova Indira Sailybaevna — Candidate of Chemical Sciences, RGP on PVC "Kazakh
National Women's Teacher Training University"

E-mail: Saparbekova.i@gyzpu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0003-3551-9526>.

Abstract. A key feature of intergel systems is that hydrogels do not interact directly in solution. Acidic and basic hydrogels act remotely within the system, thereby altering the electrochemical properties of the solution (Fazli Wahid, 2020). This work is to study the electrochemical properties of aqueous environments as a result of the remote interaction of hydrophobic hydrogel intergel systems consisting of poly (methacrylic acid) (hPMAC) and poly(2-methyl-5-vinylpyridine) (hP2M5VP). The specific conductivity and the pH dependency of the aqueous environment over time and molar ratio are discussed. That the specific conductivity of the aqueous environment reached its maximum value 24 hours into the experiment for hydrogels with a 2:4 ratio, while the pH value decreased compared to its initial

value. At certain ratios of acidic and basic hydrogels, compared to the original hydrogels, the lowest conductivity values were recorded at ratios of 5:1 and 3:3, where the maximum value was observed. After 8.5 hours of testing, an increase in the conductivity of the aqueous environment was observed at hydrogel ratios of 4:2 and 2:4. The pH value of the environment significantly decreases at a ratio of 4:2. In these intergel systems, the maximum conductivity value almost corresponds to the minimum pH value. In the intergel system hPMAc:hP2M5VP with a hydrogel ratio of 1:5, the conductivity of the environment reached a maximum value of 8.0 after 8.5 hours of remote influence and then decreased to 2.8. The figure shows that in the case of the poly(2-methyl-5-vinylpyridine) hydrogel with a 0:6 ratio, conductivity does not change significantly over time. The pH of the environment decreased from 7 to 6.07 over 8.5 hours. Changes in specific conductivity were observed for all molar ratios of hydrogels. The observed changes in conductivity of hydrogels in the intergel system of poly(methacrylic acid) and poly(2-methyl-5-vinylpyridine) and the formation of oppositely charged and neutralized ions indicate the presence of remote interaction effects between hydrogels. Thus, upon activation, the hydrogel becomes highly ionized. As a result, the electrochemical properties of the solution change, as well as the conformational and sorption properties of macromolecules.

Keywords: hydrogels, remote effect, ion exchange resins, intergel system, specific conductivity, pH value

Conflict of interest: *The authors declare that there is no conflict of interest.*

© Т.К. Джумадилов^{1,2}, Г.Т. Дюсембаева^{1,2*}, Ж.С. Мукатаева²,
Ю.В. Гражулявичюс³,
И.С. Сапарбекова⁴, 2024

¹«Ә.Б.Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ,
Алматы, Қазақстан;

²Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті,
Алматы, Қазақстан;

³Каунас технологиялық университеті, Каунас, Литва;

⁴Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.
E-mail: g_gazinovna@mail.ru

ПОЛИМЕТАКРИЛ ҚЫШҚЫЛЫ МЕН ПОЛИ-2-МЕТИЛ-5- ВИНИЛПИРИДИН ГЕЛЬДЕРІНІҢ ҚАШЫҚТЫҚТАН ӘРЕКЕТТЕСУ ЕРЕКШЕЛІКТЕРІ

Джумадилов Талқыбек Қожатаевич — Химия ғылымдарының докторы, профессор «Ә.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ

E-mail: jumadilov@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0001-9505-3719>;

Дюсембаева Гүлнур Токтаргазиновна — PhD докторант, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті докторанты

E-mail: g_gazinovna@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-2721-997X>;

Мукатаева Жазира Сағатбековна — Химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті

E-mail: jazira-1974@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-1584-5810>;

Гражулявичюс Юозас Видас — Химия ғылымдарының докторы, профессор, Каунас технологиялық университеті, Каунас, Литва

E-mail: juozas.grazulevicius@ktu.lt, <https://orcid.org/0000-0002-4408-9727>;

Сапарбекова Индира Сайлыбаевна — Химия ғылымдарының кандидаты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті

E-mail: Saparbekova.i@gzypu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0003-3551-9526>.

Аннотация. Интергелді жүйелердің басты ерекшелігі, ерітіндідегі гидрогельдердің арасында тікелей әрекеттесудің болмауында. Қышқылдық және негіздік полимерлі гидрогельдер жүйеде қашықтықтан әсер етуі арқылы, ертіндінің электрохимиялық қасиеттерін өзгертеді (Fazli Wahid, 2020). Сирек торланған гидрогельдердің полиметакрил қышқылы (гПМАҚ) мен поли-2-метил-5-винилпиридин (гП2М5ВП) интергелді жүйелерінің қашықтықтан әрекеттесуі нәтижесінде сулы ортаның электрохимиялық қасиеттерін зерттеу. Екі гидрогельдің негізінде құрылған интергелдік жүйенің сулы ортасының меншікті электрөткізгіштігінің және рН көрсеткішінің уақытқа және мольдік қатынастарына тәуелділігі қарастырылды. гПМАҚ:гП2М5ВП гидрогельдері 2:4 қатынастарында сулы ортаның меншікті электрөткізгіштігі 24 сағаттан соң максимум мәнге жетті, ал рН көрсеткіші бастапқы мәнмен салыстырғанда төмендеген. Қышқылдық және негіздік гидрогельдердің белгілі бір арақатынасында бастапқы гидрогельдермен салыстырғанда гПМАҚ:гП2М5ВП жүйесінің 5:1 және 3:3 қатынастарында электрөткізгіштіктің ең төменгі көрсеткіштері тіркеліп, гидрогельдердің ең жоғарғы белсенділік аймақтары байқалады. Зерттеудің 8.5 сағатынан соң гидрогельдердің 2:4 қатынасында сулы ортаның электрөткізгіштігі жоғарылағаны байқалады. Ортаның рН мәні 4:2 қатынасында рН көрсеткіші айтарлықтай төмендегені байқалады. Дәл осы интергелді жүйелерде электрөткізгіштіктің максималды мәні рН минималды мәніне дерлік сәйкес келеді. гПМАҚ: гП2М5ВП интергелді жүйесінде гидрогельдердің 1:5 қатынасында ортаның электрөткізгіштігі қашықтан әсер етудің 8.5 сағатында максимум мәнге 8-ге жетіп, ары қарай уақыт өткен сайын 2.8-ге дейін төмендеді. 0:6 қатынасында поли-2-метил-5-винилпиридин гидрогелі қатысында электрөткізгіштің уақыт өте, аса қатты өзгеріске ұшырамағаны суретте көрсетілген. Ортаның рН көрсеткіші 8.5 сағаттың ішінде 7 көрсеткішінен 6.07-ге түскен. Меншікті электрөткізгіштіктің өзгеретіні гидрогельдердің барлық мольдік қатынастарында байқалды. Зерттелетін гидрогельдердің қашықтан әрекеттесуі интергелді жүйелердің полиметакрил қышқылы мен поли-2-метил-5-винилпиридин гидрогельдерінің электрөткізгіштігінің өзгеруі және қарама-қарсы зарядталған иондар мен бейтарапталған иондар түзуі, гидрогельдер арасында қашықтан әрекеттесуі эффектісінің бар болғанын көрсетеді. Демек, активтену барысында гидрогельдер жоғары ионданған күйге көшеді. Нәтижесінде ерітіндінің электрохимиялық қасиеттерінің өзгеруіне, конформациялық және макромолекулалардың сорбциялық қасиеттерінің өзгеруіне алып келеді.

Түйін сөздер: гидрогельдер, қашықтан әсер ету, иониттер, интергельді жүйе, меншікті электрөткізгіштік, рН көрсеткіші

Мүдделер қақтығысы: Авторлар осы мақалада мүдделер қақтығысы жоқ деп мәлімдемейді.

Қаржыландыру: Зерттеу жұмысы Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі Ғылым комитетінің гранттық қаржыландыру бойынша No.BR18574042 жобасымен қаржыландырылды.

© Т.К. Джумадилов^{1,2}, Г.Т. Дюсембаева^{1,2*}, Ж.С. Мукатаева²,
Ю.В. Гражулявичюс³, И.С. Сапарбекова⁴, 2024

¹АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный педагогический университет имени Абая,
Алматы, Казахстан;

³Каунасский технологический университет, Каунас, Литва;

⁴Казахский национальный женский педагогический университет,
Алматы, Казахстан.

E-mail: g_gazinovna@mail.ru

ОСОБЕННОСТИ ДИСТАНЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГИДРОГЕЛЕЙ ПОЛИМЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ПОЛИ-2- МЕТИЛ-5-ВИНИЛПИРИДИНОМ

Джумадилов Талкыбек Кожатаевич — доктор химических наук, профессор АО «Институт химических наук имени А.Б. Бектурова», Алматы, Казахстан

E-mail: jumadilov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9505-3719>;

Дюсембаева Гульнур Токтаргазиновна — PhD докторант, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

E-mail: g_gazinovna@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2721-997X>;

Мукатаева Жазира Сагатбековна — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

E-mail: jazira-1974@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1584-5810>;

Гражулявичюс Юозас Видас — доктор химических наук, профессор, Каунасский технологический университет, Каунас, Литва

E-mail: juozas.grazulevicius@ktu.lt, <https://orcid.org/0000-0002-4408-9727>;

Сапарбекова Индира Сайлыбаевна — кандидат химических наук, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан

E-mail: Saparbekova.i@gyzpu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3551-9526>.

Аннотация. Ключевой особенностью интергелевых систем является то, что гидрогели не взаимодействуют непосредственно в растворе. Кислотные и основные гидрогели действуют в системе дистанционно, тем самым изменяя электрохимические свойства раствора (Fazli Wahid, 2020). Изучение электрохимических свойств водных сред в результате дистанционного взаимодействия гидрофобных гидрогелевых интергельных систем состоящих из полиметакриловой кислоты (гПМАК) и поли-2-метил-5-винилпиридина (гП2М5ВП). В статье обсуждается удельная электропроводность и

зависимость рН водной среды от времени и мольного соотношения. Удельная электропроводность водной среды достигала максимального значения через 24 часов опыта для гидрогелей с соотношением 2:4, при этом значение рН снижалось по сравнению с исходным значением. При определенных соотношениях кислотных и основных гидрогелей по сравнению с исходными гидрогелями самые низкие значения электропроводности были зафиксированы при соотношении 5:1 и 3:3, где наблюдалась максимальное значение. После 8,5 часов испытаний наблюдается увеличение электропроводности водной среды при соотношении гидрогелей 4:2 и 2:4. Значение рН среды значительно снижается при соотношении 4:2. В этих межгелевых системах максимальное значение электропроводности практически соответствует минимальному значению рН. В интергелевой системе гПМАК:гП2М5ВП с соотношением гидрогелей 1:5 электропроводность среды достигла максимального значения 8.0 через 8,5ч дистанционного воздействия и далее снизилась до 2,8. В случае поли-2-метил-5-винилпиридинового гидрогеля с соотношением 0:6 электропроводность существенно не изменяется со временем. рН среды снизился с 7 до 6,07 за 8,5 часа. Изменения удельной электропроводности наблюдались для всех мольных соотношениях гидрогелей. В результате изученных дистанционных взаимодействиях между гидрогелями изменение электропроводности гидрогелей в интергелевой системе полиметакриловой кислоты и поли-2-метил-5-винилпиридина и образование разноименно заряженных и нейтрализованных ионов свидетельствует о наличии эффектов дистанционного взаимодействия между гидрогелями. Таким образом, при активации гидрогель становится высокоионизированным. В результате изменяются электрохимические свойства раствора, а также конформационные и сорбционные свойства макромолекул.

Ключевые слова: гидрогели, эффект дальнего действия, иониты, интергелевая система, удельная электропроводность, показатель рН

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Кіріспе

Интергель жүйелерін зерттеуге арналған жұмыстарда гидрогельдердің өзара активтенуі электрохимиялық, көлемдік гравиметриялық қасиеттердің өзгеруіне айтарлықтай әсер ететінін көрсетті (Yskak, 2023). Алдыңғы жұмыстарда гидрогельдердің селективтілігін болжау үшін интергель жүйесіндегі полимердің өзара активтенуінің әсері мен әрекеттесуші гидрогелдердің қашықтықтан әрекеттесу кезінде өзара әрекеттесу нәтижесінде әлдеқайда белсенді күйге ауысатыны болжамдалды (Yan Yin, 2023). Зерттеулердің нәтижесінде алынған деректер қышқылдар мен негіздік гидрогельдерге негізделген интергель жүйелері әртүрлі иондармен иондық және координациялық механизмдер арқылы қашықтан әрекеттесуге қабілетті екендігін көрсетті (Can Zhou, 2022). Сондықтан, гидрогель бет-

тесу арқылы толық әрекеттесе алмайтындықтан олардың өзара алыстан әрекеттесу мүмкіндігін зерттеу мақсат етіп қойылды (Leimarakram Sophia Devi, 2023). Электрөткізгіштік, рН-метр және гравиметрия әдістерімен өзара белсендірілу мүмкіндіктерін анықтау мақсатында полиметакрил қышқыл гидrogелі (ПМАҚ) және поли-2-метил-5-винилпиридин гидrogелі (П2М5ВП) интергелді жүйесінің сулы ерітінділерінің электрохимиялық қасиеттері зерттелді (Jumadilov, 2023). Молекулалары химиялық жолмен сирек торланған гидrogельдер әртүрлі әдістермен алынатын ионалмастырғыш шайырларға жатады. Бұл материалдардың құрылымында қоршаған ортамен иондарын алмастыра алатын функционалдық топтары болады (Jumadilov, 2021–2024).

Эксперименттік бөлім

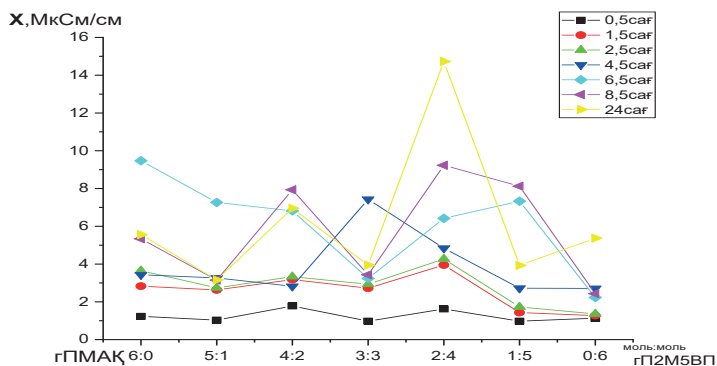
Зерттеуге қажетті қондырғылар: Сулы ортаның электроөткізгіштігін және рН өлшеу үшін кондуктометр МАРК 603 (Ресей) және рН-метр Metrohm 827 рН-Lab (Швейцария) қондырғылары пайдаланылды.

Материалдар: Тігуші агент N,N-метилен-бис-акриламид және $K_2S_2O_8$, $Na_2S_2O_3$ тотығу-тотықсыздану жүйесі қатысында полиметакрил қышқылының гидrogелдері синтезделініп алынды. Зерттеу дистилденген су ортасында және бөлме температурасында жүргізілді.

Зерттеу объектілері: Гидрогельдер негізінде интергелді жұп құрау үшін гПМАҚ: гП2М5ВП гидrogельдері қолданылды. Барлық жүргізілген тәжірибелік жұмыстар бөлме температурасында жүргізілді. Интергелді жүйені зерттеуді келесідей түрде жүзеге асырылды: салмағы өлшеніп алынған әрбір құрғақ гидrogель жеке шыны сүзгіштерге бөлініп ретпен салынды. Сүзгіштердің кеуектері гидrogелдердің дисперсиясы үшін өтімсіз, ал төмен молекулалық иондар мен молекулалар үшін өтімді болып келеді. Әрбір гидrogель салынған бюкстер дистилденген су құйылған стақандарға салынады. Әр түрлі уақыт интервалында сулы ерітіндінің электрохимиялық өзгерістері (меншікті электрөткізгіштік, рН) өлшенді. Гель орналасқан сұйықтықтың рН шамасы мен электрөткізгіштігін стақаннан гидrogель салынған бюксты алғаннан кейін анықтайды.

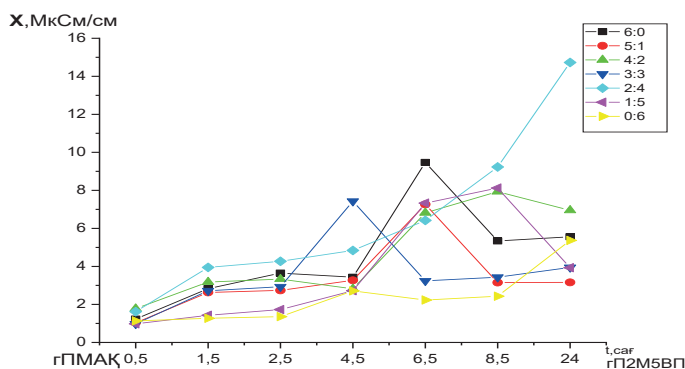
Нәтижелер және оларды талқылау

Түрлі функционалды топтары бар интергелді жүйелерге арналған зерттеу жұмыстарының нәтижесі гидrogельдердің өзара активтелуі олардың әртүрлі өзгерістерге ұшырайтындығын көрсетіп отыр. Сулы ортада интергелді жүйенің болуы түрлі процестердің жүруіне себепші болады. Поли-2-метил-5-винилпиридин – пиридин сақиналары бар синтетикалық полимер. Пиридин сақиналары оған ерекше химиялық қасиеттерді, соның ішінде металдармен күрделі болу қабілетін және жоғары химиялық тұрақтылықты береді. Пиридин сақинасының болуына байланысты поли-2-метил-5-винилпиридин әртүрлі заттармен әрекеттесу қабілетіне ие (María Dolores Ramírez-Alba, 2024). Әр түрлі қатынаста алынған интергелді жүйесінің меншікті электрөткізгіштігінің сулы ортадағы уақытқа және гидrogельдердің мольдік қатынастарына тәуелділігі 1-суретте көрсетілген.



Сурет. 1. гПМАҚ– гП2М5ВР интергелді жүйесінің меншікті электрөткізгіштігінің сулы ортадағы гидрогельдердің мольдік қатынастарына тәуелділігі.

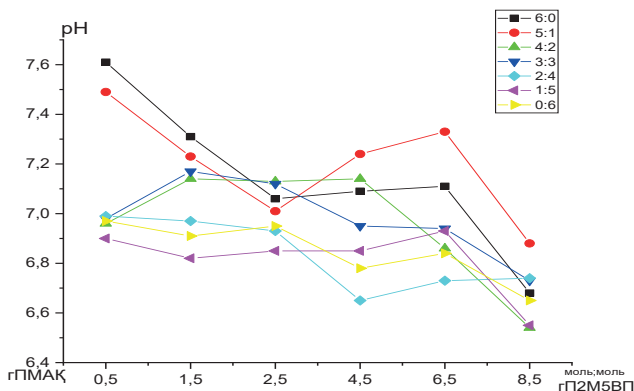
Уақыт өткен сайын гПМАҚ:гП2М5ВР жүйесінің әртүрлі қатынастар үшін бастапқы электроөткізгіштің ең жоғарғы нүктелерін, гидрогельдердің сумен жанасу уақыты ұлғайған сайын максималды және минималды электроөткізгіштік аймақтары байқалады. Түрлі мольдік қатынаста электроөткізгіштің мәні әр түрлі мәнге ие болады. Зерттеудің 24-ші сағатында ПМАҚ: П2М5ВР гидрогельдері 2:4 қатынасында сулы ортаның меншікті электрөткізгіштіктің мәнінің лезде өсуін, гидрогельдердің қашықтықтан бір-біріне әсер етуі нәтижесінде, қосымша ОН-иондарының пайда болуы нәтижесінде деп түсіндіруге болады. Себебі, ұзақ мерзімді әрекеттесудің нәтижесінде полиметакрил қышқылы мен поли-2-метил-5-винилпиридин гельдері ерітіндідегі зарядталған бөлшектердің жоғары концентрациясын көрсетеді. Қышқылдық және негіздік гидрогельдердің белгілі бір арақатынасында бастапқы гидрогельдермен салыстырғанда гПМАҚ:гП2М5ВР жүйесінің 5:1 және 3:3 қатынастарында электроөткізгіштіктің ең төменгі көрсеткіштері тіркеліп, гидрогельдердің ең жоғарғы белсенділік аймақтары байқалады.



Сурет. 2. гПМАҚ– гП2М5ВР интергелді жүйесінің меншікті электрөткізгіштігінің сулы ортадағы уақытқа тәуелділігі.

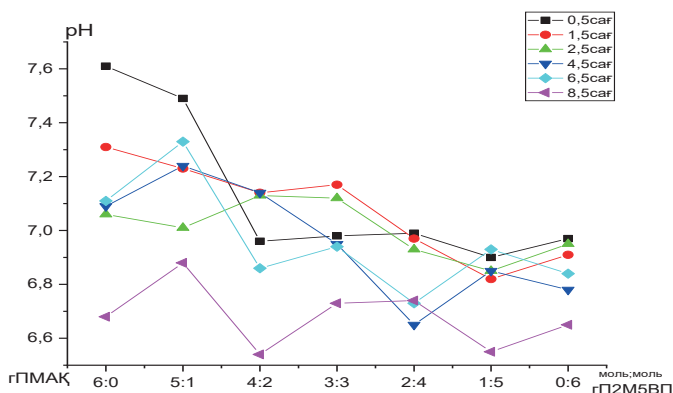
8.5 сағаттан соң гидрогельдердің 2:4 қатынасында сулы ортаның электроөткізгіштігі жоғарлағаны байқалады, мұндай құбылысты, гидрогельдер өзара активтелгенін және жоғары ионданған күйге көшкенін қашықтан әсер ету кезінде болады деп тұжырымдасақ болады. Диссоциациялану константасы жоғары карбоксил тобы бар гидрогельдер қашықтан өзара әсер еткенде, ортаның электроөткізгіштік мәні жоғарылайды. Карбонилді топтар алдымен ионданады, кейін карбоксилат анион $-\text{COO}^-$ мен H^+ сутек ионына диссоциацияланады. Қашықтықтан әсер ету кезінде гидрогельдер өзара активтелгенің және жоғары ионданған күйге көшкенін байқауға болады. Сол себепті диссоциация процесінде сулы ортада протон иондары түзіледі.

Суреттен байқағанымыздай гПМАҚ:гП2М5ВП жүйесінің 5:1 және 3:3 қатынастарында 8.5 сағаттан соң, электроөткізгіштіктігі төмендейді. Мұндай өзгерісті, карбоксил топтарының диссоциациялануын тежейтін және гидрогель иондарының еркін қозғалуына бөгет жасайтын комплекстердің түзілуімен түсіндіруге болады. гПМАҚ: гП2М5ВП интергельді жүйесінде гидрогельдердің 1:5 қатынасында ортаның электроөткізгіштігі қашықтан әсер етудің 8.5 сағатқа жеткенде, максимум мәнге 8-ге жетіп, ары қарай уақыт өткен сайын 2.8-ге дейін төмендеді. 0:6 қатынасында поли-2-метил-5-винилпиридин гидрогелі қатысында электроөткізгіштің уақыт өте, аса қатты өзгеріске ұшырамағаны суретте көрсетілген, яғни ерітіндіде жаңа иондардың пайда болуы жүрмегендігін болжауға болады. Сулы ортада карбоксил топтары мен су молекулаларының H^+ , OH^- иондарына диссоциациялану барысында түзілетін сутек иондарының қосылуы кезінде поли-2-метил-5-винилпиридин катионды гидрогелі ионданады. Оң зарядтардың жалпы мөлшері әрекеттесулер кезінде сулы ортада азаяды. Гидрогел бөлшектерінің өлшемдері үлкен болғандықтан сулы ортада қозғала алмайды. Интергелді жүйеде екі гелдің белгілі бір қатынастарында электроөткізгіштіктің жоғары шамалары карбонилді топтардың диссоциациясы протонның азот гетероатомдарына ассоциациялану процесінен басым болатынын көрсетеді. Бұл винилпиридин азот атомдарымен сутек иондарының ассоциациялануының төмендеуінен болуы мүмкін. Мұның себебі түйінаралық тізбектердегі буындардың конформациялық өзгерістері болуы мүмкін. Зарядталған NH^+ топтардың белгілі концентрацияларында полимерлік шумақтардың жиырылуы мен протонның байланыстыруының азаюына әкелетін $\geq \text{N} \dots \text{H}^+ \dots \text{N} \equiv$ типтегі ішкі молекулалық торлар түзілуі мүмкін. Полиметакрил қышқылы мен поли-2-метил-5-винилпиридин гелдерінің интергельді жүйесі ерітінділерінің рН шамасының уақытқа тәуелділігі 3-ші суретте келтірілген.



Сурет. 3. гПМАА:гП2М5ВПинтергелді жүйесінің рН сулы ортадағы уақытқа тәуелділігі

Интергелді жүйенің қатысында сирек торланған полиметакрил қышқылы мен поли-2-метил-5-винилпиридин полимерлік торларының сулы ортада сутек иондары концентрациясының өзгерісі байқалады. 5:1 қатынасында сулы ортаның рН мәнінің 0.5сағатта максимум мәнге 7.9-ке жетіп, ары қарай рН көрсеткіші 2.5 сағатта төмендеп, 6.5 сағатқа жеткенде қайта көтерілгенің байқауымызға болады. Көрсетілген нәтижелер полиқышқыл басым болғанда ерітіндінің бастапқы уақытта (1 қисық) жүйеде рН шамасы жоғары болатынын көрсетеді, диссоциация кезінде H^+ ионының бөліну жылдамдығы полинегізге қарағанда полиқышқылда (1,2,3 қисығы) жоғары. Карбоксил $COOH$ тобының диссоциацияда бөліну жылдамдығы төмендеп, соның нәтижесінде рН ортасы өседі. Сол себепті, H^+ ионының концентрациясы екі процесстің тепе-теңдігін анықтап отырады. Ерітіндінің рН шамасы гПМАА:гП2М5ВП 4:2 қатынасында минимум арқылы өте отыра поливинилпиридин үлесінің артуымен біртіндеп түсе бастайды.4-суретте гПМАА:гП2М5ВП интергелді жүйесінің рН шамасының гидрогельдердің әр түрлі мольдік қатынастарына тәуелділігі бейнеленген.



Сурет. 4. гПМАА:гП2М5ВПинтергелді жүйесінің рН сулы ортадағы уақытқа тәуелділігі

Суретте, уақытқа қатысты гидрогельдердің барлық қатынастары үшін рН шамасының өзгергені байқалады. Зерттеудің рН мәні 0.5 сағат уақыт өткен кезде, 6:0 қатысынасында рН көрсеткішінің мәні максималды өскен, ал кейін уақыт өте келе біртіндеп рН көрсеткіші төмендегені байқалады, мұнда рН көрсеткішінің жалпы тенденциядан ауытқу байқалады. Бұл тәжірибенің басында күрделірек химиялық процестің болуы мүмкін екенін көрсетеді. Мүмкін, бұл кезде полимер тізбектерінің диссоциациялануымен байланысты әсерлер ортаның рН-ына толық әсер етпеуі немесе ерітіндінің рН-ын уақытша тұрақтандыратыны ионалмасу орын алуы мүмкін. 2:4 қатынасында сулы ортаның рН мәнінің 4.5 сағатта төмендеуі сутегі иондарының концентрациясының жоғарылауын көрсетеді. Интергелді жүйе үшін сулы ортада сутектің төмен концентрациялары гидрогельдердің 4:2 және 1:5 қатынастарында байқалады, бұл деректер тәжірибе жүзінде электрөткізгіштік бойынша нәтижелермен сәйкес келеді. Зерттеудің 8.5-сағатында, протондардың концентрациясы төмен болғаны гидрогельдердің 3:3 қатынасында байқалады, бұл молекулалық ассоциаттардың ыдырауымен түсіндіріледі. 0:6 қатынасында поли-2-метил-5-винилпиридин гидрогелі қатысында ортаның рН көрсеткіші 8.5 сағаттың ішінде 7 көрсеткішінен 6.07-ге түскенің байқай аламыз.

Қорытынды

Зерттеулердің нәтижесінде, меншікті электрөткізгіштіктің өзгеретіні гидрогельдердің барлық мольдік қатынастарында байқалды. Зерттелетін гидрогельдердің қашықтан әрекеттесуі интергелді жүйелердің полиметакрил қышқылы мен поли-2-метил-5-винилпиридин гидрогельдерінің электрөткізгіштігінің өзгеруі және қарама-қарсы зарядталған иондар мен бейтарапталған иондар түзуі, гидрогельдер арасында қашықтан әрекеттесу эффектісінің бар болғанын көрсетеді. Демек, активтену барысында гидрогельдер жоғары ионданған күйге көшеді. Нәтижесінде ерітіндінің электрохимиялық қасиеттерінің өзгеруіне, конформациялық және макромолекулалардың сорбциялық қасиеттерінің өзгеруіне алып келеді.

ӘДЕБИЕТТЕР

- Fazli Wahid, Xiang-Jun Zhao, Shi-Ru Jia, He Bai, Cheng Zhong (2020). Nanocomposite hydrogels as multifunctional systems for biomedical applications: Current state perspectives // *Composites Part B: Engineering* — 2020. — 200. — 108208. — <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.108208>
- T.K. Jumadilov, L.K. Yskak, N.O. Myrzakhmetova (2023). FEATURES OF SORPTION OF CERIUМ IONS BY THE INTERPOLYMER SYSTEM BASED ON AMBERLITE IR120 AND AB-17-8 ION-EXCHANGE RESIN // NEWS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY — 2023. — 1. — 454. — 37–46. — <https://doi.org/10.32014/2023.2518-1491.146>
- Yan Yin, Qingzhuo Gu, Xuebo Liu, Fuguo Liu (2023). David Julian McClements, Double network hydrogels: Design, fabrication, and application in biomedicines and foods // *Advances in Colloid and Interface Science*. — 2023. — 320. — 102999. — <https://doi.org/10.1016/j.cis.2023.102999>
- Can Zhou, Tingting Wu, Xinmin Xie, Guoxi Song, Xintao Ma, Qiyu Mu, Zixu Huang, Xiguang Liu, Changmei Sun, Wenlong Xu. (2022). Advances and challenges in conductive hydrogels: From properties to applications // *European Polymer Journal*. — 2022. — 177. — 111454. — <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2022.111454>

Leimapokpam Sophia Devi, Roy Paily Palathinkal, Ashok Kumar Dasmahapatra. (2024). Preparation of cross-linked PANI/PVA conductive hydrogels for electrochemical energy storage and sensing applications // *Polymer*. — 2024. — 293. — 126673. — <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2024.126673>

Jumadilov T.K., Khimersen Kh., Haponiuk J.T. (2023). Influence of Initial States on the Electrochemical Behavior of Industrial Ionites in the Interpolymer System Lewatit CNPLF-AB-17-8 // *Advanced Polymer Structures: Chemistry for Engineering Applications*. — 2023. — 83–95. — <https://doi.org/10.1201/9781003352181-9>

Jumadilov T.K., Khimersen Kh., Haponiuk J.T., Totkhuskyzy B. (2024). Enhanced Lutetium Ion Sorption from Aqueous Solutions Using Activated Ion Exchangers // *Polymers*. — 2024. — 16. — 220. — <https://doi.org/10.3390/polym16020220>

Jumadilov T.K., Totkhuskyzy B., Malimbayeva Z., Kondaurov R., Imangazy A.M., Khimersen K., Grazulevicius J.V. (2021). Impact of Neodymium and Scandium Ionic Radii on Sorption Dynamics of Amberlite IR120 and AB-17-8 Remote Interaction // *Materials* — 2021. — 14. — 5402. — <https://doi.org/10.3390/ma141854022>

Jumadilov T.K., Imangazy A.M., Khimersen Kh., Haponiuk J.T. (2023). Remote interaction effect of industrial ion exchangers on the electrochemical and sorption equilibrium in scandium sulfate solution // *Polymer Bulletin*. — 2023. — 81. — 1–19. — <https://doi.org/10.1007/s00289-023-04800-x>

Utesheva A.A., Jumadilov T.K., Grazulevicius J.V. (2022). Self-organization of interpolymer systems with high sorption activity to uranyl ions // *Engineering Journal of Satbayev University*. — 2022. — 144(2). — 22–27. — <https://doi.org/10.51301/ejsu.2022.i2.04>

María Dolores Ramírez-Alba, Marta Molins-Martínez, Jose García-Torres, Michela Romanini, Roberto Macovez, Maria M. Pérez-Madrigal, Carlos Alemán (2024). pH and electrically responsive hydrogels with adhesive property // *Reactive and Functional Polymers*. — 2024. — 196. — 105841. — <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2024.105841>

REFERENCES

Fazli Wahid, Xiang-Jun Zhao, Shi-Ru Jia, He Bai, Cheng Zhong (2020). Nanocomposite hydrogels as multifunctional systems for biomedical applications: Current state and perspectives // *Composites Part B: Engineering*. — 2020. — 200. — 108208. — <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.108208>

T.K. Jumadilov, L.K. Yskak, N.O. Myrzakhmetova (2023). FEATURES OF SORPTION OF CERIUM IONS BY THE INTERPOLYMER SYSTEM BASED ON AMBERLITE IR120 AND AB-17-8 ION-EXCHANGE RESIN // NEWS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY — 2023. — 1. — 454. — 37–46. — <https://doi.org/10.32014/2023.2518-1491.146>

Yan Yin, Qingzhuo Gu, Xuebo Liu, Fuguo Liu (2023). David Julian McClements, Double network hydrogels: Design, fabrication, and application in biomedicines and foods // *Advances in Colloid and Interface Science*. — 2023. — 320. — 102999. — <https://doi.org/10.1016/j.cis.2023.102999>

Can Zhou, Tingting Wu, Xinmin Xie, Guoxi Song, Xintao Ma, Qiyu Mu, Zixu Huang, Xiguang Liu, Changmei Sun, Wenlong Xu (2022). Advances and challenges in conductive hydrogels: From properties to applications // *European Polymer Journal*. — 2022. — 177. — 111454. — <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2022.111454>

Leimapokpam Sophia Devi, Roy Paily Palathinkal, Ashok Kumar Dasmahapatra. (2024). Preparation of cross-linked PANI/PVA conductive hydrogels for electrochemical energy storage and sensing applications // *Polymer*. — 2024. — 293. — 126673. — <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2024.126673>

Jumadilov T.K., Khimersen Kh., Haponiuk J.T. (2023). Influence of Initial States on the Electrochemical Behavior of Industrial Ionites in the Interpolymer System Lewatit CNPLF-AB-17-8 // *Advanced Polymer Structures: Chemistry for Engineering Applications*. — 2023. — 83–95. — <https://doi.org/10.1201/9781003352181-9>

Jumadilov T.K., Khimersen Kh., Haponiuk J.T., Totkhuskyzy B. (2024). Enhanced Lutetium Ion

Sorption from Aqueous Solutions Using Activated Ion Exchangers // *Polymers*. — 2024. — 16. — 220. — <https://doi.org/10.3390/polym16020220>

Jumadilov T.K, Totkhuskyzy B., Malimbayeva Z., Kondaurov R., Imangazy A.M, Khimersen K., Grazulevicius J.V. (2021). Impact of Neodymium and Scandium Ionic Radii on Sorption Dynamics of Amberlite IR120 and AB-17-8 Remote Interaction // *Materials*. — 2021. — 14. — 5402. — <https://doi.org/10.3390/ma141854022>

Jumadilov T. K., Imangazy A.M., Khimersen Kh., Haponiuk J.T. (2023). Remote interaction effect of industrial ion exchangers on the electrochemical and sorption equilibrium in scandium sulfate solution // *Polymer Bulletin*. — 2023. — 81. — 1–19. — <https://doi.org/10.1007/s00289-023-04800-x>

Utesheva A.A., Jumadilov T.K., Grazulevicius J.V. (2022). Self-organization of interpolymer systems with high sorption activity to uranyl ions // *Engineering Journal of Satbayev University*. — 2022. — 144(2). — 22–27. — <https://doi.org/10.51301/ejsu.2022.i2.04>

María Dolores Ramírez-Alba, Marta Molins-Martínez, Jose García-Torres, Michela Romanini, Roberto Macovez, María M. Pérez-Madrigal, Carlos Alemán. (2024). pH and electrically responsive hydrogels with adhesive property // *Reactive and Functional Polymers*. — 2024. — 196. — 105841. — <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2024.105841>

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 167–185

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.264>

UDC 31.25.19:615.453

© **A. Kappasuly**^{1,2}, **D. Makhayeva**^{1*}, **Zh. Kozhantayeva**¹, **G. Irmukhametova**¹,
2024

¹ al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

²Scientific and Production Center of Environmental and Industrial Biotechnology,
Astana, Kazakhstan.

E-mail: danelya.1993@gmail.com

PREPARATION OF METHACRYLATED ALGINIC ACID FOR THE DEVELOPMENT OF OPHTHALMOLOGICAL DRUG DELIVERY SYSTEMS

A. Kappasuly — Master of Engineering Science, junior researcher, Scientific and Production Center of Environmental and Industrial Biotechnology, Astana, Kazakhstan

E-mail: kappasuly@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-6205-7721>;

D. Makhayeva — PhD, senior researcher, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: danelya.1993@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1250-9587>;

Zh. Kozhantayeva — student in the doctor's program at the al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: k.j.e.94_zk@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0830-0162>;

G. Irmukhametova — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail galiya.irm@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1264-7974>.

Abstract. In recent years, there has been a growing interest among researchers in developing mucoadhesive dosage forms utilizing natural polymers due to their biocompatibility, biodegradability, and non-toxic nature. Polymer hydrogels, particularly, are gaining traction in ocular therapy for enhancing drug delivery efficiency and safeguarding the cornea from damage. These systems must possess mucoadhesive properties to adhere to the eye's mucous membrane effectively. This study focuses on creating a prototype of eye drops utilizing a modified natural polymer, alginic acid, and exploring its main physicochemical characteristics and potential practical applications in ophthalmology. The chemical modification of alginic acid with glycidylmethacrylate was undertaken, and spectroscopic analyses, including IR and NMR spectroscopy, revealed signals indicative of the glycidylmethacrylate double bond within the methacrylated alginic acid, with no signals associated with the epoxy group. The physicochemical properties of polymer solutions were assessed using UV-spectroscopy and viscometry. It was observed that the viscosity of methacrylated alginic acid increases with higher

concentrations of glycidylmethacrylate in the initial mixture and decreasing temperature, with an optimal effective polymer solution concentration determined to be 1 w.%. Furthermore, prototypes of dosage forms in the form of eye drops were successfully developed for the first time using the synthesized polymers. Their mucoadhesive properties were evaluated through in vitro studies on the cornea and eyelids of sheep eyes. This comprehensive approach provides insights into the potential application of modified natural polymers, such as methacrylated alginate, in ophthalmic formulations, highlighting their suitability for ocular drug delivery systems with enhanced mucoadhesive properties.

Keywords: alginate, glycidylmethacrylate, chemical modification, mucoadhesion, ophthalmic dosage forms

© Ә. Қаппасұлы^{1,2}, Д. Махаева^{1*}, Ж. Қожантаева¹, Ғ. Ирмухаметова¹, 2024

¹әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

²Экологиялық және өндірістік биотехнология ғылыми-өндірістік орталығы, Астана, Қазақстан.

E-mail: danelya.1993@gmail.com

ДӘРІЛІК ЗАТТАРДЫ ЖЕТКІЗУДІҢ ОФТАЛЬМОЛОГИЯЛЫҚ ЖҮЙЕЛЕРІН ӘЗІРЛЕУ ҮШІН МЕТАКРИЛДЕНГЕН АЛЬГИН ҚЫШҚЫЛЫН АЛУ

Қаппасұлы Ә. — Техника ғылымдарының магистрі, кіші ғылыми қызметкер, Экологиялық және өндірістік биотехнология ғылыми-өндірістік орталығы, Астана, Қазақстан

E-mail: kappasuly@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-6205-7721>;

Махаева Д.Н. — PhD, аға ғылыми қызметкер, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

E-mail: danelya.1993@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1250-9587>;

Қожантаева Ж. — әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті докторанты, Алматы, Қазақстан.

E-mail: k.j.e.94_zk@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0830-0162>;

Ирмухаметова Ғ.С. — х. ғ. к., қауымдастырылған профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

E-mail: galiya.irm@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1264-7974>.

Аннотация. Зерттеушілерді табиғи полимерлер негізіндегі шырышты адгезиялық дәрілік формаларды жасау бағыты көбірек қызықтыруда, өйткені олар биоүйлесімді, биологиялық ыдырайтын және улы емес. Осы қасиеттерінің арқасында биополимерлер офтальмологиялық дәрілік формалары ретінде жақсы қалыптасқан. Полимерлі гидрогельдер жеткізілетін препараттардың тиімділігін арттыру мақсатында және көз қабығын зақымданудан қорғау үшін көз терапиясында қолданылады. Сонымен қатар, мұндай жүйелер көздің шырышты қабатында ұзақ уақыт сақталу үшін шырышты жабысқақ қасиеттерге ие болуы керек. Шырышты қабықтың жоғары өткізгіштігі дәрілік формалардың басқа түрлерімен салыстырғанда шырышты адгезиялық дәрілік форманың

мүмкіндіктерін кеңейтеді. Бұл жұмыс модификацияланған табиғи полимер – альгин қышқылы негізінде көз тамшылары түріндегі дәрілік форманың прототипін жасауға, негізгі физика-химиялық сипаттамаларын анықтауға, сондай-ақ офтальмологияда алынған үлгілерді тәжірибеде қолданудың перспективалық аспектілерін анықтауға арналған. Зерттеудің негізгі физика-химиялық әдістері ретінде жұмыста гравиметрия, вискозиметрия, ¹H-ЯМР-спектроскопия, ИҚ-спектроскопия, УК-спектрофотометрия, дифференциалды-сканерлеу калориметриясы және *in vitro* ұстау қабілетін зерттеу қолданылады. ИҚ -, ЯМР спектроскопиясының нәтижелері бойынша метакрилденген альгин қышқылының спектрлерінде глицидилметакрилаттың қос байланыс сигналдары бар және эпоксидті топқа жататын сигналдар жоқ екендігі анықталды. УК-спектроскопия және вискозиметрия әдістері арқылы модифицирленген полимерлер ерітіндісінің физика-химиялық қасиеттері зерттелді. Бастапқы қоспадағы глицидилметакрилат концентрациясының жоғарылауымен және температураның төмендеуімен метакрилденген альгин қышқылы ерітінділерінің тұтқырлығы жоғарылайтыны анықталды. Модификацияланған үлгілердің оптикалық тығыздығын зерттеу нәтижелері бойынша, метакрилденген альгин қышқылы ерітінділерінің концентрациясы 1 масс.% дейін оңтайлы және мөлдір екені анықталды. Алғаш рет көз тамшылары түріндегі альгин қышқылының модификацияланған үлгілері негізінде дәрілік формалардың прототиптері алынды және олардың мукоадгезиялық қасиеттері *in vitro* ұстау қабілетін зерттеу әдісімен қой көзінің қабығы мен қабағына зерттеу жүргізіліп сыналды.

Түйін сөздер: альгин қышқылы, глицидилметакрилат, химиялық модификация, мукоадгезия, офтальмологиялық дәрілік формалар

© А. Каппасулы^{1,2}, Д.Н. Махаева^{1*}, Ж. Кожантаева¹,
Г.С. Ирмухаметова¹, 2024

¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

²Научно-производственный центр экологической и промышленной

биотехнологии, Астана, Казахстан.

E-mail: danelya.1993@gmail.com

ПОЛУЧЕНИЕ МЕТАКРИЛИРОВАННОЙ АЛЬГИНОВОЙ КИСЛОТЫ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ОФТАЛЬМОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

Каппасулы А. — магистр технических наук, младший научный сотрудник, Научно-производственный центр экологической и промышленной биотехнологии, Астана, Казахстан
E-mail: kappasuly@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-6205-7721>;

Махаева Д.Н. — PhD, старший научный сотрудник, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан
E-mail: danelya.1993@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1250-9587>;

Кожантаева Ж. — докторант, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: k.j.e.94_zk@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0830-0162>;

Ирмухаметова Г.С. — к.х.н., ассоциированный профессор, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail galiya.irm@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1264-7974>.

Аннотация. Исследователей все больше привлекает направление создания мукоадгезивных лекарственных форм на основе природных полимеров, так как они являются биосовместимыми, биоразлагаемыми и нетоксичными. Благодаря этим свойствам биополимеры хорошо зарекомендовали себя в качестве глазных лекарственных форм. Полимерные гидрогели используются в глазной терапии для повышения эффективности доставляемых лекарственных веществ и защиты роговицы глаза от повреждений. При этом такие системы должны обладать мукоадгезивными свойствами для удерживания на слизистой оболочке глаза длительное время. Высокая проницаемость слизистой оболочки расширяет возможности мукоадгезивной лекарственной формы по сравнению с другими видами лекарственных форм. Данная работа посвящена созданию прототипа лекарственной формы в виде глазных капель на основе модифицированного природного полимера – альгиновой кислоты (АК), определению основных физико-химических характеристик, а также выявлению перспективных сторон практического применения полученных образцов в офтальмологии. В качестве основных физико-химических методов исследования в работе использованы гравиметрия, вискозиметрия, ¹H-ЯМР-спектроскопия, ИК-спектроскопия, УФ-спектрофотометрия, дифференциально-сканирующая калориметрия и *in vitro* исследования удерживающей способности. В работе осуществлена химическая модификация альгиновой кислоты глицидилметакрилатом. По результатам ИК-, ЯМР-спектроскопии установлено, что на спектрах метакрилированной альгиновой кислоты присутствуют сигналы двойной связи глицидилметакрилата и отсутствуют сигналы, принадлежащие эпоксидной группе. Изучены физико-химические свойства растворов модифицированного полимера методами УФ-спектроскопии и вискозиметрии. Установлено, что с увеличением концентрации глицидилметакрилата в исходной смеси и понижением температуры повышается вязкость растворов метакрилированной альгиновой кислоты. По результатам исследования оптической плотности модифицированных образцов было выявлено, что концентрация растворов метакрилированной альгиновой кислоты до 1 масс. % является оптимальной с точки зрения прозрачности. Впервые получены прототипы лекарственных форм на основе модифицированных образцов альгиновой кислоты в виде глазных капель и изучены их мукоадгезивные свойства на роговице и веках овечьих глаз *in vitro*.

Ключевые слова: геомагнитные аномалии, глубинные разломы, отрицательные, положительные, вертикальная компонента

Введение

Создание мукоадгезивных лекарственных форм различного типа является в настоящее время одним из перспективных и эффективных способов решения вопросов контролируемой доставки лекарственных веществ (Laffleur, 2014: 591). Природные полимеры, в частности полисахариды и белки, обладают такими свойствами, как низкая токсичность, биосовместимость, биodeградируемость и др (Zelikin et al, 2016: 997). Благодаря этим свойствам (Laffleur & Dachs, 2015: 1211) биополимеры хорошо зарекомендовали себя в качестве глазных лекарственных форм. Применение механизмов мукоадгезии при разработке офтальмологических лекарственных форм является перспективным направлением. Так как прилипание на слизистой поверхности глаза ведет к увеличению времени контакта препарата в месте нанесения и, следовательно, снижается общая вводимая доза препарата как при системном, так и при местном введении. Высокая проницаемость слизистой оболочки расширяет возможности мукоадгезивной лекарственной формы по сравнению с другими видами лекарственных форм (Абилова и др., 2019: 21).

Альгиновая кислота – природный полимер, получаемый из бурых водорослей, который обладает гелеобразующими свойствами под воздействием двухвалентных катионов металлов. Это свойство позволяет инкапсулировать лекарства в гелевую матрицу, обеспечивая контролируемое высвобождение. Гелевая матрица может замедлять диффузию лекарств, что приводит к устойчивому и контролируемому высвобождению в течение длительного периода времени (Guo et al, 2020: 628). Альгиновая кислота может «защищать» лекарственные препараты, чувствительные к таким параметрам, как pH, температура и ферментативное воздействие. Инкапсулируя препараты в гидрогелевую матрицу, альгиновая кислота защищает их от деградации и повышает их стабильность (Bennacef et al, 2021: 106782).

Альгинаты широко используются в промышленности для регулирования вязкости, в качестве стабилизаторов или загустителей, способны создавать пленки и могут применяться в качестве связующих материалов (Savić Gajić et al, 2023: 2592). Альгинаты используются в основном в пищевой промышленности благодаря их способности образовывать термостабильные гели, в текстильной печати, в производстве керамики, сварочной проволоки и в фармацевтической промышленности для производства бинтов и стоматологических слепочных материалов, а также для инкапсуляции клеток и ферментов. Инкапсулированные клетки защищены от механического воздействия, а метаболиты и питательные вещества проникают через полупроницаемую капсулу. Новые материалы, такие как полиуретаны на основе альгината, обладают превосходными механическими свойствами и могут быть использованы в сосудистых системах (Lee & Mooney, 2012: 106). Они могут быть использованы для инкапсуляции клеток и лекарств. Область применения альгиновой кислоты очень широка, и можно расширить ее за счет модификации альгиновой кислоты. Наличие карбоксильных групп

делает альгиновую кислоту реакционноспособной, по сравнению с другими полисахаридами. Модификация карбоксильных групп позволяет получить новые производные альгиновой кислоты.

Целью работы является метакрирование альгиновой кислоты глицидилметакрилатом с целью получения мукоадгезивного прототипа офтальмологической лекарственной формы со способностью к *in situ* гелеобразованию.

Материалы и методы

Материалы

Альгиновая кислота (Sigma Aldrich, Германия), глицидилметакрилат, степень чистоты 97 % (Sigma Aldrich, Германия), диметилсульфоксид марки «х.ч.», натриевая соль флуоресцина (Sigma Aldrich, Великобритания).

Модификация альгиновой кислоты

Для модификации к раствору альгиновой кислоты (АК) концентрацией 3 масс.% покапельно добавляли глицидилметакрилат (ГМК) в следующих мольных соотношениях [АК]:[ГМК]= 1:2; 1:3; 1:4 и 1:8 и продували инертным газом. После установления температуры, равной 60 °С, синтез осуществляли в течение 2-х часов при pH=8 и постоянном перемешивании. Полученный и охлажденный до комнатной температуры раствор осаждали в диметилсульфоксиде (ДМСО) и пересаждали в ацетоне для удаления непрореагировавшего глицидилметакрилата. Осадок модифицированного полимера растворяли в дистиллированной воде и очищали с помощью диализной мембраны (MWCO 12–14 кДа) в течение четырех суток. Полученный полимер был высушен в лиофильной сушилке.

Физико-химические методы исследования

¹H ЯМР спектры полимеров были записаны на спектрометре JNM-ECA 500 от производителя Jeol (Япония). Сухие образцы полимеров растворяли в дейтерированной воде. Все химические сдвиги даны в ppm. Спектры были обработаны с помощью программы MestreNova для графического отображения. Все химические сдвиги на спектрах были представлены как δ – миллионная доля (ppm).

ИК-спектры высушенных и твердых образцов полимеров были получены с помощью PerkinElmer – Spectrum 65 FT-IR (США) в интервале от 4000 до 500 см⁻¹.

УФ-видимые спектры поглощения растворов полимеров получили с помощью УФ-спектрофотометра «Shimadzu UV – 1900I УФ-Вид» (Япония) при длине волны 390 нм с использованием кварцевой кюветы толщиной 1 мм при комнатной температуре и деионизированной воды в качестве эталонного раствора.

Термический анализ альгиновой кислоты и его метакрированной формы был проведен на приборе Netzsch DSC-TGA with IR coupling (Германия).

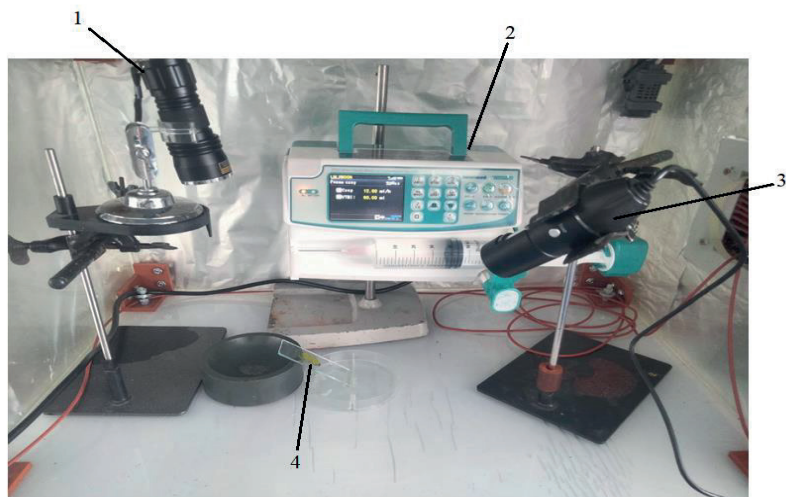
Выход полученной метакрированной альгиновой кислоты был рассчитан гравиметрическим методом по формуле (1):

$$\eta = \frac{m_{\text{практ.}}}{m_{\text{теор.}}} \cdot 100\% \quad (1)$$

Определение динамической вязкости проводили с помощью микровискозиметра Lovis 2000 M/ME (AntonPaar, Австрия), работающего по принципу падающей сферы. Стеклянный капилляр, заполненный раствором, устанавливается в измерительную камеру, изменяющую свой угол расположения в диапазоне 15÷80°. Результаты испытаний представляются как динамическая вязкость в мПа•с. Для определения динамической вязкости использовали капилляр диаметром 1,59 мм. Эксперименты проводились при температуре 25°C и 37°C и повторялись по три раза.

Исследование удерживающей способности метакрилированной альгиновой кислоты на поверхности овечьих глаз

Тесты *in vitro* для определения времени удержания водных растворов альгиновой кислоты и модифицированных образцов для оценки мукоадгезивных свойств, проводили на поверхности овечьих глаз согласно методике (Mun et al., 2014: 3557). Роговицу размером 2*2 см вырезали с помощью острого скальпеля. Каждую роговицу перед применением смачивали раствором искусственной слезной жидкости. Для изучения мукоадгезивных свойств полимера была использована установка, представленная на рисунке 1.



1 – источник УФ света, 2 – шприцевой насос, 3 – цифровой микроскоп, 4 – образец
Рис. 1. Установка для измерения мукоадгезивных свойств полимеров

В начале эксперимента роговицу помещали на предметное стекло, установив под углом 45 ° (рисунок 2), и выдерживали в инкубаторе при температуре 37 °C в течение 10 минут до начала эксперимента. Были приготовлены флуоресцентные растворы альгиновой кислоты и метакрилированной

альгиновой кислоты концентрацией 0,5 масс. %. Концентрация флуоресцина натрия – 1 мг/мл. Продолжительность эксперимента – 6 ч, скорость потока искусственной слезной жидкости – 12 мл/ч. Флуоресцентные изображения были проанализированы с помощью программного обеспечения ImageJ и Adobe photoshop. Все измерения повторялись трехкратно.

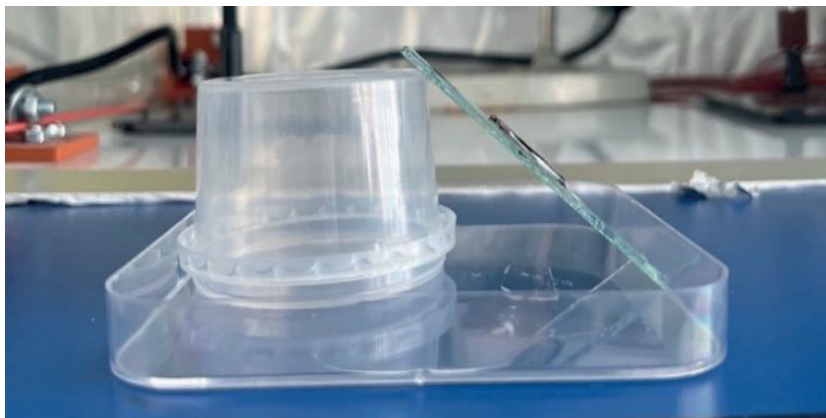


Рис. 2. Наглядное представление положения предметного стекла с роговицей под углом 45°

Приготовление раствора искусственной слезной жидкости

Искусственная слезная жидкость (ИСЖ) была приготовлена согласно методике (Agibaeva et al., 2020: 119093). Для этого навески хлорида натрия, бикарбоната натрия и хлорида кальция растворяли в 1л деионизированной воды и перемешивали при 40°C до полного растворения.

Результаты и их обсуждение

Альгиновая кислота является биосовместимым и нетоксичным полимером, что позволяет использовать ее в офтальмологии (Kaldybekov et al., 2018: 83). Улучшая мукоадгезивные свойства альгиновой кислоты, возможно получение лекарственной формы, способной «прилипнуть» к слизистой оболочке глаза. Увеличение времени пребывания и контакта лекарственной формы с поверхностью глаза, обеспечивает устойчивое высвобождение лекарственного средства и улучшает его терапевтическую эффективность (Davidovich-Pinhas & Bianco-Peled, 2011). Существуют такие методы модификации, как физическая и химическая модификации (Kontoroulou, 2014: 68). При физической модификации происходит смешивание и образование композитов. Метод химической модификации представляет собой введение функциональных групп (метакрилатных, сульфидных и т.п.) или изменение структуры полимера с помощью химических взаимодействий. Присутствие таких групп способствует улучшению мукоадгезивных свойств полимеров (Khutoryanskiy, 2011: 748).

В данной работе было осуществлено метакрилирование альгиновой кислоты глицидилметакрилатом с целью получения улучшенного прототипа

мукоадгезивной офтальмологической лекарственной формы со способностью к *in situ* гелеобразованию. Реакция протекала за счет взаимодействия эпоксидной группы ГМА с гидроксильной группой альгиновой кислоты в щелочной среде согласно схеме, представленной на рисунке 3:

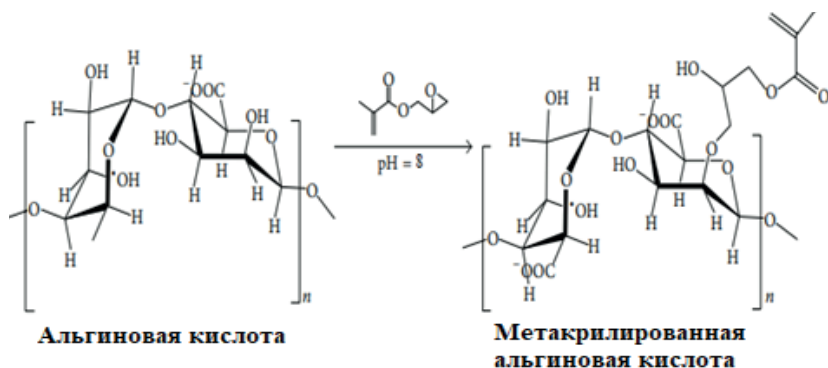


Рис. 3. Схема реакции метакрирования АК глицидилметакрилатом

Для характеристики полученных полимеров и установления протекания реакции модификации альгиновой кислоты глицидилметакрилатом, были выбраны методы ИК- и ЯМР-спектроскопии. В качестве контроля была использована альгиновая кислота.

Как видно из рисунка 4, для альгиновой кислоты характерны следующие колебания молекулярных связей: 3400 см^{-1} и 1150 см^{-1} групповые валентные колебания -ОН, $2900\text{--}2950\text{ см}^{-1}$ групповые валентные колебания $-\text{CH}_2$, 2400 см^{-1} колебания $-\text{COOH}$ группы, 1800 и 1730 см^{-1} область колебаний двойных связей ($-\text{C}=\text{O}$).

На ИК спектрах модифицированных полимеров (рисунок 4) присутствуют характеристические полосы поглощения при 1722 см^{-1} , 1637 см^{-1} , 1596 см^{-1} , принадлежащие двойной связи ($-\text{C}=\text{C}-$) ГМА. Кроме того, на спектрах метакрилированных полимеров присутствуют полосы поглощения при 1260 см^{-1} , принадлежащие сложноэфирной группе ГМА. При этом стоит отметить, что чем выше концентрация ГМА в исходном растворе, тем выше интенсивность полос сложноэфирной группы ГМА на ИК-спектрах и меньше интенсивность пика в диапазоне $1000\text{--}1150\text{ см}^{-1}$, которые принадлежат колебаниям -ОН группы АК. Это свидетельствует о том, что происходит уменьшение количества гидроксильных групп АК в связи с взаимодействием с ГМА. На основе данных ИК-спектроскопии можно утверждать, что с повышением концентрации ГМА в исходной смеси увеличивается степень модификации альгиновой кислоты.

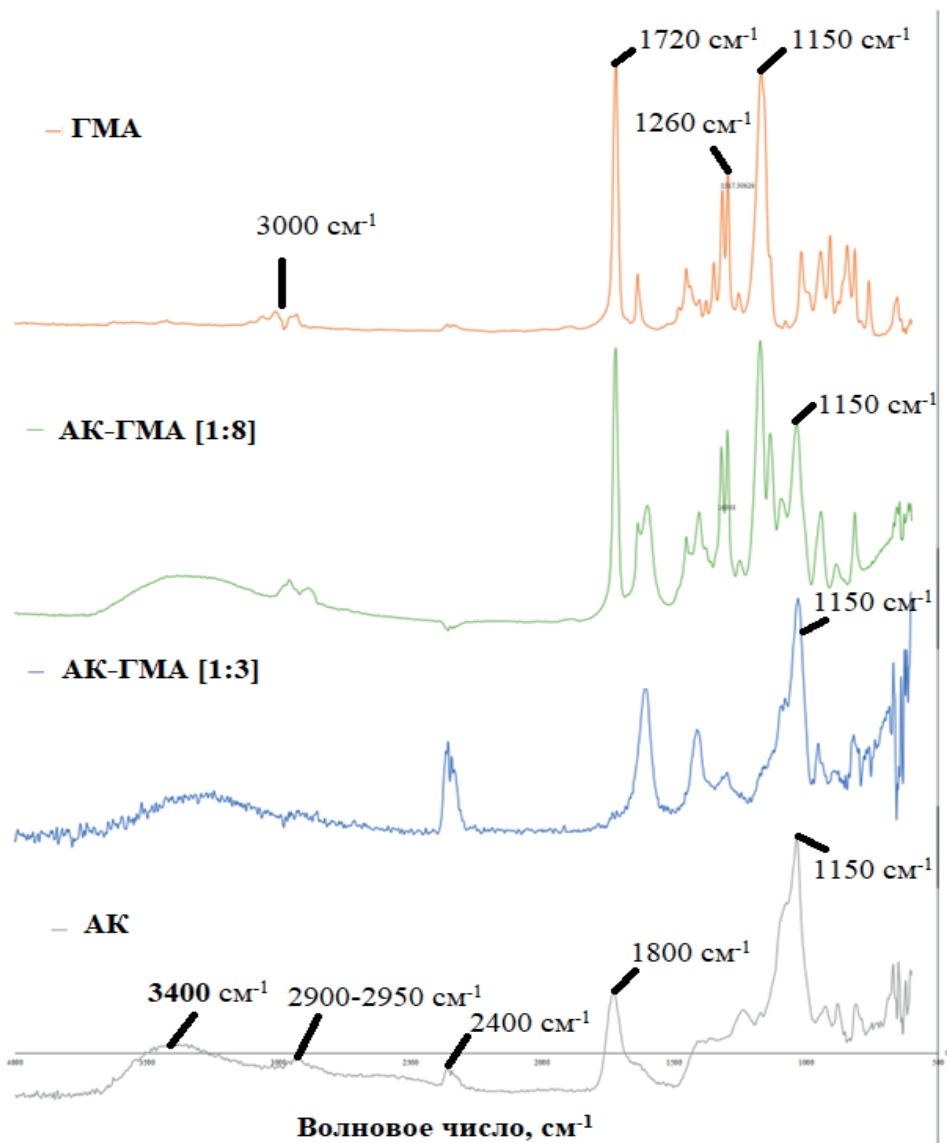


Рис. 4. ИК спектры АК, ГМА и АК-ГМА

По результатам ¹H ЯМР спектроскопии (рисунок 5, а) для АК характерны пики между 3,5 и 5,20 м.д., соответствующие сахаридным единицам основной цепи АК. Тогда как на спектре АК-ГМА (рисунок 5, б) наблюдаются пики m 6.02, m 5.97, s 1,75 м.д. сигналов протона, характерные для двойной связи и метильной группы ГМА. В качестве сравнения на ЯМР спектрах АК эти пики не наблюдаются. Это указывает на то, что после реакции АК с ГМА появились новые сигналы, принадлежащие двойным связям в ГМА, что подтверждает модификацию альгиновой кислоты.

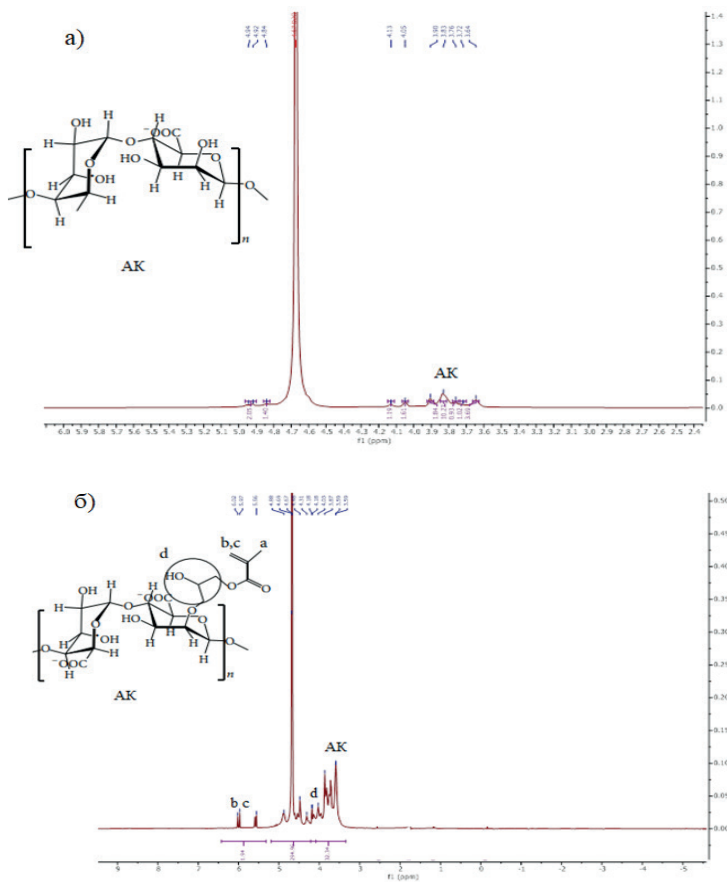


Рис. 5. ¹H – ЯМР спектры а) АК и б) АК-ГМА = [1:8]

Для изучения термических характеристик модифицированных образцов АК использовались методы ДСК и ТГА.

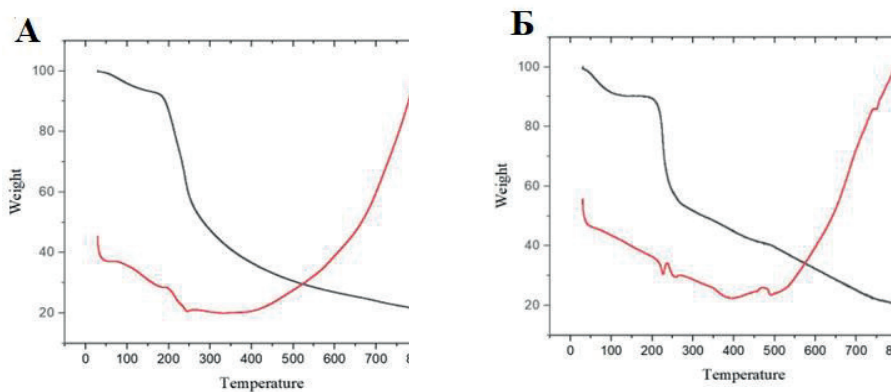


Рис. 6. ДСК и ТГА – кривые АК (а) и АК-ГМА (б)

По результатам ТГА и ДСК, представленных на рисунке 6, можно увидеть, что температура плавления и температура стеклования имеют лишь не большой сдвиг в пределах 200 °С для модифицированных образцов (рис. 6, б). Это свидетельствует о небольшом изменении в модифицированных полимерах, которые не оказывают существенного влияния на термические свойства АК-ГМА.

С целью определения оптимальных вязкостных характеристик для прототипа глазных капель был проведен ряд экспериментов по изучению зависимости динамической вязкости от концентрации и степени модификации полимеров, температуры и ионной силы растворов полимеров.

Влияние температуры на динамическую вязкость полимерных растворов исследовалось при 25 °С и 37 °С (рисунки 7, 8). Установлено, что с повышением температуры наблюдается снижение вязкости водных растворов метакрилированной альгиновой кислоты, что обусловлено термочувствительными свойствами полимера.

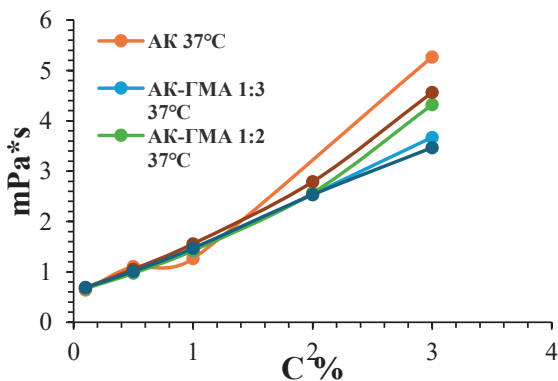


Рис. 7. Зависимость динамической вязкости растворов полимеров АК и АК-ГМА от концентрации при 37°C

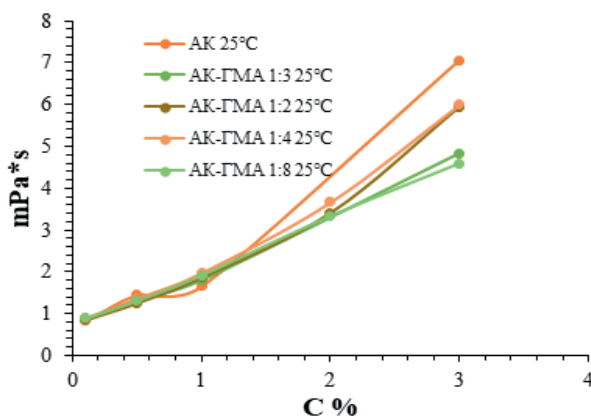


Рис. 8. Зависимость динамической вязкости растворов полимеров от концентрации АК и АК-ГМА 25°C

Также была исследована зависимость динамической вязкости от концентрации ГМА в исходной смеси. Из рисунка 9 видно, что с повышением содержания ГМА повышается вязкость растворов АК-ГМА. Такое поведение связано с гидрофобными свойствами глицидилметакрилата.

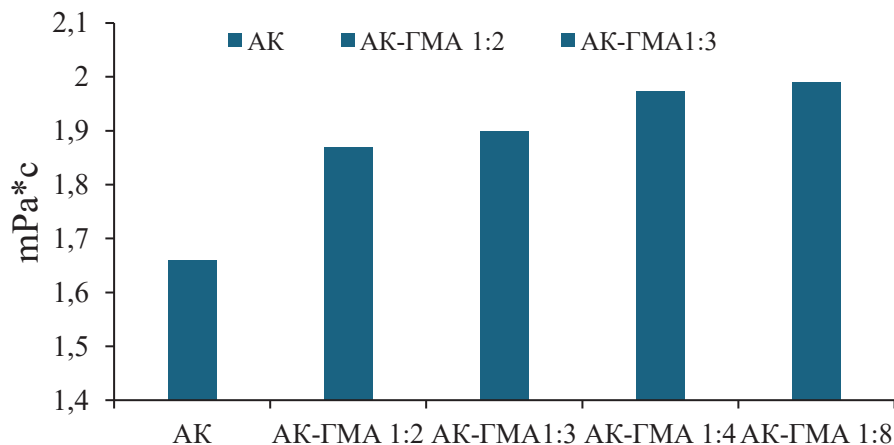


Рис. 9. Зависимость динамической вязкости растворов полимеров от соотношения АК-ГМА в исходной мономерной смеси

Влияние ионной силы на вязкость растворов полимеров зависит от различных факторов, в том числе от природы полимера и концентрации ионов, температуры и свойств растворителя. Поведение различных полимерных систем при различной ионной силе может существенно различаться. Экспериментальные измерения и тщательная характеристика необходимы для понимания специфических эффектов и поведения растворов полимеров в отношении ионной силы.

В работе было изучено изменение вязкости растворов АК и АК-ГМА в растворе искусственной слезной жидкости (рН=7,4) и в деионизированной воде. Установлено, что вязкость растворов модифицированных полимеров в ИСЖ ниже по сравнению с деионизованной водой (Рисунок 10). Это свидетельствует о том, что состав искусственной слезной жидкости не оказывает существенного влияния на реологическое поведение модифицированной альгиновой кислоты (рисунок 10).

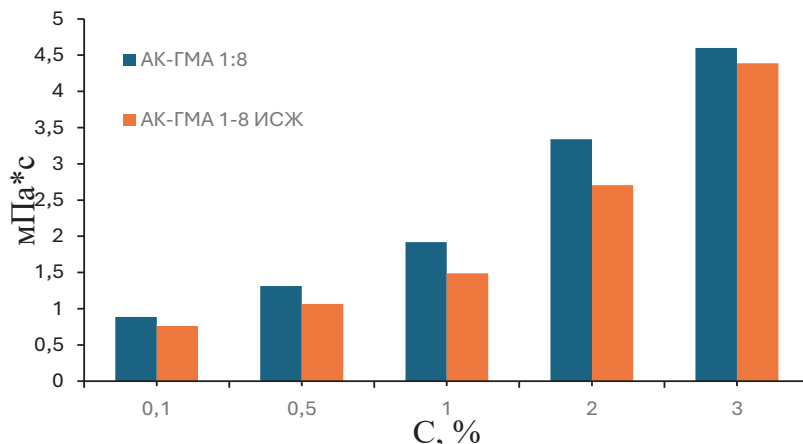


Рис. 10. Зависимость динамической вязкости растворов АК-ГМА в дистиллированной воде и ИСЖ в зависимости от концентрации полимера

Полученные в работе значения вязкости растворов АК-ГМА могут быть полезны в следующих случаях:

1. Простота рецептуры и стабильность: если значения динамической вязкости модифицированной альгиновой кислоты в воде и искусственной слезной жидкости сопоставимы, то это упрощает процесс разработки рецептуры. Одна и та же концентрация модифицированного образца потенциально может использоваться как в препаратах на водной основе, так и в препаратах на основе искусственной слезной жидкости без необходимости значительных корректировок. Это может обеспечить стабильную эффективность продуктов на основе модифицированных образцов, таких как глазные капли или офтальмологические составы, независимо от того, приготовлены ли они на воде или на основе искусственной слезной жидкости.

2. Универсальность: когда среда не сильно влияет на реологические свойства модифицированной альгиновой кислоты, она может быть универсальной в применении помимо искусственной слезной жидкости. Модифицированные образцы потенциально можно использовать в других составах на водной основе или в качестве компонента композиционных материалов, гидрогелей или каркасов тканевой инженерии без существенного изменения ее вязкостных характеристик.

Прозрачность – важный показатель глазных капель, так как напрямую влияет на способность капель оказывать необходимый терапевтический эффект. Определение показателя прозрачности проводят с помощью УФ-спектроскопии, что позволяет оценить качество и эффективность действия глазных капель.

Чистые и прозрачные глазные капли обеспечивают оптимальную систему доставки активных ингредиентов, позволяя им беспрепятственно достигать глазных тканей и оказывать желаемый терапевтический эффект.

Была изучена зависимость оптической плотности растворов полимера от концентрации АК и АК-ГМА. Данный эксперимент был проведен с целью определения максимальной концентрации модифицированного полимера, при которой раствор оставался бы прозрачным. По результатам, представленным на рисунке 11, видно, что с повышением концентрации полимера идёт закономерное повышение оптической плотности. В концентрации до 1 масс. % наблюдается лишь небольшое изменение оптической плотности.

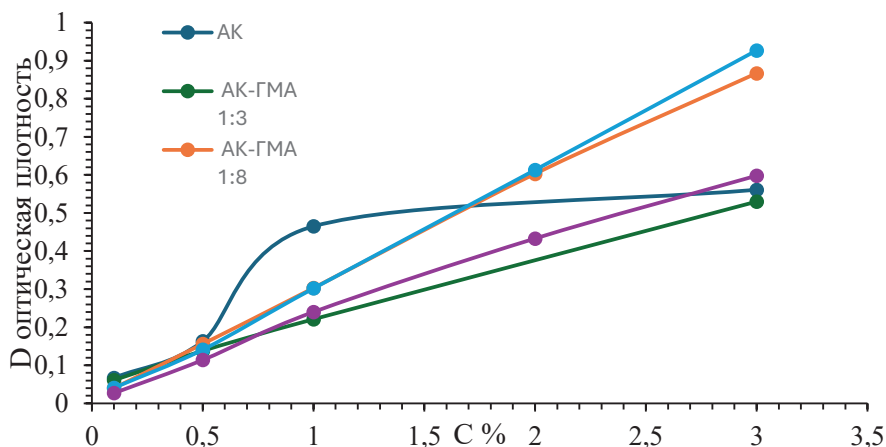


Рис. 11. Зависимость оптической плотности растворов полимеров от концентрации АК и АК-ГМА при $\lambda=390$

Таким образом, определение прозрачности глазных капель имеет решающее значение для гарантии качества, эффективности и безопасности при лечении различных заболеваний глаз. По результатам исследования оптической плотности модифицированных образцов было выявлено, что концентрации растворов метакрилированной альгиновой кислоты до 1 масс. % являются оптимальными и наиболее прозрачными.

Применение механизмов мукоадгезии при разработке офтальмологических лекарственных форм также является перспективным направлением. В этом случае эксплуатируется возможность взаимодействия полимеров со слизистой оболочкой глаза, содержащей муцин. В результате наблюдается увеличение времени нахождения лекарственного препарата в верхнем сегменте глаза и увеличивается биодоступность лекарственного вещества. Известно несколько теорий полимер-муцин взаимодействия: электронная; теория адсорбции, электростатические взаимодействия, водородные связи, силы Ван-дер-Ваальса, гидрофобные эффекты, а также ковалентная связь между некоторыми специфическими полимерами и теория смачивания, основанная на структурном сходстве между полимером и муцином. Модификация природных или синтетических полимеров функциональными группами, способными к вышеописанным взаимодействиям (например, тиольными,

акрилатными, малеимидными, ионными и т.д.) может способствовать увеличению мукоадгезивных свойств известных полимеров.

Удержание на слизистой оболочке роговицы и века овечьего глаза растворов АК и АК-ГМА, содержащих флуоресцеин натрия (NaFl, 1 мг/мл) и чистого раствора флуоресцеина натрия оценивали с помощью метода смыва *in vitro* с флуоресцентным детектированием. На рисунке 12 приведены флуоресцентные микрофотографии удерживания растворов АК и АК-ГМА, содержащих флуоресцеин натрия (NaFl, 1 мг/мл) и чистого раствора флуоресцеина натрия (используемого в качестве контроля) на веках овечьего глаза после каждого промывания растворами ИСЖ (рН 7,4; скорость потока 12 мл/час) в течение 60 мин.

Затем флуоресцентные изображения были проанализированы с помощью программного обеспечения ImageJ и Adobe photoshop. Значения интенсивности флуоресценции на микрофотографиях нормировались на 100 % (рисунки 12 и 13).

Из рисунка 12 видно, что для растворов АК-флуоресцеин натрия, АК-ГМА-флуоресцеин натрия и чистого флуоресцеина натрия последующие промывки приводили к снижению интенсивности окрашивания за счет вымывания. При этом установлено, что раствор АК-ГМА проявляет значительную способность удерживаться на слизистой оболочке века (Vсл. жид. = 12 мл) по сравнению с раствором АК. Введение метакрилированных групп увеличивает время удерживания пленок на слизистой оболочке века, т.е. улучшает мукоадгезивные свойства.

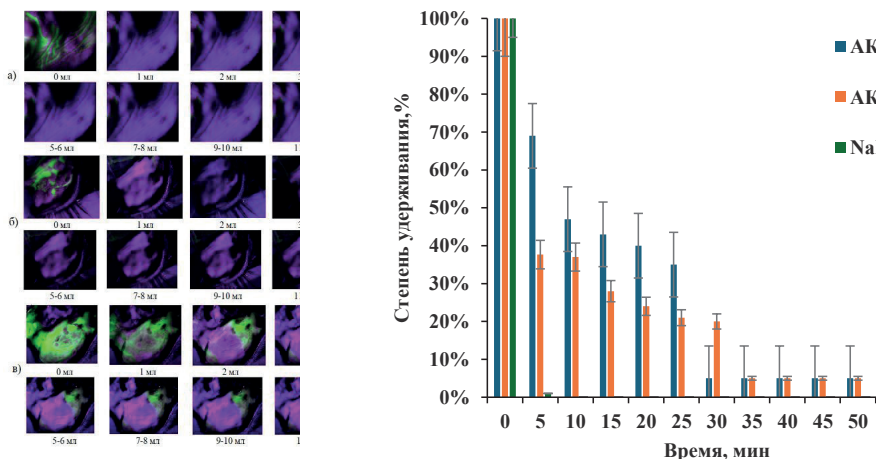


Рис. 12. Микрофотографии, показывающие время удержания растворов NaFl (а), АК (б) и АК-ГМА(в) на поверхности века овечьего глаза и зависимость степени удерживания растворов АК, АК-ГМА и NaFL на поверхности слизистой век от времени

На рисунке 13 представлены флуоресцентные микрофотографии удерживания растворов АК и АК-ГМА, содержащих флуоресцеин натрия

(NaFl, 1 мг/мл) и чистого раствора флуоресцеина натрия (используемого в качестве контроля) на роговице овечьего глаза после каждого промывания растворами ИСЖ (рН 7,4; скорость потока 12 мл/час) в течение 60 мин. Время удерживания АК-ГМА на роговице овечьего глаза дольше, чем АК и чистого раствора флуоресцеина натрия. Тогда как время удерживания образцов на роговице меньше, чем на веках овечьего глаза. Это связано с тем, что на роговице овечьего глаза содержание мукозы (слизистой) меньше, чем на веках, что приводит к более быстрому смыву растворов полимеров.

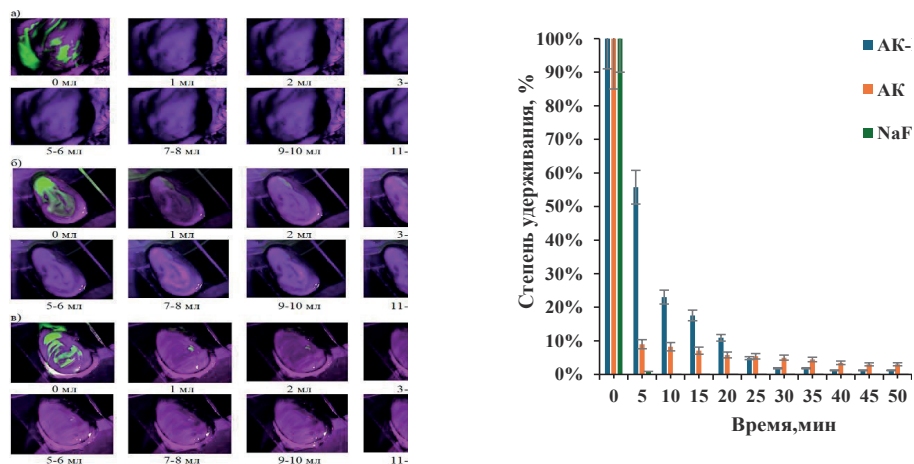


Рис. 13. Микрофотографии, показывающие время удержания растворов NaFl (а), АК (б) и АК-ГМА(в) на поверхности роговицы овечьего глаза и зависимость степени удерживания растворов АК, АК-ГМА и NaFl на поверхности роговицы от времени

По результатам эксперимента видно, что время удерживания АК-ГМА дольше, чем у АК. Это происходит за счет взаимодействия метакрилированных групп АК-ГМА с муцином, которое позволяет удерживаться дольше на поверхности глаза. Таким образом, полученные и представленные результаты подтверждают улучшение мукоадгезивных свойств альгиновой кислоты путем его метакрилирования, для использования в качестве потенциальных мукоадгезивных лекарственных форм в терапии глазных заболеваний.

Закключение

Таким образом, в ходе исследования были синтезированы метакрилированные формы альгиновой кислоты в трех соотношениях [АК]:[ГМА]=1:3; 1:5; 1:8, структура которых была изучена методами ИК и ЯМР-спектроскопии. Полученные метакрилированные формы альгиновой кислоты. Методом вискозиметрии были определены оптимальные характеристики прототипов глазных капель. Установлено, что с увеличением концентрации ГМА в исходной смеси повышается вязкость раствора метакрилированной альгиновой кислоты, а с повышением температуры идет снижение вязкости растворов полимера. Присутствие компонентов в

искусственной слезной жидкости не оказывает существенного влияния на поведение вязкости альгиновой кислоты. Было выявлено, что оптимальной концентрацией для получения глазных капель является концентрация метакрилизованной альгиновой кислоты до 1 масс. %. Модифицированный полимер показывает улучшенные мукодагезивные свойства по сравнению с альгиновой кислотой.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РК по проекту программно-целевого финансирования вне конкурсных процедур на 2023–2025 годы № (BR21882289) «Разработка и внедрение технологических аспектов производства и промышленного применения функциональных углерод-кремниевых наполнителей»

ЛИТЕРАТУРА

- Абилова Г.К., Әбілқәрім Ә., Ирмухаметова Г.С. (2019). Получение и характеристика термически сшитых пленок на основе хитозана и поли(2-этил-2-оксазолина). Вестник КазНУ им. аль-Фараби. Серия химическая. — 94(3). — 20–27. <https://doi.org/https://doi.org/10.15328/cb1085>.
- Agibayeva L.E., Kaldybekov D.B., Porfiryeva N.N., Garipova V.R., Mangazbayeva R.A., Moustafine R.I., Semina I.I., Mun G.A., Kudaibergenov S.Ye., Khutoryanskiy V.V. (2020). Gellan gum and its methacrylated derivatives as in situ gelling mucoadhesive formulations of pilocarpine: In vitro and in vivo studies. *Int. J. Pharm.* — 577. — 119093. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2020.119093>
- Bennacef C., Desorby-Banon S., Probst L., Desorby S. (2021). Advances on alginate use for spherification to encapsulate biomolecules. *Food Hydrocoll.* — 118. — 106782. <https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2021.106782>
- Davidovich-Pinhas M. & Bianco-Peled H. (2011). Physical and structural characteristics of acrylated poly(ethylene glycol)-alginate conjugates. *Acta Biomater.* — 7(7). — 2817–2825. <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2011.04.001>
- Guo X., Wang Y., Qin Y., Shen P. & Peng Q. (2020). Structures, properties and application of alginic acid: *Int. J. Biol. Macromol.* — 162. — 618–628. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.06.180>
- Kaldybekov D.B., Tonglairoum P., Opanasopit P. & Khutoryanskiy V.V. (2018). Mucoadhesive maleimide-functionalised liposomes for drug delivery to urinary bladder. *Eur. J. Pharm. Sci.* — 111. — 83–90. <https://doi.org/10.1016/j.ejps.2017.09.039>
- Khutoryanskiy V.V. (2011). Advances in Mucoadhesion and Mucoadhesive Polymers. *Macromol. Biosci.* — 11. — 748–764. <https://doi.org/10.1002/mabi.201000388>
- Kontopoulou M. (2014). Advances in Chemically Modified and Functionalized Polymers. *Macromol. React. Eng.* — 8. — 67–68. <https://doi.org/10.1002/mren.201300197>
- Laffleur F. (2014). Mucoadhesive polymers for buccal drug delivery. *Drug Dev. Ind. Pharm.* — 40(5). — 591–598. <https://doi.org/10.3109/03639045.2014.892959>
- Laffleur F. & Dachs S. (2015). Development of novel mucoadhesive hyaluronic acid derivate as lubricant for the treatment of dry eye syndrome. *Ther. Deliv.* — 6(10). — 1211–1219. <https://doi.org/10.4155/tde.15.55>
- Lee K.Y. & Mooney D.J. (2012). Alginate: properties and biomedical applications. *Prog. Polym. Sci.* — 37(1). — 106–126. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2011.06.003>
- Mun E.A., Morrison P.W., Williams A.C. & Khutoryanskiy V.V. (2014). On the barrier properties of the cornea: a microscopy study of the penetration of fluorescently labeled nanoparticles, polymers, and sodium fluorescein. *Mol. Pharm.* — 11(10). — 3556–3564. <https://doi.org/10.1021/mp500332m>
- Savić Gajić I.M., Savić I.M. & Svirčev Z. (2023). Preparation and Characterization of Alginate Hydrogels with High Water-Retaining Capacity. *Polymers.* — 15(12). — 2592. <http://dx.doi.org/10.3390/polym15122592>

Zelikin A.N., Ehrhardt C. & Healy A.M. (2016). Materials and methods for delivery of biological drugs. *Nat. Chem.* — 8(11). — 997–1007. <https://doi.org/10.1038/nchem.2629>

REFERENCES

Abilova G., Abilkarim A. & Irmukhametova G. (2019). Preparation and characterization of thermally crosslinked films based on chitosan and poly(2-ethyl-2-oxasoline). *Chem. Bull. Kaz. Nat.* — 94(3). — 20–27. <https://doi.org/10.15328/cb1085> (in Rus).

Agibayeva L.E., Kaldybekov D.B., Porfiryeva N.N., Garipova V.R., Mangazbayeva R.A., Moustafine R.I., Semina I.I., Mun G.A., Kudaibergenov S.Ye., Khutoryanskiy V.V. (2020). Gellan gum and its methacrylated derivatives as in situ gelling mucoadhesive formulations of pilocarpine: In vitro and in vivo studies. *Int. J. Pharm.* — 577. — 119093. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2020.119093>

Bennacef C., Desorby-Banon S., Probst L., Desorby S. (2021). Advances on alginate use for spherification to encapsulate biomolecules. *Food Hydrocoll.* — 118. — 106782. <https://doi.org/10.1016/j.foodhyd.2021.106782>

Davidovich-Pinhas M. & Bianco-Peled H. (2011). Physical and structural characteristics of acrylated poly(ethylene glycol)-alginate conjugates. *Acta Biomater.* — 7(7). — 2817–2825. <https://doi.org/10.1016/j.actbio.2011.04.001>

Guo X., Wang Y., Qin Y., Shen P. & Peng Q. (2020). Structures, properties and application of alginic acid: *Int. J. Biol. Macromol.* — 162. — 618–628. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.06.180>

Kaldybekov D.B., Tonglairoum P., Opanasopit P. & Khutoryanskiy V.V. (2018). Mucoadhesive maleimide-functionalised liposomes for drug delivery to urinary bladder. *Eur. J. Pharm. Sci.* — 111. — 83–90. <https://doi.org/10.1016/j.ejps.2017.09.039>

Khutoryanskiy V.V. (2011). Advances in Mucoadhesion and Mucoadhesive Polymers. *Macromol. Biosci.* — 11. — 748–764. <https://doi.org/10.1002/mabi.201000388>

Kontopoulou M. (2014). Advances in Chemically Modified and Functionalized Polymers. *Macromol. React. Eng.* — 8. — 67–68. <https://doi.org/10.1002/mren.201300197>

Laffleur F. (2014). Mucoadhesive polymers for buccal drug delivery. *Drug Dev. Ind. Pharm.* — 40(5). — 591–598. <https://doi.org/10.3109/03639045.2014.892959>

Laffleur F. & Dachs S. (2015). Development of novel mucoadhesive hyaluronic acid derivate as lubricant for the treatment of dry eye syndrome. *Ther. Deliv.* — 6(10). — 1211–1219. <https://doi.org/10.4155/tde.15.55>

Lee K.Y. & Mooney D.J. (2012). Alginate: properties and biomedical applications. *Prog. Polym. Sci.* — 37(1). — 106–126. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2011.06.003>

Mun E.A., Morrison P.W., Williams A.C. & Khutoryanskiy V.V. (2014). On the barrier properties of the cornea: a microscopy study of the penetration of fluorescently labeled nanoparticles, polymers, and sodium fluorescein. *Mol. Pharm.* — 11(10). — 3556–3564. <https://doi.org/10.1021/mp500332m>

Savić Gajić I.M., Savić I.M. & Svirčev Z. (2023). Preparation and Characterization of Alginate Hydrogels with High Water-Retaining Capacity. *Polymers.* — 15(12). — 2592. <http://dx.doi.org/10.3390/polym15122592>

Zelikin A.N., Ehrhardt C. & Healy A.M. (2016). Materials and methods for delivery of biological drugs. *Nat. Chem.* — 8(11). — 997–1007. <https://doi.org/10.1038/nchem.2629>

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 186–194

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.265>

UDC 31.23.17

© **A. Karilkhan**^{1,2}, **A. Tursynova**², 2024

¹Abylkas Saginov Karaganda Technical University, Karaganda, Kazakhstan;

²L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

E-mail: aidynguljj@mail.ru

STUDY OF THE SYNTHESIS OF ISOPULEGOL AND MENTHOL FROM MONOTERPENE CITRONELLAL

A. Karilkhan — senior lecturer of the Department of Chemistry and Chemical Technologies, Abylkas Saginov Karaganda Technical University, Karaganda, Kazakhstan, PhD student of specialty chemistry, Faculty of natural sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

E-mail: aidynguljj@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-7904>;

A. Tursynova — Candidate of Chemistry, Associate Professor of Chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

E-mail: tursynova_79@mail.ru.

Abstract. In the modern world, leading countries consider organic synthesis as a state problem and pay special attention to it. The synthesis of organic substances by simple and effective methods is a modern requirement. Therefore, the purpose of this work is to determine data on the synthesis of isopulegol and menthol from monoterpene citronellal and to study the mechanism and conditions for the formation of reaction products, to study the features of methods for obtaining menthol from citronellal by its cyclization and hydrogenation. Since citronella is a highly reactive compound, it may be considered as the basis for the synthesis of numerous organic compounds. Menthol is one of the substances synthetically obtained from monoterpenes. Isopulegol is an intermediate product. The purpose of the study: to study the synthesis of isopulegol and menthol from citronellal monoterpene. To achieve this goal, the article analyzes a review of scientific studies with high consistency and data on the synthesis of isopulegol and menthol from citronellal monoterpene and selects an effective technique. At the same time, the mechanism and conditions of formation of reaction products, features of methods for obtaining menthol by cyclization and hydrogenation of citronellals are highlighted. We have studied the properties of products obtained from Kazakh mint, conducted Fourier analysis, chromatographic analyses and elemental analysis of products and presented the results of the analysis.

Keywords: monoterpenes, chirality, citronellal, citronella, synthesis, isopulegol, menthol, dimethyloctanol

© А. Карилхан^{1,2}, А. Турсынова², 2024

¹Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды Техникалық Университеті,
Қарағанды, Қазақстан;

²Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, Астана, Қазақстан.
E-mail: aidynguljj@mail.ru

МОНОТЕРПЕНДІК ЦИТРОНЕЛЛАЛЬДАН ИЗОПУЛЕГОЛ ЖӘНЕ МЕНТОЛ СИНТЕЗІН ЗЕРТТЕУ

Карилхан А. — Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университетінің химия және химиялық технология кафедрасының аға оқытушысы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, жаратылыстану ғылымдары факультетінің Химия кафедрасының докторанты, Астана, Қазақстан

E-mail: aidynguljj@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-7904>;

Турсынова А. — химия ғылымдарының кандидаты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті химия кафедрасының доценті, Астана, Қазақстан.

E-mail: tursynova_79@mail.ru.

Аннотация. Қазіргі таңдағы заманауи ғылыми зерттеулерде *ментолдың өнеркәсіптік қолданылу аясының кеңдігіне байланысты, ментолдың синтетикалық синтезі химия өнеркәсібіндегі аса маңызды синтездердің бірі болып табылады. Ментол өнімдерінің бірі - цитронеллаль реакцияға түсу қабілеттілігі өте жоғары қосылыс болғандықтан, оны көптеген органикалық қосылыстар синтезінің іргетасы және негізгі шикізат ретінде қарастыруға болады. Зерттеудің мақсаты: монотерпендік цитронеллальдан изопулегол және ментол синтезін зерттеу. Бұл мақсатқа жету үшін мақалада жоғары дәйектемесі бар ғылыми зерттелерге шолу мен монотерпендік цитронеллальдан изопулегол және ментолдың синтезделуі туралы мәліметтер талданып, тиімді әдістемесі таңдалды. Сонымен қатар практикалық тұрғыда реакция өнімдерінің түзілу механизмі мен шарттары, цитронеллальды циклдеу және гидрлеу арқылы ментолды алу әдістерінің ерекшеліктері ажыратылды. Қазақстан республикасындағы жалбыздан алынған өнімдер қасиеттері зерттеліп, олардан алынған өнімдерге ИК- Фурье, қондығыларында хроматографиялық талдаулар, Е А3100 элементтік талдаулар жүргізіліп, талдау нәтижелері ұсынылды.*

Түйін сөздер: монотерпендер, хиральдылық, цитронеллаль, цитронелла, органикалық синтез, пулегол, изопулегол, ментол, катализатор, гидрлеу, циклдеу, цитронеллол, диметиллоктанол

© А. Карилхан^{1,2}, А. Турсынова²

¹Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова,
Караганда, Казахстан;

²Евразийский национальный университет им. Н. Гумилева,
Астана, Казахстан.

E-mail: aidynguljj@mail.ru

ИЗУЧЕНИЕ СИНТЕЗА ИЗОПУЛЕГОЛА И МЕНТОЛА ИЗ МОНОТЕРПЕНОВОГО ЦИТРОНЕЛЛАЛЯ

Карилхан А. — старший преподаватель кафедры химии и химической технологии Карагандинского технического университета имени Абылкаса Сагинова, докторант кафедры химии факультета естественных наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

E-mail: aidynguljj@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-7904>;

Турсынова А. — кандидат химических наук, и.о. доцент кафедры химии, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

E-mail: tursynova_79@mail.ru.

Аннотация. Синтетический синтез ментола является одним из важнейших синтезов в химической промышленности ввиду широкого спектра промышленного применения ментола в современных научных исследованиях. Поскольку цитронеллаль, один из продуктов ментола, является соединением с очень высокой реакционной способностью, его можно рассматривать как основное сырье для синтеза многих органических соединений. Цель исследования: изучить синтез изопулегола и ментола из монотерпенового цитронеллала. В статье был проведен обзор научных исследований с высокой достоверностью, проанализированы данные о синтезе изопулегола и ментола из монотерпенового цитронеллала и выбран эффективный метод. Также в практическом плане были выделены механизм и условия образования продуктов реакции, описаны особенности методов получения ментола путем цитронеллального циклирования и гидрирования. Были изучены свойства продуктов из Казахстанской перечной мяты, проведены хроматографические анализы на ИК - Фурье, элементный анализ E A3100 и представлены результаты анализа.

Ключевые слова: монотерпены, хиральность, цитронеллаль, цитронелла, синтез, изопулегол, ментол, диметилоктанол

Introduction

Developed countries at the forefront of developing the need for organic products are paying special attention to the problem of studying menthol synthesis.

The law of the Republic of Kazakhstan "on the production of organic products" sets the goal "development of internal market of organic products and satisfaction of the needs of the population of the Republic of Kazakhstan in organic products" [<https://adilet.zan.kz/eng/docs/Z1500000423>].

Natural monoterpenes obtained from plants are the main and cheap sources of chiral compounds. The most accessible of them are: α - and β -pinene, 2- and 3-carene, limonene and pulegone, which are used as starting materials for the synthesis of bi- and three-functional chiral and heterocyclic compounds (Szakonyi et.al., 2011).

As mentioned above, the organic substance, menthol, is also of particular interest in the chemical industry, it is used to treat colds, rheumatism, relieve muscle pain from overwork, etc. It is one of the most common aromatic compounds in the world, widely used in pharmaceuticals for the treatment of diseases (Lait et.al., 2007).

Natural or synthetic menthol, peppermint essential oils are used in a number of oral care products and cosmetics, for example, in antitussives, in the production of toothpastes (Florentina Neat et.al., 2015).

Due to the presence of three chiral centers in the cyclohexane ring of menthol, it forms four pairs of stereoisomers, but only (-)-menthol has a sharp smell and cooling effect, while other stereoisomers and (+)-menthol do not have such properties, so their market value is low (El Alami et.al., 2015).

Due to the fact that in organic chemistry, the chirality of menthol is used in stereospecific (asymmetric) synthesis, we studied the mechanism of conversion of citronellal to isopulegol, isopulegol to menthol, effective catalysts used in the synthesis process, as well as effective conditionals for the implementation of the reaction, which were reflected in the research of scientists (Nicolás M et.al., 2015).

Research methods and discussion. (-)-Isopulegol is a very important intermediate product in industrial production (Takasago process). Since only the (-)-isopulegol configuration is used in it, its synthesis requires high stereoselectivity. Pure citronellals are converted to isopulegol when heated in the range of 130–200°C or under the influence of ultraviolet radiation (fig.1).

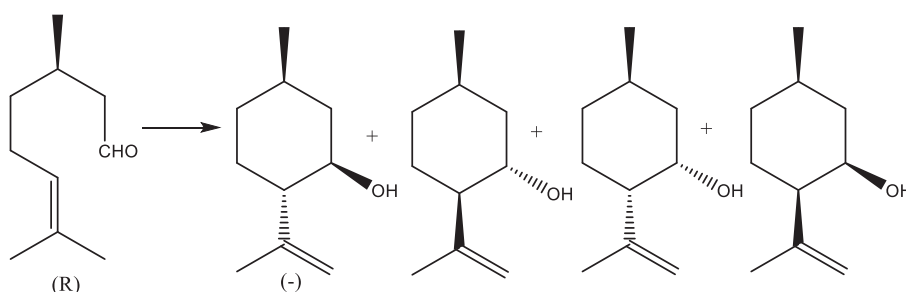


Figure 1. Isopulegol isomers derived from (R) — citronella

Thermal cyclization is accelerated by activated carbon, silica, metal oxides, boric acid, nickel sulfate in the hydrogen stream or by Cu — Cr and Cu—Cr — Mn catalysts (Philipp Müller et.al., 2015).

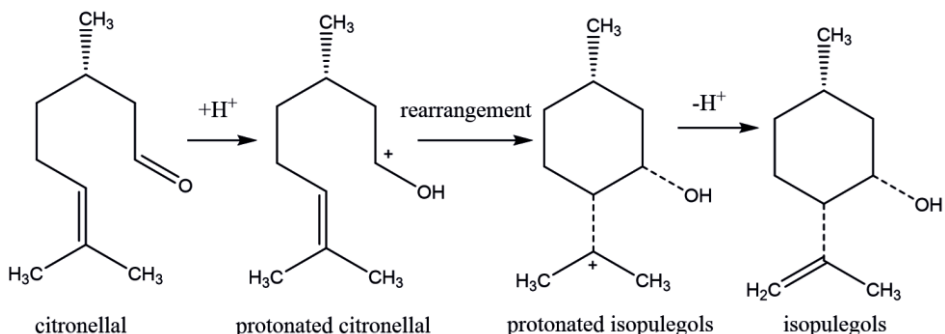


Figure 2. The mechanism of substitution of citronella

Further development of heterogeneous catalysis in menthol production begins with citronella and includes two stages: cyclization of citronella to isopulegol (Fig. 2) and further hydrogenation of menthol.

The hydrogenation of citronella is shown in Figure 3.

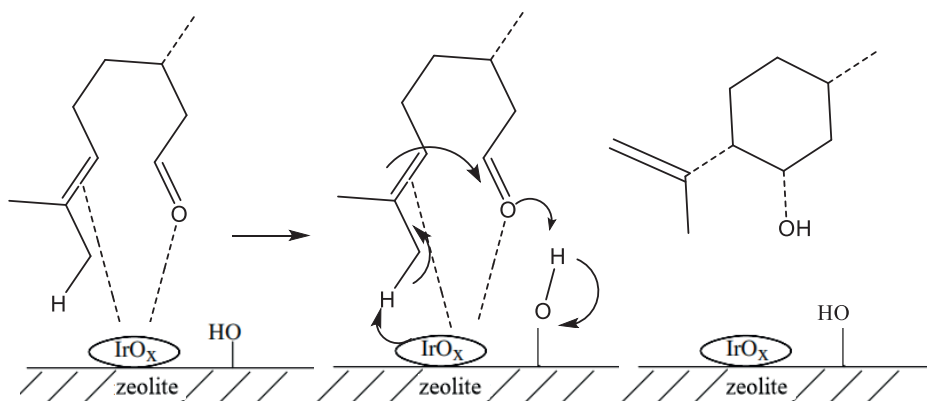


Figure 3. Citronella ring in the presence of iridium catalysts

It is clearly seen from these diagrams that isopulegol was obtained by hydration of citronellal (Eder Lenardao et al., 2007). In addition, the choice of catalysts used in the synthesis of isopulegol and menthol from citronellal plays an important role (Matthias Vandichel et al., 2016).

Table 1. Hydrogenation of citronella on different bases with 0.8 MPa H₂, 800 °C, cyclohexane, 24 hours using Ir 3 %.

Catalyst	Conversion (%)	S _{isopulegol} (%)	S _{menthol} (%)	S _{citronellol} (%)	S _{3,7-DMO} (%)
3% Ir/Beta	100	0	93	0	7
3% Ir/ZM510	95	89	1	5	5
3% Ir /CBV20A	91	80	0	9	11

Table 1 shows that cyclization of citronella with isopulegol in the presence of a 3 % Ir / ZMS10 catalyst and cyclization of menthol with a 3 % Ir / beta catalyst can achieve high results (Iosif et.al., 2004).

Table-2. Effect of solvent on citronella hydrogenation in catalysts of 3 % Ir / Beta, 0.8 MPa H₂, 80 ° C, 24 hours, conversion of 100%;

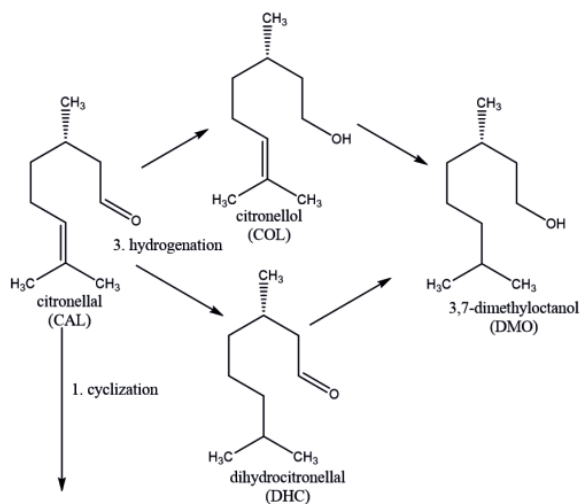
	Solvent	ϵ^0 (Al ₂ O ₃) ^a	Dielectric constant ^b	S _{isopulegol} (%)	S _{menthol} (%)	S _{3,7-DMO} (%)	S _{citronellol} (%)	time (h) ^c
1	1,4-dioxane	0,56	2,2189	10	78	5	7	16
2	Toluene	0,29	2,3790	0	89	11	0	12
3	cyclohexane	0,04	2,0243	0	93	7	0	10
4	2-propanol	0,84	20,18	13	46	15	26	24

- a) the solvent strength parameter in the Snyder eutotropic series;
- b) values corresponding to 293.2 K;
- c) the maximum conversion time.

From the data in Table 2, it can be seen that during the single-stage hydrogenation of citronella in the presence of Ir / Beta catalysts, menthol and its isomers give high yields (93%) with a cyclohexane solvent. The choice of parameters such as solvent, temperature and pressure improves the selectivity for isopulegol, as well as for menthol (Dong-Lin Shieh et.al., 2014).

The use of solvents with low permittivity and poor interaction with the surface (for example, cyclohexane) at temperatures up to 80 ° C and pressures of 0.8 MPa leads to high selectivity of menthol. The weight of the catalyst is also very important, 3 % Ir (93 % menthol) gives good results.

Cyclization of citronella into isopulegol and further hydrogenation to menthol were studied in the works of J. Plöber and other scientists (Jutta Plöber et.al., 2014). This work is presented in stages in Figure 4.



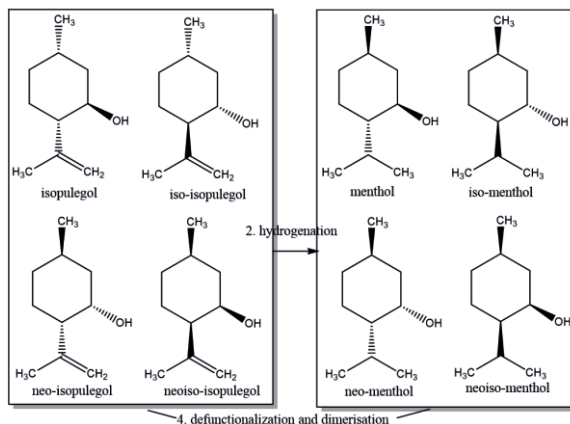


Figure 4. Scheme of the citronella reaction to menthol

The first stage (Fig. 1, stage 1) is the ringing of citronella, the configuration of three proximal carbon atoms, and therefore the catalyst synthesizes an excess of the necessary stereoisomer. Ru / H-BEA is easily hydrogenated by metal catalysts of double bonds of isopuleholes and menthol is obtained (Fig. 1, stage 2) (Cortés et al., 2011).

We have practically studied the synthesis of menthol from Kazakhstan mint (Fig. 5).

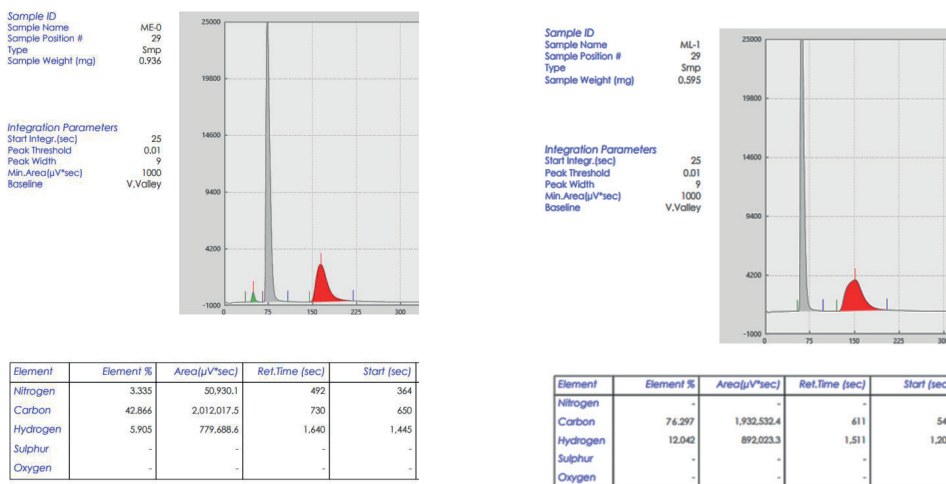


Figure 5. Elemental analysis of compounds

The structure of the practical yield of menthol corresponded to the theoretical one.

Conclusion

The article studies the synthesis of isopulegol and menthol from citronellal monoterpene. To achieve this goal, the article analyzes a review of scientific studies with high consistency and data on the synthesis of isopulegol and menthol from citronellal monoterpene and selects an effective technique.

The studied method of synthesis of menthol from isopulegol showed that this synthesis has been studied in detail using selective catalysts, the product has a high yield, the resulting compounds are easy to use, low-toxic and affordable. The synthesis of substances from citronellal, which are important products of organic synthesis, is one of the most urgent problems today, so in our research we decided to obtain new organic synthesis products from citronellal.

In addition, in practical terms, the mechanism and conditions of formation of reaction products, features of methods of obtaining menthol by citronellal cyclization and hydrogenation were distinguished, the properties of mint in the Republic of Kazakhstan were studied, chromatographic analyzes of products obtained from them in IC - Fourier, superconductors, elemental analysis E A3100 were carried out and the results of the analysis were presented.

REFERENCES

- Szakonyi Z., Fülöp F. (2011). Monoterpene-based chiral β -amino acid derivatives prepared from natural sources: syntheses and applications, *Amino Acids*, — 41, — 597–608.
- Lait S.M.; Rankic D.A.; Keay B.A. (2007). 1,3-Aminoalcohols and Their Derivatives in Asymmetric Organic Synthesis, *Chem. Rev.*, — 107, — 767–796.
- El Alami M.S.I., El Amrani M.A., Agbossou—Niedercorn F., Suisse I., Mortreux A. (2015). Chiral Ligands Derived from Monoterpenes: Application in the Synthesis of Optically Pure Secondary Alcohols via Asymmetric Catalysis, *Chem. Eur. J.*, — 21, — 1398–1413.
- Nariman F. Salakhutdinov*, Konstantin P. Volcho and Olga I. Yarovaya (2016). Monoterpenes as a renewable source of biologically active compounds // A collection of invited papers based on presentations at the XX Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry (Mendeleev XX), held in Ekaterinburg, Russia, September. — 25–30.
- Eder J. Lenardao, Giancarlo V. Botteselle, Francisco de Azambuja, Gelson Perin and Raquel G. Jacob (2007). Citronellal as key compound in organic synthesis, *Tetrahedron*, — 63, — 6671–6712.
- Florentina Neat, Simona Coman, Vasile I. Parvulescu, G. Poncet, Dirk De Vos, Pierre Jacobs (2009). Heterogeneous Catalytic Transformation of Citronellal to Menthol in a Single Step on Ir—Beta Zeolite Catalysts, *Top Catal.*, — 52, — 1292–1300.
- Dong—Lin Shieh, Chia—Chun Tsai and An—Nan Ko, (2003). Liquid — phase synthesis of isopulegol from citronellal using mesoporous molecular sieves mcm — 41 and zeolites, *React.Kinet. Catal.Lett.*, — 79 (2), — 381–389.
- Iosif F., Coman S., Părvulescu V., Grange P., Delsarte S., Vos D., Jacobs P. (2004). Ir—Beta zeolite as a heterogeneous catalyst for the one-pot transformation of citronellal to menthol, *Chem. Commun.*, — 11, — 1292–1293.
- Jutta Plößler, Fatma Dedeaga, Martin Lucas, Peter Claus (2016). The effect of catalyst preparation conditions on the synthesis of menthol from citronellal on Ru/H—BEA. *Applied Catalysis A: General*, — 516, — 100–108.
- Bernd Schäfer. Menthol (2013). *Nützliche naturstoffe // Chem. Unserer Zeit*, — 47, — 174–182.
- Matthias Vandichel, Frederik Vermoortele, Stijn Cottenie, Dirk E. De Vos, Michel Waroquier, Veronique Van Speybroeck. (2013). Insight in the activity and diastereoselectivity of various Lewis acid catalysts for the citronellal cyclization, *Journal of Catalysis*, — 305, — 118–129.

Cortés C.B. et al. (2011). One pot synthesis of menthol from (±) — citronellal on nickel sulfated zirconia catalysts, *Catalysis Today*, — 172, — 21–26.

Leffingwell J.C. (2009). Cooling Ingredients and Their Mechanism of Action, *Handbook of Cosmetic Science and Technology*, — 3, — 661–675.

Nicolás M. Bertero, Andrés F. Trasarti, María C. Acevedo, Alberto J. Marchi, Carlos R. Apesteguía. (2020). Solvent effects in solid acid-catalyzed reactions: The case of the liquid-phase isomerization/cyclization of citronellal over $\text{SiO}_2\text{—Al}_2\text{O}_3$, *Molecular Catalysis*, — 481, — 110–192.

Simona M. Coman, Pratap Patil, Stefan Wuttke, Erhard Kemnitz (2009). Cyclisation of citronellal over heterogeneous inorganic fluorides-highly chemo- and diastereoselective catalysts for (±)-isopulegol, *Chemical Communications*, — 4, — 460–462.

Philipp Müller, Patrick Wolf, and Ive Hermans (2016). Insights into the Complexity of Heterogeneous Liquid-Phase Catalysis: Case Study on the Cyclization of Citronellal, *ACS Catal.*, — 6, 5, — 2760–2769.

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 195–203

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.266>

УДК 577.112.38: 543.635.35

МПНТИ 14.25.09

© A.A. Kudaibergen, A.K. Nurlybekova, J. Jenis, M.A. Dyusebaeva*, 2024

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: Moldyr.Dyusebaeva@kaznu.edu.kz

CHEMICAL CONSTITUENTS OF LIPOSOLUBLE EXTRACT OF ARTEMISIA TERRAE-ALBAE

A. Kudaibergen — PhD of Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: aidana.kudaibergentegi@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7344-2702>;

A. Nurlybekova — PhD, scientist of Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: nurl_al@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9797-284X>;

J. Jenis — Director of the Center for Medicinal Plants, PhD, professor of Al-Farabi Kazakh National University

E-mail: janarjenis@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7148-7253>;

M. Dyusebaeva — Vice Dean for Scientific-Innovative Activity and International Relations of the Faculty of Chemistry and Chemical Technology, candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: Moldyr.Dyusebaeva@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>.

Abstract. In this work, the quantitative and qualitative analysis of phytochemical constituents of the medicinal plant *Artemisia terrae-albae* from Kazakhstan have been made for the first time. The total bioactive components of *Artemisia terrae-albae* were determined as follows organic acids (1.44 %). Moisture content (7.14 %), total ash (13.4 %), and extractives content (57.61 %) were determined. The petroleum ether extract from the aerial part of *Artemisia terrae-albae* was analyzed using Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS). In total, 67 compounds were isolated from petroleum ether part and their relative content was determined by normalizing the peak area, in which the main components are Heneicosane (14.4 %), Heptacosane (14.1 %), Octacosane (12.6 %), Pentacosane (10.6 %), Hexacosane (5.9 %).

Keywords: *Artemisia terrae-albae*, Gas Chromatography-Mass Spectrometry

© А.А. Құдайберген, А.К. Нурлыбекова, Ж. Жәніс, М.А. Дюсебаева*, 2024

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: Moldyr.Dyusebaeva@kaznu.edu.kz

ARTEMISIA TERRAE-ALBAE МАЙДА ЕРИТІН СЫҒЫНДЫСЫНЫҢ ХИМИЯЛЫҚ ҚҰРАМЫ

Құдайберген А.А. — докторант Қазақского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Қазақстан

E-mail: aidana.kudaibergentegi@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7344-2702>;

Нұрлыбекова А.К. — докторант Қазақского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Қазақстан

E-mail: nurl_al@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9797-284X>;

Жәніс Ж. — Директор центра лекарственных растений, PhD, профессор Қазақского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Қазақстан

E-mail: janarjenis@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7148-7253>;

Дюсебаева М.А. — заместитель декана факультета химии и химической технологии по научно-инновационной работе и международным связям, кандидат химических наук, ассоциированный профессор Қазақского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Қазақстан

E-mail: Moldyr.Dyusebaeva@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>.

Аннотация. Бұл жұмыста алғаш рет Қазақстанда өсетін *Artemisia terrae-albae* дәрілік өсімдіктің фитохимиялық компоненттеріне сандық және сапалық талдау жасалды. Ылғалдың (7,14 %), жалпы күлдің (13,4 %), экстрактивті заттардың (57,61%), органикалық қышқылдардың (1,44 %) мөлшері анықталды. *Artemisia terrae-albae* жер үсті бөлігінің петролей эфирі сығындысы газ хроматографиясы-масс-спектрометрия (ГХ-МС) көмегімен талданды. Петролей эфирі сығындысынан барлығы 67 қосылыс бөлініп алынды және олардың салыстырмалы құрамы негізгі құрамдастары генеикозан (14,4 %), гептакозан (14,1 %), октакозан (12,6 %), пентакозан (10) болып табылатын пик аймағын қалыпқа келтіру арқылы анықталды (6 %).), гексакозан (5,9 %).

Түйін сөздер: *Artemisia terrae-albae*, газ хроматографиясы-масс-спектрометрия

© А.А. Құдайберген, А.К. Нурлыбекова, Ж. Жәніс, М.А. Дюсебаева*, 2024

Қазақский национальный университет имени аль-Фараби,

Алматы, Қазақстан.

E-mail: Moldyr.Dyusebaeva@kaznu.edu.kz

ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ЖИРОРАСТВОРИМОГО ЭКСТРАКТА ARTEMISIA TERRAE-ALBAE

Құдайберген А.А. — докторант Қазақского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Қазақстан

E-mail: aidana.kudaibergentegi@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7344-2702>;

Нұрлыбекова А.К. — докторант Қазақского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Қазақстан

E-mail: nurl_al@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9797-284X>;

Женис Ж. — директор центра лекарственных растений, PhD, профессор Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: janarjenis@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7148-7253>;

Дюсебаева М.А. — заместитель декана факультета химии и химической технологии по научно-инновационной работе и международным связям, кандидат химических наук, ассоциированный профессор Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: Moldyr.Dyusebaeva@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>.

Аннотация. В работе впервые проведен количественный и качественный анализ фитохимических компонентов лекарственного растения *Artemisia terrae-albae* произрастающего на территории Казахстана. Было определено содержание влаги (7,14 %), общей золы (13,4 %), экстрактивных веществ (57,61 %), органических кислот (1,44 %). Экстракт петролейного эфира надземной части *Artemisia terrae-albae* анализировали с помощью газовой хроматографии-масс-спектрометрии (ГХ-МС). Всего из экстракта петролейного эфира выделено 67 соединений и их относительное содержание определено путем нормализации площади пика, в котором основными компонентами являются гейнекозан (14,4 %), гептакозан (14,1 %), октакозан (12,6 %), пентакозан (10,6 %), гексакозан (5,9 %).

Ключевые слова: *Artemisia terrae-albae*, газовая хроматография-масс-спектрометрия.

Introduction

The genus *Artemisia* is one of the largest and most widely distributed genera of the family *Astraceae* (*Compositae*). It is a heterogenous genus, consisting over 500 diverse species distributed mainly in the temperate zones of Europe, Asia and North America. These species are perennial, biennial and annual herbs or small shrubs (Kundan & Anupam, 2011). The term “*Artemisia*” is derived from the word “*Artemis*,” which is used in folk medicine for women's diseases and corresponds to Diana, a Greek Goddess (Deepali et al., 2022).

Artemisia contains various of chemical compounds such as lactones, terpenoids (e.g. myrcene, germacrene D, camphor, chamazulene), flavonoids, and flavonoid glycosides (Batiha et al., 2020).

In folk medicine, *Artemisia* has been used as an antipyretic, antiseptic, anthelmintic, tonic, diuretic and for the treatment of abdominal pain (Javed et al., 2019).

Substances isolated from *Artemisia* exhibit antibacterial, anti-inflammatory, hepatoprotective, antidepressant, antioxidant (Bordean et al., 2021), antimicrobial, antiviral, antistress, hepatoprotective, antioxidant (Yousefi et al., 2021), antispasmodic, antimalarial, antipyretic, as well as for the treatment of chronic fever (Hbika, Daoudi et al., 2022). In dermatology, *Artemisia* is also used to treat rheumatism and skin diseases (Hbika, Bouyanzer et al., 2022).

The present study has been made the investigation of the chemical constituents

for the aerial part of the medicinal plant *Artemisia terrae-albae* grown in the Almaty region of Kazakhstan for the first time. Total bioactive components of *A. terrae-albae* such as organic acids, and flavonoids together with moisture content, total ash, and saponins content were determined. The dichloromethane extract from the aerial part of *A. terrae-albae* has been analyzed by Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS).

Materials and methods

Petroleum, chloroform, ethyl acetate, and butanol brand were purchased from Sigma-Aldrich (Saint Louis, MO, USA). Ethanol 96 % was from Talgar ethanol factory (Talgar town, Kazakhstan)

Plant material. The aerial part of plant *A. terrae-albae* was collected in September 2021 from the Zailiysky Alatau Mountains of the Almaty region. The air-dried aerial part of *A. terrae-albae* was cut into small pieces and stored at room temperature.

Extraction. The air-dried plant *A. terrae-albae* (3.0 kg) was pulverized and extracted with ethanol (EtOH) three times (seven days each time) at room temperature. After evaporation of the solvent under reduced pressure, 170,74 g of the residues were mixed and suspended in water and then successively partitioned with petroleum ether (PE), chloroform (Chl), ethyl acetate (EA), and butanol (BuOH) to afford the corresponding extracts.

Experimental part. The quantitative and qualitative contents of biologically active constituents from the aerial part of the plant were determined according to methods reported in the State Pharmacopeia XI edition techniques (Baitenov, 2001).

Gas chromatography-mass spectrometry. The liposoluble components in the petroleum ether extract of the medicinal plant were analyzed using the GC-MS method. The work was carried out on a gas chromatograph with mass selective detector Agilent 7890A-5975C. Used capillary column HP-5MS length 30 m, internal diameter 0.25 mm, film thickness of stationary phase 0.25 μm . Chromatography conditions: carrier gas-helium; flow rate 1 ml / min; column temperature: initial temperature of 50 °C (10 min), temperature rise from 10°C / min from 50°C to 300°C, final temperature of 300 °C (40 min), scanning range of 30–1000 AU, electronic shock mode at 70eV. The temperature of the ion source is 230 °C. 1 μl of the sample was injected into the chromatograph evaporator. Samples were introduced by splitting with a 5: 1 split ratio.

Identification of the compounds: Identification of compounds was done by comparing the NIST and Wiley library data of the peaks and mass spectra of the peaks with those reported in literature. Percentage composition was computed from GC peak areas on HP-5MS column without applying correction factors (Masada, 1976).

Results and discussion

Extraction. The powdered aerial part of *A. terrae-albae* plant (3.0 kg) was extracted (30 L x 3) for twenty-one days in total at room temperature. The combined

extracts were evaporated under reduced pressure to give a residue (170.74 g) which was dissolved in water and partitioned with solvents of increasing polarity to give PE (7.89 g), Chl (56.49 g), EA (30.48 g), and BuOH (13.12 g) (Figure 1).

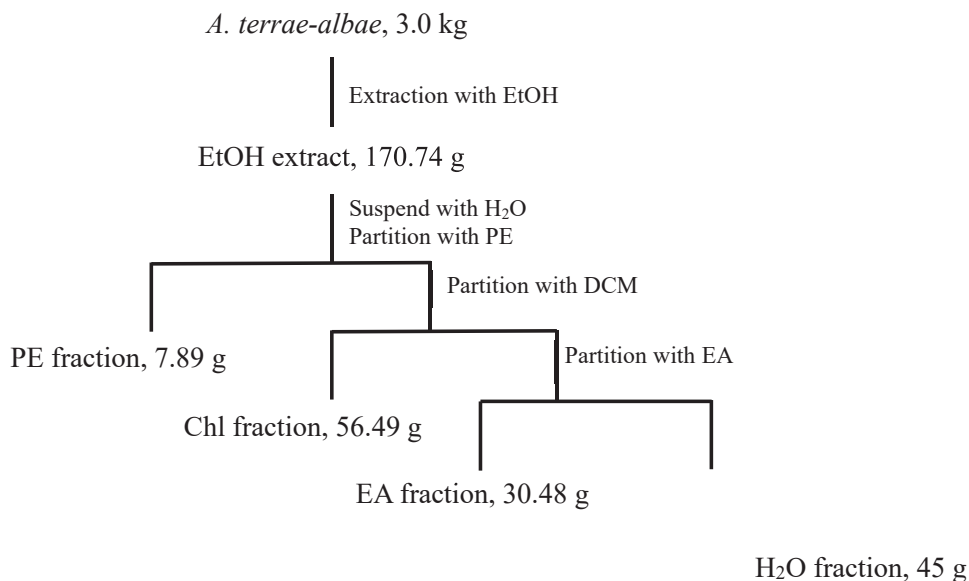


Fig. 1: Flow-chart of partition of the aerial part of *A. terrae-albae*

The quantitative and qualitative analysis. The quantitative and qualitative analysis of biologically active constituents together with moisture content, total ash, and extractives contents were determined from the aerial part of *A. terrae-albae*. The results are shown in Table 1.

Table 1: Quantitative analysis of bioactive constituents of *A. terrae-albae*

Component	Content, %
Moisture content	7.14 +0.03
Ash	13.4+0.05
Extractives	57.61+0.91
Organic acids	1.44+0.01

Gas Chromatography-Mass Spectrometry. The constituents of petroleum ether extracts from the aerial parts of *A. terrae-albae* were analyzed by GC-MS. GC-MS technology which is recognized as the “gold standard” in identifying chemicals in simple and complex mixtures. Besides, the technology is able to recognize substances at a trace level that is unattainable with other technologies. This method allows to selectively and precisely determine various types of compounds.

The resulting PE part of *A. terrae-albae* was analyzed by gas chromatography-mass spectrometry (Fig.2, table 2). The identification of the resulting phytochemical

compounds was based on the peak area, retention time, and molecular formula. The active substances with their retention time, name, probability of identification, and percentage are presented in Table 1. Analysis of the PE part from *A. terrae-albae* revealed 67 compounds in the studied samples.

The main components of the petroleum ether extract are Heneicosane (14.39 %), Heptacosane (14.12 %), Octacosane (12.58 %), Pentacosane (10.66 %), Hexacosane (5.91 %).

Table 2: comparative analysis of Fat-soluble components from the petroleum ether extract of the aerial part of *Artemisia terrae-albae* with other *Artemisia* species

Peak №	Names of compounds	Molecular formula	Molecular weight	Retention time, min	Peak area (%)
1	Eucalyptol	C ₁₀ H ₁₈ O	154	9,637	0,15
2	Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-, (1S)-	C ₁₀ H ₁₆ O	152	11,523	2,95
3	endo-Borneol	C ₁₀ H ₁₈ O	154	12,024	0,22
4	1-Allylcyclopropanecarboxylic acid	C ₇ H ₁₀ O ₂	126	14,029	0,06
5	3,3-Dimethyl-6-methylenecyclohexene	C ₉ H ₁₄	122	14,105	0,22
6	Succinic acid, 2-methylpent-3-yl trans-hex-3-en-1-yl ester	C ₁₆ H ₂₈ O ₄	284	14,42	0,14
7	Ethanone, 1-cyclohexyl-	C ₈ H ₁₄ O	126	15,099	0,09
8	Methyleugenol	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	178	15,448	0,24
9	(-)-Spathulenol	C ₁₅ H ₂₄ O	220	17,741	0,11
10	Methyl jasmonate	C ₁₃ H ₂₀ O ₃	224	18,311	0,20
11	Triethyl citrate	C ₁₂ H ₂₀ O ₇	276	18,412	0,22
12	(S,E)-6-Hydroxy-6-methyl-2-((2S,5R)-5-methyl-5-vinyltetrahydrofuran-2-yl)hept-4-en-3-one	C ₁₅ H ₂₄ O ₃	252	18,88	0,08
13	Lilac aldehyde C	C ₁₀ H ₁₆ O ₂	168	18,948	0,13
14	Estran-3-one, 17-(acetyloxy)-2-methyl-, (2.alpha.,5.alpha.,17.beta.)-	C ₂₁ H ₃₂ O ₃	332	19,101	0,11
15	Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-1,4-dimethyl-	C ₁₂ H ₁₆	160	19,542	0,07
16	3-Acetyl-6-methoxycoumarine	C ₁₂ H ₁₀ O ₄	218	19,84	0,33
17	Furan, 3-(dicyanomethylene)-tetrahydro-2,2-dimethyl-	C ₉ H ₁₀ N ₂ O	162	19,933	0,11
18	Phthalic acid, butyl 2-methoxyethyl ester	C ₁₅ H ₂₀ O ₅	280	20,647	0,40
19	(2E,4E)-5-Chloro-3,4-dimethyl-2,4-heptadiene	C ₉ H ₁₅ Cl	158	20,8	0,14
20	1,3-di-n-Propyladamantane	C ₁₆ H ₂₈	220	20,995	0,26
21	Z,E-2,13-Octadecadien-1-ol	C ₁₈ H ₃₄ O	266	21,122	0,17
22	Hexadecanoic acid, methyl ester	C ₁₇ H ₃₄ O	270	21,437	0,78

23	Di-sec-butyl phthalate	$C_{16}H_{22}O_4$	278	21,564	0,14
24	n-Hexadecanoic acid	$C_{16}H_{32}O$	256	21,828	0,68
25	Estra-1,3,5(10)-trien-17.beta.-ol	$C_{18}H_{24}O$	256	21,963	0,13
26	Hexadecanoic acid, ethyl ester	$C_{18}H_{36}O_2$	284	22,108	1,55
27	Hexacosane	$C_{26}H_{54}$	366	22,465	5,91
28	Tridecane, 7-hexyl-	$C_{19}H_{40}$	268	22,541	3,41
29	Eicosane	$C_{20}H_{42}$	282	22,609	2,87
30	Ethanone, 1-(1,2,3,4,7,7a-hexahydro-1,4,4,5-tetramethyl-1,3a-ethano-3aH-inden-6-yl)-	$C_{17}H_{26}O$	246	22,83	0,17
31	9,12-Octadecadienoic acid, methyl ester, (E,E)-	$C_{19}H_{34}O$	294	22,983	0,81
32	Trans-13-Octadecenoic acid, methyl ester	$C_{19}H_{36}O$	296	23,059	0,53
33	Phytol	$C_{20}H_{40}O$	296	23,246	1,12
34	Heptadecanoic acid, 16-methyl-, methyl ester	$C_{19}H_{38}O$	298	23,331	0,22
35	Cyclohexane, 1,1,2-trimethyl-3,5-bis(1-methylethenyl)-, (2.alpha.,3.beta.,5.beta.)-	$C_{15}H_{26}$	206	23,484	0,17
36	Acetamide, N-[3-(3-isoxazolylmethoxy)phenyl]-	$C_{12}H_{18}N_2O$	206	23,569	1,74
37	Ethyl Oleate	$C_{20}H_{38}O_2$	310	23,68	0,28
38	Methanol, tris(methylenecyclopropyl)-	$C_{13}H_{16}O$	188	23,739	0,97
39	Octadecanoic acid, ethyl ester	$C_{20}H_{40}O$	312	23,926	0,16
40	1,1,4,7-Tetramethyldecahydro-1H-cyclopropa[e]azulene-4,7-diol	$C_{15}H_{26}O_2$	238	24,011	0,40
41	(S)(+)-Z-13-Methyl-11-pentadecen-1-ol acetate	$C_{18}H_{34}O_2$	282	24,181	0,31
42	8-Acetyl-5,5-dimethyl-nona-2,3,8-trienoic acid, methyl ester	$C_{14}H_{20}O_3$	236	24,461	2,73
43	1-Nonadecene	$C_{19}H_{38}$	266	24,741	0,26
44	Cyclohexane, 1,1,2-trimethyl-3,5-bis(1-methylethenyl)-, (2.alpha.,3.beta.,5.beta.)-	$C_{15}H_{26}$	206	24,809	0,12
45	Heptacosane	$C_{27}H_{56}$	380	25,149	14,12
46	D-Xylopyranose, 5-C-(acetyloxy)-2,3,4-tri-O-methyl-, acetate	$C_{11}H_{16}O_9$	292	25,616	0,12
47	4H-1,2,4-Triazole-3-thiol, 4-(3-methoxyphenyl)-5-(1-methylethyl)-	$C_9H_9N_3OS$	207	25,752	0,60
48	E-2-Octadecadecen-1-ol	$C_{18}H_{36}O$	268	25,88	0,11
49	Decyl 4-nitrophenyl ether	$C_{16}H_{25}NO_3$	279	26,296	0,08
50	1-Docosene	$C_{22}H_{44}$	308	26,398	0,78
51	Octadecane, 1-(ethenyloxy)-	$C_{20}H_{40}O$	296	26,5	0,08
52	Pentacosane	$C_{25}H_{52}$	352	26,78	10,66

53	Octadec-9-en-1-yl dimethyl acetal	$C_{20}H_{40}O_2$	312	27,061	0,06
54	Docosanoic acid, ethyl ester	$C_{24}H_{48}O_2$	368	27,18	0,16
55	Trans-2-Dodecen-1-ol	$C_{12}H_{24}O$	184	27,443	0,06
56	Heneicosane	$C_{21}H_{44}$	296	28,046	14,39
57	Methyl 18-methylcosanoate	$C_{22}H_{44}O_2$	340	28,165	0,18
58	Undecanoic acid, ethyl ester	$C_{13}H_{26}O_2$	214	28,632	0,13
59	Octadecane, 1-bromo-	$C_{18}H_{37}Br$	332	28,751	0,11
60	Octacosane	$C_{28}H_{58}$	394	29,108	12,58
61	Tricosane	$C_{23}H_{48}$	324	29,456	0,91
62	Hexacosanoic acid, methyl ester	$C_{27}H_{54}O_2$	410	29,558	0,10
63	Tetratetracontane	$C_{44}H_{90}$	618	30,102	0,05
64	Hexadecane	$C_{16}H_{34}$	226	30,807	0,68
65	Stigmasterol	$C_{29}H_{48}O$	412	31,962	0,21
66	gamma.-Sitosterol	$C_{29}H_{52}O_2$	414	32,506	0,34
67	26,27-Dinoregosta-5,23-dien-3-ol, (3.beta.)-	$C_{26}H_{42}O$	370	33,22	0,10

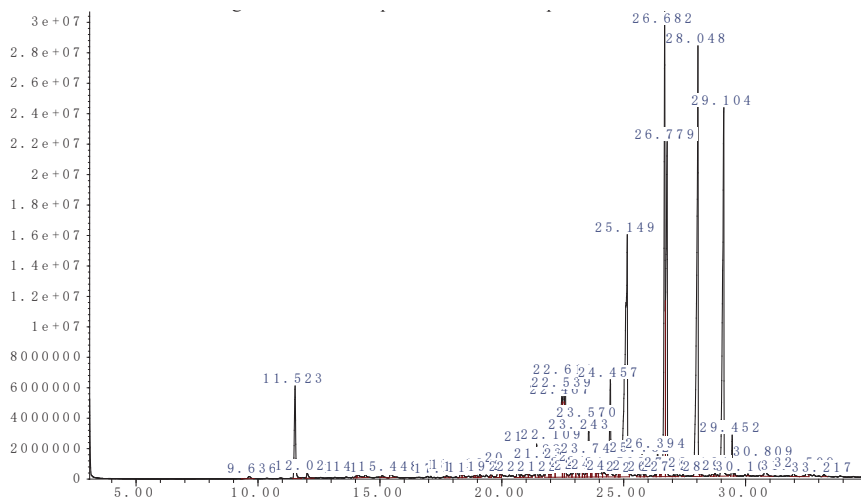


Fig. 2: Chromatogram of *A. terrae-albae* extract (PE part)

Conclusion

Our study determined that the PE extract of *A. terrae-albae* contains novel compounds of pharmacological importance. Identified compounds from *A. terrae-albae* plant in this study can be used as potential candidates in drug development to overcome different emerging diseases. The isolated compounds exhibit the following activity: Heneicosane - microbicidal activity (Vanitha et al, 2020), Heptacosane - non-toxic inhibitors of ATPase activity and P-gp function (Manuela et al, 2022), Octacosane - antitumor activity (Figueiredo et al, 2014, Pentacosane, Hexacosane - antimicrobial Activity (Seham & Magdy, 2013; Kawuri & Darmayasa, 2019).

This work was carried out within the framework of the following project:

- Grant financing of scientific and (or) scientific and technical projects of the Republic of Kazakhstan for 2021–2023 with a period of implementation of 36 months on the topic: “Phytochemical Profiles and Development of Medicinal Plants Targeting Skin Diseases”, IRN AP09057982.

REFERENCES

- Batiha G.E.S., Olatunde A., El-Mleeh A., Hetta H.F., Al-Rejaie S., Alghamdi S., Zahoor M., Magdy B.A., Murata T., Zaragoza-Bastida A., Rivero-Perez N. (2020). Bioactive compounds, pharmacological actions, and pharmacokinetics of wormwood (*Artemisia absinthium*). — *Antibiotics* 9 (6), — 353
- Bordean M., Muste S., Marțiș G.S., Mureșan V., Buican B. (2021). Health effects of wormwood (*Artemisia absinthium* L.): From antioxidant to nutraceutical. *Journal of Agroalimentary Processes and Technologies* — 27(2), — 211–218
- Baitenov M.S. (2001). *Flora of Kazakhstan*. — Almaty: Gylym. — 280 p.
- Deepali S., Dipali N., Mukesh N. (2022). *Artemisia vulgaris* Linn: an updated review on its multiple biological activities Future. *Journal of Pharmaceutical Sciences*. — 8:47
- Figueiredo C.R., Matsuo A., Pereira F.V. (2014). *Pyrostegia venusta* heptane extract containing saturated aliphatic hydrocarbons induces apoptosis on B16F10-Nex2 melanoma cells and displays antitumor activity in vivo. *Pharmacognosy Magazine* 10(Suppl 2): — Pp. 363–76
- Javed A., Showkat R.M., Saima A.A. (2019). Pharmacognostic review on *Artemisia absinthium*. *Int. Res. J. Pharm* — 10 (1)
- Hbika A., Daoudi N.E., Bouyanzer A., Bouhrim M., Mohti H., Loukili E.H., Mechchate H., Al-Salahi R., Nasr F.A., Bnouham M., Zaid A. (2022). *Artemisia absinthium* L. Aqueous and Ethyl Acetate Extracts: Antioxidant Effect and Potential Activity In Vitro and In Vivo against Pancreatic α -Amylase and Intestinal α -Glucosidase. *Journals Pharmaceutics* — 14 (3), — 481
- Hbika A., Bouyanzer A., Saadi M., Ammari L.E., Benali M., Majidi L., Gharibi E.K., Zarrouk A. (2022). Structural study and thermal stability of Artemetin extracted from *Artemisia absinthium* L. *Chemical Data Collections* — 40:100880
- Kundan S.B., Anupam S. (2011). The Genus *Artemisia*: A Comprehensive Review. *Pharmaceutical Biology*. —49:1, — 101–09
- Kawuri R., Darmayasa I.B.G. (2019). Bioactive compound of *Streptomyces capoamus* as biocontrol of Bacterial Wilt Disease on Banana Plant. *IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.* — 347. — 012054
- Manuela Labbozzetta M., Poma P., Tutone M., McCubrey J.A., Sajeve M., Notarbartolo M. (2022). Phytol and Heptacosane Are Possible Tools to Overcome Multidrug Resistance in an In Vitro Model of Acute Myeloid Leukemia. *Pharmaceutics* — 15(3), — 356
- Masada Y. (1976). Analysis of essential oils by gas chromatography and mass spectrometry. New York: John Wiley & Sons — 251–255
- Seham S.E., Magdy M.D. (2013). Chemical Composition, Antimicrobial Activity of the Essential Oil of the Flowers of *Paulownia tomentosa* (Thunb.) Steud. Growing in Egypt. *Journal of Applied Sciences Research*. — 9(4): — 3228–3232
- Vanitha V., Vijayakumar S., Nilavukkarasi M., Punitha V.N., Vidhya E., Praseetha P.K. (2020). Heneicosane — A novel microbicidal bioactive alkane identified from *Plumbago zeylanica* L. *Industrial Crops and Products*. — 154, — 112748
- Yousefi M., Zahedi S., Reverter M., Adineh H., Hoseini S.M., Doan H.V., El-Haroun E.R., Hoseinifar S.H. (2021). Enhanced growth performance, oxidative capacity and immune responses of common carp, *Cyprinus carpio* fed with *Artemisia absinthium* extract-supplemented diet. *Aquaculture* — 545. — 737167

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 204–218

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.267>

UDC 544.77

© M.G. Murzagaliyeva¹, N.S. Ashimkhan^{1*}, A.O. Sapieva², 2024

¹Asfendiyarov Kazakh National Medical University, Almaty, Kazakhstan;

²Astana Medical University, Astana, Kazakhstan.

E-mail: nazgul.ashimkhan@mail.ru

INVESTIGATION OF COLLOID-CHEMICAL PROCESSES OF WASTERWATER TREATMENT WITH NATURAL ADSORBENTS

Murzagaliyeva Manshuk Ginayatovna — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Department of Chemistry, Asfendiyarov Kazakh National Medical University, Almaty, Kazakhstan
E-mail: m_murzagaliyeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9671-0610>;

Ashimkhan Nazgul Seilkhankyzy — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Department of Chemistry, Asfendiyarov Kazakh National Medical University, Almaty, Kazakhstan
E-mail: nazgul.ashimkhan@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3614-9010>;

Sapieva Ardak Onalbekovna — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Astana Medical University, Astana, Kazakhstan
E-mail: ardaksapieva73@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7038-1740>.

Abstract. One of the urgent problems is the treatment of industrial wastewater from toxic and heavy metal ions. Increased requirements for the normally permissible discharge of wastewater require more efficient and environmentally-friendly methods of treatment. The aim of the research is to study the colloidal-chemical processes of sorption treatment of wastewater from Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2} ions with natural adsorbents. Bentonite montmorillonite (Middle Tentec degeneration), bentonite red (Mukra degenerations), zeolite (Maitobe degenerate) and diatomite (Ilyan fields) were selected as the objects of the study. Methods of research - X-ray phase analysis, atomic absorption spectrometry. X-ray phase analysis determines the chemical composition of the materials studied. The main component of diatomite is SiO_2 , in zeolite – Laumontite composition $Ca_4Al_8Si_{16}O_{48} \cdot 14H_2O$ (51.3 %). The base of bentonites is bedellite-montmorillonite, which has an amorphous structure. The method of atomic absorption spectrometry was used to investigate the sorption of heavy metal ions (Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2}) by the natural adsorbents under investigation. Bentonites, Mukra and Medium Tentec have the best sorption properties. Here, the content of lead, nickel and zinc ions decreases by an average of 82–85 %. If diatomite is used, the ion content of these same metals decreases by approximately 74–76 %, and for zeolite by 64 %. Generally speaking, the adsorption properties of these minerals are expected to be achieved by the high porosity in the case of diatomite and zeolite or the penetration of ions into the interpackage space between

the bentonite layers. Mixing adsorbents, increasing their mass percentages and increasing the mass of the mixture leads to increased efficiency of the degree of cleaning from these ions. In conclusion of the study, natural minerals of the Almaty region have sorption properties that can be used for practical purposes, in particular for wastewater treatment.

Keywords: waste water, natural adsorbent, metal ions, sorption, X-ray analysis, atomic absorption spectroscopy

© М.Г. Мурзагалиева¹, Н.С. Ашимхан^{1*}, А.О. Сапиева², 2024

¹С.Д. Асфендияров атындағы Қазақ ұлттық медициналық университеті,
Алматы, Қазақстан;

²Астана Медициналық университеті, Астана, Қазақстан.

E-mail: nazgul.ashimkhan@mail.ru

АҒЫНДЫ СУЛАРДЫ ТАБИҒИ АДсорбенттермен ТАЗАЛАУДЫҢ КОЛЛОИДТЫ – ХИМИЯЛЫҚ ПРОЦЕСІН ЗЕРТТЕУ

Аннотация. Өнеркәсіптік ағынды суларды улы және ауыр металдардан тазарту өзекті мәселелердің бірі болып келеді. Ағынды судағы қалдық иондардың шекті рұқсат етілген концентрациясына талап жоғары болғандықтан тиімді және экологиялық таза әдістер қажет етіледі. *Зерттеу жұмысының мақсаты* - ағынды суларды табиғи адсорбенттермен Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2} иондарынан сорбциялық тазалау үшін коллоидтық-химиялық процесін зерттеу. *Зерттеу объектілері* - бентонит монтмориллонит (Средний Тентек), қызыл бентонит (Мукры), цеолит (Майтобе), диатомит (Іле) қолданылды. *Зерттеу әдістері* – рентгенофазалық талдау әдісі, атомдық-абсорбциялық спектрометрия. *Зерттеу нәтижесінде* рентгенофазалық талдау әдісімен табиғи адсорбенттердің химиялық құрамы анықталды. Диатомиттің құрамының негізгі компоненті SiO_2 , цеолит – $Ca_4Al_8Si_{16}O_{48} \cdot 14H_2O$ (51,3 %), бентониттер құрамы аморфты құрылысты бейделлит-монтмориллониттен тұрады. Атомдық-абсорбциялық спектрометрия әдісімен табиғи адсорбенттердің ауыр металл иондарын (Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2}) сорбциялық қасиеті зерттелді. Мукры және Средний Тентек кен орнынан шыққан бентонит ең жоғары сорбциялық қасиетке ие екені анықталды. Бентонитпен қорғасын, никель және мырыш иондарынан тазарту 82–85 % құрайды. Диатомитпен 74–76 %, ал цеолитпен 64 % тазартылды. Диатомит пен цеолиттің кеуектілігінің жоғары болуы және бентониттің құрылысы қатпарлы болуынан адсорбциялық қасиеті жоғары болатыны анықталды. Адсорбенттерді араластыру, олардың массалық үлестерінің және қоспадағы массаларының өсуі осы иондардан тазалау тиімділігі артады. *Зерттеу нәтижесінің қорытындысы* Алматы облысынан шыққан табиғи адсорбенттер сорбциялық қасиеті жоғары екенін көрсетті. Оларды практикалық мақсатта, яғни ағынды суларды тазалау үшін қолдануға болатыны анықталды.

Түйін сөздер: ағынды сулар, табиғи адсорбент, металл иондары, сорбция, рентгенофазалық талдау, атомдық-абсорбциялық спекторметрия

© М.Г. Мурзагалиева¹, Н.С. Ашимхан^{1*}, А.О. Сапиева², 2024

¹Казахский национальный медицинский университет имени С.Д.

Асфендиярова, Алматы, Казахстан;

Медицинский университет Астана, Астана, Казахстан.

E-mail: nazgul.ashimkhan@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ПРИРОДНЫМИ АДСОРБЕНТАМИ

Аннотация. Одной из актуальных проблем является очистка промышленных сточных вод от ионов токсичных и тяжелых металлов. Повышение требований к значениям нормативно-допустимого сброса сточных вод требует более эффективных и экологических способов их очистки. Целью исследовательской работы является изучение коллоидно-химических процессов сорбционной очистки сточных вод от ионов Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2} природными адсорбентами. В качестве объектов исследования были выбраны бентонит монтмориллонит (месторождение Средний Тентек), бентонит красный (месторождение Мукры), цеолит (месторождение Майтобе) и диатомит (Илийского месторождения). Методы исследования – рентгенофазовый анализ, атомно-абсорбционная спекторметрия. Рентгенофазовым анализом определен химический состав исследуемых материалов. Основным компонентом диатомита является SiO_2 , у цеолита – Laumontite состава $Ca_4Al_8Si_{16}O_{48} \cdot 14H_2O$ (51,3 %). Основой бентонитов является бейделлит-монтмориллонит, имеющий аморфную структуру. Методом атомно-абсорбционной спекторметрии были проведены исследования по сорбции ионов тяжелых металлов (Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2}) исследуемыми природными адсорбентами. Лучшими сорбционными свойствами обладают бентониты, месторождения Мукры и Средний Тентек. Здесь содержания ионов свинца, никеля и цинка уменьшаются в среднем на 82–85 %. В случае использования диатомита содержание ионов этих же металлов уменьшаются приблизительно на 74–76 %, а для цеолита на 64 %. В целом можно ожидать проявление адсорбционных свойств этих минералов, которые должны обеспечиваться вследствие высокой пористости в случае диатомита и цеолита или проникновения ионов в межпакетное пространство между слоями бентонитов. Смешивание адсорбентов, увеличение их массовых долей и повышение массы смеси приводит к повышению эффективности степени очистки от этих ионов. Авторы пришли к выводу о том, что природные минералы месторождений Алматинской области, обладают сорбционными свойствами, которые можно использовать в практических целях, в частности для очистки сточных вод.

Ключевые слова: сточные воды, природный адсорбент, ионы металлов, сорбция, рентгенофазовый анализ, атомно-абсорбционная спекторметрия **Introduction**

With the development of the industrial sector, the issue of industrial waste water treatment and waste disposal is increasingly raised. The environmental situation is deteriorating, forcing firms to tighten their requirements for disposal of waste and waste water. As you know, almost no enterprise can operate without waste and waste water. When designing production a few years ago, the formation of waste water, their further recycling and treatment were not taken into consideration. As a rule, it was solved in an increasingly simple way, wastewater was diverted to the nearest point of reception or to a relief (waterway). The effects of the discharge of wastewater were not calculated.

To date, the situation with the discharge of wastewater is changing. The search for and development of the most effective solutions in the field of industrial waste water treatment is required.

With the advent of modern methods of wastewater treatment, the problems of waste water treatment began to find their solutions. The diversity of the composition of sewage determines the breadth of choice of different technological schemes and equipment for their treatment. The range of industrial waste water treatment equipment includes equipment from different industries, adapted to the required requirements. The existing range of waste water treatment equipment is constantly expanding with the emergence of new, more efficient technologies.

The main type of galvanic waste is washing water, which contains large amounts of heavy metal ions.

The aim of the study was to conduct research on the adsorption of ions of heavy metals by natural adsorbents by X-ray phase and atomic-adsorption methods.

Methods and materials

Atomic absorption spectrometry. For the analysis of the content of heavy metal ions in wastewater before and after their treatment, the atomic absorption spectrometer MGA-915MD was used.

The principle of operation of the spectrometer is based on the use of the method of Zeeman polarization spectroscopy with high-frequency modulation, which is one of the options of selective atomic-absorption analysis.

The basis of the method used is that the atomizer is placed in a transverse magnetic field with a voltage of about 7.5 kE. Modulated at a frequency of 50 kHz by polarization radiation from the resonance source installed in the working position of the revolver, gets into the atomizer, where the horizontal component of polarization (parallel to the lines of the magnetic field) is absorbed by the identifiable atoms, interfering molecules and aerosols, and the vertical (perpendicular to the magnetic field lines) - only the molecule and the aerosol, i.e. atomic absorption for it is practically absent. At the same time, non-selective absorption for both polarizations is the same. The result is a differential signal with a frequency of 50 kHz, proportional to the concentration of atoms.

Limit of the relative average square deviation of the output signal of the spectrometer at the input of the control solution 6 %.

X-ray phase analysis. The X-rays of the samples were obtained on the

diffractometer DRON-3 in digital form using copper radiation. The sampling modes are as follows: voltage on the X-ray tube 30 kV, pipe current 30 mA, movement step of the goniometer $0.05^\circ 2\theta$ and intensity measurement time at the point - 1.0 sec. During the shooting, the specimen was rotating in its own plane at a speed of 60 rpm.

Preliminary X-ray processing to determine the angle position and intensity of reflexes was carried out by the Fpeak program. The analysis was carried out using the PCPDFWIN program with the PDF-2 diffractometric database.

Objects of investigation. Diatomite is a white-grey powder. Diatomite of Ili field. Diatomite density is 1.4 g/cm^3 . Bentonite red is a clay of brown or red color. Mukry field. Density is 0.03 g/cm^3 . Bentonite montmorillonite - clay, dark gray colour, in touch resembling soap. Middle Tentek field. Density is 1.8 g/cm^3 . Ceolite is a dark brown powder. The Maitobe field. Density: 1.9 g/cm^3 .

Results

The main objective of the study was to conduct wastewater treatment using natural adsorbents. Bentonites, diatomite and zeolite were selected as natural adsorbents. All these minerals are characterized as good adsorbents due to their structure and properties (Gholikandi et al., 2010; Ju Okoli et al., 2014; Kafia et al., 2011). The adsorbents of the fields of the Almaty region were taken: bentonite montmorillonite (Middle Tentek field), bentonites red (Mukry field), zeolite (Maitobe field) and diatomite (Ili fields).

Research on the treatment of wastewater from heavy metal ions requires knowledge of the chemical composition and structure of the potential adsorbents used. For this purpose, a X-ray phase analysis was carried out on the data of the minerals, which visually demonstrates the qualitative and semi-quantitative composition of the tested minerals.

Figure 1 shows a X-ray of the diatomite (Ili field).

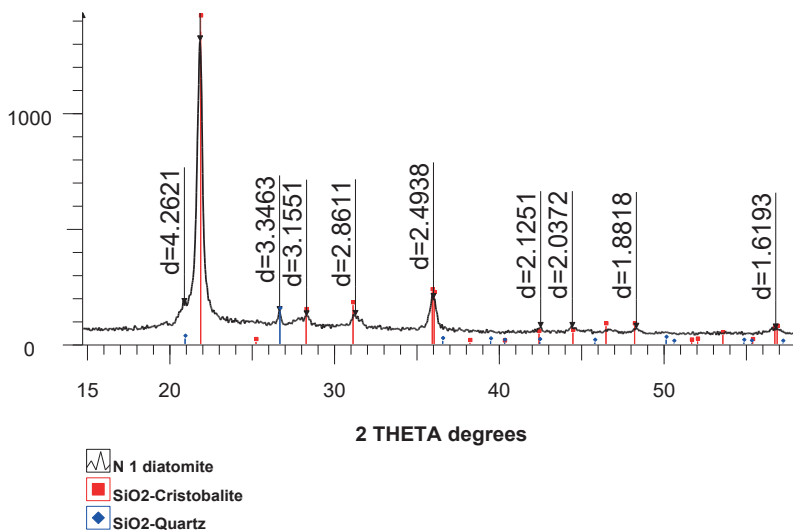


Figure 1. Diatomite X-ray (Ili field)

On the basis of an X-ray, a semi-quantitative analysis of this mineral was made, the data of which are given in table 1.

Table 1 - Results of semi-quantitative analysis of diatomite (Ili field))

Formula	%
SiO ₂ -Cristobalite	95.7
SiO ₂ -Quartz	4.3

The diatomite under investigation is silicon oxide, which is present in various forms. Cristobalite is a high-temperature modification of SiO₂ quartz. Cristobalite occurs in the form of spherulites or grapes (balls up to 1 mm in size) in obsidian (volcanic glass), as well as in voids. Sometimes with grown plates of tridimite on crystals of cristobalite, in grain clusters of correct octahedra, rarely in the form of complex cellular structure, pseudo-cubic crystals (spherical crystals), massive forms. It usually has a color ranging from milky-white to yellowish and light brown. It has a high hardness of 6–7, a specific weight of 2.32-2,36 g/cm³.

Thus, high mechanical hardness, resistance to the action of high temperature, as well as aggressive environments of diatomite is ensured by its composition. The adsorption properties of diatomite are mainly due to its high porosity.

X-ray (figure 2) and table 2 show the main composition of the ceolite (Maitobe field).

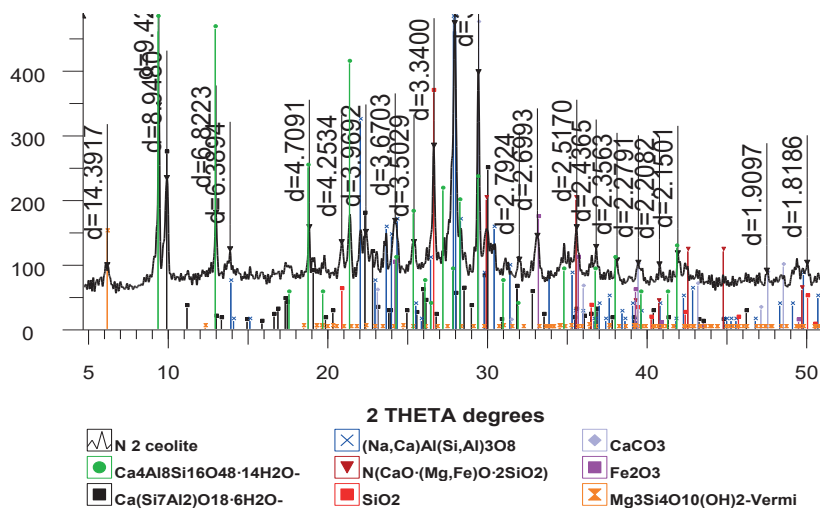


Figure 2. X-ray of the ceolitis (Maitobe field)

As can be seen from the X-rays and the table, cam ceolite is a rather complex mixture of natural minerals, which have their own characteristics and composition. For example, lamontite belongs to the group of zeolites based on aqueous calcium

aluminosilicate. It has a hardness on the Mohs scale of 3.5–4, with a density of 2.23–2.41 g/cm³, while it is quite fragile. Heulandite is a mineral, a frame silicate from the group of zeolites. Albite (lat. albus - white) is one of the most common species-forming minerals, white sodium feldspar of magmatic origin of the silicate class, aluminosilicate of the plagioclase group. Augustinite (from the Greek ἀύγη - "shining, shine") is a species-forming mineral from the clino-pyroxene group $\text{Ca}(\text{Mg,Fe,Al})[(\text{Si,Al})_2\text{O}_6]$. Coloring from green to black. Hardness 5–6.5. It is part of andesite, basalt, diabasis and other erupted mountain species of predominantly basic nature. Hematite is a common iron mineral, Fe_2O_3 , one of the main iron ore. Synonyms: red iron, iron gloss (star.) has a hardness of 5.5–6.5. It's fragile. Density 4.9–5.3. Vermiculite is a mineral from the group of hydrothermal, having a layered structure, hardness on a mineralogical scale of 1–1.5, density of 2.4–2.7 g/cm³ (0.065–0.130 g/cm³).

Table 2 - Results of semi-quantitative analysis of zeolite (Maitobe field)

Formula	%
$\text{Ca}_4\text{Al}_8\text{Si}_{16}\text{O}_{48} \cdot 14\text{H}_2\text{O}$ -Laumontite	51.3
$\text{Ca}(\text{Si}_7\text{Al}_2)\text{O}_{18} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ - Heulandite-Ca	16.1
$(\text{Na,Ca})\text{Al}(\text{Si,Al})_3\text{O}_8$ - Albite	10.1
$\text{N}(\text{CaO} \cdot (\text{Mg,Fe})\text{O} \cdot 2\text{SiO}_2) \cdot (\text{Al,Fe})_2\text{O}_3$ - Augite	7.6
SiO_2 - Quartz	6.6
CaCO_3 -Calcite	6.2
Fe_2O_3 - Haematite	1.9
$\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ -Vermiculite	0.2

Vermiculite is biologically stable - is not susceptible to degradation and rotation under the action of microorganisms, is not a favourable environment for insects and rodents, and is chemically inert - neutral to the effects of alkalins and acids. In general, it can be seen that zeolite (Maitobe field) mainly contains minerals, which have a fairly high hardness and mechanical strength. An important property of zeolites is the ability to ionic exchange, due to its crystalline structure, which is formed by the tetrahedral groups $\text{SiO}_{2/4}$ and $\text{AlO}_{2/4}$, joined by common peaks into a three-dimensional frame, permeated by cavities and channels (winders) of the size 2–15 angstrom (Khadhraoui et al., 2002; Khraisheh et al., 2004).

A similar X-ray analysis was performed with two bentonites. The first bentonite-montmorillonite X-ray is shown in figure 3. For this sample, semi-quantitative analysis is virtually impossible due to its low crystallization. Bentonite refers to layered clay, therefore in its structure there are no pronounced crystals, i.e. it is an amorphous material

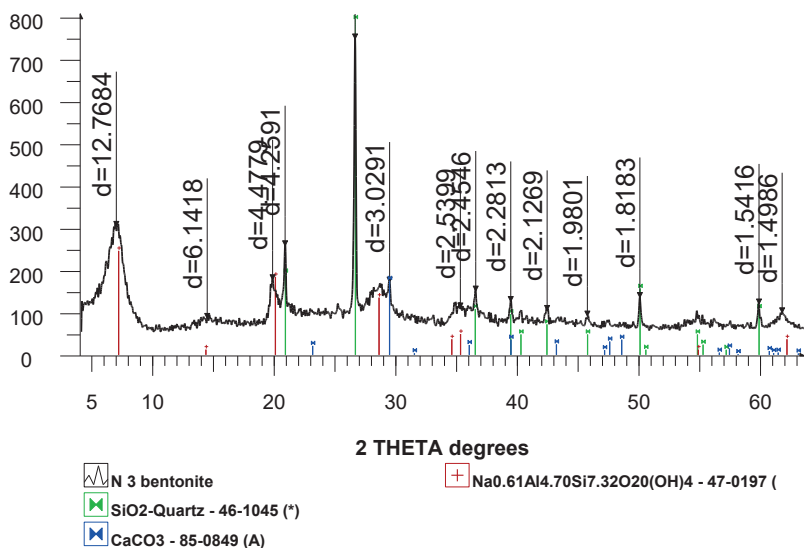


Figure 3. Bentonite-montmorillonite sample X-ray (Middle Tentek field)

In general, the main component of the tested bentonite is bedellite or otherwise - montmorillonite. It is a clay mineral belonging to the subclass of layered silicates. This mineral has a strong ability to swell due to its structure and has pronounced sorption properties (figure 4).

Three-layer package (2:1): two layers of silica tetrahedrons, facing their tops to each other, cover a layer of aluminhydroxyl octahedres on both sides. In this connection, the connection between the packets is weak, the interpackage distance is large and it can contain ions and water molecules. Because of this, the mineral when soaking is very swollen. The presence of isomorphous substitutions, a large specific surface area (up to 600–800 m²/g) and the ease of ion penetration into the interpackage space result in a significant cation exchange capacity (80–150 mmolequivalent /100 g).

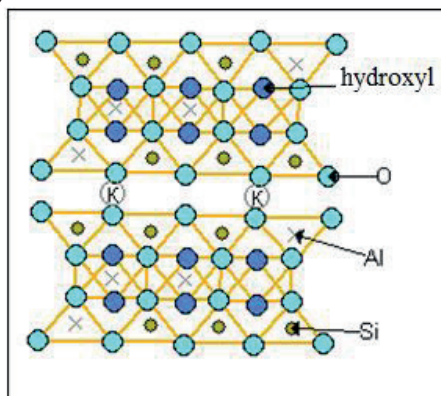


Figure 4. Structure of montmorillonite

A similar composition is found in the fourth specimen, which is the red bentonite (Mukry field) (figure 5). The sample contains the same Beidellite-12A - montmorillonite, as in the previous case. But the content of this smectite here is less.

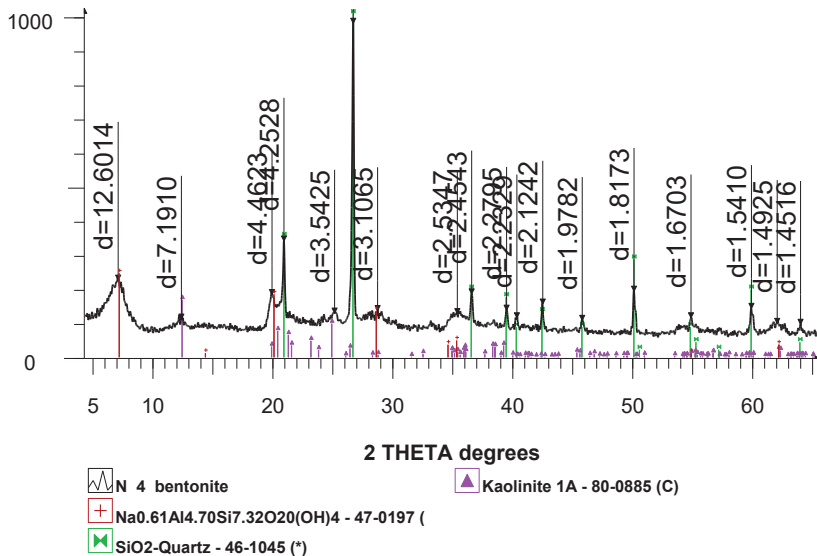


Figure 5. Red bentonite X-ray (Mukry field)

Thus, the X-ray phase analysis gave a complete picture of the chemical composition of the materials studied. Generally speaking, the adsorption properties of these minerals are expected to be achieved due to high porosity in the case of diatomite and ceolite or the penetration of ions into the interpackage space between the bentonite layers.

Spectroscopic studies of waste water before and after treatment were carried out to study the adsorption properties of these minerals. Before studying the adsorption properties, it was necessary to analyse wastewater prior to treatment (Guixia Zhao et al., 2011). Since the wastewater under investigation is waste from the galvanic production of lead batteries, it is assumed that it contains ions of lead, zinc, nickel and other heavy metals. The main types of metal ions examined in the present paper for technical purposes are lead, zinc and nickel. Table 3 shows the content of these ions in wastewater before treatment and after treatment with limestone milk by battery plant technology.

Table 3 - Results for heavy metal ions in sewage

	Ni ⁺² , мг/дм ³	Pb ⁺² мг/дм ³	Zn ⁺² мг/дм ³
Wastewater before treatment	1,801	2,465	1,347
Wastewater after treatment	0,018	0,073	0,015

As shown in table 3, the treatment of waste water with limestone milk is quite effective. After cleaning, the content of metal ions decreases. However, according to the permissible concentration limits of pollutants in sewage, wastewater levels after limestone treatment exceed the maximum allowable concentration for these lead and nickel ions. Thus, for nickel ions the maximum permissible concentration according to this regulatory document is 0.008mg / l, for lead ions - 0.01mg / l, and for zinc – 0.053mg/l.

The use of milk of lime for waste water treatment by the battery plant is based on the neutralization of acidic wastewater with alkali calcium oxide hydrate $\text{Ca}(\text{OH})_2$. In most cases, when $\text{Ca}(\text{OH})_2$ reacts with acids, insoluble calcium salts are formed, which, precipitating, can clog sewer networks. Therefore, after the neutralizers, sludge-fillers are provided, in which sludges are defended and the wastewater is further tempered.

At the plant, the waste water treatment is carried out in step-by-step pools, at the bottom of which the sludge is deposited. But as the data show, such cleansing is still not effective enough.

The waste water treatment was carried out as follows: samples of each adsorbent (2g) were mixed with 100 ml of wastewater taken before treatment. The resulting mixture was kept for 3 hours, with periodic mixing to improve the sorption process. After this, the filter was separated from the sediment and then diluted 100 times, depending on the contamination. Data are presented in table 4.

Table 4 - Co-retention of heavy metal ions in sewage by adsorption

Adsorbents/metals	C(Pb^{+2}), mg/l	C(Ni^{+2}), mg/l	C(Zn^{+2}), mg/l
diatomite	0,614±0,098	0,448±0,071	0,335±0,053
bentonite red	0,423±0,067	0,309±0,049	0,231±0,037
zeolite	0,893±0,143	0,652±0,104	0,488±0,078
bentonite montmorillonite	0,435±0,069	0,318±0,05	0,238±0,038

The results show that the content of heavy metal ions in waste water after treatment with the adsorbents under investigation is reduced compared to waste water before treatment. Comparing adsorbents among themselves, we can say that in this series bentonites manifest themselves better. Here, the content of lead, nickel and zinc ions decreases by an average of 82–85 %. If diatomite is used, the ion content of the same metals decreases by approximately 74–76 %. It's worse for zeolite. In this case, the ion concentrations detected in waste water after treatment with this adsorbent were 36 %, i.e. 64% extraction. It should also be noted that for all adsorbents lead ions are extracted to a greater extent than other ions. This is due to the high content of this ion in the original wastewater solution.

Probably, the manifestation of higher sorption properties in bentonites is associated with their more amorphous structure, which facilitates the process of penetration of ions into the interpackage space (Bokiev et al., 2018).

Compared to limestone-treated waste water, the indicators shown in table 4 for

natural adsorbents were not as effective as expected. Therefore, in order to improve the quality of purification, a study of kinetics of nickel ion sorption by adsorbent mixtures was carried out. Three adsorbents were taken – diatomite, red bentonite and bentonite-montmorillonite in different ratios. The first mixture contained 30 % of diatomite and 35 % of bentonites each, and the second mixture had the same composition, but the content of diatomite was reduced to 10 % and bentonite was increased to 45 %, respectively. In addition, kinetic curves should show whether the sorption process improves over time. Figure 6 shows the results.

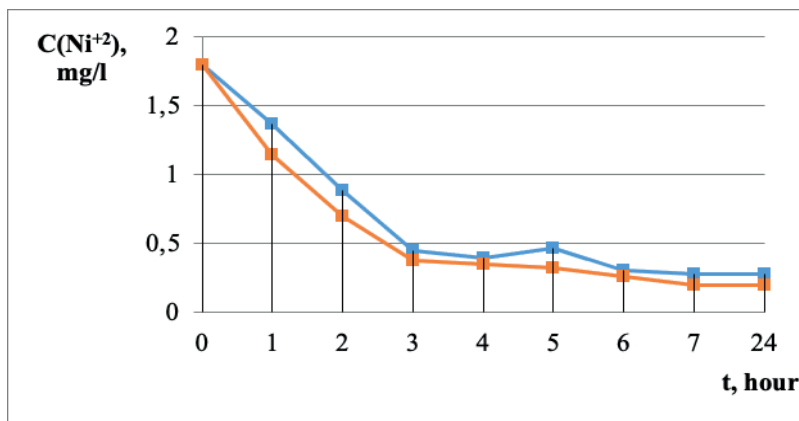


Figure 6. Ni^{2+} ion sorption kinetics by adsorbent mixtures

- 1-mixture of composition: 30 % diatomite and 35 % red bentonite and 35 % bentonite-montmorillonite
- 2-mixture of composition: 10 % diatomite and 45 % red bentonite and 45 % bentonite-montmorillonite

The dependency of the concentration of nickel ions in the sewage after its treatment with the adsorbent mixture decreases over time to the limits that are achieved when two phases are in contact during the day. Figure 6 shows that the adsorbent mixture with a higher bentonite content shows lower nickel ion content. Naturally, an increase in the number of bentonites, which exhibit higher sorption capacity, leads to an increased degree of nickel extraction. An intense change in the concentration of nickel ions for both mixtures is observed in the first 3 hours, then the curves go to constant values. According to the kinetic curve obtained, it can be said that practically holding the waste water with the adsorbent mixture for 3 hours is sufficient to pass the main sorption process. In principle, in 2.5–3 hours is usually physico-chemical sorption.

The next stage of the research was to test the effect of the mass of the adsorbent mixture on the efficiency of the cleaning process. For this purpose, the weight of adsorbent mixtures was increased to 4 grams. The ratio of the composition of the adsorbents remained the same. The data obtained are presented in figure 7, in the form of comparative charts of indicators of concentration of lead, nickel and zinc

ions after treatment of waste water with individual types of adsorbents and their mixtures. As shown in figure 7, the lead ion content of waste water after treatment with adsorbent mixtures is reduced to 0.335 mg/l for a single mixture and to 0.268 mg/l for a two-mixture where the bentonite content is higher. These concentrations of Pb^{+2} are the lowest in the range of adsorbents used. For example, compared to the indicators for zeolite, these values are 2.5–3 times smaller. They are less than indicators for diamond almost 2 times. The adsorbent mixture is more effective in cleaning the waste water from lead ions than pure bentonites. Here, cleaning efficiency is achieved by increasing the mass of adsorbent mixtures. It would be possible to further increase the mass of adsorbents, however, an increase in the percentage weight of the adsorbent material is not desirable, as this proportionally increases the weight of sludge, which is also undesirable in technological processes.

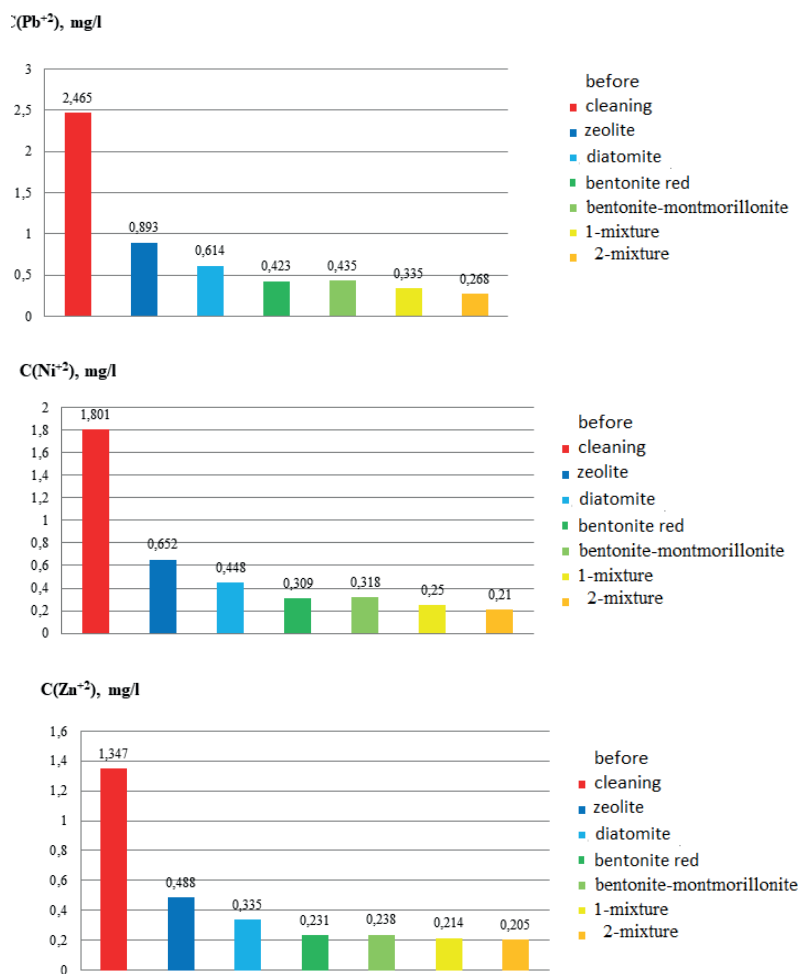


Figure 7. Concentrations of lead, nickel and zinc ions after cleaning with adsorbents and mixtures

Analysis was performed with nickel ions. As shown in figure 7, the content of nickel ions in sewage after its treatment with adsorbent mixtures is reduced to 0.25 mg/l for a single mixture and to 0.21 mg/l for a two mixture where the bentonite content is higher. Here too, as with lead ions, the relative content of Ni^{+2} is significantly reduced compared to zeolite and diatomite.

The same pattern is observed for zinc ions (figure 7). Here the Zn^{+2} content in the treated waste water in the case of adsorbent mixtures is 0.25 mg/l and 0.21 mg/l. These data show that the mixtures are the best in this range of sorbents. But once again it is necessary to add that the improvement of the sorption process is due not only to the composition of adsorbents, but also to their mass.

Table 5 - Degrees of extraction of metal ions by adsorbents and their mixtures

Adsorbents	Degree of extraction (Pb^{+2}), %	Degree of extraction (Ni^{+2}), %	Degree of extraction (Zn^{+2}), %
zeolite	63,77	63,8	63,77
diatomite	75,09	75,12	75,13
red bentonite	82,84	82,84	82,85
betonite montmorillonite	82,35	82,34	82,33
1-mixture	86,41	86,12	84,11
2-mixture	89,12	88,34	84,78

A clearer demonstration of the effectiveness of adsorbent mixtures is table 5, where the obtained data were used to calculate the degree of extraction of metal ions by all of the above adsorbents. The highest recovery rates are noted for lead and nickel ions when mixtures are used. The increase in the degree of extraction for the first mixture reaches 86 % and for the second mixture – 89 % for lead ions. The degree of extraction is 86 % and 88 % for nickel ions. And for zinc ions, these values reach 84 %. Thus, mixing adsorbents, increasing their mass fractions and increasing the mass of the mixture leads to a more efficient result. However, the achieved values are not sufficient for the treatment of these wastewaters, as they exceed the norms of the maximum allowable concentration.

Studies conducted in the work on the selection of effective natural adsorbents for the treatment of wastewater have shown that the natural materials used in the works, fields of Almaty region, have sorption capacity. The highest sorbent properties of a number of the objects studied are the bentonites, the Mukry and the Middle Tentek fields. The predominant sorption of heavy metal ions (Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2}) is likely to be associated with the increased ion exchange capacity of these clay minerals, due to their amorphous structure and high inflatability, which contributes to the rapid penetration of ions into the interpackage space. The lower sorption activity observed in zeolite and diatomite is probably due to the fact that the rigid frame-band structure of these minerals contains less ion-exchangeable ions.

Studies of the kinetics of nickel ion adsorption in adsorbent mixtures showed that an increase in the bentonite mass ratio leads to an increased sorption. Significant changes in the concentration of Ni^{+2} in the test solutions occur within 3 hours, after which values decrease less sharply.

Increasing the mass of the adsorbent by 2 times increases the extraction of heavy metal ions from wastewater solutions to 84–89 %. The results, however, exceed the maximum permissible concentration standards that are imposed on sewage. Per treatment of wastewater with the same adsorbents in two successive stages would result in the desired results.

Conclusion

The work conducted studies on the treatment of waste water using natural adsorbents. As natural adsorbents have been chosen bentonite montmorillonite (Middle Tentek field), bentonite red (Mukry field), ceolite (Maitobe field) and diatomite (Ili field).

X-ray phase analysis was performed to identify the chemical composition of the objects studied. A qualitative and semi-quantitative analysis of minerals was done, according to which the main component of diatomite is SiO_2 , in the zeolite – Laumontite composition $\text{Ca}_4\text{Al}_8\text{Si}_{16}\text{O}_{48} \cdot 14\text{H}_2\text{O}$ (51,3 %). The base of bentonites is bedellite-montmorillonite, which has an amorphous structure. In addition to the specified substances, these minerals contain other inclusions characteristic of mineral compounds of natural origin (CaCO_3 , CaO , Fe_2O_3 , $\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$).

Atomic-absorption spectroscopy was used to investigate the sorption of heavy metal ions (Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2}) by natural adsorbents. The results show that the content of heavy metal ions in waste water after treatment with the adsorbents studied decreases compared to waste water before treatment. Bentonites, Mukry and Medium Tentek fields have the best sorption properties. Here, the content of lead, nickel and zinc ions decreases by an average of 82–85 %. If diatomite is used, the ion content of these same metals decreases by approximately 74–76 %, and for zeolite by 64 %. The predominant sorption of heavy metal ions (Pb^{+2} , Ni^{+2} , Zn^{+2}) is likely to be associated with the increased ion exchange capacity of these clay minerals, due to their amorphous structure and high inflatability, which contributes to the rapid penetration of ions into the interpackage space. The lower sorption activity observed in zeolite and diatomite is probably due to the fact that the rigid frame-band structure of these minerals contains less ion-exchangeable ions.

Studies of the kinetics of nickel ion adsorption in adsorbent mixtures showed that an increase in the bentonite mass ratio leads to an increased sorption. Significant changes in the concentration of Ni^{+2} in the test solutions occur within 3 hours, after which values decrease less sharply.

Increasing the weight of the adsorbent by 2 times increases the extraction of heavy metal ions from wastewater solutions. The increase in extraction rate for 1 mixture (30 % diatomite, 70 % bentonite) reaches 86 % and for 2nd mixture (10 % diatomite and 90 % bentonites) 89 % for lead ions. The extraction rate for these same mixtures is 86 % and 88 % for nickel ions, respectively. And for zinc ions, these values reach 84 %. Thus, mixing adsorbents, increasing their mass percentages and increasing the mass of the mixture leads to increased cleaning efficiency from these ions.

The conducted studies have shown that the natural minerals of the Almaty region deposit have sorption properties that can be used for practical purposes, in particular for wastewater treatment. Since the results obtained exceeded the norms of the maximum permissible concentration for wastewater, it can be recommended to use these sorbents in wastewater treatment processes along with other methods (reagent, biological, etc.).

REFERENCES

- Bokiev B., Khujaev P., Sharipov Sh. & Murodov P. (2018). Sorption method for purification of industrial wastewater waters. *Bulletin of Science and Practice*, — 4(7):203–209. — file:///C:/Users/ASUS/Downloads/sorbtsionnyy-metod-ochistki-proizvodstvennyh-stochnyh-vod%20(1).pdf (in Rus.)
- Gholikandi G.B., Baneshi M.M., Dehghanifard E., Salehi S., Yari A.R. (2010). Natural zeolites application as sustainable adsorbent for heavy metals removal from drinking water, *Iranian J. of Toxicology*, — 3:302-310. — DOI: <http://ijt.arakmu.ac.ir/article-1-53-en.html> (in Eng.)
- Guixia Zhao, Xilin Wu, Xiaoli Tan, Xiangke Wang (2011). Sorption of Heavy Metal Ions from Aqueous Solutions: A Review, *The Open Colloid Science Journal*, 4:19–31. DOI: 10.2174/1876530001104010019 (in Eng.)
- Ju Okoli, Ibe Ezuma (2014). Adsorption studies of heavy metals by low-cost adsorbents, *J. Appl. Sci. Environ. Manage*, — 3:443–448. — DOI: <http://dx.doi.org/10.4314/jasem.v18i3.11> (in Eng.)
- Kafia M., Shareef S. (2011). Agricultural Wastes as Low Cost Adsorbents for Pb Removal: Kinetics, Equilibrium and Thermodynamics. *Intern. J of Chem*. — 3:19-32. — DOI: <https://doi.org/10.5539/ijc.v3n3p103> (in Eng.)
- Khadhraoui M., Watanabe T., Kuroda M. (2002). The effect of the physical structure of a porous Ca-based sorbent on its phosphorus removal capacity, *Water Res.*, — 15:3711–3718. — DOI: [https://doi.org/10.1016/s0043-1354\(02\)00096-9](https://doi.org/10.1016/s0043-1354(02)00096-9) (in Eng.)
- Khraisheh M.A., Al-Ghouti M.A., Allen S.J., Ahmad M.A. (2004). The Effect of pH, Temperature, and Molecular Size on the Removal of Dyes from Textile Effluent Using Manganese Oxides-Modified Diatomite, *Water Environ. Res.*, — 7:2655–2663. — DOI: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/16042113/> (in Eng.)

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 219–229

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.268>

ӨОЖ 678.028

FTAXA 616331

© **G.F. Sagitova***, **S.A. Sakibayeva**, **B.A. Sakybayev**, **Z.A. Emkulova**,
V.Yu. Morozova, 2024

M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan.

DEVELOPMENT OF SEALING RUBBERS BASED ON BUTADIENE-NITRILE RUBBERS AND FILLERS

Sagitova Guzaliya — Candidate of technical sciences, Assoc. Prof of the chair «Technology of inorganic and petrochemical industries» of M. Auezov South Kazakhstan university

E-mail: guzalita.fl1978@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7913-7453>;

Sakibayeva Saule — Candidate of technical sciences, Prof of the chair «Technology of inorganic and petrochemical industries» of M. Auezov South Kazakhstan university

E-mail: saule.sakibayeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8697-9309>;

Sakybayev Berik — Senior Lecturer, doctor PhD of the Department of «Oil and Gas Business» of M. Auezov South Kazakhstan university,

E-mail: neftehimstroy@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-5474-3841>;

Emkulova Zakira — Senior teacher of the department «Foreign languages for humanitarian specialties» of M. Auezov South Kazakhstan university

E-mail: zakira.emkulova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1421-6681>;

Morozova Valentina — Senior teacher of the department «Foreign languages for humanitarian specialties», M. Auezov South Kazakhstan university

E-mail: ricco-shym@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9928-4530>.

Abstract. Improving the efficiency of machinery and equipment is the most important task of industrial engineering. One way to solve this problem is to ensure the smooth operation of the least reliable nodes that limit the operation of all equipment. Such nodes include, first of all, seals. To increase the resource of these units, it is necessary to look for opportunities to improve the performance of seals, for example, by using a special recipe for rubber mixtures or by introducing appropriate additives into standard rubber mixtures. Increasing the technical level of rubber products will increase the service life and efficiency of equipment operation. This is of paramount importance in a market economy. In this paper, the possibility of using zeolite from the Daubabinsky deposit in the recipe of a sealing rubber compound is investigated. To study the effect of zeolites on the properties of rubbers, a recipe was used to create a seal by partially replacing carbon. The use of natural mineral fillers in the rubber mixture makes it possible to improve their performance and reduce the cost of production. In this sense, natural zeolites

deserve great attention, which are minerals consisting mainly of aluminum silicates of alkaline earth metals. It can be concluded that the task of manufacturing rubber for sealing elements of oilfield equipment can be solved by introducing special additives into the recipe of rubber mixtures, that is, zeolite from the Daubabinsky field. Because when using natural zeolite, the properties of rubbers practically do not change, they comply with control standards. Optimal physical and mechanical properties of rubbers were observed when using 15 mass parts of zeolite. Thus, partial replacement of carbon black with zeolite showed increased rigidity, strength and elongation of the studied rubbers. As a rule, the use of zeolite in rubbers prolongs the service life of machines and reduces their cost.

Keywords: ingredients, rubber compound, zeolite, sealer, rubber, rubber products

© Г.Ф. Сагитова*, С.А. Сакибаева, Б.А. Сақыбаев, З.А. Емкулова,
В.Ю. Морозова, 2024

М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.
E-mail: guzalita.f1978@mail.ru

БУТАДИЕН-НИТРИЛДІ КАУЧУКТАР МЕН ТОЛЫҚТЫРҒЫШТАР НЕГІЗІНДЕГІ ТЫҒЫЗДАҒЫШ РЕЗИНАЛАРДЫ ӘЗІРЛЕУ

Сагитова Г.Ф. — техника ғылымдарының кандидаты, «Бейорганикалық және мұнайхимия өндірістерінің технологиясы» кафедрасының профессоры, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті

E-mail: guzalita.f1978@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7913-7453>;

Сакибаева С.А. — техника ғылымдарының кандидаты, «Бейорганикалық және мұнайхимия өндірістерінің технологиясы» кафедрасының профессоры, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті

E-mail: saule.sakibaeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8697-9309>;

Сақыбаев Б.А. — PhD докторы, «Мұнайгаз ісі» кафедрасының аға оқытушысы, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті

E-mail: neftehimstroy@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-5474-3841>;

Емкулова З.А. — «Гуманитарлық мамандықтар үшін шет тілі» кафедрасының аға оқытушысы, магистр, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті

E-mail: zakira.emkulova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1421-6681>;

Морозова В.Ю. — «Гуманитарлық мамандықтар үшін шет тілі» кафедрасының аға оқытушысы, магистр, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті

E-mail: ricco-shym@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9928-4530>.

Аннотация. Машиналар мен жабдықтардың жұмыс қабілеттілігін арттыру салалық машина жасаудың маңызды міндеті болып табылады. Оны шешудің бір тәсілі - барлық жабдықтардың жұмысын шектейтін ең аз сенімді түйіндердің үздіксіз жұмыс істеуін қамтамасыз ету. Мұндай түйіндерге, ең алдымен, тығыздағыштар жатады. Бұл түйіндердің ресурсын ұлғайту үшін, мысалы, резина қоспаларының арнайы рецептін қолдану немесе стандартты резина қоспаларына тиісті қоспаларды енгізу арқылы тығыздағыштардың

өнімділігін арттыру мүмкіндіктерін іздеу қажет. Резина-техникалық бұйымдардың техникалық деңгейін арттыру жабдықты пайдалану мерзімін және пайдалану тиімділігін арттыруға мүмкіндік береді. Бұл нарықтық экономика жағдайында бірінші кезектегі маңызға ие. Бұл жұмыста тығыздағыш резина қоспасының рецептінде Дәубаба кен орнының цеолитін қолдану мүмкіндігі зерттелді. Цеолиттердің резиналардың қасиеттеріне әсерін зерттеу үшін көміртекті ішінара алмастыру арқылы тығыздағыш жасауға арналған рецепт қолданылды. Табиғи минералды толықтырғыштарды резина қоспасында қолдану олардың өнімділігін жақсартуға және өнімнің өзіндік құнын төмендетуге мүмкіндік береді. Осы тұрғыдан алғанда, негізінен сілтілі жер металдарының алюминий силикаттарынан тұратын минералдар болып табылатын табиғи цеолиттер үлкен назар аударуға тұрарлық. Мұнай кәсіпшілігі техникасының тығыздағыш элементтері үшін резиналарды жасау міндетін резина қоспаларының рецептіне арнайы қоспаларды енгізу арқылы, яғни Дәубаба кен орнының цеолитімен шешуге болады деген қорытынды жасауға болады. Өйткені табиғи цеолитті пайдаланған кезде резиналардың қасиеттерінің көрсеткіштері іс жүзінде өзгермейді, бақылау нормаларына сәйкес келеді. Цеолиттің 15 масс. бөлігін пайдалану кезінде резиналардың оңтайлы физика-механикалық көрсеткіштері байқалды. Осылайша, техникалық көміртекті цеолитпен ішінара ауыстыру зерттелетін резиналардың қаттылығы, беріктігі мен салыстырмалы ұзаруының жоғарылауын көрсетті. Жалпы, цеолитті резиналарда қолдану машиналардың қызмет ету мерзімін ұзртады және олардың құнын төмендетеді.

Түйін сөздер: ингредиенттер, резина қоспасы, цеолит, тығыздағыш, резина, резина техникалық бұйымдар

© Г.Ф. Сагитова*, С.А. Сакибаева, Б.А. Сақыбаев, З.А. Емкулова,
В.Ю. Морозова, 2024

Южно-Казахстанский университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан.
E-mail: guzalita.f1978@mail.ru

РАЗРАБОТКА УПЛОТНИТЕЛЬНЫХ РЕЗИН НА ОСНОВЕ БУТАДИЕН-НИТРИЛЬНЫХ КАУЧУКОВ И НАПОЛНИТЕЛЕЙ

Сагитова Г.Ф. — к.т.н., профессор кафедры «Технология неорганических и нефтехимических производств» ЮКУ им. М. Ауэзова

E-mail: guzalita.f1978@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7913-7453>;

Сакибаева С.А. — к.т.н., профессор кафедры «Технология неорганических и нефтехимических производств» ЮКУ им. М. Ауэзова

E-mail: saule.sakibayeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8697-9309>;

Сақыбаев Б.А. — Доктор PhD, старший преподаватель кафедры «Нефтегазовое дело», Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова

E-mail: neftehimstroy@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0001-5474-3841>;

Емкулова З.А. — старший преподаватель, магистр кафедры «Иностранные языки для гуманитарных специальностей» ЮКУ им. М. Ауэзова

E-mail: zakira.emkulova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1421-6681>;

Морозова В.Ю. — старший преподаватель, магистр кафедры «Иностранные языки для гуманитарных специальностей» ЮКУ им. М. Ауэзова
E-mail: ricco-shym@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9928-4530>.

Аннотация. Повышение работоспособности машин и оборудования является важнейшей задачей отраслевого машиностроения. Один из способов решить эту проблему -обеспечить бесперебойную работу наименее надежных узлов, ограничивающих работу всего оборудования. К таким узлам относятся, прежде всего, уплотнения. Чтобы увеличить ресурс этих узлов, необходимо искать возможности для повышения производительности уплотнений, например, с помощью специального рецепта резиновых смесей или путем введения соответствующих добавок в стандартные резиновые смеси. Повышение технического уровня резинотехнических изделий позволит увеличить срок эксплуатации и эффективность эксплуатации оборудования. Это имеет первостепенное значение в условиях рыночной экономики. В данной работе исследована возможность применения цеолита Даубабинского месторождения в рецепте уплотнительной резиновой смеси. Для изучения влияния цеолитов на свойства резин использовался рецепт для создания уплотнения путем частичной замены углерода. Применение натуральных минеральных наполнителей в резиновой смеси позволяет улучшить их работоспособность и снизить себестоимость продукции. В этом смысле большое внимание заслуживают природные цеолиты, которые представляют собой минералы, состоящие в основном из силикатов алюминия щелочноземельных металлов. Можно сделать вывод, что задачу изготовления резин для уплотнительных элементов нефтепромысловой техники можно решить введением в рецепт резиновых смесей специальных добавок, то есть цеолита Даубабинского месторождения. Потому что при использовании природного цеолита показатели свойств резин практически не меняются и соответствуют нормам контроля. Оптимальные физико-механические показатели резин наблюдались при использовании 15 масс.ч. цеолита. Таким образом, частичная замена технического углерода цеолитом показала повышенную жесткость, прочность и относительное удлинение исследуемых резин. Как правило, использование цеолита в резинах продлевает срок службы машин и снижает их стоимость.

Ключевые слова: ингредиенты, резиновая смесь, цеолит, уплотнитель, резина, резинотехнические изделия

Кіріспе

Машиналар мен жабдықтардың жұмыс қабілеттілігін арттыру салалық машина жасаудың маңызды міндеті болып табылады. Оны шешудің бір тәсілі — барлық жабдықтардың жұмысын шектейтін ең аз сенімді түйіндердің үздіксіз жұмыс істеуін қамтамасыз ету. Мұндай түйіндерге, ең алдымен, тығыздағыштар жатады. Өйткені резина параметрлері көптеген жағдайларда

ресурс бойынша өндіріс талаптарына сәйкес келмейді. Аталған түйіндер қатаң пайдалану жағдайында жұмыс істейді. Бұл ретте тығыздағыштарға қол жеткізу шектеулі. Ал олардың қызмет ету мерзімі жабдықтың негізгі түйіндерінің қызмет ету мерзімінен кем болмауы тиіс.

Бұл түйіндердің ресурсын ұлғайту үшін, мысалы, резина қоспаларының арнайы рецептін қолдану немесе стандартты резина қоспаларына тиісті қоспаларды енгізу арқылы тығыздағыштардың өнімділігін арттыру мүмкіндіктерін іздеу қажет. Резина-техникалық бұйымдардың (РТБ) техникалық деңгейін арттыру жабдықты пайдалану мерзімін және пайдалану тиімділігін арттыруға мүмкіндік береді. Бұл нарықтық экономика жағдайында бірінші кезектегі маңызға ие.

Резина өнеркәсібінің өзекті мәселесі-қолданылатын ингредиенттердің шикізат базасын кеңейту және көміртегі сияқты дәстүрлі қымбат толықтырғыштарды экологиялық таза табиғи қосылыстармен алмастыру. Осыған сәйкес, бұл жұмыстың мақсаты цеолитті тығыздағыш өндірісіне арналған резина қоспаларының рецептінде толықтырғыш ретінде қолдану мүмкіндігін зерттеу болып табылады.

Табиғи минералды толықтырғыштарды резина қоспасында қолдану олардың өнімділігін жақсартуға және өнімнің өзіндік құнын төмендетуге мүмкіндік береді. Осы тұрғыдан алғанда, негізінен сілтілі жер металдарының алюминий силикаттарынан тұратын минералдар болып табылатын табиғи цеолиттер үлкен назар аударуға тұрарлық. Цеолиттердің химиялық құрамы кен орнына байланысты. Бұл зерттеулерде химиялық құрамы бойынша негізінен кремний және алюминий тотықтарынан (SiO_2 – 60–74 %, Al_2O_3 – 14–15 %), сондай-ақ натрий, темір, кальций, магний тотықтарынан тұратын Қазақстанның Даубаба кен орнының цеолиті пайдаланылды. Даубаба кен орнының цеолитінің бұрын зерттелген құрамы мен құрылымы оның жоғары беттік белсенділігін, қосымша байланыстар түзу қабілетін көрсетеді және оларды жоғары молекулалық қосылыстардың толықтырғыштары ретінде пайдалануға кең мүмкіндіктер ашады (Сагитова, 2021; Сагитова және т.б., 2008; Сагитова және т.б., 2021).

Шина резиналарында толықтырғыш ретінде кеңінен қолданылатын техникалық көміртектің бірқатар кемшіліктері бар: от пен жарылыс қаупінің жоғарылауы, тасымалдаудың күрделілігі, қымбаттығы, шетелден әкелу қажеттілігі.

Зерттеу материалдары мен әдістері

Зерттеу нысандары ретінде қарастырылды:

-Дәубаба кен орнының цеолиті; Цеолиттердің жалпы химиялық формуласы: $\text{Me}_{x/n} [\text{Al}_x \text{Si}_y \text{O}_{2(x+y)}] \times z\text{H}_2\text{O}$, мұндағы Me-металл, n-оның тотығу дәрежесі, x-алюминий атомдарының саны, у-кремний атомдарының саны, z-су молекулаларының саны.

- тығыздағыштарға арналған резина қоспаның рецепті, (1-кесте);

Резина қоспасы зертханалық білікте алынды (МЕМСТ 14333–79Е Резина өңдеу біліктері).

Зерттеулер төменде келтірілген әдістермен жүргізілді:

-цеолиттерді рентгендік құрылымдық талдау ("Дрон-3" дифрактометрі) арқылы жүргізілді (сурет 1).

-үлгілердің серпімді-беріктік сипаттамалары МЕМСТ270–75 сәйкес ұзу машинасында анықталды (ГОСТ270–75, 1975).

- Шора бойынша қаттылығы, МЕМСТ 263-75. (ГОСТ263–75, 1989).

Нәтижелер және оларды талқылау

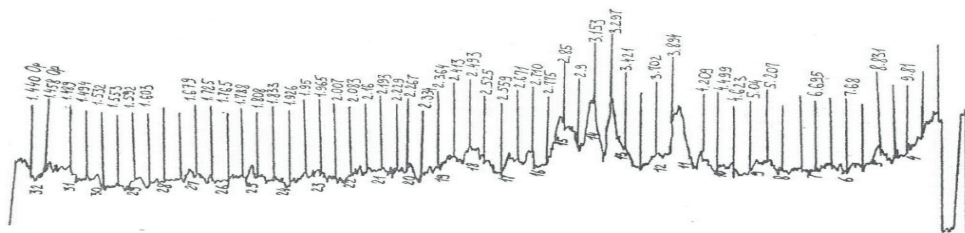
Дәубаба кен орнының цеолит құрамын зерттеу рентгендік құрылымдық талдау әдісімен жүргізілді.

Цеолиттің дифрактограммасында басым минералды фаза – клиноптилолит дифракторлы максимумдары: 4,623₍₅₎ – 4,25₍₇₎ – 3,421₍₂₎ – 3,297₍₁₀₎ – 3,04₍₇₎ – 2,98₍₇₎ – 2,90₍₇₎ – 2,775₍₅₎ – 2,57₍₆₎ – 2,43₍₂₎ – 2,16₍₇₎ – 2,007₍₅₎ – 1,926₍₃₎ – 1,808₍₉₎ – 1,458₍₂₎ – 1,44₍₂₎ болып табылады.

Дифракциялық максимумның аз интенсивтігі гейландитте (Ca,Na₂) [Al₂Si₆O₁₆*5H₂O]: 9,81₍₈₎ – 8,831₍₈₎ – 5,207₍₆₎ – 4,499₍₄₎ – 3,98₍₁₀₎ – 3,421₍₇₎ – 3,10₍₆₎ – 2,95₍₈₎ – 2,85₍₆₎ – 2,710₍₄₎ – 2,559₍₄₎ – 1,965₍₆₎ – 1,788₍₆₎ – 1,603₍₂₎ – 1,553₍₂₎ – 1,494₍₄₎ – 1,458₍₄₎, ал филлипситте дифракторлы максимумымен: 7,68₍₁₀₎ – 6,695₍₁₀₎ – 5,207₍₄₎ – 5,04₍₄₎ – 4,209₍₆₎ – 3,153₍₁₀₎ – 2,958₍₄₎ – 2,67₍₆₎ – 2,525₍₄₎ – 2,413₍₄₎ – 2,16₍₂₎ – 2,083₍₂₎ – 1,965₍₄₎ – 1,83₍₂₎ – 1,765₍₂₎ – 1,725₍₂₎ – 1,672₍₂₎ – 1,553₍₂₎ – 1,489₍₂₎ байқалады (Сагитова, 2021).

Рентгенограммадағы қалған шыңдарды шабазит пен тенардитке жатқызу керек. Олардың ондық максимумдары кестелік мәліметтер бойынша 2,93 және 2,94 құрайды. Бұл рентгенограммада байқалған дифракциялық максимум 2,958 қарқындылығын түсіндіреді.

Рентгендік құрылымдық талдаудың нәтижелері 1-суретте көрсетілген.



Сурет 1. Дәубаба кен орны цеолитінің рентгенограммасы

Цеолиттердің резиналардың қасиеттеріне әсерін зерттеу үшін көміртекті ішінара алмастыру арқылы тығыздағыш жасауға арналған рецепт қолданылды (1-кесте).

Каучуктің негізі ретінде бутадиен-нитрилді каучук СКН-18 пайдаланылды. Резиналардың қасиеттерін анықтау компоненттерді таңдау және резина

қоспаларының рецептін түзету кезінде тікелей жүзеге асырылды. Резина қоспасы ПД 320 160/160 зертханалық білігінде жасалды. Мұнай-газ салаларында кеңінен таралған (1–3 белгіленген) жаңа сынақ және стандартты эталон маркасымен белгіленген резина қоспаларының рецептісінің көрсеткіштері анықталды.

Резина қоспасы этанол, техникалық майлар мен бензин ортасында пайдалану үшін профильді және қалыпталған бөлшектерді өндіруде кеңінен танымал. Ол майға төзімді манжеттер, сақиналар, техникалық плиталар, тығыздағыштар, құбырлар, профильдер, сымдар және басқа да РТБ өндірісінде қолданылады. Шикі резина өндірісінің заманауи технологиялары сыртқы агрессивті ортаның жағымсыз факторларына төзімділігі жоғары өнімдерді шығаруға мүмкіндік береді. Оларды ең кең температура (-60-тан 100 °С дейін) диапазонында қолдануға болады (Мартин, 2013; ГОСТ Р 54554-2011, 2018).

Кесте 1. Тығыздағыш жасауға арналған резина қоспасының рецепті

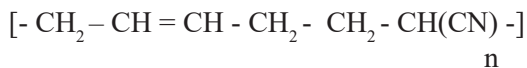
Ингредиенттердің атауы	Каучуктің 100 массалық үлесіне, масс. ү.			
	Эталон	1	2	3
СНК-18	100	100	100	100
Техникалық күкірт	0,3	0,3	0,3	0,3
Тиурам Д	0,5	0,5	0,5	0,5
Сульфенамид Ц	3,0	3,0	3,0	3,0
Параоксизон	1,0	1,0	1,0	1,0
Альдоль- α -нафтиламин	4,0	4,0	4,0	4,0
Мырыш оксиді	7,5	7,5	7,5	7,5
Техуглерод П-245	60	60	60	60
Техуглерод П-514	60	53	45	35
Май фракцияларының қышқылдары С17–С20	1,0	1,0	1,0	1,0
Пластификатор-эфир ЛЗ-7	22,5	22,5	22,5	22,5
Гексол ЗВ	0,6	0,6	0,6	0,6
Диафен ФП	1,0	1,0	1,0	1,0
Дәубаба кен орнының цеолиті	-	7	15	25
Барлығы	268,6	268,6	268,6	268,6

Дайын резина қоспалары бөлме температурасында 2 сағат бойы сақталды. Содан кейін стандартты және тәжірибелі үлгілерді алу үшін 165 °С престае 10 минут вулкандалды. Төменде резина қоспасының физика-механикалық қасиеттерін зерттеу нәтижелері 2–5 суреттерде келтірілген (ГОСТ269–66, 2001).

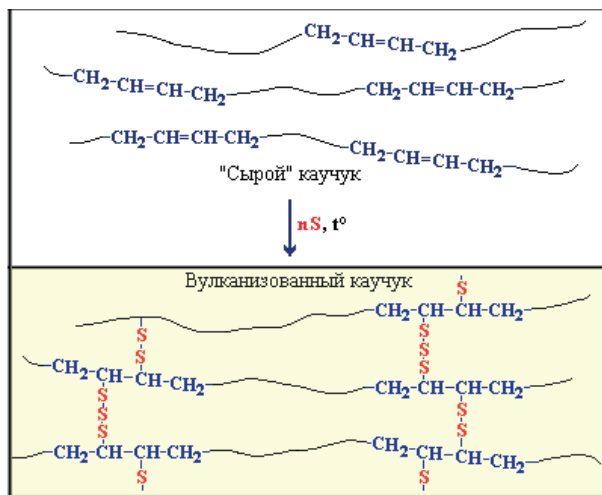
Вулкандау — резина өндірісінің технологиялық процесі. Онда пластикалық «шикі» каучук резинаға айналады. Вулкандау кезінде резинаның беріктік сипаттамалары, оның қаттылығы, серпімділігі, жылуға және аязға төзімділігі артады. Органикалық еріткіштерде ісіну дәрежесі мен ерігіштігі төмендейді. Вулкандаудың мәні - каучук сызықты макромолекулалардың вулкандау торы деп аталатын біртұтас «өзара байланысқан» жүйеге қосылуы. Вулкандау

нәтижесінде макромолекулалар арасында көлденең байланыстар пайда болады. Олардың саны мен құрылымы вулкандану әдісіне байланысты. Вулкандану процесінде -C-S-C-; C-S-S-C- байланыстарының әртүрлі типтері бар вулкандану торы түзіледі. Вулкандану кезінде вулкандалған қоспаның кейбір қасиеттері уақыт өте келе монотонды емес, максимумнан немесе минимумнан өтеді. Резиналардың әртүрлі физика-механикалық қасиеттерінің ең жақсы үйлесуіне қол жеткізілетін вулкандану дәрежесі оңтайлы вулкандану деп аталады (Корнев, 2000).

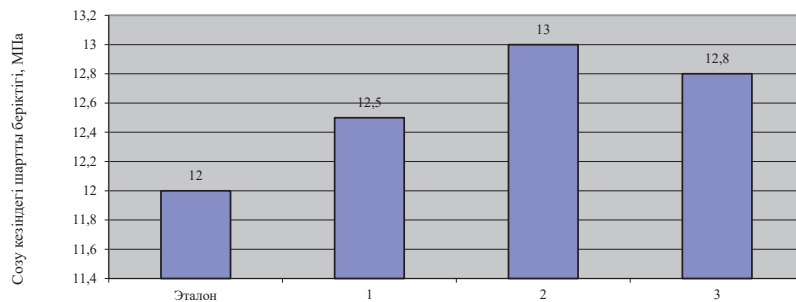
Бутадиен-нитрил бұл акрилонитрил ($CH_2 = CHCN$) мен бутадиеннің ($CH_2 - CH - CH = CH_2$) бір үлкен көп элементті тізбекке полимерленуі болып табылады. Акрилонитрилдің мөлшері негізгі полимерде болатын майға төзімділіктің әртүрлі дәрежесін алу үшін өзгереді. Әдеттегі диапазондар акрилонитрилдің 14-50 пайызын құрайды (Кошелев, 1968, Догадкин, 1959 Сакибаева, 2013).



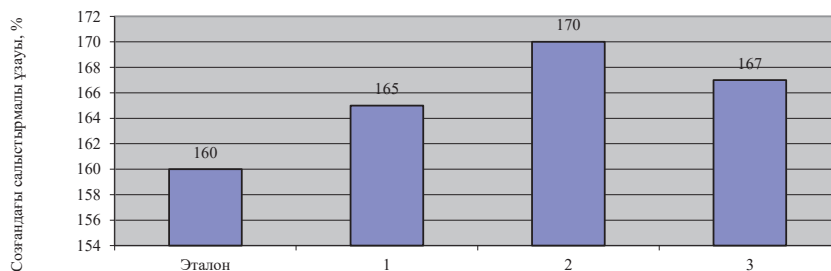
Бутадиен-нитрилді каучук (БНК) негізіндегі резиналардың негізгі қасиеттері олардағы акрилонитрилдің (АКН) құрамына байланысты. Құрамының жоғарылауымен беріктік қасиеттері, қаттылығы, тозуға төзімділігі, алифатты көмірсутектердегі ісінуге төзімділігі және термиялық қартаюға төзімділігі артады. Сонымен қатар, икемділік пен аязға төзімділік айтарлықтай төмендейді. Бірнеше деформация кезінде жылу пайда болады. БНК негізіндегі резина алифатты көмірсутектерде, майларда және өсімдік майларында ісінуге төзімділігі жоғары, бірақ полярлы, хош иісті және хлор бар органикалық қосылыстарда қатты ісінеді. Вулкандану процесі бутадиеннің қос байланысы арқылы жүреді.



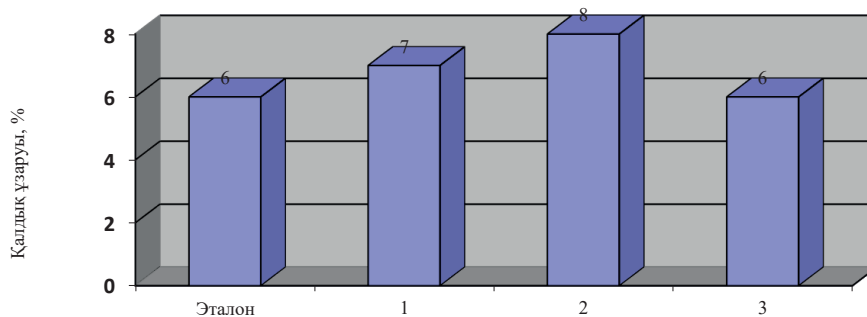
Алынған резина қоспасының сынақ нәтижелері 2-5 суреттерде келтірілген (ГОСТ269-66, 2011).



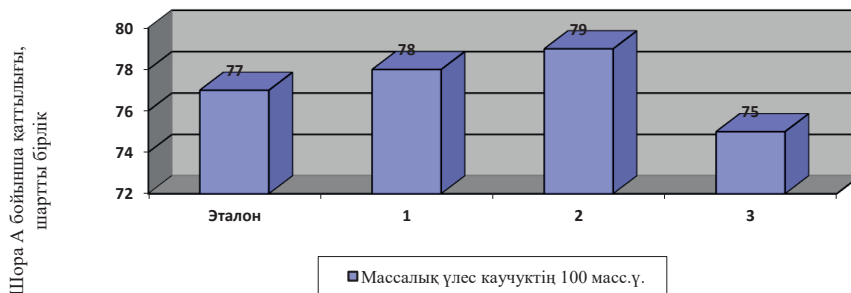
Сурет 2. Тығыздағыш резинаны созу кезіндегі шартты беріктігінің цеолиттің мөлшеріне тәуелділігі



Сурет 3. Тығыздағыш резинаны созғандағы салыстырмалы ұзауының цеолиттің мөлшеріне тәуелділігі



Сурет 4. Тығыздағыш резинаның қалдық ұзаруының цеолиттің мөлшеріне тәуелділігі



Сурет 5. Тығыздағыш резинаның қаттылығының цеолиттің мөлшеріне тәуелділігі

2–5 суреттерден көріп отырғанымыздай, алынған резина қоспасының сынақ нәтижелерін эталонмен салыстырғанда жоғары мәнге ие екенін зерттеулер көрсетті. Каучуктің 100 массалық үлесіне Дәубаба кен орнының цеолитін 15 массалық үлесте резина қоспасына қосқанымызда оң нәтиже берді: созу кезіндегі шартты беріктігі 13МПа; созғандағы салыстырмалы ұзауы 170 %; қалдық ұзаруы 8 %; Шора А бойынша қаттылығы 79 шартты бірлік.

Көптеген мұнай-газ жабдықтары үшін жоғары тозуға төзімділік, қаттылық және бұдырмалыққа тұрақтылық талаптары негізгі болып табылады. Жоғарыда келтірілген мәліметтерге сүйене отырып, мұнай кәсіпшілігі техникасының тығыздағыш элементтері үшін резиналарды жасау міндетін резина қоспаларының рецептіне арнайы қоспаларды енгізу арқылы, яғни Дәубаба кен орнының цеолитімен шешуге болады деген қорытынды жасауға болады. Өйткені табиғи цеолитті пайдаланған кезде резиналардың қасиеттерінің көрсеткіштері іс жүзінде өзгермейді, бақылау нормаларына сәйкес келеді. Резинаның оңтайлы физика-механикалық көрсеткіштері цеолиттің 15 масс.ү. байқалды.

Қорытынды

Бұл жұмыста тығыздағыш резина қоспасының рецептінде Дәубаба кен орнының цеолитін қолдану мүмкіндігі зерттелді. Резина қоспасына цеолитті енгізудің ерекшелігі: вулканды кезінде химиялық байланыстардың кеңістік желісін құруға белсенді қатысуы, сонымен қатар минералдар мен пластификаторлардың резина қоспаларының басқа ингредиенттерінің тепе-теңдіксіз адсорбциялық әрекеттесуінде. Мұның бәрі табиғи цеолиттерді тиімді деп сипаттауға мүмкүндік береді. Осылайша, техникалық көміртекті цеолитпен ішінара ауыстыру зерттелетін резиналардың қаттылығы, беріктігі мен салыстырмалы ұзаруының жоғарылауын көрсетті. Жалпы, цеолитті тығыздағыш резиналарда қолдану резиналардың қызмет ету мерзімін ұзартады және олардың құнын төмендетеді.

ӘДЕБИЕТТЕР

ГОСТ 269-66, 2001 — Резина. Общие требования к проведению физико-механических испытаний. Взамен ГОСТ260-53. — ИПК Издательство стандартов, —2001

ГОСТ Р 54554-2011, 2018 — Смеси резиновые стандартные. Материалы, оборудование, методы смешения и приготовления вулканизованных пластин. — М.: Стандартинформ, 2018. — 18с.

ГОСТ263-75, 1989 — Резина. Метод определения твердости по Шору А. М.: — Издательство стандартов, 1989. — 7с.

ГОСТ270-75, 1975 — Резина. Метод определения упругопрочностных свойств при растяжении. Взамен ГОСТ270-64, Дата введения в действие: 01.01.1978. — М.: Издательство стандартов, — 1975. — 29с.

Догадкин Б.А. (1959). Вулканизационные структуры и их изменения при вулканизации, термомеханическом воздействии и утомлении вулканизатов, "Химическая наука и промышленность", — 1959, — Т. 4. — №1

Корнев А.Е., Буканов А.М., Шевурдяев О.Н. (2000). Технология эластомерных материалов: Учебник для вузов. — М.: Издательство «Эксим», — 2000. — 288 с.

Кочелев Ф.Ф., Корнев А.Е., Климов Н.С. (1968). Общая технология резины, — М.: Химия, 1968. — 560с

Мартин Дж., Смит В. (2013). Производство и применение резинотехнических изделий. Книга. Перевод с англ. (Handbook of Rubber Technology. Processing, Compounding, Manufacturing and Uses of Rubber) под ред. Красовского В.Н. — ISBN: 5-93913-089-5: — Издательство: ЦОП Профессия, — 2013

Сагитова Г.Ф. (2021). Цеолитті қолдана отырып резина қоспаларына арналған құрама окшаулаушы композицияларын әзірлеу / Монография, Шымкент: Издательский центр «Асем», — 2021. — 160 с. — ISBN 978-9965-19-454-2. Рекомендован Ученым Советом ЮКУ им. М. Ауэзова Протокол №12 от 25.02.2021 г.

Сагитова Г.Ф., Байболова Г.Р. (2008). Цеолиты Даубабинского месторождения-наполнители шинных резин// Материалы IV международной научно-практической конференции «Nowoczesnych naukowych osiagniec. —2008. — Польша, 2008». — Т.14. — С. 3–6

Сагитова Г.Ф., Джанпаизова В.М., Тогатаев Т.У., Садырбаева А.С. Шуханова Ж.К., Емкулова З.А. (2021). Перспективы применения природного цеолита месторождения Даубаба (Казakhstan) для наполнения полимеров//«Технология текстильной промышленности» Известия высших учебных заведений, — 2021 г. — №6 (396). — С. 327–332

Сакибаева С.А., Сырманова К.К., Негим Э.С. (2013). Технология эластомеров. — Учебник. Шымкент: «Әлем». — 2013. — 252 с.

REFERENCES

GOST 269-66, 2001 — Rubber. General requirements for conducting physical and mechanical tests. Instead of GOST 260-53, IPK Publishing House of Standards, — 2001 (in Russ.).

GOST R 54554-2011, 2018 — Standard rubber mixtures. Materials, equipment, methods of mixing and preparation of vulcanized plates. Moscow: Standartinform, — 2018. — 18 p. (in Russ.).

GOST263-75, 1989 — Rubber. Shore hardness determination method A.M.: — Publishing House of Standards, 1989. — 7 p. (in Russ.).

GOST270-75, 1975 — Rubber. A method for determining elastic-strength properties under tension. Instead of GOST270-64, Effective date: 01.01.1978. — Moscow: Publishing House of Standards, — 1975. — 29 p. (in Russ.).

Guadkin B.A. (1959). Vulcanization structures and their changes during vulcanization, thermomechanical action and fatigue of vulcanizates, "Chemical Science and Industry", — 1959. — Vol. 4. — No.1 (in Russ.).

Kornev A.E., Bukanov A.M., Sheverdyaev O.N. (2000). Technology of elastomeric materials: Textbook for universities. — M.: Publishing house "Exim", 2000. — 288 p. (in Russ.).

Koshelev F.F., Kornev A.E., Klimov N.S. (1968). General rubber technology, — M.: Chemistry, 1968. — 560 p. (in Russ.).

Martin J., Smith V. (2013). Production and application of rubber products. Book. Translated from English (Handbook of Rubber Technology. Processing, Compounding, Manufacturing and Uses of Rubber) edited by Krasovsky V.N. ISBN: 5-93913-089-5: Publishing House: PSC Profession, — 2013 (in Russ.).

Sagitova G.F. (2021). Development of composite insulation compositions for rubber mixtures using zeolite / Monograph, Shymkent: Publishing Center "Asem", 2021. — 160p. (ISBN 978-9965-19-454-2) Recommended by the Scientific Council of the M.Auezov South Ural State University Protocol. — No. 12 dated 02/25/2021 (in Kaz.).

Sagitova G.F., Baibolova G.R. (2008). Zeolites of the Daubabinsky deposit -fillers of tire rubbers// Proceedings of the IV international scientific and practical conference "Nowoczesnych naukowych osiagniec. —2008. — Poland, 2008". — Vol. 14. — Pp. 3–6 (in Russ.).

Sagitova G.F., Dzhanpaizova V.M., Togataev T.U., Sadyrbaeva A.S. Shukhanova Zh.K., Emkulova Z.A. (2021). Prospects for the use of natural zeolite from the Daubaba deposit (Kazakhstan) for polymer filling// "Technology of the textile industry" Proceedings of higher educational institutions, — 2021. — No.6 (396). — Pp. 327–332 (in Russ.).

Sakibaeva S.A., Syrmanova K.K., Negim E.S. (2013). elastomerov technology. — Учебник. Шымкент: "Алем". — 2013. — 252 p. (in Russ.).

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 230–243

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.269>

УДК 544.6

МРПТИ 31.15.33

© **B.S. Serikbayeva¹, R. Abzhalov¹, A.V. Kolesnikov², Sh.T. Koshkarbayeva¹,
M.S. Satayev¹, 2024**

¹M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan;

²D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia.

E-mail: sbagdash@bk.ru

DIRECT PHOTOCHEMICAL SILVERATION OF POLYMERS

B.S. Serikbayeva — PhD student of postgraduate school of the technology of inorganic and petrochemical industries department of M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: sbagdash@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0001-4408-7967>;

R. Abzhalov — PhD, Senior Lecturer at the Department of Chemistry and Pharmaceutical Engineering of M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: ars.es_84@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2070-0843>;

A.V. Kolesnikov — Candidate of technical sciences, Docent of the chair technologies of inorganic substances and electrochemical processes of Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russian

E-mail: artkoles@list.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4586-6612>;

Sh.T. Koshkarbayeva — Candidate of technical sciences, Docent of the chair technology of inorganic and petrochemical industries of M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: shayzada-1968@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8753-3245>;

M.S. Satayev — Doctor of Technical Sciences, Professor of the chair technology of inorganic and petrochemical industries of M. Auezov South Kazakhstan university, Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: malik_1943@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3456-7083>.

Abstract. The method of applying electrically conductive silver films to the surface of polymeric materials is recommended. For this, a mechanically treated and roughened polymer plate is immersed in a suitable solution to obtain a surface sorption layer. The activation process was carried out in solutions containing copper chloride, as a result of such treatment, as a result of the interaction of copper dichloride and pickled products, associated active centers containing copper monochloride and partially reduced copper are formed. Silver nitrate and ascorbic acid solutions were used for silvering. Samples with a sorption layer were exposed to electromagnetic waves of light radiation. Sunlight and light from artificial lighting lamps were used as sources of electromagnetic waves of light radiation. After washing and drying, a metallic silver coating remains on the sample surface.

Keywords: polymer, silver nitrate, ascorbic acid, silvering, photochemistry

© Б. Серикбаева^{1*}, Р. Абжалов¹, А. Колесников², Ш. Кошкарбаева¹,
М. Сатаев¹, 2024

¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті,
Шымкент, Қазақстан;

²Д.И. Менделеев атындағы Россия химиялық-технологиялық университеті,
Мәскеу, Ресей.

E-mail: sbagdash@bk.ru

ПОЛИМЕРЛЕРДІҢ ТІКЕЛЕЙ ФОТОХИМИЯЛЫҚ КҮМІСТЕНУІ

Б.С. Серикбаева — М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің бейорганикалық және мұнай-химия өндірісі технологиялары кафедрасының PhD докторанты, Шымкент, Қазақстан

E-mail: sbagdash@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0001-4408-7967>;

Р.С. Абжалов — PhD доктор, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің химия және фармацевтикалық инженерия кафедрасының аға оқытушысы, Шымкент, Қазақстан

E-mail: ars.es_84@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2070-0843>;

А.В. Колесников — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, Д.И. Менделеев атындағы Ресей химиялық технология университетінің бейорганикалық заттар және электрохимиялық процестер технологиялары кафедрасының меңгерушісі, Мәскеу, Ресей

E-mail: artkoles@list.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4586-6612>;

Ш.Т. Қошкарбаева — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің бейорганикалық және мұнай-химия өндірісі технологиялары кафедрасы, Шымкент, Қазақстан

E-mail: shayzada-1968@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8753-3245>;

М.С. Сатаев — техника ғылымдарының докторы, профессор, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университетінің бейорганикалық және мұнай-химия өндірісі технологиялары кафедрасы, Шымкент, Қазақстан

E-mail: malik_1943@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3456-7083>.

Аннотация. Полимерлі материалдар бетіне электр өткізгіш күміс қабықшаларды жағу әдісі ұсынылады. Ол үшін механикалық өңделген және кедір бұдырланған полимер пластинасын беттік сорбциялық қабат алу үшін тиісті ерітіндіге батырылады. Белсендіру үрдісі мыс хлоридінен тұратын ерітінділерде жүргізілді, мұндай өндеудің нәтижесінде мыс дихлориді мен маринадталған өнімдердің өзара әрекеттесуі нәтижесінде құрамында мыс монохлориді мен жартылай қалпына келтірілген мыс бар байланысты белсенді орталықтар пайда болады. Ал күмістеу үшін күміс нитраты мен аскорбин қышқылының ерітінділері қолданылды. Сорбциялық қабаты бар үлгілер жарық сәулеленуінің электромагниттік толқындарына ұшырады. Жарық сәулеленуінің электромагниттік толқындарының көзі ретінде күн сәулесі және жасанды жарықтандыру шамдарының сәулесі пайдаланылды. Жуылып және кептірілгеннен кейін үлгі бетінде металдық күміс қаптамасы қалады.

Түйін сөздер: полимер, күміс нитраты, аскорбин қышқылы, күмістеу, фотохимия

© Б.С. Серикбаева^{1*}, Р. Абжалов¹, А.В. Колесников², Ш.Т. Кошкарбаева¹,
М.С. Сатаев¹, 2024

¹Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

²Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
Москва, Россия.

E-mail: sbagdash@bk.ru

ПРЯМОЕ ФОТОХИМИЧЕСКОЕ СЕРЕБРЕНИЕ ПОЛИМЕРОВ

Серикбаева Б.С. — PhD докторант кафедры технология неорганических и нефтехимических производств Южно-Казахстанского университета им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

E-mail: sbagdash@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0001-4408-7967>;

Абжалов Р.С. — доктор PhD, старший преподаватель кафедры химии и фармацевтической инженерии Южно-Казахстанского университета им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

E-mail: ars.es_84@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2070-0843>;

Колесников А.В. — кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой неорганических веществ и технологии электрохимических процессов Российского университета химической технологии им. Д. И. Менделеева, Москва, Россия

E-mail: artkoles@list.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4586-6612>;

Кошкарбаева Ш.Т. — кандидат технических наук, доцент, кафедры технология неорганических и нефтехимических производств Южно-Казахстанского университета им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

E-mail: shayzada-1968@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8753-3245>;

Сатаев М. С. — доктор технических наук, профессор, кафедра технологии неорганических и нефтехимических производств Южно-Казахстанского университета им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

E-mail: malik_1943@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3456-7083>

Аннотация. Авторы статьи рекомендуют метод нанесения электропроводящих пленок серебра на поверхность полимерных материалов. Для этого механически обработанную и приданную шероховатость полимерную пластину погружают в подходящий раствор для получения поверхностного сорбционного слоя. Процесс активации проводят в растворах, содержащих хлорид меди, в результате такой обработки в результате взаимодействия дихлорида меди и продуктов травления образуются ассоциированные активные центры, содержащие монохлорид меди и частично восстановленную медь. Для серебрения используются растворы нитрата серебра и аскорбиновой кислоты. Образцы с сорбционным слоем подвергаются воздействию электромагнитных волн светового излучения. В качестве источников электромагнитных волн светового излучения используются солнечный свет и свет ламп искусственного освещения. После промывки и сушки на поверхности образца остается налет металлического серебра.

Ключевые слова: полимер, нитрат серебра, аскорбиновая кислота, серебрение

Кіріспе

Күмісті қолдану ең алдымен оның химиялық және физикалық қасиеттерімен әдемі көрінісімен байланысты. Күміс техниканың әр түрлі салаларында, биологияда және медицинада, зергерлік бұйымдар өндірісінде қолданылады. Қазіргі таңда техникада осы асыл металдың жабындары мен қабықшалары бар көптеген материалдар қолданылады. Күмістің жоғары коррозиялық тұрақтылығы және электр өткізгіштігінің жоғары болғандықтан мұндай материалдарды электротехникада (Спешилов және т.б., 2017), электронды және химия өнеркәсібінде (Jiang және т.б., 2005), машина жасауда қолдануға (Аснис және т.б. 2020) мүмкіндік береді.

Күміс сонымен қатар жоғары бактерияцидтік қасиетке ие. Әдеби деректерден күмістің бактерияға қарсы спектрі 650 түріне (Margaret et al., 2006), ал кез келген антибиотиктің бактерияға қарсы спектрі бактериялардың 5–10 ғана түріне таралатыны белгілі (Гарасько және т.б., 2008). Сондықтан күміс қабықшаларды медициналық мақсаттағы материалдарға: импланттарға, дәрі дәрмек жеткізу жүйесіне (Furno, & other authors 2004), медициналық құрылғыларға арналған бактерияға қарсы жабындарға және микробқа қарсы қаптамаларға қолдануға арналған әзірлемелер кеңінен таралды (Thomas, & McCubbin, 2003). Сонымен қатар мұндай материалдар тұрмыстық мақсаттағы бұйымдарда: перделерде, майлықтарда, бинттерде, әр түрлі құрылғыларда бактерицидтік қоспалар (мұздатқыш, желдеткіш, кондиционер), киім кешек (шұлық, ішік) бұйымдарында қолданылады (Thomas, & McCubbin, 2003).

Сондықтан әртүрлі диэлектриктерге күміс қабықшасын жағуға арналған әзірлемелер кеңінен қолданылды.

Әдебиеттерде металл емес материалдарға металл қабықшаларын алу әдістердің бірқатары келтірілген, осы әдістерді диэлектриктерге күміс қабықшасын алуда қолдануға болады. Диэлектрик материалдарға металл қабықшасын алудың әдебиеттегі белгілі әдістерді шартты түрде физикалық және химиялық болып бөлінеді.

Күміс қабықшасын алудың физикалық әдістерінен вакуумдық камерада металл бөлшектерін (соның ішінде күмісті) магнетронды бүркіп, содан кейін материал бетіне жағу әдісі белгілігі (Патент РФ № 2214476 2003). Бұл әдіс инертті газда қалыптан тыс жану разрядын қолдануға негізделген онда разрядта түзілген оң разрядталған иондар эрозия аймағындағы катодтың бетін бомбалайды, одан метал бөлшектерін шығарады, содан кейін өнделетін материалдың бетіне жұқа қабат түрінде олар тұнбаға түседі. Мұнда катодтың бетінен шығатын бөлшектердің жоғары кинетикалық энергиясы алынған қабықшаның негізбен жақсы адгезия деңгейін қамтамасыз етеді.

Физикалық топқа медициналық таңғыштарды алу әдісін де жатқызуға болады, яғни химиялық реакция нәтижесінде күміс нано бөлшектері мата талшықтарының арасына физикалық шашыратып тұндырылған әдіс. Бактерияға қарсы талшықты материал алу үшін күміс нитратының сулы ерітіндісінен күмісті қалпына келтіру қолданылады. Сонда алдымен

(Lansdown, 2002) қалпына келтіретін немесе тотықсыздандыратын агенттер талшықты материалға бекітіледі, содан кейін олардың бетіне күміс жағылады (Вишняков және т.б., 2008). Процесті жүргізу үшін талшықты материалдарды өңдеуден тұрады.

Диэлектриктерді күмістеуде химиялық әдістер жиі кездеседі. Мұнда күміс қаптамасын алу үшін химиялық тотықсыздандырғыштарды (көбінесе диметилборан (Lansdown, 2002), күкіртқышқылды гидразин (Heggers, 2005), натрий гипофосфиті (Shkil және т.б., 2011), глюкоза, лимон немесе шарап қышқылының тұздары (Lansdown, 2010) қолданады.

Осы орайда диэлектриктердің бетін алдын ала белсендіру керек, сонымен қатар олар кейбір металдарды қалпына келтіре немесе тотықсыздандыра отырып, басқа металдарға инертті болуы мүмкін. Автомобиль өнеркәсібі үшін химиялық күмістелген полимерлерді қолдануда көшбасшылардың бірі АТОТЕХ компаниясы болып табылады (Брандес, 2011). Электрондық өнеркәсіпте (Lansdown, 2002), және медицинада (Lansdown, 2010) химиялық күмістеуді қолдану нәтижелері еңбектерінде келтірілген. Химиялық әдістерге жарық сәулесінің электромагниттік толқындарының әсерінен болатын фотохимиялық процестерде жатады. Жарық сәулеленуі жаңартылатын және таза энергияның ең үлкен көзі болып табылады, ол улы емес және қоршаған ортаны ластамайды, химиялық процестерде қалдық қалдырмайды. Күн сәулесін де, жасанды жарық сәулесінде фотохимиялық процестерде қолданыла береді.

Салыстырмалы түрде жоғары тотықсыздану потенциалына (+0,799 В) ие күмісті жарық сәулесінің фотондары арқылы қалпына келтіруге болады. Осы арқылы күмістің нанобөлшектерін (Исаева және т.б., 2006) өндіруде де, диэлектриктерді металдандыруда да қолдануға болады (Белоусова және т.б., 2009).

Сонымен (Fritsch және т.б., 2015) жұмыста негіздің бетінде күмістің жұқа өткізгіш қабықшасын алу үшін, процестің бірінші кезеңінде күміс нитраты мен 2- пирролодидонды суда немесе этанол - су қоспасында ерітеді, $[Ag(PyI)_2] NO_3$ түзіледі. Содан соң, процестің екінші кезеңінде қапталатын негіздің бетіне ерітінді жағылады, кейіннен кем дегенде минут ультракүлгін спектрдің электромагниттік толқындарымен сәулелендіріледі. Сонда химиялық тотықсыздану процесі жүреді, яғни күмістің бөлінуіне әкеледі, содан кейін термиялық өңдеу кезеңі 220 °C температурада кем дегенде 60 минут ішінде жүреді.

Классикалық химиялық күмістеудің кемшілігі - көп сатылы. Сондықтан кемшілікті азайтудың бірқатар технологиялары ұсынылған. Осындай баламалы технологиялардың бірі — тікелей металдандыру, яғни диэлектриктің бетінде жеке каталитикалық белсенді нүктелер (катализатор) орнына тоқ өткізгіш қабықша алынады, оған мыс немесе басқа металды гальваникалық әдіспен бірден тұндыруға болады.

Материалдар және негізгі әдістер

Зерттеу үшін PP H030 маркалы полипропиленнен жасалған полимерлі пластиналар қолданылды. Химиялық және фотохимиялық процестердің барысын визуальды бақылауды қамтамасыз ету үшін ашық түсті полимер үлгілер таңдалынды.

Пластиналарды алдын ала дайындау Р – 2000 зімпара қағазымен беті өңделді, бөлме температурасында 5–10 минут ішінде $K_2Cr_2O_7$ – 6, 5%, H_2SO_4 – 93,5 % ерітіндісінде кедір бұдырландырылды және Na_3PO_4 – 20г/л, Na_2CO_3 – 20г/л ерітіндісімен майсыздандырылды.

Белсендіру және күміс қабықшасын тұндыру процестері суда еритін мыс, күміс, аскорбин қышқылының тұздары бар зерттелетін ерітінділерге батыру арқылы, полимерлердің бетін сулау арқылы алынған ерітінділердің сорбциялық қабықшасында жүргізілді. Құрамында 40 г/л астам күміс нитратынан және 20 г/л астам аскорбин қышқылы бар бастапқы ерітінділерге тұрақтандырғыш ретінде 1–3 г/л желатин қосылды. Жұмыста қолданылған барлық реактивтер химиялық таза біліктілігіне ие және қосымша тазалаудан өтпеді. Батырылғаннан кейін үлгінің бетінде қалыңдығы шамамен 400–450 мкм болатын ерітіндінің сорбциялық қабықшасы қалады.

Электролиттің жұқа сорбциялық қабаттарынан металл қабықшаларын жағу процесін жүргізу диэлектриктің бетіне жарық сәулеленуінің электромагниттік толқындардың енуін жеңілдетеді. Осының нәтижесінде қосымша энергия алған диэлектриктің шекаралық қабаты қозады, бұл металл иондарының сәулелену фотондарымен тотықсыздануына әкеледі.

Бұл жағдайда сорбциялық қабатта электр өткізгіш қабықша түзілуі үшін қажетті мөлшерде күміс қосылыстары болу керек. Сонымен қатар, күміс иондарының фотохимиялық тотықсыздану су молекулаларының қатысуымен жүруі мүмкін, бұл сорбциялық қабаттың тез кебуіне әкелуі мүмкін. Сорбциялық қабат құрғағаннан кейін қалпына келтіру процесі тоқтайды және сумен жуғаннан кейін диэлектриктің бетінде тек күмістің электр өткізгіш қабықшасы қалады. Фотохимиялық процестер әдетте жарық сәулелену көзіне қарайтын жағында ғана жүреді, бірақ айналмалы құрылғыларды пайдалана отырып, процестердің үлгінің басқа жақтарында жүруін қамтамасыз етуге болады.

Жарық сәулеленуінің электромагниттік толқындарының (ЖСЭМТ) көзі ретінде күн сәулесі және жасанды жарықтандыру шамдарының сәулеленуі пайдаланылды. Сәулелену ағынының тығыздығы SM 206-SOLAR күн сәулесінің өлшегішімен анықталды және көп жағдайда 800–1100 Вт/м² болды.

Қабықшалардың құрылымы мен құрамын зерттеу JSM-6490-LV растрлық электронды микроскопында жүргізілді.

Алынған қабықшалардың электр өткізгіштігін анықтау үшін DT-830B кедергі өлшеу тестері қолданылды. Бұл жағдайда беттік электр өткізгіштіктің шартты көрсеткіші Δ_i қолданылды. Δ_i мәндері 200OM кедергіде үлгі бетінің әр түрлі бөліктеріне 1см қашықтықта тестер зондтарын қолдану арқылы

анықталды және осылайша 5–6 мәндерін алғаннан кейін, орташа мән ΔI есептелінді. Зерттелетін үлгілердің беттік электр өткізгіштігінің индикаторы ретінде ΔI пайдалану технологиялық процестің жекелеген параметрлерінің электр өткізгіштікке әсерін бағалауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар белгілі бір кедергі мәні ΔI бар металдарды дәл осылай өлшеу арқылы алынған күміс қабықшасының меншікті кедергісінің шамамен мәнін анықтауға болады.

Күміс қабықшасының полимер негізіне жабысуын скотч көмегімен тексерілді (Melentiev және т.б., 2022).

Нәтижелер

Пластину бетін белсендіру

Алдын ала дайындау нәтижесінде механикалық және кедір бұдырландыру полимер бетінде гидроксил, карбонил және альдегид топтары бар полимерлердің қатты бөлшектерімен байланысты өрескел қабат түзеді. Белсендіру үшін құрамында 10г/л мыс дихлориді бар ерітінді қолданылды.

Мыс дихлоридінің сорбциялық қабатына енгізген кезде оның полимердің альдегидтік тобымен $R_{\text{н}}\text{CHO}$ келесі реакция бойынша әрекеттесуі мүмкін:



Полимердің альдегид тобы $R_{\text{н}}\text{CHO}$ қатты фазамен байланысқан полимердің бөлігі болғандықтан, түзілген CuCl олимер бетімен берік байланыс түзеді.

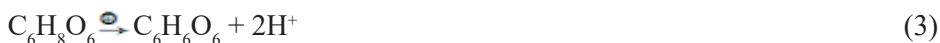
Үлгіні жуғаннан кейін үлгі бетінде мыс монохлоридінен тұратын белсенді орталықтар қалады.

Содан кейін үлгіні құрамында AgNO_3 және аскорбин қышқылы ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$) бар ерітіндімен сулап, (ЖСЭМТ) әсеріне ұшыратамыз.

Бұл жағдайда CuCl бинарлы жартылай өткізгіш ретінде жарық сәулелену фотондарының әсерінен қалпына келтіріледі



Бұл жағдайда пайда болған бос орындар (\bullet) аскорбин қышқылының дегидроаскорбин қышқылына дейін тотығуына әкеледі.



Осыны ескере отырып, жарық сәулелену фотондарының әсерінен болатын жалпы реакция (фотохимиялық реакция) пайда болады.



Бұл жағдайда CuCl -ді AgCl -мен алмастыруға болады, бұл AgCl -нің ерігіштігінің көбейтіндісі CuCl -не қарағанда бірнеше ретке төмен ($E\theta_{\text{CuCl}} = 1,2 \cdot 10^{-6}$, $E\theta_{\text{AgCl}} = 1,78 \cdot 10^{-10}$).

Күміс хлориді бинарлы фотохимиялық сезімтал жартылай өткізгіш болып табылады, сондықтан құрамында аскорбин қышқылы бар реакциялық ортада келесі процестер жүреді.



Осы фотохимиялық реакциялардың нәтижесінде күміс түзіледі



Осы кезде пайда болған HCl күміс нитратымен әрекеттесіп, фотохимиялық белсенді хлоридтің жаңаруына ықпал етеді. Сондықтан сорбциялық қабаттағы соңғы фотохимиялық реакция келесідей болады:



Жарықтың электромагниттік толқындары жоғары жылдамдықпен қатаң түзу қозғалатындықтан, әр түрлі денелерден өткенде әрдайым олармен қамтылмаған бөлімдер (дәліздер) болады. Мұндай көлеңкелі аймақтар пайда болған фотохимиялық қабықшаларға қара (немесе күңгірт) түс береді. Сонымен қатар, бұл аймақтар электрондардың өтуіне тосқауыл қояды, нәтижесінде металл атомдары түзетін фотохимиялық қабықшалар әдетте электр тогын өткізбейді.

Сондықтан күмісті аскорбин қышқылының молекулаларымен химиялық тотықсыздандыру электр өткізгіш қабықшаның пайда болуының қажетті шарты болып табылады.

Сонымен қатар, әдебиетте (Горяев и Смирнов, 2014) аскорбин қышқылының азот қышқылды күміспен тотығу реакциясы жарықта тезірек жүретіні атап өтілген.

Демек, бұл процесс химиялық болса да, жарық сәулесімен белсендіруді қажет етеді.

Кәдімгі химиялық реакциялардың фотохимиялық реакциялардан айырмашылығы барлық бағытта бірдей жылдамдықпен жүреді, сондықтан фотохимиялық процестен кейін пайда болған бос жерлерде де күмістің тотықсыздануы болуы мүмкін. Сондықтан күмістің электр өткізгіш қабықшасын алу үшін осы екі процестің тіркесімі қажет. Тотықсыздандырғыш ретінде аскорбин қышқылын қолдану осындай мүмкіндік береді.

Осы зерттеулердің негізгі нәтижелері 1-кестеде аскорбин қышқылының сорбциялық қабатына қосылуы ЖСЭМТ әсер еткенде ғана күміс иондарының химиялық тотықсыздауына ықпал ететінін көрсетіліп келтірілген.

1-кесте - Әр түрлі жарықтандырудың электр өткізгіш күміс қабатының пайда болу ұзақтығына әсері

Белгіленуі:

H - үлгі бетін жарықтандыру түрі;

W - ЖСЭМТ ағынының тығыздығы;

C₁ – сорбциялық қабаттағы күміс нитратының концентрациясы;

C₂ – сорбциялық қабаттағы аскорбин қышқылының концентрациясы;

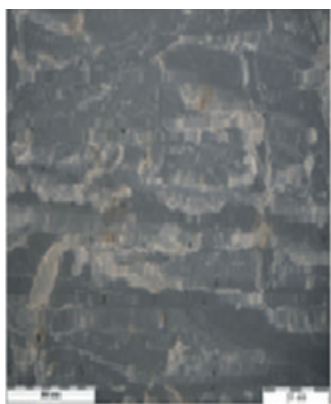
t – электр өткізгіш күміс қабатының түзілу процесінің ұзақтығы немесе сорбциялық қабаттың толық кебуі;

№	Н	W, Вт/м ²	C ₁ , г/л	C ₂ , г/л	τ, мин
1	Қараңғы	0,1	20	20	Электр өткізгіш қабықша түзілмейді
2	Күндізгі жарық	15,4	20	0	
3	Электр жарығы	1050	20	0	
4	Күндізгі жарық	15,4	20	20	77
5	Электр жарығы	625	20	50	13
6	Электр жарығы	1050	40	20	13
7	Электр жарығы	1050	40	40	13
8	Электр жарығы	1050	40	100	12
9	Электр жарығы	1050	60	20	10
10	Электр жарығы	1050	100	20	10

1 – кестеде келтірілген эксперимент нәтижелерінен қараңғыда және аскорбин қышқылы болмаған кезде электр өткізгіш қабатының түзілмейтіндігі байқалады. Күндізгі жарықтың электромагниттік толқындарының әсерінен аскорбин қышқылының концентрациясы электр өткізгіш қабатың түзілуіне әсер етеді. Сонда, 20 г/л концентрацияда электр өткізгіш қабаты баяу түзіледі.

Электр өткізгіш қабықшалардың пайда болуына ЖСЭМТ ағынының тығыздығы айтарлықтай әсер етеді. ЖСЭМТ ағынының тығыздығының жоғарылауы алдымен күміс иондарының фотохимиялық тотықсыздану жылдамдығын арттыратыны анық. Сонымен қатар, аскорбин қышқылының каталитикалық белсенділігін арттыру арқылы күміс иондарының химиялық тотықсыздану жылдамдығыда артады.

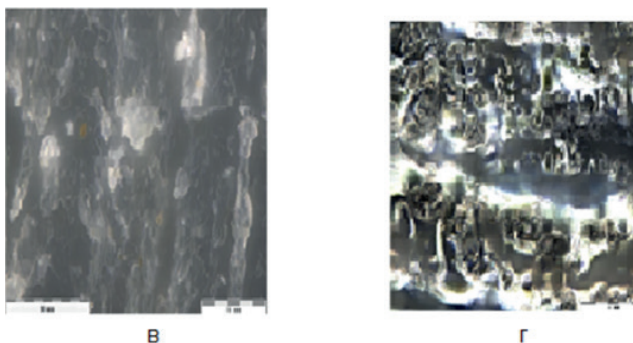
Айта кету керек, электр өткізгіш қабатындағы күмістің негізгі бөлігі 7 реакция бойынша түзіледі. Сондықтан, кестедегі мәліметтерден көрініп тұрғандай, аскорбин қышқылының концентрациясының жоғарылауы ЖСЭМТ ағынының жоғары тығыздығында электр өткізгіш қабатың пайда болу жылдамдығына айтарлықтай әсер етпейді. Сондай-ақ СЭМ суреттері сорбциялық қабатың күміс нитраты концентрациясының жоғарылауымен үлгі бетіндегі күміс пайызының өсуін көрсетеді.



а



б



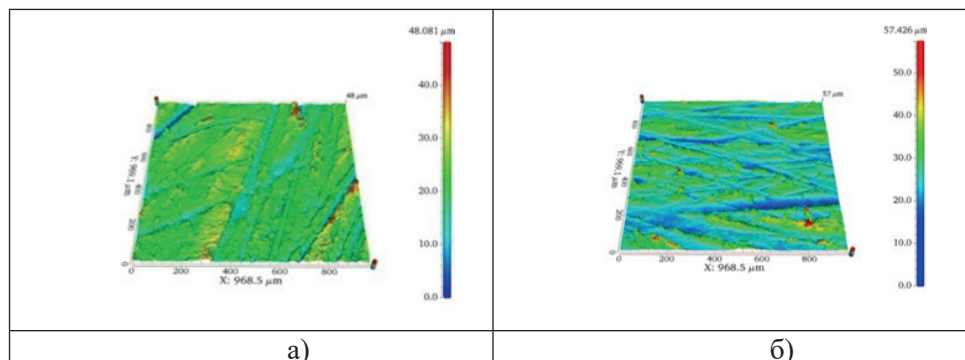
1-Сурет - Үлгі бетінің СЭМ суреттері (қараңғы өріс X500)
 Белгіленуі: а) бастапқы үлгі; б) кедір-бұдырланудан кейін;
 в) белсендіруден кейін; г) фотохимиялық күмістеуден кейін.

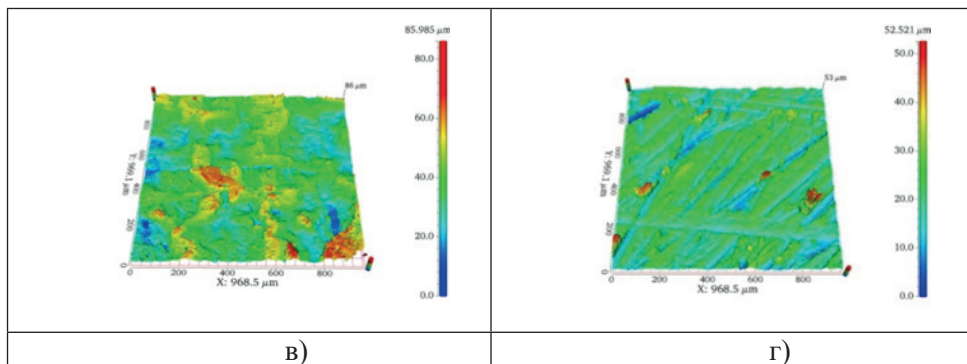
2-кестеде JSM-6490 LV электронды микроскопының көмегімен алынған спектрлік талдау нәтижелері көрсетілген. Кесте деректерінен фотохимиялық процестер және сумен жуылғаннан кейін көруге болады. Сонымен қатар, спектрлік талдау көрсеткендей күміс қабықшасының түзілуі үлгінің алдыңғы және артқы жағында бірдей.

2 кесте. Күміс нитраты мен аскорбин қышқылының әртүрлі концентрациясы бар сорбциялық қабаттардағы фотохимиялық процестерді жүргізгеннен кейінгі полимердің беткі қабатының элементтік құрамы

Сорбциялық қабаттың құрамындағы концентрациясы, г/л	Күміс нитраты	20	20	40	60	100
	Аскорбин қышқылы	50	20	20	20	20
Полимердің беткі қабаттарының элементтік құрамы % масс.	C	25,45	37,75	12,04	6,18	2,62
	O	0,09	1,45	4,42	4,55	4,73
	C ₁	-	-	1,54	0,66	3,49
	Ag	65,96	60,32	81,10	88,08	89,17

Күмістен тұратын қабықшалардың құрылымын зерттегенде, олар барлық жағдайда сфералық бөлшектер түрінде түзілетіні анықталды, орташа диаметрі бірнеше ондаған нанометрден жүздеген нанометрге дейін.





2 – сурет - Фотохимиялық күмістеу процесінің жекелеген кезеңдерінен кейінгі полимер бетінің морфологиясы мен құрылымын сипаттайтын үш өлшемді фотосуреттері Белгіленуі: а) бастапқы үлгі; б) кедір-бұдырланудан кейін; в) белсендіруден кейін; г) фотохимиялық күмістеуден кейін.

Қою көк түстен қызылға дейінгі градиенттік созылу тереңдігімен биіктігінің түс шкаласы болып табылады. Шкала беттің кедір-бұдырлығын талдауға мүмкіндік береді.

1 Кесте. Фотохимиялық күмістеу процесінде полимер бетінің морфологиясы мен құрылымының өзгеруі.

- S- полимерді өңдеу кезеңі;
- ΔH -ең тереңнен ең жоғарғы нүктеге дейінгі айырмашылық;
- h_r - сызат тереңдігі;
- h_b - сызат биіктігі;

№	S	ΔH , мкм	h_r мкм	h_b мкм	айырмашылық h_b и h_r
1	Бастапқы	48	10–20	20–25	7,5
2	кедір-бұдырланудан кейін	52	10–20	20–25	7,5
3	белсендіруден кейін	57	15–25	25–30	7,5
4	фотохимиялық күмістеуден кейін	85	35–45	45–50	7,5

2 суреттің фотохимиялық процеске дейін түсірілген а,б,в, суреттердегі ΔH , h_b , h_r мәндерінің айырмашылығы аз, демек кедір-бұдырландыру және белсендіру процестері полимер бетінің кедір-бұдырына іс-жүзінде әсер етпейтіндігін көрсетеді.

Күмістеуден кейін полимер үлгісінің қалыңдығы артады. Сонда, h_b және h_r мәндері сәйкесінше артады. Нәтижесінде полимер бетінің кедір бұдырлығы өзінің бастапқы мәнін сақтайды. Бұл қажет болған жағдайда фотохимиялық күмістеуді қайталауға мүмкіндік береді.

Қорытынды

Жарықтың электромагниттік толқындарына ұшыраған кезде олар жоғары жылдамдықпен қатаң түзу қозғалатындықтан, әр түрлі денелерден өткенде әрдайым олармен қамтылмаған аймақтар (дәліздер) болады. Мұндай көлеңкелі аймақтар пайда болған фотохимиялық қабықшаларға қара (немесе күңгірт)

түс береді. Сонымен қатар, бұл аймақтар электрондардың өтуіне тосқауыл қояды, нәтижесінде металл атомдары түзетін фотохимиялық қабықшалар әдетте электр тогын өткізбейді. Химиялық тотықсыздандырғышқа ұшыраған кезде олардың диффузиясы тек концентрация градиентімен қамтамасыз етіледі, сондықтан олар осы көлеңкелі жерлерде тотықсыздандыру процесін қамтамасыз етіледі. Бұл полимердің бүкіл бетінде электр өткізгіш қабаттарының пайда болуына ықпал етеді.

ӘДЕБИЕТТЕР

Аснис Н.А., Василенко О.А., Гаспарян М.Д. [и др.] (2020). Серебрение высокопористых ячеистых керамических материалов. — Т. 93, — вып. 10. — С. 1446–1453.

Белоусова В.М. Денисов В.В. Иванов. (2009). Применение серебра (обзор) *Journal of Siberian Federal University. Engineering & Technologies*. — 3.— 250–277.

Брандес М. (2011). Металлизация пластмасс. Основы и процессы, современное состояние и разработки, нацеленные на будущее. Гальванотехника и обработка поверхности. — Т XIX. № 1. — С. 46–49.

Вишняков А.В., Манаева Т.В., Хотимский Д.В., Чашин В.А. (2008г). Способ получения антибактериального текстильного волокнистого материала. Патент — RU 2337716.

Гарасько Е.В., Шиляев Р.Р., Чуловская С.А., Парфенюк В.И. (2008). Применение наноразмерных частиц серебра в медицине. // *Вестн. Ивановской медицинской академии*. NQ3. —4. — С. 30–34.

Исаева Е.И., Горбунова В.В., Бойцова Т.Б., Щукарев А.В., Сиротинкин Н.В. (2006). Исследование процессов фотохимического образования наночастиц серебра в эластомерных пленках // *Журнал общей химии*. —Т.76. Вып.5, — С. 723 —729.

Lansdown, A. V. Silver. (2002). 1. Its antibacterial properties and mechanism of action. *J Wound Care*; 11: — 125–130.

Lansdown, Alan B.G. (2010). Silver in Healthcare: Its Antimicrobial Efficacy and Safety in Use. *Royal Society of Chemistry*; —р. 159.

М.А. Горяев, А.П. Смирнов. (2014). Галогениды серебра как уникальные фотохимически чувствительные полупроводники // *Известия Российского государственного педагогического университета имени А. И. Герцена*. — СПб., — N 165. — С. 52 — 60.

Margaret Ip, Sau Lai Lui, Vincent K. M. Poon, Ivan Lung, Andrew Burd. (2006). Antimicrobial activities of silver dressings: an in vitro comparison. *Journal of medical microbiology*; no. — 55 — P. 59 — 63.

Ruslan Melentiev, Arief Yudhanto, Ran Tao, Todor Vuchkov, Gilles Lubineau (2022). Metallization of polymers and composites: State-of-the-art approaches. *Materials & Design*, Volume. —221, —110958.

Патент РФ № 2214476 МПК: C23C14/16. (2003). Способ формирования покрытия из драгоценных металлов и их сплавов / А.Ж. Тулеушев, В.Н. Лисицын, Ю.Ж. Тулеушев, В.Н. Володин, С.Н. Ким. Оpubл.

Fritsch Julia, Schumm Benjamin, Grothe, Julia, Dr., Kaskel, Stefan (2015). Process for the preparation of thin electrically conductive layers of silver, a silver complex, its solution and a use of the silver complex in a solution. Patent DE102011108089B4.

Furno, F., Morley, K. S., Wong, B. & other authors (2004). Silver nanoparticles and polymeric medical devices: a new approach to prevention of infection? *Antimicrob Chemother*. — 54. — 1019–1024.

Спешилов И.О., Лазарев П.Ю., Ваграмян Т.А. (2017). Исследование процесса химического серебрения диэлектрических материалов на основе углепластика. *Гальванотехника и обработка поверхности*, том —XXV, № 4. — С. 44–48.

S.Q. Jiang, E. Newton, C.W.M. Yuen, C.W. Kan (2005). Chemical silver plating and its

application to textile fabric design // *Journal of Applied polymer science*. — Volume 96. — Issue 3. Pp. 919–926.

Shkil N.N., Shkil N.A., Burmistrov V.A., Sokolov M.Y. (2011). Antimicrobial properties, pharmacotoxicological characteristics and therapeutic effectiveness preparation argovit in gastroenteritis diseases of calves. *Научный журнал КубГАУ*. — №68 — (04).

Heggors J., Goodheart R.E., Washington J., McCoy L., Carino E., Dang T., Edgar P., Maness C. (2005). & Chinkes D. Therapeutic efficacy of three silver dressings in an infected animal model. *J Burn Care Rehabil*. — 26. — 53–56.

Thomas S. & McCubbin P.A (2003). comparison of the antimicrobial effects of four silver-containing dressings on three organisms. *Wound Care*. — 12. — 101–107.

REFERENCES

Anis N.A., Vasilenko O.A., Gasparyan M.D. [et al.] (2020). Silvering of highly porous cellular ceramic materials. — Vol. 93, — Issue 10. — Pp. 1446–1453.

Belousova V.M. Denisov V.V. Ivanov. (2009). The use of silver (review) *Journal of Siberian Federal University. Engineering & Technologies*. — 3. — 250–277.

Brandes M. (2011). Metallization of plastics. Fundamentals and processes, current state and developments aimed at the future. *Electroplating and surface treatment*. — Vol. XIX. — No. 1. — Pp. 46–49.

Vishnyakov A.V., Manaeva T.V., Khotimsky D.V., Chashchin V.A. (2008). A method for producing antibacterial textile fibrous material. Patent — RU 2337716.

Garasko E.V., Shilyaev R.R., Chulovskaya S.A., Parfenyuk V.I. (2008). The use of nanoscale silver particles in medicine. 11 *Known*. Ivanovo Medical Academy. — NQ3–4. — Pp. 30–34.

Isaeva E.I., Gorbunova V.V., Boitsova T.B., Shchukarev A.V., Sirotinkin N.V. (2006). Investigation of the processes of photochemical formation of silver nanoparticles in elastomeric films // *Journal of General Chemistry*. — Vol.76. — Issue 5. — Pp. 723–729.

Lansdown A.B. Silver (2002). 1. Its antibacterial properties and mechanism of action. *J Wound Care*; 11: — 125–130.

Lansdown Alan B.G. (2010). *Silver in Healthcare: Its Antimicrobial Efficacy and Safety in Use*. Royal Society of Chemistry; — p. 159.

M.A. Goryaev, A.P. Smirnov (2014). Silver halides as unique photochemically sensitive semiconductors // *Izvestia of the A. I. Herzen Russian State Pedagogical University*. — St. Petersburg, — N 165. — Pp. 52–60.

Margaret Ip, Sau Lai Lui, Vincent K. M. Poon, Ivan Lung, Andrew Burd. (2006). Antimicrobial activities of silver dressings: an in vitro comparison. *Journal of medical microbiology*; — № 55. — Pp. 59–63.

Ruslan Melentiev, Arief Yudhanto, Ran Tao, Todor Vuchkov, Gilles Lubineau (2022). Metallization of polymers and composites: State-of-the-art approaches. *Materials & Design*, — Volume 221, — 110958.

RF Patent No. 2214476 IPC: C23C14/16. (2003). The method of forming a coating of precious metals and their alloys / A.J. Tuleushev, V.N. Lisitsyn, Yu.Zh. Tuleushev, V.N. Volodin, S.N. Kim. Publ.

Fritsch Julia, Schumm Benjamin, Grothe Julia, Dr., Kaskel Stefan (2015). Process for the preparation of thin electrically conductive layers of silver, a silver complex, its solution and a use of the silver complex in a solution. Patent DE102011108089B4.

Furno F., Morley K.S., Wong B. & other authors (2004). Silver nanoparticles and polymeric medical devices: a new approach to prevention of infection? *Antimicrob Chemother*. — 54. — 1019–1024.

Speshilov I.O., Lazarev P.Yu., Vahramyan T.A. (2017). Investigation of the process of chemical silvering of dielectric materials based on carbon fiber. *Electroplating and surface treatment*, volume XXV. — No. 4. — Pp. 44–48.

S.Q. Jiang, E. Newton, C.W.M. Yuen, C.W. Kan (2005). Chemical silver plating and its

application to textile fabric design // Journal of Applied polymer science. — Volume 96. — Issue 3. — Pp. 919–926.

Shkil N.N., Shkil N.A., Burmistrov V.A., Sokolov M.Y. (2011). Antimicrobial properties, pharmotoxicological characteristics and therapeutic effectiveness preparation argovit in gastroenteritis diseases of calves. Научный журнал КубГАУ. — №68. — (04).

Heggers J., Goodheart R.E., Washington J., McCoy L., Carino E., Dang T., Edgar P., Maness C. (2005). & Chinkes D. Therapeutic efficacy of three silver dressings in an infected animal model. J Burn Care Rehabil. — 26. —53–56.

Thomas S. & McCubbin P.A (2003). comparison of the antimicrobial effects of four silver-containing dressings on three organisms. Wound Care. —12. —101–107.

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 244–258

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.270>

УДК 547.1-3

© **A.T. Takibayeva***, **O.V. Demets**, **A.A. Zhorabek**, **A. Karilkhan**,
D.A. Rajabova, 2024

Abylkas Saginov Karaganda technical university, Karaganda, Kazakhstan.

E-mail: aia86@mail.ru

SYNTHESIS AND RESEARCH OF BIOLOGICALLY ACTIVE SUBSTANCES OF LUPAN TRITERPENOIDS

A. Takibayeva — Candidate of Chemical Sciences, assistant professor of department of Chemistry and Chemical Technology Abylkas Saginov Karaganda technical university. Nazarbaev 56, Karaganda, Kazakhstan

E-mail: altynarai81@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0536-0817>;

O. Demets — Master of Chemistry. Senior Laboratory assistant of the Department of Chemistry and Chemical Technology of Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov. Nazarbaev 56, Karaganda, Kazakhstan

E-mail: sweetc7@mail.ru;

A. Zhorabek — master of engineering and technology, «Abylkas Saginov Karaganda Technical University», Kazakhstan

E-mail: aia86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4309-9720>;

A. Karilkhan — senior lecturer of the Department of Chemistry and Chemical Technologies, Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov, Karaganda, Kazakhstan, PhD student of specialty chemistry, Faculty of natural sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhymukan 13, Nur-Sultan, Kazakhstan

E-mail: aidynguljj@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-7904>;

D. Rajabova — Master's student of OP "Chemical technology of organic substances" Karaganda Technical University named after Abylkas Saginov, Karaganda, Kazakhstan, Nazarbaev 56, Karaganda, Kazakhstan

E-mail: razhabova_d@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7261-2052>.

Abstract. The need for effective medicines of plant origin with minimal toxicity is growing every day. From the point of view of organic synthesis, one of the approaches to the creation of such drugs is the synthesis of structures containing several different sets of pharmacologically active atoms. One of the promising ways is the chemical transformation of available bioactive natural compounds, which is carried out in order to obtain analogues of drugs with useful properties or with completely new types of activity when creating such substances. One of the main such compounds can be considered natural triterpenoids of the Lupan series (betulin, betulinic acid, lupeol, etc.), which still attract more attention due to the fact that synthetic chemists have identified a wide range of biological

activity (antitumor, antiviral, anti-inflammatory, antibacterial, choleric, etc.). Of particular interest as the basis for obtaining new effective drugs from this group is the pentacyclic alcohol - betulin (3 β , 28digydroxy-20(29)-Lupen), which is the main component of the bark of the White-stemmed Birch of the genus *Betula*, widespread in the territory of Central Asia. The article is devoted to the study of new synthetic changes in some Lupan derivatives and the analysis of the spectrum of biological activity of new Lupan series derivatives and the assessment of the likelihood of the presence of basic pharmacological activity for the development of new drugs based on plant raw materials. To analyze the current state of research in this area, we gave a wide assessment of many studies that allow us to determine the need and prospects for continuing development in this direction. However, a detailed analysis of literary data showed that, despite the growing interest in this area, the study of synthesis and new chemical changes, the determination of the quantitative composition and biological activity of triterpenoids of the Lupan series in birch bark (*Betula pendula*) was not previously carried out. Therefore, the search and development of new ways to modify Lupan compounds and the study of useful properties still remain relevant.

Keywords: lupine, synthesis, betulin, terpenes, plants, physical, chemical, spectroscopy, virus, bacterium

© **А.Т. Такибаева, О.В. Демец, А.А. Жорабек, А. Карилхан,
Д.А. Ражабова, 2024**

Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті,
Қарағанды, Қазақстан.
E-mail: aia86@mail.ru

ЛУПАН ТРИТЕРПЕНОИДТАРЫНЫҢ БИОЛОГИЯЛЫҚ БЕЛСЕНДІ ЗАТТАРЫН СИНТЕЗДЕУ ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ

Такибаева А.Т. — Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университетінің химия және химиялық технология кафедрасының доценті, химия ғылымдарының кандидаты. Назарбаев даң. 56, Қарағанды, Қазақстан

E-mail: altynarai81@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0536-0817>;

Демец О.В. — химия ғылымдарының магистрі, Химия және химиялық технологиялар кафедрасының аға лаборанты, Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университеті, Назарбаев даң. 56, Қарағанды, Қазақстан

E-mail: sweetc7@mail.ru;

Жорабек А.А. — Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университетінің химия және химиялық технология кафедрасының аға оқытушысы, Назарбаев даң. 56, Қарағанды, Қазақстан

E-mail: aia86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4309-9720>;

Карилхан А. — Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университетінің химия және химиялық технология кафедрасының аға оқытушысы, Назарбаев даң. 56, Қарағанды, Қазақстан, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ докторанты

E-mail: aidynguljj@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-7904>;

Ражабова Д.А. — Әбілқас Сағынов атындағы Қарағанды техникалық университетінің

«Органикалық заттардың химиялық технология» мамандығының магистранты, Назарбаев дан.56, Қарағанды, Қазақстан
E-mail: razhabova_d@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7261-2052>.

Аннотация. Минималды уыттылығы бар өсімдік тектес тиімді дәрі-дәрмектерге қажеттілік күн сайын артып келеді. Органикалық синтез тұрғысынан мұндай препараттарды жасаудағы тәсілдердің бірі-фармакологиялық белсенді атомдардың бірнеше түрлі жиынтығы бар құрылымдардың синтезі. Осындай заттарды жасау кезінде пайдалы қасиеттері бар немесе мүлдем жаңа белсенділік түрлері бар препараттардың аналогтарын алу мақсатында жүргізілетін қолжетімді биоактивті табиғи қосылыстарды химиялық түрлендіру перспективалы жолдардың бірі болып табылады. Осындай негізгі қосылыстардың бірі Лупан сериясының табиғи тритерпеноидтарын (бетулин, бетулин қышқылы, лупеол және т.б.) қарастыруға болады, олар синтетикалық химиктердің биологиялық белсенділіктің кең спектрін (антитуморлық, вирусқа қарсы, қабынуға қарсы, бактерияға қарсы, холеретикалық және т. б.) анықтауына байланысты әлі күнге дейін көбірек назар аударады. Осы топтан жаңа тиімді дәрілік заттарды алудың негізі ретінде пентациклді спирт - бетулин (3β, 28дигидрокси-20(29)-лупен) ерекше қызығушылық тудырады, ол Орта Азия аумағында кең таралған *Betula* тұқымдас ақ сабақты қайыңның қабығының негізгі компоненті болып табылады. Мақалада лупанның кейбір туындыларының жаңа синтетикалық өзгерістерін зерттеуге және лупан сериясының жаңа туындыларының биологиялық белсенділігі спектрін талдауға және өсімдік шикізатына негізделген жаңа дәрі-дәрмектерді жасау үшін негізгі фармакологиялық белсенділіктің болу ықтималдығын бағалауға арналған. Осы саладағы зерттеулердің қазіргі жағдайын талдау үшін біз осы бағытта дамуды жалғастырудың қажеттілігі мен болашағын анықтауға мүмкіндік беретін көптеген зерттеулерге кең баға бердік. Алайда, әдеби деректерді егжей-тегжейлі талдау осы салаға деген қызығушылықтың артуына қарамастан, синтезді және жаңа химиялық өзгерістерді зерттеу, қайың қабығындағы Лупан сериясының тритерпеноидтарының сандық құрамы мен биологиялық белсенділігін анықтау бұрын жүргізілмегенін көрсетті (*Betula pendula*). Сондықтан Лупан қосылыстарын модификациялаудың жаңа тәсілдерін іздеу және дамыту және пайдалы қасиеттерді зерттеу әлі де өзекті болып қала береді.

Түйін сөздер: Лупан, синтез, бетулин, терпендер, өсімдіктер, физикалық, химиялық, спектроскопия, вирус, бактерия

© **А.Т. Такибаева, О.В. Демец, А.А. Жорабек, А. Карилхан,
Д.А. Ражабова, 2024**

Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова,
Караганда, Казахстан.
E-mail: aia86@mail.ru

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ЛУПАНОВЫХ ТРИТЕРПЕНОИДОВ

Такибаева А.Т. — к.х.н., доцент кафедры химии и химических технологий Карагандинского технического университета имени Абылкаса Сагинова., пр. Назарбаева 56, Караганда, Казахстан
E-mail: altynarai81@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0536-0817>;

Демец О.В. — магистр химии, старший лаборант кафедры химии и химических технологий Карагандинского технического университета имени Абылкаса Сагинова., пр. Назарбаева 56., Караганда, Казахстан
E-mail: sweetc7@mail.ru;

Жорабек А.А. — ст. преподаватель кафедры химии и химических технологий Карагандинского технического университета имени Абылкаса Сагинова., пр. Назарбаева 56, Караганда, Казахстан
E-mail: aia86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4309-9720>;

Карилхан А. — ст. преподаватель кафедры химии и химических технологий Карагандинского технического университета имени Абылкаса Сагинова., пр. Назарбаева 56, Караганда, Казахстан, докторант ЕНУ им. Л.Н. Гумилева
E-mail: aidynguljj@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-7904>;

Ражабова Д.А. — магистрант ОП «Химическая технология органических веществ» кафедры химии и химических технологий Карагандинского технического университета имени Абылкаса Сагинова., пр. Назарбаева 56, Караганда, Казахстан
E-mail: razhabova_d@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7261-2052>.

Аннотация. Потребность в эффективных растительных лекарствах с минимальной токсичностью растет с каждым днем. С точки зрения органического синтеза одним из подходов к разработке таких препаратов является синтез структур с несколькими различными наборами фармакологически активных веществ. При создании таких веществ одним из перспективных путей является химическая модификация доступных биоактивных природных соединений, которая проводится с целью получения аналогов препаратов, обладающих полезными свойствами или имеющих совершенно новые формы активности. Одним из основных таких соединений можно считать природные тритерпеноиды серии Лупан (бетулин, бетулиновая кислота, лупеол и др.), которые по-прежнему привлекают все большее внимание из-за того, что химики-синтетики определяют широкий спектр биологической активности (противоопухолевая, противовирусная, противовоспалительная, антибактериальная, желчегонная и др.). В качестве основы для получения новых эффективных лекарственных средств из этой группы особый интерес представляет пентациклический спирт - бетулин (3 β , 28дигидрокси-20(29)-Люпен), являющийся основным компонентом коры березы с белыми стеблями

рода *Betula*, широко распространенного на территории Средней Азии. Статья посвящена изучению новых синтетических изменений некоторых производных Лупана и анализу спектра биологической активности новых производных серии лупан и оценке вероятности наличия основной фармакологической активности для разработки новых лекарств на основе растительного сырья. Чтобы проанализировать текущее состояние исследований в этой области, мы провели широкую оценку многих исследований, которые позволяют определить необходимость и перспективы развития в этом направлении. Однако детальный анализ литературных данных показал, что, несмотря на растущий интерес к этой области, исследования синтеза и новых химических изменений, количественного состава и биологической активности тритерпеноидов Лупанового ряда в бересте ранее не проводились (*Betula pendula*). Поэтому поиск и разработка новых подходов к модификации соединений Лупана и изучение полезных свойств по-прежнему остаются актуальными.

Ключевые слова: Лупан, синтез, бетулин, терпены, растения, физические, химические, спектроскопия, вирус, бактерия

Кіріспе

Лупеол тритерпендердің ішіндегі ең кең тарағаны, өсімдіктердің көп түрлерінде кездеседі. Лупеол ақ қырыққабат, бұрыш, қияр, қызанак, сәбіз, бұршақ, соя, шырмауық, кара шай, інжір, құлпынай, қызыл жүзім, тұт, құрма сияқты кейбір көкөністер мен жемістерде кездеседі. Сонымен қатар ши майы, мия тамыры сияқты дәрілік өсімдіктерде көп кездеседі, *Celastrus paniculatus*, *Zanthoxylum riedelianum*, *Allanblackia monticola*, *Himatanthus sukuuba*, *Leptadenia hastata*, *Crataeva nurvala*, *Bombax ceiba*, *Sebastiania adenophora*, *Aegle marmelos* u *Embllica officinalis*. Сандық зерттеулер көрсеткендей, лупеол зәйтүн жемістерінде (3 мкг/г), манго жемістерінде (1,80 мкг / г целлюлоза), алоэ құрғақ жапырақтарында (280 мкг/г құрғақ жапырақ), қарағайда (800 мкг/г қабығы), жапон алмұртында (175 мкг/г қабығы) және женьшень майында (15,2 мг / 100 г май) (Mar et al., 2010).

Өсімдіктердегі лупеол биосинтезі тритерпен синтезі арқылы жүзеге асырылады және табиғатта болатын ең күрделі реакциялардың бірі ретінде қарастырылады. Лупеол биосинтезі цитозолда жүріледі және мевалонат (МВА), изопентенилпирофосфат (IPP), диметилаллилпирофосфат (DMAPP) және фарнезилпирофосфат (FPP) ацетилкоадан сатылы түрде қалыптасады (А.Н. Антимонова және т.б., 2010). Бұл реакция фарнезилпирофосфат синтаза (FPS) арқылы катализденеді. Содан кейін сквален синтаза (SQS) FPP-ны скваленге айналады. Сквален-эпоксидаза (SQE) скваленді 2,3-оксидоскваленге дейін тотықтырады, содан кейін лупеолсинтазалармен (LUS) циклденіп, лупенильді катион түзеді. Ақырында, лупенил катионы 29 метил тобын депротондау арқылы лупеолға айналады (Галайко және т.б., 2014).

Тритерпендердің негізгі сипаттамалары 1-кестеде көрсетілген.
1-кесте - Тритерпендердің сипаттамасы

Тритерпендердің классы	Тритерпендер	R ₁	R ₂	M [г/моль]
лупан	лупеол	CH ₃		426.70
	бетулин	CH ₂ OH		442.72
	бетулин қышқылы	COOH		456.71
олеанин	β-амирин	CH ₃	H	426.70
	эритродиол	CH ₂ OH	H	442.72
	олеанол қышқылы	COOH	H	456.71
	май қышқылы	COOH	OH	472.70
урсан	аамирин	CH ₃		426.70
	уваол	CH ₂ OH		442.72
	урсол қышқылы	COOH		456.71

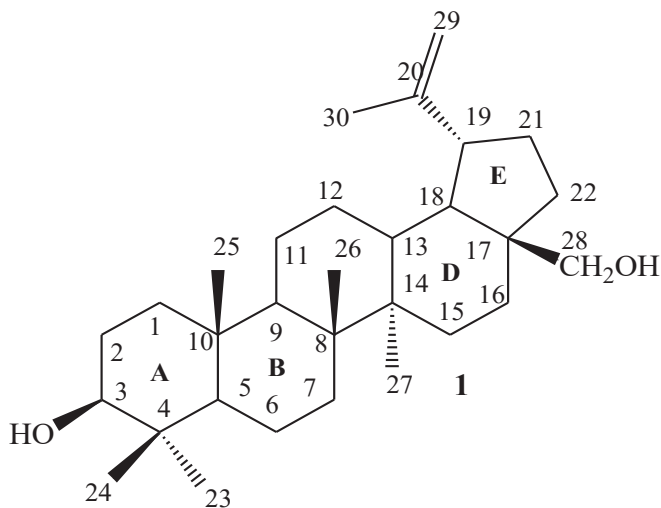
Негізгі тритерпендердің негізгі модификацияларының кең спектрі белгілі. Табиғатта тритерпеноидтар фитостеролдар сияқты тритерпен гликозидтері сияқты еркін түрде немесе олардың прекурсорлары ретінде бөлінеді.

Тетрациклді және пентациклді тритерпендер-ең көп таралған тритерпендер. Пентациклді тритерпендер көміртегі қаңқаларының химиялық құрылымына негізделген топтарға бөлінеді; гаммасерандар, хопандар, лупандар, олеанандар және урсандар. Оларды кейбір ағаш түрлерінің қабығында, жапырақтардың балауыз қабығында жоғары концентрацияда табуға болады. Тритерпеноидтар бірнеше түрлі биологиялық нысандарға қатысты белсенді (Говди және т.б., 2011).

Биологиялық белсенді тритерпеноидтардың ішінде көптеген препараттарды әзірлеуге перспективалы бетулин туындылары маңызды орын алады. Лупан қаңқасының басқа позицияларындағы тритерпеноидтардың химиялық түрленуіне аз көңіл бөлінеді. Осыған байланысты біз одан әрі зерттеудің негізгі векторы ретінде таңдаған лупан қатарындағы жаңа фосфоры бар тритерпеноидтардың туындыларын синтездеу маңызды және өзекті міндет болып табылады.

Лупан сериясының тритерпеноидтер класының ең танымал заттарының бірі, бетулин және оның туындылары, бүгінгі күні белсенді зерттелуде.

Бетулин - лупандар тобына жататын табиғи пентациклді тритерпеноид. Бұл топқа жататын сипаты белгі бес мүшелі сақина E және C-19-да α-изопропил (изопропилен) тобының болуы. Бетулиннің жүйелі атауы – 3β, 28-дигидрокси-20 (29) – лупен немесе луп-20 (29) – ең-3β, 28-диол (1-сурет).

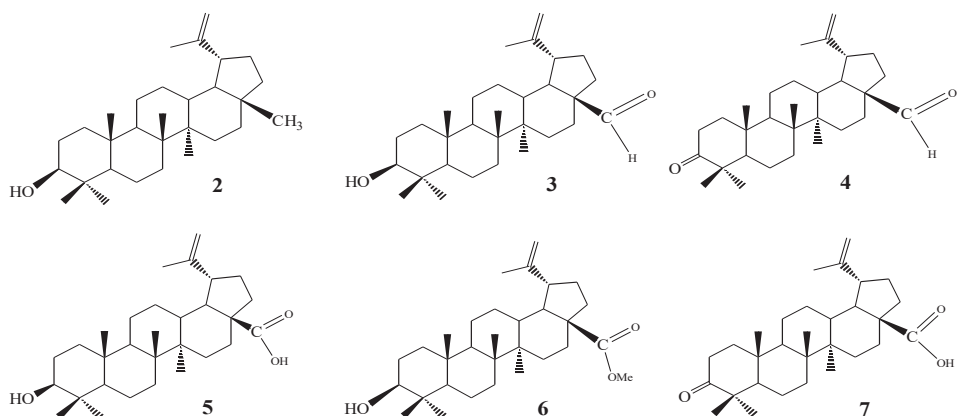


1 Сурет – Бетулин

Бетулин (1) қайталама С3 гидроксид тобы, қос С-20 байланысы және бастапқы С-28 гидроксид тобы болған кезде оңай өзгертіледі. Бұл функцияларды бетулиннің неғұрлым белсенді және ерекше туындыларын синтездеу үшін пайдалануға болады. 2-кестеде бетулиннің кейбір физикалық-химиялық қасиеттері көрсетілген (Kazakova et.al., 2010).

Бетулин-аздап аморфты қасиеттері бар ұнтақ түріндегі ақ зат, крахмалға ұқсайды, көптеген еріткіштерді қолдану үлкен кристалдардың өсуіне мүмкіндік бермейді, бұл бетулин молекуласында аз полярлы алкилді фрагменттердің көп болуының салдары болып табылады (Lucie Heller et.al., 2016).

Қайың қабығы екі бөліктен тұрады - сыртқы және ішкі. Қабықтың сыртқы бөлігі экстрактивті заттарға ең бай. Барлық дерлік сығындылардың негізгі компоненті бетулин болып табылады, оның қабығының сыртқы бөлігіндегі мөлшері қайың түріне, оның өсу орны мен жағдайына, ағаштың жасына және басқа факторларға байланысты 10–35 % аралығында өзгереді. Бетулиннің тұрақты серігі лупеол болып табылады (2-сурет). Қайың қабығы сығындыларының құрамында оның туындылары да бар: бетулин альдегиді, бетулон қышқылы, бетулин қышқылы, бетулин қышқылы метил эфирі және 3-оксобетулин (бетулон) қышқылы (2-сурет).



2-сурет – Бетулин туындылары (2-лупеол; 3-бетулин альдегиді; 4-бетулин альдегиді; 5-бетулин қышқылы; 6-бетулин қышқылының метил эфирі; 7-бетулин қышқылы)

Бетулиннің және оның кейбір туындыларының химиялық түрленуі

Бетулин (1) құрамында химиялық түрлендірулер мүмкін болатын үш функционалды топ бар: гидроксигруппалары 3-С және 28-С позицияларда және изопропил тобы 19-С позицияда. Айта кету керек, кез-келген ОН тобына немесе изопропил тобына химиялық түрлендірулер жүргізу үшін ацилденген бетулин туындылары жиі қолданылады. 2-суретке сәйкес спиртті түрлендірудің қарапайым түрлерінің бірі-хлорангидридтермен немесе қышқыл ангидридтерімен әрекеттесу арқылы эфирлердің түзілуі. Реакция жағдайларына байланысты моно - және диэфир түзетін бетулинді этерификациялаудың әртүрлі нұсқалары ұсынылған (Касенов және т.б., 2019).

Әдістер мен материалдар

Зерттеу барысында талдаудың келесі физикалық-химиялық әдістері қолданылды: ИҚ-, хромато-масс-спектрометрия, газ хроматографиясы, Pass бағдарламасы арқылы химиялық қосылыстардың биологиялық белсенділігі спектрлерін компьютерлік болжау.

Цитоуыттылығы *Artemia salina* (Leach) теңіз шаян тәрізділердің дернәсілінің тіршілік әрекетінің өмір сүру сынағы кезінде зерттелді. Тәжірибелер 2 күндік дернәсілдерге *in vitro* өсіру жағдайында жүргізілді. Дернәсілдер *Artemia salina* (Leach) теңіз шаяндарының жұмыртқаларын жасанды теңіз суына батыру арқылы өсірілді және 48 сағат бойы, 37 °С температурада инкубацияланды. Сынақ үлгісінің өлшенген үлгісі 2 мл метанолда ерітілді, содан кейін осы ерітіндіден 500 мкл (3 параллель), 50 мкл (3 параллель), 5 мкл (3 параллель) алынды. Метанол буланғаннан кейін әрбір ыдысқа 5 мл жасанды теңіз суы қосылды. Осылайша, егер үлгінің бастапқы массасы 2 мг болса, онда үлгінің соңғы концентрациясы үш реттік қайталаудағы әрбір концентрациядан тиісінше 100 мкг/мл, 10 мкг/мл және 1 мкг/мл болды. Әрбір ыдыста Пастер тамшуырының көмегімен сынамамен бірге теңіз шаян тәрізділері *Artemia salina* (Leach) 2 күндік дернәсілдері орналастырылды. Осыдан кейін барлық

құтылар бөлме температурасында 24 сағат бойы жарықта қалдырылды. 24 сағаттан кейін тірі қалған және өлген дернәсілдер саналды.

Лупан сериясының табиғи тритерпеноидтарын оқшаулау үшін біз қайың қабығын (*Betula pendula*) таңдадық (Kommera et.al., 2010). Зерттеулерде қайың қабығының сыртқы бөлігі қолданылды.

Лупан тритерпеноидтарын алу үшін Қарағанды облысының маңындағы салыстырмалы түрде жаңадан кесілген *Betula pendula* қайың ағашынан мұқият тазарту арқылы алынған қайың қабығы қолданылды, шикізат 2018 жылдың қараша айында жиналды.

Бетулин-зертханалық әдістермен алынған негізгі зерттеу объектісі, әрі қарай эксперименттік жұмыстар жүргізу үшін оның құрылымының сенімділігі үшін тексеріледі.

Экстракция кезінде еріткіш ретінде жұмыста изопропил спирті, бутанол, этанол, гексан, хлороформ және басқа да органикалық еріткіштер қолданылды.

ЖҚХ әдісі: Жұмыста алынған заттар (Касенов және т.б., 2020) Элюциялық жүйелерді қолдана отырып, Silufol тақталарында жұқа қабатты хроматография (ЖҚХ) арқылы анықталды:

бензол: метилен хлориді: этил спирті = 5:5:1. Дақтарды анықтау фосфор – Молибден қышқылының 10 % ерітіндісімен жүзеге асырылды, содан кейін пластинаны 3-4 минут қыздырды.

ИҚ спектрлері ФСМ – 1201 маркалы Фурье спектрометрінде түсірілді, толқын ұзындығы 500 – 4000см⁻¹ диапазонында калий бромиді таблеткаларында және сіңіру жолақтарының сипаттамалық жиіліктерінің көмегімен молекулада бетулинге тән атомдар мен байланыстардың әртүрлі топтарының болуы анықталды (Lucie Heller et.al., 2016).

ЖТСХ талдауы Shimadzu LC – 20 Prominence хроматографында жүргізілді, Zorbax бағанының өлшемі 150*4,6 мм, SPD 20 AV спектрофотометриялық детекторы.

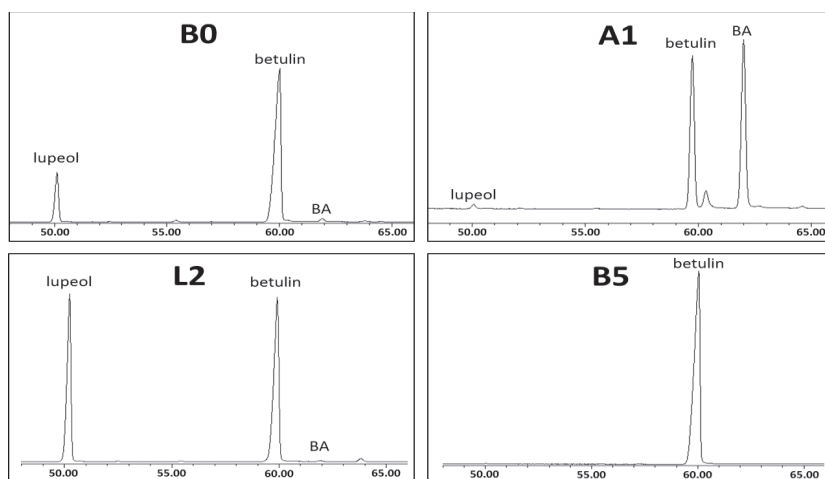
Тәжірибелік бөлім

Бетулинді қайыңның қабығынан бөліп алу әдісі әртүрлі еріткіштермен экстракциялау арқылы бетулинді бөліп алу әдістеріне негізделген. Мұндағы әр нақты фракцияның аздаған бөлігі үлгілерді талдау және басқа эксперименттік мақсаттар үшін пайдаланылды. (Курбатов және т.б., 2011). Сондықтан тазартудың келесі кезеңінде қолданылатын фракцияның мөлшері тазартудың алдыңғы сатысында алынған тиісті фракцияның мөлшерінен аз болады. Төменде көрсетілген барлық фракциялар әріппен (в - бетулин фракциясы, L - лупеол фракциясы, а - бетулин қышқылының фракциясы) және нөмірмен (тазарту сатысының нөмірі; 0—қабықтан негізгі экстракция үшін) көрсетіледі (Shayan Amiri et. al., 2016). Қолданылған әдіс тек зертханалық масштабта, грамм мөлшерін қолдана отырып жасалды. Алайда, бұл әдісті тәжірибелі қондырғыда немесе коммерциялық масштабта қолдануға болмайды.

2-Кесте - Фракциялардағы бетулин, бетулин қышқылы, лупеол және басқа тритерпендердің мөлшері

Фракция	Фракциялар құрамы				Тазалау
	бетулин %	БА %	лупеол %	басқа %	шығу %
B0	83.0	1.4	15.2	0.4	(26%)
B1	83.5	0.1	15.9	0.5	94
A1	45.7	53.3	0.2	0.8	(шамамен 0.7 г)
B2	98.2	0.1	1.1	0.6	70
L2	55.4	0.2	44.1	0.3	(1.12 г)
B3	98.7	0.1	1.0	0.2	43
B4	99.2	0.0	0.7	0.1	91
B5	99.8	0.0	0.2	0.0	71

ГХ-МС хроматограммасы шындарының аудандары айқындалады. Нәтижелерді калибрлеу қисығы (БА-бетулин қышқылы) арқылы алынған молшылық коэффициентінің % түрінде ұсынылған. Алдыңғы фракцияның бастапқы мөлшерінен % - бен экстракция және тазарту сатыларының шығуы (Naavikko et.al., 2014).



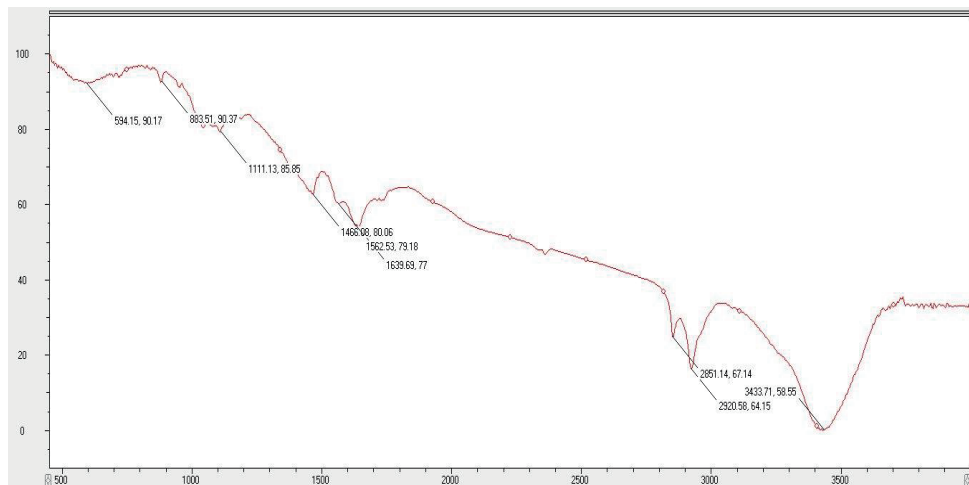
3-Сурет. ГХ-МС төрт фракциядан тұратын хроматограмма. B0-бастапқы сығынды, A1-бетулин қышқылымен байытылған жанама өнім, L2-лупеолмен байытылған жанама өнім, B5—таза бетулин; BA-бетулин қышқылы; детектордың салыстырмалы реакциясы (Y осі) минуттарда (X осі).

Зерттелетін заттардың бөліну сатыларының жалпыланған сипаттамасы:

- 1 кезең- $\text{CA}(\text{OH})_2$ көмегімен қышқылдар мен басқа қоспаларды алып тастау;
- 2 кезең - бензолмен экстракция арқылы лупеолды алып тастау;
- 3 кезең - ерітіндімен қайта кристалдану;
- 4 кезең - хлороформдағы силикагельдегі қалдық (ішінара боялған) қоспаларды жою;
- 5 кезең - этанолмен қайта кристалдану.

Синтезделген заттардың құрылымын ИҚ-спектроскопия әдісімен анықтау. Лупан туындыларын хроматографиялық, масс-спектрометриялық зерттеу

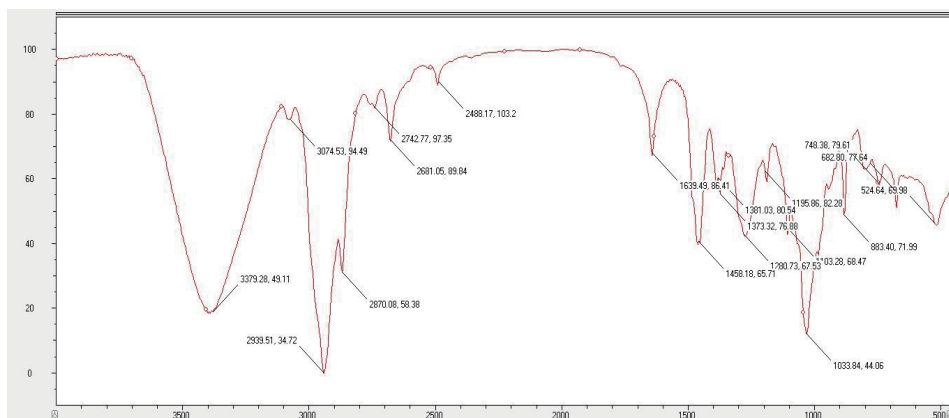
ИҚ - спектрлерді тіркеу бромид калий таблеткасында 500–4000 см⁻¹ толқын ұзындығы диапазонында FSM - 1201 маркалы Фурье - спектрометрінде жүргізілді (4-сурет).



4-Сурет. ИҚ-зат үлгісінің спектрі

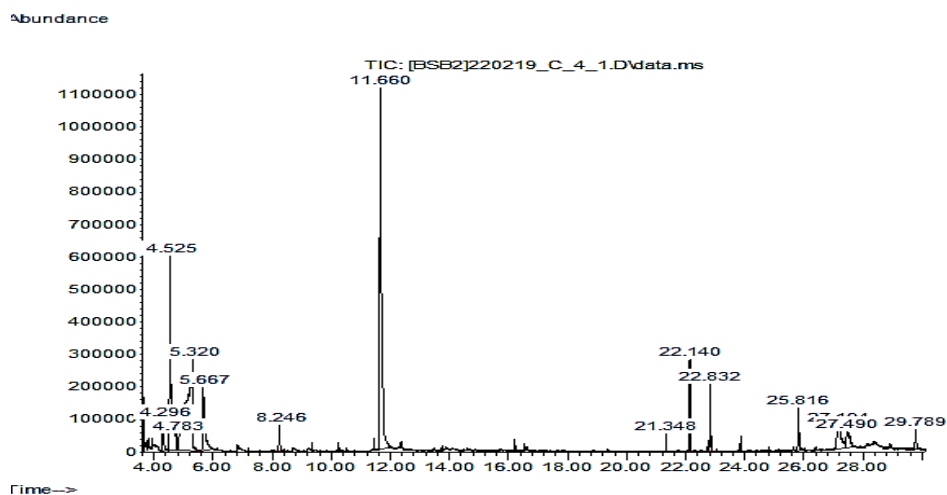
Сіңіру жолақтарының сипаттамалық жиіліктерінің көмегімен молекулада бетулин молекуласына тән атомдар мен байланыстардың әртүрлі топтарының болуы анықталды. Атомдардың келесі топтарына тән сіңіру жолақтары анықталды: гидроксил топтарының валенттік тербелістеріне жататын кең сіңіру жолағы бар, 3433 см⁻¹ гидроксил топтарының созылу тербелісіне жататын кең жұтылу жолағы бар; лупан қаңқасының С - Н топтарына тән созылу тербелісі 2920 және 2851 см⁻¹; С = С қос байланысының созылу тербелісі 1639 см⁻¹; CH₂ топтарының деформациялық тербелістері 1466см⁻¹ кезінде байқалады; С - О тобының созылу тербелісі 1111 см⁻¹ байқалады (Csuk, 2013); CH₃ топтарының деформациялық тербелістері - 883 см-де⁻¹. Алынған үлгінің ИҚ - спектрін әртүрлі көздерде келтірілген ИҚ - спектрлерімен салыстыру біз алған зат бетулин деген қорытынды жасауға мүмкіндік береді.

Әрі қарай, сипатталған әдіс бойынша фосфорланған бетулин туындыларын синтездегеннен кейін реакцияның жүру барысы жұқа қабатты хроматография көмегімен бақыланды. Алынған зат ИҚ-спектроскопия әдісімен талданды (5-сурет). ИК-спектроскопия деректері бойынша, бетулин фрагментіне тән сіңіру жолақтарымен қатар, Р-О-СН₃ топтарына тән 1195см⁻¹ және Р = О 1280см⁻¹ кезінде жұтылу жолақтары анықталды (Xu et.al., 2018).



5-Сурет. Бетулиннің фосфорланған туындысының ИҚ-спектрі

Көрсетілген фосфат топтарының бетулин молекуласына қосылу реакцияларын жүргізу кезінде нәтижелері 6-суретте көрсетілген хромато-масс-спектрометрияны қолдана отырып, оның 3, 28-позицияда жүретіндігі анықталды (Jana Wiemann et al., 2016)



6-Сурет. Фосфорланған бетулин туындысының хромато-масса спектрі

Осылайша, ИҚ және хроматомассалық спектроскопиясының мәліметтері бойынша фосфат топтарының бетулин молекуласына қосылу реакциясы - 28 позициясында болатындығы анықталды.

Қорытынды

Бұл ғылыми-зерттеу жұмыс лупан туындыларының синтетикалық өзгерістерін, құрылымын және биологиялық белсенділігін зерттеуге бағытталған.

Зерттелген мәліметтер қарастырылып отырған органикалық қосылыс-

тардың химиялық құрылымына, реакциялық қабілеттеріне және перспективті фармакологиялық әсерлеріне жасалған көптеген зерттеулерге қарамастан, лупан сериясының пентациклді тритерпеноидтары жаңа жоғары тиімді дәрі-дәрмектерді құрудың бастапқы нүктесі болып табылатынын көрсетеді.

Зерттеу барысында алынған нәтижелер келесі қорытынды жасауға мүмкіндік береді:

1. *Betula pubescenz*, *Betula kirghisorum*, *Betula alba* және т.б. сияқты әртүрлі қайыңдардан бетулинді бөліп алуға арналған ғылыми әдебиеттерді зерттей отырып, біз Қарағанды облысының аумағында өсетін қайыңның (*Betula pendula*) химиялық құрамын зерттеу бойынша жұмыстар бұрын жүргізілген жоқ деген қорытындыға келдік.

2. Алғаш рет бетулиннің қайың қабығынан сандық шығуының экстракция ұзақтығына және сілтінің сулы ерітіндісінің концентрациясына тәуелділігі зерттелді. Бетулинді бөліп алу сулы сілтілік ерітіндіде гидролизденген бутил спиртінен экстракция әдісімен жүзеге асырылды. Зерттеудің барлық кезеңдері үшін лупанның кейбір туындыларының көзі ретінде қайыңның бұл түрі таңдалды.

3. Көптеген зерттеулердің негізінде бетулинді пентациклді тритерпеноидін қайың қабығынан шығарудың ең тиімді әдісі әзірленді.

4. Бетулин диацетатының құрылымы мен биологиялық белсенділігінің өзара байланысы туралы жаңа деректер алынды, олар өсімдік шикізаты химиясының бірқатар теориялық мәселелерін шешуге белгілі бір айқындық бере алады.

5. Бетулин негізіндегі жаңа фосфорлы туындылар синтезделіп, сипатталды. Бірінші реакция 1:2:2 қатынасында жүргізілді (бетулин: диметилхлорфосфат: триэтиламин). Фосфор фрагменттерінің қосылуы көміртек атомдарының 3 және 28 позициясында жүреді. Реакциялар 1:1:1 қатынасында жүргізілді. Содан кейін фосфор фрагментінің қосылуы тек көміртек атомының 28 позициясында жүреді, яғни оң жағында, онда ол топ $-CH_2$ арқылы циклмен байланысады. 3-позицияда ОН тобы циклмен тікелей байланысты. Диацетатабетулинді алу реакциялары да жүргізілді, онда 3 және 28-позицияда О-СО- CH_3 ацетатты топтарына ОН топтары ауыстырылады. Бұл 3 және 28 көміртек атомдарын блоктау үшін қажет, содан кейін жоғарғы $=CH_2$ тобының қос байланысы арқылы фосфорлану реакциясын жүргізу керек, яғни біз фосфор фрагментін қос байланыс орнына отырғызамыз. Осыдан кейін біз тиісті реакциямен ОН топтарын өз орнына қайтарамыз.

6. ИҚ спектрлеріндегі сипаттамалық сіңіру жиіліктерін қолдана отырып, қосылыста бетулин молекуласына тән атомдар мен байланыстардың түрлі топтарының болуы анықталды. ЖТСХ әдісімен бетулинге сапалық және сандық талдау жүргізілді. Бұл зат қайыңнан алғаш рет бөлініп алынған.

7. Химиялық қосылыстардың құрылымдық формулалары негізінде биологиялық белсенділік спектрлерін болжайтын PASS компьютерлік

бағдарламасының көмегімен синтезделген қосылыстардың биологиялық белсенділігін болжауды жүзеге асырдық.

8. Осы жұмыста сипатталған зерттеулер барысында алынған үлгілердің цитоуыттылығын сынауға арналған сынақтардан кейін *Artemia salina* (Leach) теңіз шаяндарының личинкаларына қатысты *in vitro* өсіру жағдайында бутил экстракты, этил экстракты, бетулиннің фосфорланған туындысы, бетулин үлгілері *Artemia salina* (Leach) теңіз шаяндарының личинкаларына қатысты әлсіз цитоуыттылықты көрсетеді.

9. «Экологиялық қауіпсіздік» бөлімін жазудың нәтижесі қоршаған орта үшін қауіпсіздікті анықтау және осы жұмыста сипатталған эксперименттерді жүргізу кезінде «жасыл химия» әдістерін қолдану болды.

Минималды жанама әсерлердің болуы лупан туындыларына басқа қосылыстардан әлдеқайда үлкен артықшылық береді. Өсімдік экстракттарының құрамында олардың болуы жоғары тиімділікке ие болу үшін бірдей мәнге ие, бұл уыттылық деңгейінің төмендеуіне әкеледі. Әдеби шолу мен эксперименттік зерттеулердің нәтижелерін егжей-тегжейлі талдағаннан кейін, бетулин дамып келе жатқан аналитикалық әдістердің көмегімен өсімдік негізіндегі жаңа дәрі-дәрмектерді өндіруде перспективалы болатын жаңа туындыларды шығара алатындай етіп, біздің назарымызды қажет етеді деген қорытындыға келдік.

REFERENCES

A.A. Mar et al. (2010). Synthesis, proapoptotic screening, and structureactivity relationships of novel aza-lupane triterpenoids // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. — Vol. 20. — № 18. — Pp. 5389–5393.

Говди А.И., Василевский С.Ф., Ненайденко В.Г., Соколова Н.В., Толстикова Г.А. (2011). Бетулон қышқылының 1,2,3-триазолды конъюгаттарын 1,3-циклокосылым негізінде пептидтермен синтездеу // *РАН Жар Сер.хим.* — №11. — Б. 2354–2358.

Касенов Р.З., Демец О.В., Картбаева Г.Т., Жумадилов С.С. и др. (2019). Extraction of betulin-natural triterpenoids from Kirgыз birch «*Betula kirgisorum*», an endemic plant of the Republic Kazakhstan // *Журнал «Вестник Карагандинского университета», серия «Биология. Медицина. География»*. — С. 14–18. — №1 (93).

Kazakova O.B., Giniyatullina G.V., Tolstikov G.A., Medvedeva N.I., Utkina T.M., and Kartashova O.L. (2010). Synthesis, Modification, and Antimicrobial Activity of the N-methylpiperazinyl Amides of Triterpenic Acids // *Russian Journal of Bioorganic Chemistry*. — V. 36. — No. 3. — Pp. 383–389.

Курбатов Е.С., Коструб В.В., Казей В.И., Карапстян Р.Н., Курбатов С.В. (2011). Бетулон қышқылы пиперазидінің және оның нитрогетеральды туындыларының синтезі // *ОрХ.Ж.* — Т. 47. — №11. — Pp.1247–1248.

Касенов Р.З., Демец О.В., Алиева М.Р. (2020). Кейбір табиғи тритерпеноидтарды бөліп алу және химиялық трансформациялау әдістерін зерттеу. Монография: Караганда: Изд-во «Санат-Полиграфия», — 80 p.

Lucie Heller, Vincent Perl, Jana Wiemann, Ahmed Al-Harrasi, René Csuk (2016). *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. Pp. 1–3.

Santos R.C., Salvador J.A.R., Marin S., Cascante M., Moreira J.N., Dinis T.C.P. (2010). Synthesis and structure – activity relationship study of novel cytotoxic carbamate and N-acylheterocyclic bearing derivatives of betulin and betulinic acid // *Bioorg. Med. Chem.* — V.18. — Pp. 4385–4396

Csuk R., Szepek R., Siewert B., Nitsche C. (2013). Cytotoxic betulin derived hydroxypropargylamines trigger apoptosis // *Bioorg. Med. Chem.* — 2013. — V.21. — Pp. 425–435.

Такибаева А.Т., Касенов Р.З., Ибраев М.К., Демец О.В., Алиева М.Р. (2021). Бетулинді

қайың қабығынан оқшаулау әдісі *Betula Kirghisorum*. ҚР пайдалы модель патенті. — № 6483. — 08.10.2021 ж.

Xu J., Li Zh., Luo J., Yang F., Liu T., Liu M., Qiu W-W., Tang J. (2012). Synthesis and biological evaluation of heterocyclic ring-fused betulinic acid derivatives as novel inhibitors of osteoclast differentiation and bone resorption // *J. Med. Chem.* — V. 55. — Pp. 3122–3134.

H. Kommera, G. N. Kaluderović, S. Dittrich, Ju. Kalbitz, B. Dräger, Th. Mueller, R. Paschke, Bioorg (2010). *Med. Chem. Lett.*, — 20, — 3409 p.

Haavikko R., Nasereddin A., Sacerdoti-Sierra N., Kopelyanskiy D., Alakurtti S., Tikka M., Jaffe Ch. L., Yli-Kauhaluoma J. (2014). Heterocycle-fused lupane triterpenoids inhibit *Leishmania donovani* amastigotes // *Med. Chem. Comm.* — V. 5. — Pp. 445–451.

Shayan Amiri, Sanaz Dastghaib, Mazaher Ahmadi (2020). Betulin and its derivatives as novel compounds with different pharmacological effects. *Biotechnology Advances.* — Pp. 38–45.

Jana Wiemann, Lucie Heller, Vincent Perl, Ralph Kluge, Dieter Strohl, Rene Csuk (2016). Betulinic acid derived hydroxamates and betulin derived carbamates are interesting scaffolds for the synthesis of novel cytotoxic compounds. — №106. — Pp. 194–210.

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 259–270

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.271>

UDC 677.027.62

© **B.R. Taussarova, M.Sh. Suleimenova, Zh.E. Shaikhova, S.O. Abilkasova*,
L.M. Kalimoldina, 2024**

Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: sandy_ao@mail.ru

STUDY OF PROPERTIES OF CELLULOSE TEXTILE MATERIALS BASED ON COPPER NANOPARTICLES

Taussarova Bizhamal — Almaty Technological University, Doctor of Chemical Sciences, professor of the Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Almaty, Kazakhstan

E-mail: birtausarova@mail.ru . <https://orcid.org/0000-0002-2718-2102>;

Suleimenova Mariya — Almaty Technological University, candidate of chemical sciences, associate professor of the Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Almaty, Kazakhstan

E-mail: s.mariyash@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0001-5455-6475>;

Shaikhova Zhanat — Almaty Technological University, lecturer of the Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Master's degree, Almaty, Kazakhstan

E-mail: zh.shaikhova@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-5909-4182>;

Abilkasova Sandugash — Almaty Technological University, candidate of technical sciences, senior lecturer of the Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Almaty, Kazakhstan

E-mail: sandy_ao@mail.ru <https://orcid.org/0000-0001-8322-4592>;

Kalimoldina Laila — Almaty Technological University, candidate of technical sciences, senior lecturer of the Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Almaty, Kazakhstan

E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-4397-9629>.

Abstract. Currently, an urgent problem is the improvement of methods for modifying cellulose materials to create a wide range of new, high-quality materials with multifunctional properties. The aim of the work is to obtain textile cellulose materials with antibacterial properties based on copper nanoparticles. Methods of synthesis of copper nanoparticles by reduction of copper sulfate in an aqueous medium in the presence of ascorbic acid and gelatin stabilizer are considered. To determine the optimal synthesis conditions, the influence of various factors on the antibacterial activity of copper nanoparticles was studied: the concentrations of the reagents used, the pH values of the medium, the effect of temperature on the reduction of copper ions. To improve the antimicrobial properties of cellulose textiles in a composition containing copper sulfate based on ascorbic acid, a simple and environmentally safe method for producing concentrated (about 0.01 mol/l) hydrosols with nanoparticles is proposed. Copper nanoparticles were obtained from CuSO_4 solutions in the presence of ascorbic acid reducing agent and gelatin stabilizer. The acidity of the copper sulfate solution was changed by sodium

hydroxide in the pH range 2.8–11.5. The number of nanoparticles obtained increases with an increase in pH by 10.3, and a further increase in pH leads to the hydrolysis of copper salts, which to some extent reduces the number of nanoparticles formed. The study used a solution of copper ions with a concentration of the initial salt of more than 0.1–0.5 mol/l. Studies conducted by electron scanning microscopy confirmed the presence of nanoscale particles in the structure of the material. The synthesis of copper nanoparticles in the presence of ascorbic acid reducing agent and gelatin stabilizer has been developed. Optimal parameters of processing cellulose textile materials with copper nanoparticles have been developed. It is shown that the treatment of cellulose materials with copper nanoparticles gives them antimicrobial properties.

Keywords: metal nanoparticles, copper nanoparticles; ascorbic acid, gelatin, copper sulfate, cellulose material, textile materials, antibactericidal properties

© Б.Р. Таусарова, М.Ш. Сулейменова, Ж.Е. Шаихова, С.О. Абилкасова*,
Л.М. Калимолдина, 2024

Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: sandy_ao@mail.ru

МЫС НАНОБӨЛШЕКТЕРІНІҢ НЕГІЗІНДЕГІ ЦЕЛЛЮЛОЗАЛЫҚ ТОҚЫМА МАТЕРИАЛДАРЫНЫҢ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ

Таусарова Бижамал — Алматы технологиялық университеті, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының профессоры, химия ғылымының докторы, Алматы, Қазақстан
E-mail: birtausarova@mail.ru . <https://orcid.org/0000-0002-2718-2102>;

Сулейменова Мария — Алматы технологиялық университеті, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының асс.профессоры, химия ғылымының кандидаты, Алматы, Қазақстан

E-mail: s.mariyash@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0001-5455-6475>;

Шаихова Жанат — Алматы технологиялық университеті, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының лекторы, магистр, Алматы, Қазақстан

E-mail zh.shaikhova@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-5909-4182>;

Абилкасова Сандуғаш — Алматы технологиялық университеті, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының сениор-лекторы, т.ғ.к., Алматы, Қазақстан

E-mail: sandy_ao@mail.ru <https://orcid.org/0000-0001-8322-4592>;

Калимолдина Лайла — Алматы технологиялық университеті, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының сениор-лекторы, т.ғ.к., Алматы, Қазақстан

E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru. Orcid ID:0000-0003-4397-9629.

Аннотация. Қазіргі уақытта көпфункционалды қасиеттері бар жаңа, жоғары сапалы материалдардың кең спектрін жасау үшін целлюлоза материалдарын өзгерту әдістерін жетілдіру өзекті мәселе болып табылады. Жұмыстың мақсаты-мыс нанобөлшектеріне негізделген бактерияға қарсы қасиеттері бар тоқыма целлюлоза материалдарын алу. Аскорбин қышқылы мен желатин тұрақтандырғышының қатысуымен сулы ортада мыс сульфатын қалпына келтіру арқылы мыс нанобөлшектерін синтездеу әдістері

қарастырылады. Синтездің оңтайлы жағдайларын анықтау үшін мыс нанобөлшектерінің Бактерияға қарсы белсенділігіне әртүрлі факторлардың әсері зерттелді: қолданылатын реагенттердің концентрациясы, ортаның рН мәні, мыс иондарының тотықсыздану процесіне температураның әсері. Құрамында аскорбин қышқылы негізіндегі мыс сульфаты бар целлюлоза тоқыма бұйымдарының микробқа қарсы қасиеттерін жақсарту үшін 30–40 НМ мыс нанобөлшектері бар концентрацияланған (шамамен 0.01 моль/л) гидрозольдерді алудың қарапайым және экологиялық таза әдісі ұсынылады. Алынған гидрозолдар тікелей синтезден кейін және уақыт өте келе күлдің тұрақтылығын анықтау үшін 7 күннен кейін толқын ұзындығы 400-ден 500 нм-ге дейінгі спектрофотометрде ("JENWAY") зерттелді. Мыс нанобөлшектері аскорбин қышқылының тотықсыздандырғышы мен желатин тұрақтандырғышының қатысуымен CuSO_4 ерітінділерінен алынды. Мыс сульфаты ерітіндісінің қышқылдығы рН 2.8–11.5 диапазонында натрий гидроксиді арқылы өзгерді. Алынған нанобөлшектердің саны рН 10.3 жоғарылаған сайын артады, ал рН одан әрі жоғарылауы мыс тұздарының гидролизіне әкеледі, бұл белгілі бір дәрежеде пайда болған нанобөлшектердің санын азайтады. Зерттеуде бастапқы тұз концентрациясы 0.1–0.5 моль/л-ден асатын мыс иондарының ерітіндісі қолданылды. Электронды сканерлеу микроскопиясы арқылы жүргізілген зерттеулер нәтижесінде материал құрылымында наноөлшемді бөлшектердің болуы анықталды. Аскорбин қышқылы тотықсыздандырғышы мен желатин тұрақтандырғышының қатысуымен мыс нанобөлшектері синтезделді. Мыс сульфаты негізінде құрылым жасалып, целлюлоза тоқыма материалдарын мыс нанобөлшектерімен өңдеудің оңтайлы шарттары анықталды. Мыс нанобөлшектерімен өңделген целлюлоза материалдарының микробқа қарсы қасиеттерін беретіні, беріктік сипаттамаларын жақсартатыны анықталды.

Түйін сөздер: металл нанобөлшектері, мыс нанобөлшектері, аскорбин қышқылы, желатин, мыс сульфаты, целлюлоза материалы, тоқыма материалдары, бактерияға қарсы қасиеттер

© Б.Р. Таусарова, М.Ш. Сулейменова, Ж.Е. Шаихова, С.О. Абилкасова*,
Л.М. Калимолдина, 2024

Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан.

E-mail: sandy_ao@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ЦЕЛЛЮЛОЗНЫХ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ

Таусарова Бидамал — доктор химических наук, профессор кафедры «Химия, химическая технология и экология», Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан
E-mail: birtausarova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2718-2102>;

Сулейменова Мария — кандидат химических наук, асс.профессор кафедры «Химия, химическая технология и экология», Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан

E-mail: s.mariyash@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5455-6475>;

Шаихова Жанат — магистр, лектор кафедры «Химия, химическая технология и экология», Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан

E-mail: zh.shaikhova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5909-4182>;

Абилкасова Сандугаш — к.т.н., сениор-лектор кафедры «Химия, химическая технология и экология», Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан

E-mail: sandy_ao@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8322-4592>;

Калимолдина Лайла — к.т.н., сениор-лектор кафедры «Химия, химическая технология и экология», Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан

E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4397-9629>.

Аннотация. В настоящее время актуальной проблемой является совершенствование методов модификации целлюлозных материалов для создания широкого спектра новых, высококачественных материалов с многофункциональными свойствами. Цель работы — получение текстильных целлюлозных материалов с антибактериальными свойствами на основе наночастиц меди. Авторами рассмотрены методы синтеза наночастиц меди путем восстановления сульфата меди в водной среде в присутствии аскорбиновой кислоты и стабилизатора желатина. Для определения оптимальных условий синтеза изучалось влияние различных факторов на антибактериальную активность наночастиц меди: концентрации применяемых реагентов, значения pH среды, влияние температуры на процесс восстановления ионов меди. Для улучшения антимикробных свойств целлюлозных текстильных изделий, содержащих сульфат меди на основе аскорбиновой кислоты, рекомендуется простой и экологически чистый способ получения концентрированных (около 0.01 моль/л) гидрозолей с наночастицами меди 30–40 нм. Полученные гидрозоли были исследованы на спектрофотометре с длиной волны от 400 до 500 нм ("JENWAY") через 7 дней после прямого синтеза и для определения стабильности золи с течением времени. Наночастицы меди получали из растворов CuSO_4 в присутствии восстановителя аскорбиновой кислоты и стабилизатора желатина. Кислотность раствора сульфата меди изменялась с помощью гидроксида натрия в диапазоне pH 2,8–11,5. Количество образующихся наночастиц увеличивается с увеличением pH 10,3, а дальнейшее повышение pH приводит к гидролизу солей меди, что в некоторой степени уменьшает количество образующихся наночастиц. В исследовании использовался раствор ионов меди с исходной концентрацией соли более 0.1–0.5 моль/л. Исследования, проведенные с помощью электронной сканирующей микроскопии, выявили наличие наноразмерных частиц в структуре материала. В присутствии восстановителя аскорбиновой кислоты и стабилизатора желатина были синтезированы наночастицы меди. Разработана структура на основе сульфата меди и определены оптимальные условия обработки целлюлозных текстильных материалов наночастицами меди. Установлено, что целлюлозные материалы, обработанные наночастицами меди, обладают антимикробными свойствами, улучшают прочностные характеристики.

Ключевые слова: наночастицы металлов, наночастицы меди, аскорбиновая кислота, желатин, сульфат меди, целлюлозный материал, текстильные материалы, антибактериальные свойства

Introduction

Improvement of modern methods of modification of cellulosic materials to create a wide range of new, high-quality materials with flame retardant, hydrophobic and antibacterial polyfunctional properties. The unique properties of copper nanoparticles offer great opportunities for creating new composites for medicine, agriculture, efficient catalysts, sensor systems and much more (Din et al., 2017; Ingle et al., 2014). Due to its advances in the production and utilization of copper nanoparticles, the chosen method allows the production of a certain amount of stable nanoparticles that retain high chemical and biological activity. Copper nanoparticles are used to create biosensors with high biological activity depending on their antibacterial properties. The possibilities of using nanoparticles for diagnostics and treatment of various (including oncological) diseases, as well as in methods of immunochemical research are being actively studied in a new direction of experimental medicine called "nanomedicine".

Metal nanoparticles have been shown to have different antibacterial efficacy depending on the type of nanometals and bacterial cultures used. Copper nanoparticles have high antimicrobial activity both in solutions and when introduced as additives to liquid phase materials or applied to various surfaces (Ramya Devi et al., 2012; Ermini et al., 2021).

The study of the mechanism of antiseptic, biological action of copper nanoparticles is the basis for identifying the causes of nanopathology and its use as an antimicrobial agent in the creation of new drugs, medical and technical materials, varnishes, paints, etc. (Удегова, 2021; Kobayashi, 2016).

The development of modern nanotechnology makes it possible to obtain nanoscale structures, including metal nanoparticles. A comparative study of antimicrobial activity of silver, copper, zinc and aluminium nanoparticles showed that metals inhibit the growth of E. Coli cells and reduce the toxicity of the elements: Cu>Ag>Zn>Al.

Several works emphasise the importance of physicochemical characteristics of nanoparticles in the manifestation of antibiotic effects (Qamar, 2020; Воробьев, 2016). Due to their various functions, relatively low cost and environmental safety in most living organisms common in nature, copper nanoparticles are used as antimicrobial agents, replacing composites of silver and other noble metals in the development of antibacterial agents (El-Saadony, 2020).

Considering the bactericidal effect of nanoparticles, it is necessary to take into account not only the direct effect of nanoparticles on the bacterial membrane, but also the presence of Cu²⁺ ions in the suspension.

In contrast to silver nanoparticles, copper has very low stability due to easy

oxidation and is therefore poorly studied. In order to develop bactericidal preparations based on copper nanoparticles, it is necessary to complement experimental data on their antimicrobial activity. Compared to conventional copper, copper nanoparticle has mechanical properties and chemical activity, high melting point and plasticity (Pérez-Alvarez, 2021; Turakhia, 2020).

Nanoparticles and the materials in which they are modified are also widely used because of their intrinsic properties, practical possibilities. Copper nanoparticles are currently of great interest and can replace precious metals in nanoforms (Román, 2020; Wasim, 2020; Taussarova, 2017; Taycapova, 2018). In modern conditions, research is actively developing to improve the methods of modification of cellulose fibres to create a wide range of new, high quality materials with biocidal properties. Copper nanoparticles are produced from solutions in the presence of reducing agents and stabilisers of different nature (Taycapova, 2020; Burkitbay, 2017).

The aim of this work is to synthesise copper nanoparticles, determine the optimum synthesis conditions and parameters for modifying cellulosic materials using chemical method.

Research materials and methods

Copper sulphate is a colourless anhydrous substance with the formula CuSO_4 , has no very hygroscopic odour, well soluble in water, molar mass-159.60, density-3.64 g/cm^3 , an inorganic compound with disinfectant, antiseptic action.

Ascorbic acid is an organic compound with the formula $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6$, is a white crystalline synthesis of copper nanoparticles reduced with aqueous copper sulfate solution. Ascorbic acid was used as a reducing agent. The composition and amount of the product depend on the concentration of copper sulfate and reaction conditions.

Gelatin has a colourless or yellowish tint, partially hydrolysed protein collagen, a transparent viscous mass, a coupler, a processing product.

The synthesis of nanoparticles (NP) was carried out according to the following method: an equal volume of ascorbic acid ($c = 0.1; 0.3; 0.9 \text{ mol/l}$) was added to 50 ml of aqueous copper (II) sulfate solution ($c = 0.1; 0.25; 0.5 \text{ mol/l}$), and gelatin ($c = 0.05$) was added to the resulting solution for stabilisation. This was followed by the addition of 10 % sodium hydroxide to a certain pH value (7–10). The reduction process was carried out at 40 °C and stirred. On heating, the solution turned blue colour within 30 minutes, indicating the appearance of copper NB. The obtained hydrosols were examined on a 400 to 500 nm spectrophotometer ("JENWAY") after direct synthesis and after 7 days to determine the stability of the ash over time.

Results and Discussion

Copper nanoparticles were synthesised by reducing aqueous copper sulfate solution. Ascorbic acid was used as reducing agent. The structure also the size of the product depends on the reaction conditions of copper sulfate concentration. Different size copper nanoparticles can be obtained due to increase in reaction time. The molar ratio and copper salt, pH, temperature and reaction time were changed.

The acidity of copper sulphate solution was varied using sodium hydroxide in the range of pH of reducing agent 2.8–11.5. The amount of nanoparticles obtained increased with increase in pH by 10.3 and further increase in pH leads to hydrolysis of copper salts, which reduces the amount of nanoparticles formed to some extent.

The synthesis of compo sites with copper nanoparticles was carried out by reducing the copper content in aqueous solution in the presence of ascorbic acid. In order to determine the optimal concentration of initial components, a series of experiments were carried out in several stages (table 1).

Table 1 - Concentration of initial components

Model number	Concentration, mol/l			
	CuSO ₄	C ₆ H ₈ O ₆	Gelatine	H ₂ O
1	0.1	0.3	0.05	100
2	0.25	0.6		100
3	0.5	0.9		100

As a result of the experiments, sediment-resistant ash with copper concentration of about 0.05 mol/l was obtained, the optimal conditions for NP synthesis were determined: pH 9-10, initial concentration of copper (II) ions - 0.1 M, ascorbic acid - 0.1 M. When studying the stability of the obtained colloidal solutions, the intensity of the maximum surface plasma resonance (SPR) is $c = 0.1-0.5$ mol/l. It decreases approximately by a factor of 2, and the sol retains the stability of the precipitation. It is possible that under the influence of air oxygen NP partially dissolves, the formation of a surface layer of copper (I) oxide is also not excluded, which leads to the same change in the spectra.

Optical spectra of hydrosols containing metallic nanoparticles are characterised by the presence of surface SPR maxima, at which the incidence frequency of the electromagnetic wave arises from the coincidence of natural vibrations of electrons in the nanoparticles. The type, intensity as well as the position of the SPRs are shaped by the size, shape as well as the oxidation degree of the NPs. For copper spherical NBs (size 2–10 nm), the SPR state corresponds to 460–470 nm. With increasing the thickness of the oxide shell on the surface of copper NP, a relative increase in absorption in the region with a wavelength of 460–470 nm (I_{470}) is observed at $B = I_{\text{SPR}} - I_{470}$ the difference in the values of the maximum intensity of optical absorption in the "red" sphere of the spectrum characterises the yield of NP, as well as the degree of their oxidation. This parameter is chosen for optimisation of copper extraction process in this work (fig.1,2).

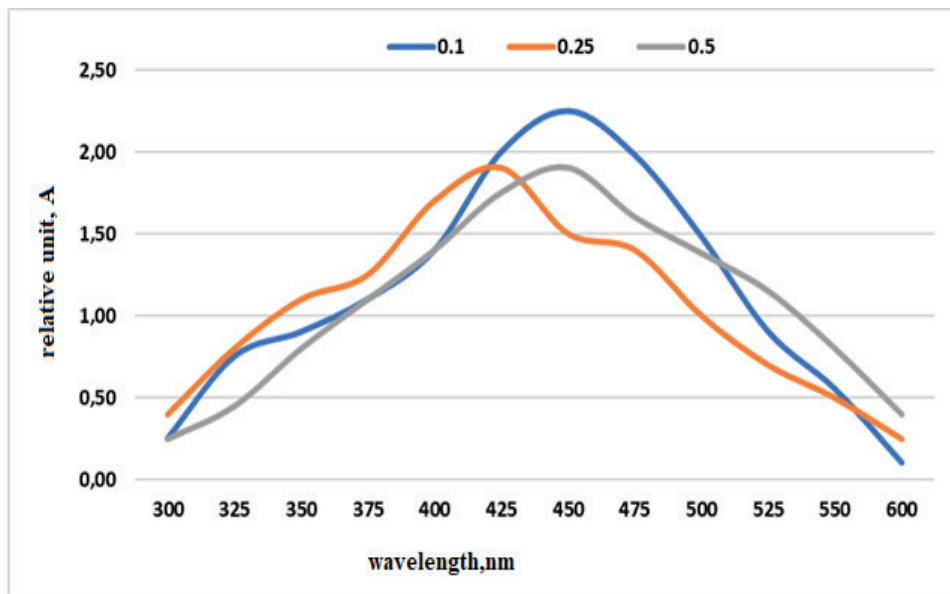


Figure 1. Effect of initial copper sulphate concentration on the optical absorption spectrum of formed copper ash
 1 - $C(CuSO_4) = 0.1 \text{ mol/l}$; 2 - $C(CuSO_4) = 0.25 \text{ mol/l}$; 3 - $C(CuSO_4) = 0.5 \text{ mol/l}$

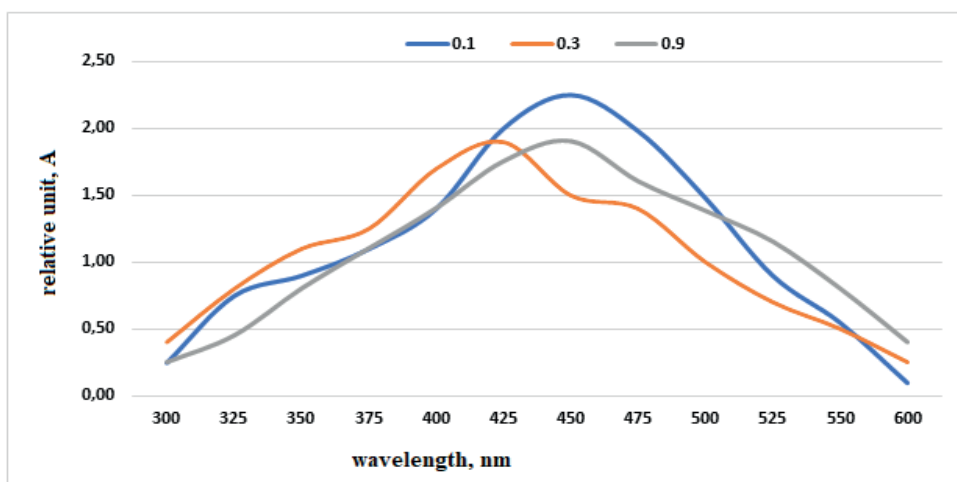
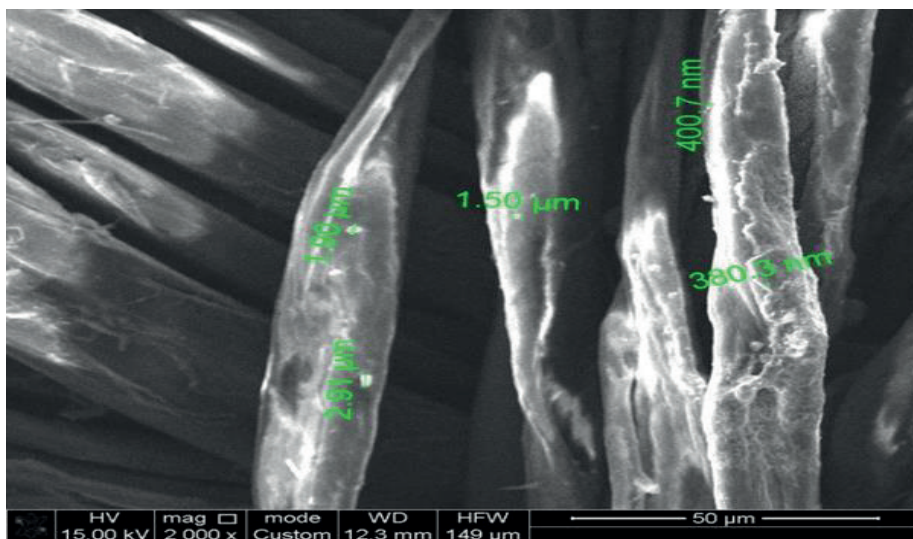


Figure 2. Influence of ascorbic acid concentration on the optical absorption spectrum of the formed copper ash
 1 - $C(C_6H_8O_6) = 0.1 \text{ mol/l}$; 2 - $C(C_6H_8O_6) = 0.3 \text{ mol/l}$; 3 - $C(C_6H_8O_6) = 0.9 \text{ mol/l}$

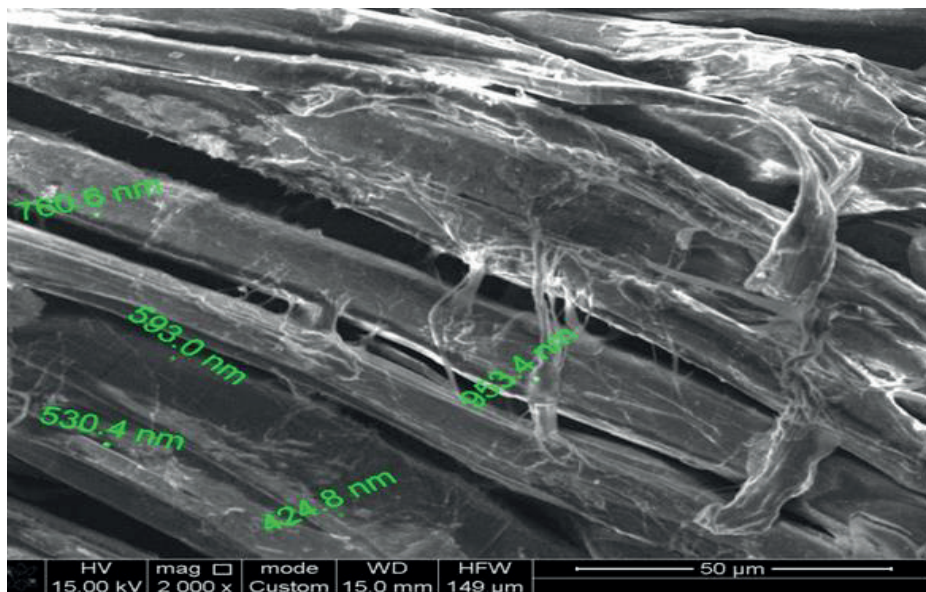
As can be seen from Figure 1, the maximum absorption occurs in the region of 440-450 nm depending on the copper sulphate content. This indicates an increase in the size of copper particles with increasing concentration of stabiliser, which may be due to negligible incorporation of ascorbic acid copper ions into the metal.

Thus, stable copper nanoparticles were synthesised by copper sulphate by reducing the presence of ascorbic acid and the optimum conditions for the synthesis of NB were established.

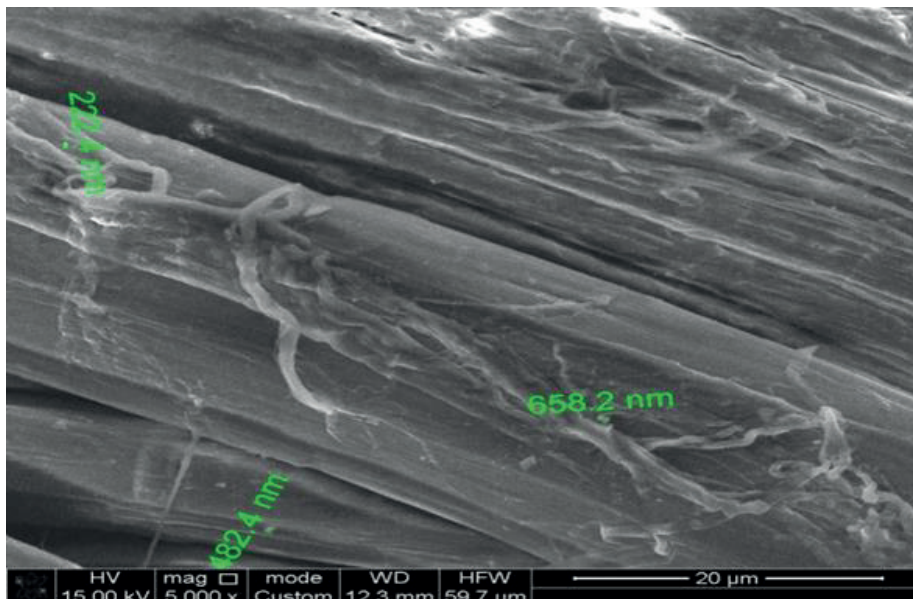
Electron scanning microscopy studies confirmed the presence of nanoscale particles in the structure of the material (Fig. 3).



a)



b)



c)

Figure 3. Size of copper nanoparticles obtained by electron scanning microscopy (ESM) CuSO_4 - 0.5 g/mol (a), CuSO_4 - 0.25 g/mol (b), CuSO_4 - 0.1 g/mol (c)

Cellulose samples of 100×100 mm (4 pieces) were dried at room temperature and impregnated with freshly prepared solution of the selected concentration for 10 minutes.

To investigate the aggregate stability of nanoparticles for size measurement, we carried out studies using JSM-6510LA electron scanning microscopy. This method allows us to obtain the distribution of particles according to size and shape, and gives insight into the spatial arrangement of the nanoparticles. Examination of the submitted samples showed that nanoparticles of copper compounds with lengths of 220–950 nm are formed on the surface of the fibres.

By reducing ascorbic acid, copper nanoparticles were obtained. The treated tissues have pronounced bactericidal properties. The optimum conditions for the formation of copper nanoparticles and their application in fabrics were determined. The optimum requirements for the treatment of cellulosic materials with copper nanoparticles ($C(\text{CuSO}_4) = 0.5$ mol/l; $c(\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6) = 0.1$ mol/l) were developed. For the first time, a structure based on ascorbic acid as well as copper sulphate was developed for antimicrobial finishing of linen. It was found that the fabric treated with the selected composition imparts antimicrobial properties, improves the strength characteristics.

Conclusion

The study of metal nanoparticles is important in the establishment of modern nanotechnology. One way to address this problem is to produce materials containing

copper nanoparticles that are highly active against all biological targets, from viral particles to the human body. Ascorbic acid was used as a reducing agent. The structure and amount of the product depend on the reaction conditions and concentration of copper sulphate. To measure the size of nanoparticles, JSM-6510LA electron scanning microscopy studies were carried out to investigate the aggregate stability of the nanoparticles. The optimal treatment requirements for cellulosic materials with copper nanoparticles ($C(\text{CuSO}_4) = 0.5 \text{ mol/l}$; $c(\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_6) = 0.1 \text{ mol/l}$) were developed.

REFERENCES

- Burkitbay A., Taussarova B.R., Kutzhanova A.Z., Rakhimova S.M. (2014). Development of a Polymeric Composition for Antimicrobial Finish of Cotton Fabrics. *Fibers & Textiles in Eastern Europe*. — 22, — 2(104). — 96–101.
- Din M.I., Arshad F., Hussain Z., Mukhtar M. (2017). Green Adeptness in the Synthesis and Stabilization of Copper Nanoparticles: Catalytic, Antibacterial, Cytotoxicity, and Antioxidant Activities. *Nanoscale Research Letters*. —12, — 638. DOI: 10.1186/s11671-017-2399-8.
- El-Saadony M.T., El-Hack M.E., Taha A.E. et al. (2020). Article Ecofriendly Synthesis and Insecticidal Application of Copper Nanoparticles against the Storage Pest *Tribolium castaneum*. *Nanomaterials*. —10, — 587. DOI: 10.3390/nano10030587.
- Ermini M.L., Voliani V. (2021). Antimicrobial Nano-Agents: The Copper Age. *ACS Nano*. —15, — 6008–6029. DOI:10.1021/acsnano.0c10756.
- Ingle A.P., Duran N., Rai M. (2014). Bioactivity, mechanism of action, and cytotoxicity of copper-based nanoparticles: A review. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* — 98, —1001–1009. DOI: 10.1007/s00253-013-5422-8.
- Kobayashi Y., Yasuda Y., Morita T. (2016). Recent advances in the synthesis of copper-based nanoparticles for metalemetal bonding processes. //Journal of Science: Advanced Materials and Devices. — 1, — 413–430.
- Pérez-Alvarez M., Cadenas-Pliego G., Pérez-Camacho O. et al. (2021). Article Green Synthesis of Copper Nanoparticles Using Cotton. *Polymers*. —13, —1906. DOI: 10.3390/polym13121906.
- Qamar H., Rehman S., Chauhan D.K., Tiwari A.K., Upmanyu V. (2020). Green Synthesis, Characterization and Antimicrobial Activity of Copper Oxide Nanomaterial Derived from *Momordica charantia*. *International Journal of Nanomedicine* —15, — 2541–2553. DOI:10.2147/IJN.S240232.
- Ramyadevi J., Jeyasubramanian K., Marikani A., Rajakumar G., Rahuman A. (2012). Synthesis and antimicrobial activity of copper nanoparticles. *Materials Letters*. —71, —114–116. DOI:10.1016/j.matlet.2011.12.055.
- Román L.E., Gomez E.D., Solís J.L., Gómez M.M. (2020). Antibacterial Cotton Fabric Functionalized with Copper Oxide Nanoparticles. *Molecules*, — 25, —5802; DOI: 10.3390/molecules25.
- Taussarova B.R., Shaikhova Zh.E. (2017). Antibacterial Characteristics of Cellulose Materials Modified with Copper Nanoparticles. *Fibre Chemistry*. — 49(1). —36–39. DOI: 10.1007/s10692-017-9837-3.
- Turakhia B., Divakara M.B., Santosh M.S. et al. (2020). Green synthesis of copper oxide nanoparticles: a promising approach in the development of antibacterial textiles. *J Coat Technol Res* —17, —531–540. <https://doi.org/10.1007/s11998-019-00303-5>
- Wasim M., Khan M.R., Mushtaq M., Naeem A., Han M., Wei Q. (2020). Article Surface Modification of Bacterial Cellulose by Copper and Zinc Oxide Sputter Coating for UV-Resistance/Antistatic/Antibacterial Characteristics. *Coatings*. —10, — 364–375. <https://doi.org/10.3390/coatings10040364>.
- Vorobyov S.A., Saikova S.V., Karimov E.E. (2016). Synthesis of concentrated hydrosols of copper nanoparticles stabilized with gelatin. *Journal of General Chemistry*. — 86, —11, —1901–1907.

Tausarova B.R., Rakhimova S.M. (2018). Cellulose materials with antibacterial properties modified with copper nanoparticles. *Chemistry of vegetable raw materials*. —1, —163–169. DOI:10.14258/jcprm.2018012190.

Tausarova B.R., Suleimenova M.Sh., Alipbaev A.N. (2020). Synthesis of copper nanoparticles and their application for modification of cellulose textile materials. *Science news of Kazakhstan*. — 2, —144.

Uzhegova E.S., Gildeeva K.A., Rukosueva T.V., Sed B. (2021). Antibacterial effect of metal nanoparticles on antibiotic-resistant bacterial strains. *Infection and immunity*. — 11, — 4, — 771–776.

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

ISSN 2224-5227

Volume 1. Number 349 (2024), 271–282

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.272>

ӘОЖ 504.054;66.074.5

© **B.Kh. Khussain, A.R. Brodskiy*, A.S. Sass, I.I. Torlopov,
K.R. Rakhmetova, 2024**

JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry",

Almaty, Kazakhstan.

E-mail: albrod@list.ru

PRELIMINARY TREATMENT OF THERMAL DEVICES' EMISSIONS IN DECARBONIZATION TECHNOLOGY

Khussain Bolatbek Khussainovich — Candidate of Technical Sciences, Deputy General Director, JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry", Almaty, Kazakhstan

E-mail: b.khusain@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9588-1012>;

Brodskiy Aleksandr Rafaelevich — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Head of the Laboratory of Physical Methods, JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry", Almaty, Kazakhstan

E-mail: albrod@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6216-4738>;

Sass Alexander Sergeyeovich — Candidate of Chemical Sciences, Leading Researcher, Sector of Modeling of Technological Processes, JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry", Almaty, Kazakhstan

E-mail: aleksandr-sass@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4049-6314>;

Torlopov Ivan Igorevich — Junior Researcher, Sector of Design of Technological Processes, JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry", Almaty, Kazakhstan

E-mail: myndfrea@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9660-6397>;

Rakhmetova Kenzhegul Saginbayevna — Researcher, Sector of Modeling of Technological Processes, JSC "D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry", Almaty, Kazakhstan

E-mail: rahmetova_75@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2098-3169>.

Abstract. The condition of the environment and, in particular, the atmosphere is a transboundary, international problem, with CO₂ being one of the most significant components of greenhouse gases. Decarbonization issues are on the agenda of all industrialized countries, including Kazakhstan. Decarbonization includes several aspects, the most important being capture and storage (utilization) of carbon dioxide. The key source of carbon dioxide emissions are thermal devices using fossil fuels. CO₂ capture is complicated by the presence of harmful components in the flue gases. In particular, when burning coal, nitrogen- and sulfur-containing oxides, carbon monoxide, volatile organic compounds, ash, and dust particles are released together with CO₂. Thus, preliminary purification is necessary, since sorbents and membranes used for CO₂ capture are not capable of withstanding prolonged exposure from solid particles and toxic impurities. This work is devoted

to the problem of decarbonization and, in particular, the preliminary treatment of flue gases to obtain pure carbon dioxide. The work discusses the principle of construction of systems for preliminary treatment of harmful impurities from flue gases of thermal devices of different industrial enterprises as a multimodular integrated system. Using the advantages of this approach creates the prerequisites for a relatively simple design of multimodular integrated treatment systems based on the free arrangement of individual autonomous modules capable to adapt to specific operating conditions.

Keywords: decarbonization, CO₂ capture and storage, exhaust gases, gas treatment, multimodular systems

Conflict of interest: *The authors declare that there is no conflict of interest.*

© **Б.Х. Хусаин, А.Р. Бродский*, А.С. Сасс, И.И. Торлопов,
К.Р. Рахметова, 2024**

"Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты" АҚ, Алматы, Қазақстан.

E-mail: albrod@list.ru

КӨМІРТЕКСІЗДЕНДІРУ ТЕХНОЛОГИЯСЫНДАҒЫ ЖЫЛУ ҚҰРЫЛҒЫЛАРЫНЫҢ ГАЗДАРЫН АЛДЫН АЛА ӨНДЕУ

Хусаин Болатбек Хусаинұлы — техника ғылымдарының кандидаты, АҚ "Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты" Бас директорының орынбасары, Алматы, Қазақстан

E-mail: b.khusain@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9588-1012>;

Бродский Александр Рафаэлевич — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, "Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты" АҚ физикалық әдістер зертханасының меңгерушісі, Алматы, Қазақстан

E-mail: albrod@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6216-4738>;

Сасс Александр Сергеевич — химия ғылымдарының кандидаты, "Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты" АҚ технологиялық процестерді модельдеу секторының жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

E-mail: aleksandr-sass@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4049-6314>;

Торлопов Иван Игоревич — "Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты" АҚ технологиялық процестерді жобалау секторының кіші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

E-mail: myndfrea@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9660-6397>;

Рахметова Кенжегүл Сағынбайқызы — "Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты" АҚ технологиялық процестерді модельдеу секторының ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

E-mail: rahmetova_75@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2098-3169>.

Аннотация. Қоршаған ортаның, атап айтқанда, ауа бассейнінің экологиялық жағдайы-трансшекаралық, халықаралық мәселе болып табылады. Парниктік газдардың маңызды компоненттерінің бірі-көмірқышқыл газы. Декарбонизация мәселелері барлық индустриалды дамыған елдердің, соның ішінде Қазақстанның күн тәртібінде тұр. Декарбонизация бірнеше аспектілерді қам-

тиды, олардың ішіндегі ең маңыздылары көмірқышқыл газын алу (шығару) және сақтау (жою) болып табылады. Көмірқышқыл газының негізгі көзі-қазба отындарын пайдаланатын жылу құрылғылары. Көмірқышқыл газын алу (шығару) процесі пайдаланылған газдарда зиянды, кедергі келтіретін компоненттердің көп болуымен қиындайды. Атап айтқанда, көмірқышқыл газынан басқа, көмірді жағу кезінде мыналар бөлінеді: азот және күкірт бар оксидтер, көміртегі (II) оксиді, ұшпа органикалық қосылыстар, күл, шаң бөлшектері. Бұдан шығатыны, алдын ала тазалау қажет, өйткені көмірқышқыл газын алу үшін бірде-бір сорбент немесе мембрана шаң бөлшектері мен улы қоспалардан ұзақ "қысымға" төтеп бере алмайды. Бұл жұмыс декарбонизация мәселесіне және, атап айтқанда, таза көмірқышқыл газын алу үшін түтін газдарын алдын ала тазартуға арналған. Жұмыста өндірістік кәсіпорындардың жылу құрылғыларының, су жылыту және бу қазандықтарының, жылыту пештерінің және т.б. түтін газдарының зиянды қоспаларынан алдын-ала тазарту жүйесін құру принципі мультимодульді кешенді жүйе ретінде қарастырылады. Бұл тәсілдің артықшылықтарын пайдалану нақты жұмыс жағдайларына бейімделу мүмкіндігі бар жеке дербес модульдердің еркін орналасуына негізделген мультимодульдік кешенді тазарту жүйелерін салыстырмалы түрде қарапайым жобалаудың алғышарттарын жасайды.

Түйін сөздер: декарбонизация, CO₂ жинау және сақтау, пайдаланылған газдар, газ тазарту, мультимодульді жүйелер

Мүдделер қақтығысы: авторлар осы мақалада мүдделер қақтығысы жоқ деп мәлімдемейді.

© **Б.Х. Хусайн, А.Р. Бродский***, А.С. Сасс, И.И. Торлопов,
К.Р. Рахметова, 2024

АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского»,
Алматы, Казахстан.
E-mail: albrod@list.ru

ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ОЧИСТКА ГАЗОВ ТЕПЛОВЫХ УСТРОЙСТВ В ТЕХНОЛОГИИ ДЕКАРБОНИЗАЦИИ

Хусайн Болатбек Хусаннович — кандидат технических наук, заместитель генерального директора АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан

E-mail: b.khusain@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9588-1012>;

Бродский Александр Рафаэлевич — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, заведующий лабораторией АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан

E-mail: albrod@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6216-4738>;

Сасс Александр Сергеевич — кандидат химических наук, ведущий научный сотрудник сектора моделирования технологических процессов, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан

E-mail: aleksandr-sass@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4049-6314>;

Торлопов Иван Игоревич — младший научный сотрудник сектора проектирования технологических процессов, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан

E-mail: myndfrea@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9660-6397>;

Рахметова Кенжегуль Сагинбаевна — научный сотрудник сектора моделирования технологических процессов, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан

E-mail: rahmetova_75@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2098-3169>.

Аннотация. Экологическое состояние окружающей среды и, в частности, воздушного бассейна — трансграничная, международная проблема. Одним из самых весомых компонентов парниковых газов является диоксид углерода. Вопросы декарбонизации стоят в повестке всех промышленно развитых стран, в том числе и Казахстана. Декарбонизация включает в себя несколько аспектов, наиболее важными из которых являются улавливание (выделение) и хранение (утилизация) диоксида углерода. Основным источником диоксида углерода являются тепловые устройства, использующие ископаемое топливо. Процесс улавливания (выделения) диоксида углерода осложняется присутствием в выхлопных газах большого количества вредных, мешающих компонентов. В частности, кроме диоксида углерода, при сжигании угля выделяются: азот- и серосодержащие оксиды, оксид углерода (II), летучие органические соединения, зола, пылевые частицы. Отсюда следует, что необходима предварительная очистка, поскольку ни один сорбент или мембрана для извлечения диоксида углерода не выдержит длительного «давления» со стороны пылевых частиц и отравляющих примесей. Данная работа посвящена проблеме декарбонизации и, в частности, предварительной очистке дымовых газов для получения чистого диоксида углерода. Авторами рассматривается принцип построения системы предварительной очистки от вредных примесей отходящих дымовых газов тепловых устройств промышленных предприятий, водогрейных и паровых котлов, печей подогрева и т.д., как мультимодульной комплексной системы. Использование преимуществ такого подхода создаёт предпосылки для сравнительно простого конструирования мультимодульных комплексных системы очистки на основе свободной компоновки отдельных автономных модулей с возможностью адаптации к конкретным условиям эксплуатации.

Ключевые слова: декарбонизация, улавливание и хранение CO₂, выхлопные газы, газоочистка, мультимодульные системы

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Работа выполнена при финансовой поддержке по программе целевого финансирования МОН РК ИРН BR21882241 «Исследование и разработка комплексной системы улавливания и хранения CO₂ на промышленных объектах Республики Казахстан для сокращения выбросов парниковых газов».

Введение

Экологическое состояние окружающей среды и в частности, воздушного бассейна является трансграничной, международной проблемой. Один из основных аспектов этой проблемы — снижение углеродного следа промышленных производств и автотранспорта, поскольку диоксид углерода является едва ли не самым весомым компонентом парниковых газов (Гюр, 2020; Рехман, 2023). По оценкам отдела технологий CCUS Международного энергетического агентства, ежегодно в атмосферу Земли попадает свыше 59 млрд т CO_2 -эквивалента (Бхавсар, 2023). Несмотря на то, что в мировом научном сообществе в последние годы большое внимание уделяется вопросам декарбонизации, в настоящее время в мире насчитывается лишь 28 крупных промышленных объектов в 10 странах, где улавливается, захоранивается и используется углекислый газ. Из 59 млрд т они суммарно утилизируют 40 млн т CO_2 в год (Деспорт, 2022; Ахметов, 2020). Повышение содержания в атмосфере парниковых газов в итоге может привести к глобальному повышению средней температуры и, как следствие, таянию ледников, льдов Арктики и Антарктики, повышению уровня мирового океана, что приведёт к затоплению обширных населённых территорий и, в конечном счёте, негативным образом скажется на состоянии среды обитания (Гюр, 2020).

Казахстан, присоединившись к Парижскому соглашению, взял на себя обязательства по снижению эмиссии парниковых газов (Ванг, 2019). Однако, в Республике энергогенерирование на ~75% приходится на ископаемое топливо и, в частности, на уголь. Использование угля дает самое большое количество вредных выбросов. При его сжигании выделяются: азот- и серосодержащие (NO_x и SO_x) оксиды, летучие органические соединения, зола, пыль и большое количество углекислого газа (CO_2) на единицу произведенной энергии (Параскив, 2018; Досмухамедов, 2022).

Доля выбросов вредных веществ предприятий, использующих такое топливо, более 85 %. В то же время, с 2026 года ЕС планирует ввести налог на продукцию тех стран и производителей, которые оставляют высокий углеродный след, а прогнозируемая цена квоты CO_2 к 2030 году составит \$129 за тонну (Адам, 2022).

В последние годы в Казахстане реализуется Программа газификации и угольная генерация должна постепенно замещаться газовой, но, с одной стороны, в настоящее время радикальным образом эту замену произвести невозможно из-за логистических проблем и больших финансовых затрат (Мухтаров, 2020; Вада, 2022), а с другой, использование газа в качестве топлива не исключает выделения в атмосферу большого количества оксидов углерода.

Решение проблемы возможно путём декарбонизации на основе мультимодульных систем, включающих в себя модули предварительной очистки дымовых газов, а также модули для улавливания, сбора и утилизации

CO₂ из выбросов тепловых устройств, использующих ископаемое топливо. Модули предварительной очистки необходимы, поскольку, как отмечалось выше, дымовые газы, помимо диоксида углерода, содержат большое количество других вредных компонентов, в том числе и пылевых частиц различной дисперсности.

После прохождения предварительной очистки, выделенный чистый диоксид углерода можно будет использовать в тепличных хозяйствах, производстве соды, в пищевой промышленности, производстве метанола, удобрений и т.д.

Данная работа открывает цикл статей, посвящённых проблеме декарбонизации и, в частности, предварительной очистке дымовых газов для получения чистого диоксида углерода. В работе рассматривается принцип построения мультимодульной комплексной системы очистки от вредных примесей отходящих дымовых газов тепловых устройств промышленных предприятий, водогрейных и паровых котлов, печей подогрева и т.д. Предварительная очистка необходима, поскольку ни один сорбент или мембрана для извлечения CO₂ не выдержит длительного «давления» со стороны пылевых частиц и отравляющих примесей.

Материалы и основные методы

Состав дымовых газов определялся с помощью газовых анализаторов семейства ОРТИМА 7 (MRU, ФРГ), запылённость (г/м³ пыли и сажи) определялась оптическим дымомером Мета-01МП 0.1 (Мета, Россия). Замеры состава дымовых газов проводились на выходе из дымососов, где, как правило, давление несколько превышало атмосферное и не позволяло в процессе замеров осуществляться подосу воздуха. Подсос воздуха может вызвать разбавление воздухом пробы газа, что может привести к заниженным результатам замера.

Для оценки размера пылевых частиц использовался метод СЭМ на низковакуумном сканирующем электронном растровом микроскопе JSM–6610LV (JEOL, Япония) с приставкой для микроанализа и локальным рентгенофлуоресцентным анализом элементного состава поверхности. Перед исследованием пылевых частиц предварительно на их поверхность в вакууме напылялся углерод, увеличивающий электропроводность образца, что позволяло более четко наблюдать образец в микроскопе.

Результаты

Дымовые газы условно можно разделить исходя из нескольких критериев, таких как запылённость, температура, влажность, наличие продуктов неполного сгорания топлива, содержания оксидов серы и азота.

Так, запылённость на входе тепловых устройств ТЭЦ, использующих размоленное твёрдое ископаемое топливо, варьируется в пределах от 5–6 г/м³. На выходе (по нормативам ТР №1232 от 14.12.2007 г.), она не должна превышать 0,2–0,4 г/м³. Размеры дымовых частиц показаны на рисунке 1.

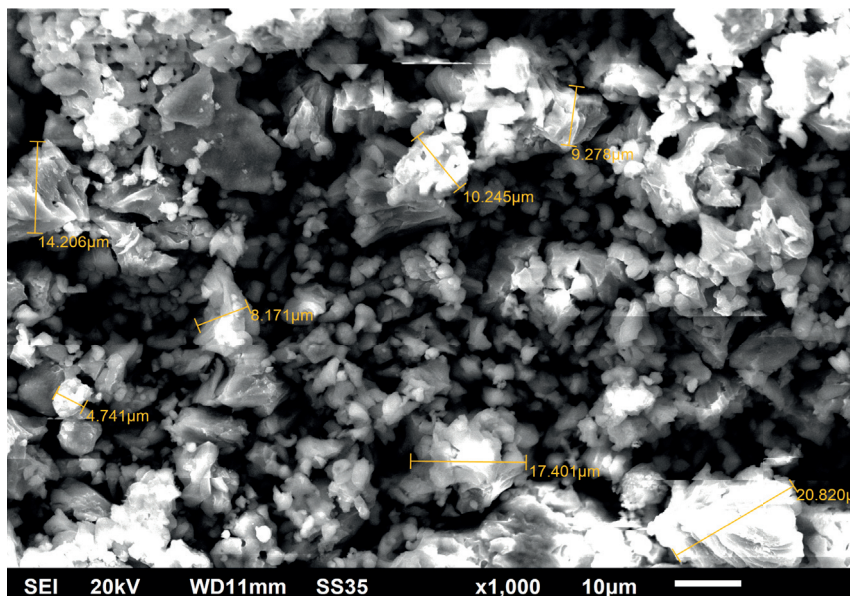


Рис. 1. Микрофотография шлака ТЭЦ при увеличении в 1000 раз
(Fig. 1. Microphotograph of thermal power plant slag at $\times 1000$ magnification)

По данным сканирующей электронной микроскопии дымовые частицы имеют размеры от нескольких до двадцати микрометров. Элементный анализ образцов показал, что частицы состоят из оксидов алюминия и кремния с примесью оксидов железа и кальция.

Температура отходящих газов на выходе из котлов находится в пределах 160–450 °С и влияет на режим работы каталитических систем нейтрализации оксидов углерода, серы, азота и продуктов неполного окисления, содержание которых может меняться от ppm до нескольких объёмных процентов.

Установлено, что в процессе сжигания жидких и особенно газообразных углеводородов, в отличие от угля, образуется большое количество паров воды (на одну молекулу метана выделяется две молекулы воды по реакции $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$), которые негативно влияют на сорбенты и мембраны по улавливанию CO_2 . Наличие на выходе из тепловых устройств (по нормативам ТР №1232 от 14.12.2007 г.) продуктов неполного сгорания топлива (до полутора процентов для двигателей внутреннего сгорания), оксидов серы (в пределах 0,78–2,00 г/м³) и азота (в пределах 0,125–0,650 г/м³) также нарушает работу мембран и сорбентов, вплоть до их полного разрушения.

Обсуждение

С учётом изложенного можно заключить, что для проведения эффективного процесса декарбонизации отходящих дымовых газов тепловых устройств нет альтернативы участию в этом процессе системы предварительной очистки газов от пылевых частиц и вредных примесей.

Предлагаемая система предварительной очистки представляет собой мультимодульную комплексную систему, которая включает в себя следующие группы, состоящие из различных модулей (блоков) согласно нижеприведённой схеме:

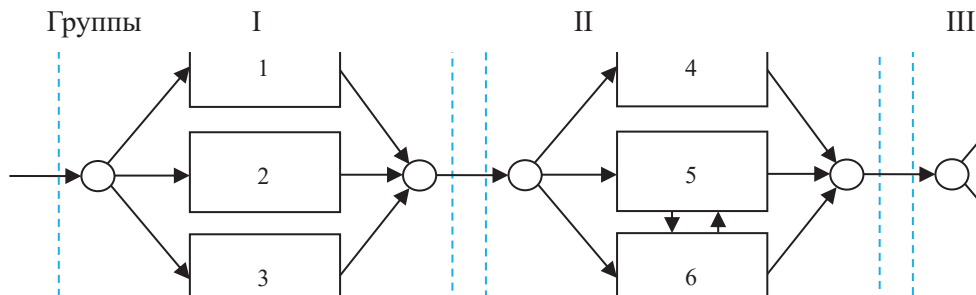


Рис. 2. Схема групп и модулей мультимодульной комплексной системы очистки
(Fig. 2. Diagram of the group and modules of the multimodal integrated cleaning system)

Описание и назначение групп, и модулей мультимодульной комплексной системы очистки.

Модуль 1. Электрофильтр — предназначен для удаления твердых частиц в дымовых газах и может работать во влажной среде при температуре до 400–450 °С.

Модуль 2. Рукавный фильтр — предназначен для удаления твердых частиц в дымовых газах и может работать при температуре до 100–150 °С в зависимости от температуры усадки и плавления ткани.

Модуль 3. Скруббер мокрого типа с водой — предназначен для удаления твердых частиц в дымовых газах и может работать при температуре до 120–160 °С на входе и очищенный газ на выходе достигает 50–60 °С.

Группа I (модули 1, 2, 3) предназначена для улавливания пылевых частиц. Конкретный модуль выбирается в зависимости от температуры на входе и выходе, т.к. для последующих каталитических блоков необходима высокая температура, а для озонатора — температура близкая к комнатной.

Модуль 4. Озонатор — предназначен для окисления оксида углерода и продуктов не полного сгорания углеводородов кислородом озона в дымовом газе до диоксида углерода, оксида азота, перевода SO_2 в SO_3 в интервале температур 20–50 °С с последующим улавливанием продуктов реакции скруббером мокрого типа с щелочным реагентом.

Модуль 5. Для селективного каталитического восстановления (СКВ) с устройством подогрева — предназначен для восстановления оксидов азота до нейтрального азота аммиаком или мочевиной (выделяет аммиак при разложении) на катализаторе в интервале температур 300–400 °С при концентрации кислорода в дымовом газе до 10 %.

Модуль 6. Для каталитического окисления CO и CH_x с устройством подогрева — предназначен для окисления оксида углерода и продуктов не

полного сгорания углеводородов кислородом в дымовом газе до диоксида углерода на катализаторе в интервале температур 300–500 °С при концентрации кислорода в дымовом газе более 1–3 %.

Группа II (модули 4, 5, 6) предназначена для преобразования вредных компонентов дымовых газов в нейтральные или кислые газы. Конкретный модуль и их последовательность (модули 5, 6) выбираются в зависимости от условий эксплуатации.

Модуль 7. Скруббер мокрого типа с реагентом — предназначен для улавливания кислых газов в дымовых газах и может работать при температуре до 120–160 °С на входе (очищенный газ на выходе имеет температуру 50–60 °С).

Модуль 8. Скруббер сухого типа с реагентом — предназначен для улавливания кислых газов в дымовых газах и может работать в температурном интервале 100–400 °С.

Группа III (модули 7, 8) предназначена для поглощения кислых газов. Конкретный модуль выбирается в зависимости от температурного режима эксплуатации.

Система очистки комплектуется в зависимости от условий эксплуатации и выбирается из трех групп с учетом их последовательного соединения. Примеры различной комплектации:

– модули, выбираемые для комплектования системы очистки из группы I, в зависимости от условий эксплуатации (температурный режим) и требований к степени очистки от частиц пыли, включают в себя электрофильтр (модуль 1), рукавный фильтр (модуль 2) и скруббер мокрого типа (модуль 3);

– модули, выбираемые для комплектования системы очистки из группы II, в зависимости от условий эксплуатации (температурный режим) и требований к степени очистки, включают в себя озонатор (модуль 4), модуль селективного каталитического восстановления NO_x (модуль 5) и модуль каталитического окисления CO и CH_x (модуль 6);

– модули, выбираемые для комплектования системы очистки из группы III, в зависимости от условий эксплуатации (температурный режим) и требований к степени очистки, включают в себя скруббер мокрого типа с реагентом для улавливания кислых газов (модуль 7) и скруббер сухого типа с реагентом (модуль 8).

Рассматриваемая в настоящей работе мультимодульная комплексная система очистки имеет заметные преимущества перед применяемыми в настоящее время системами (Глебов, 1993; Веденин, 2013; Туркин, 2014; Макаров, 2014). К недостаткам этих устройств относятся:

– отсутствие возможности изменения расположения и параметров функционирования компонентов системы очистки, обусловленное безмодульной конструкцией системы;

– невозможность масштабирования системы в данной конфигурации на промышленные объекты различного размера;

– громоздкость и значительная энергоёмкость озono-сорбционного метода очистки, отсутствие возможности функционального варьирования конфигурации модулей, составляющих систему, и отсутствие альтернативы озоновому методу очистки в рамках системы;

– модульная система очистки подразумевает варьирование конфигурации модулей только в отношении их геометрии (горизонтальная, вертикальная, комбинированные конфигурации) и невозможность автономного функционирования модулей.

В то же время отличительными особенностями предлагаемой мультимодульной комплексной системы очистки являются:

– возможность адаптации каждого модуля к конкретным условиям путём варьирования реагентов, каталитически активных фаз, фильтрующих устройств и т.д.;

– возможность работы каждого модуля в автономном режиме;

– свободная конфигурация (количество, геометрия и очерёдность расположения) модулей любого назначения (различных функциональных возможностей) в системе очистки в зависимости от конкретных потребностей.

Заключение

Резюмируя, можно сделать вывод о существенных преимуществах предлагаемой мультимодульной комплексной системы предварительной очистки выхлопных газов тепловых устройств, которые заключаются в следующем:

– возможность изменения конфигурации модулей не только по геометрии (вертикальное, горизонтальное, линейные размеры), но и в широком диапазоне функциональных возможностей путём варьирования реагентов, каталитически активных фаз, фильтрующих устройств и т.д.;

– возможность автономного функционирования модулей;

– простая адаптация к конкретным потребностям путём подключения (вхождения в систему очистки) к системе очистки любого количества модулей с различными функциональными возможностями и в любой последовательности.

Использование этих преимуществ создаёт предпосылки для сравнительно простого конструирования мультимодульной комплексной системы очистки на основе свободной компоновки отдельных автономных модулей с возможностью адаптации к конкретным условиям эксплуатации.

ЛИТЕРАТУРА

А. Бхавсар, Д. Хингар, С. Оствал, И. Таккар, С. Джадеджа, М. Шах (2023). “Текущие масштабы и состояние хранения и использования улавливания углерода: комплексный обзор”, *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*. — Т. 8. — 100368, 2023, — doi: 10.1016/j.cscee.2023.100368.

А.Д. Веденин, А.П. Пустовгар (2013). “Устройство для очистки воздуха и отходящих газов от токсичных компонентов”, Патент России № 124183. — 13 с., 2013.

А.А. Макаров (2014). “Модульная установка очистки воздуха от газовых выбросов промышленных предприятий”, Патент России № 2529218. — 11 с., 2014.

A. Рехман, М.М. Алам, И. Озтурк, Р. Альварато, М. Мурсхед, С. Исик, Х. Ма (2023). “Глобализация и использование возобновляемых источников энергии: как они способствуют увеличению выбросов CO₂? Глобальная перспектива”, *Environmental Science and Pollution Research*. — Т. 30. — № 4. — С. 9699-9712, 2023, — doi: 10.1016/j.resconrec.2021.106150.

A.B. Туркин, В.А. Туркин, В.С. Ежов (2014). “Комплексное устройство для очистки выхлопных газов судового двигателя”, Патент России № 2536749. — 8 с., 2014.

В.П. Глебов, В.Ф. Москвичев, С.Н. Пушкин, И.И. Шабанов, Ю.М. Афанасьев, А.М. Кузьмин (1993). “Установка очистки дымовых газов от окислов серы и азота”, Патент России № 1813190. — 3 с., 1993.

В.Р. Ахметов, О.В. Смирнов О.В. (2020). “Улавливание и хранение диоксида углерода. Проблемы и перспективы”, *Башкирский химический журнал*. — Т. 27. — № 3. — С. 103–115, 2020, — doi: 10.17122/bcj-2020-3-103-115.

И. Вада, А. Файзуллаев, А.Х. Хадемоломоом, А. Альзуби (2022). “Энергопотребление, реальный рост производства, ПИИ, энергоемкость и выбросы CO₂: пример Казахстана”, *Journal of Public Affairs*. — Т. 22. — № 1. — e2300, 2022, — doi: 10.1002/ра.2300.

Л. Деспорт, С. Селоссе (2022). “Обзор улавливания и использования CO₂ в энергетических моделях”. — Т. 180. — 106150, 2022, — doi: 10.1016/j.resconrec.2021.106150.

Н.К. Досмухамедов, Е.Е. Жолдасбай, М.Г. Егизсков (2022). “Новые возможности развития угольной отрасли: технология очистки отходящих газов от SO₂, NO_x, CO₂”, *Engineering Journal of Satbayev University*. — Т. 144. — № 3. — С. 5–10, 2022, — doi: 10.51301/ejsu.2022.i3.01.

С. Адам, И. Делестре, П. Левелл, Х. Миллер (2022). “Налоговая политика по сокращению выбросов углекислого газа”. *Fiscal Studies*. — Т. 43. — С. 235–263, 2022, — doi: 10.1111/1475-5890.12308.

С. Мухтаров, С. Хумбатова, И. Сейфуллаев, И. Калбиев (2020). “Влияние финансового развития на потребление энергии в случае Казахстана”, *Journal of Applied Economics*. — Т. 23. — С. 75–88, 2020, — doi: 10.1080/15140326.2019.1709690.

С. Параскив, Л.С. Параскив (2020). “Тенденции выбросов углекислого газа (CO₂) от сжигания ископаемого топлива (уголь, газ и нефть) в странах-членах ЕС с 1960 по 2018 год”, *Energy Reports*. — Т. 6. — С. 237–242, 2020, — doi: 10.1016/j.egyр.2020.11.116.

Т.М. Гюр (2022). “Выбросы углекислого газа, улавливание, хранение и утилизация: обзор материалов, процессов и технологий”, *Progress in Energy and Combustion Science*. — Т. 89. — 100965, 2022, — doi: 10.1016/j.pecs.2021.100965.

Ц. Ван, Х. Чжен, З. Ван, Й. Шан, Дж. Мен, Ц. Лян, К. Фен, Д. Гуан (2019). “Выбросы CO₂ в Казахстане в эпоху после Киотского протокола: анализ на основе производства и потребления”, *Journal of Environmental Management*. — Т. 249. — 109393, 2019, — doi: 10.1016/j.jenvman.2019.109393.

REFERENCES

A. Bhavsar, D. Hingar, S. Ostwal, I. Thakkar, S. Jadeja, M. Shah (2023). “The current scope and stand of carbon capture storage and utilization: A comprehensive review”, *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*. — Vol. 8. — 100368, 2023, — doi: 10.1016/j.cscee.2023.100368.

A.A. Makarov (2014). “Modular installation for air purification from gas clean industrial enterprises”, Russian Patent No. 2529218. — 11 pp., 2014.

A. Rehman, M.M. Alam, I. Ozturk, R. Alvarado, M. Murshed, C. Işık, H. Ma (2023). “Globalization and renewable energy use: how are they contributing to upsurge the CO₂ emissions? A global perspective”, *Environmental Science and Pollution Research*. — Vol. 30. — No. 4. — Pp. 9699-9712, 2023, — doi: 10.1016/j.resconrec.2021.106150.

A.V. Turkin, V.A. Turkin, V.S. Yezhov (2014). “An integrated device for purifying marine engine exhaust gases”, Russian Patent No. 2536749. — 8 pp., 2014.

A.D. Vedenin, A.P. Pustovgar (2013). “Device for purifying air and exhaust gases from toxic components”, Russian Patent No. 124183. — 13 pp., 2013.

I. Wada, A. Faizulayev, A.H. Khademolomoom, A. Alzubi (2022). “Energy use, real output-

growth, FDI, energy-intensity and CO₂ emission: the case of Kazakhstan”, *Journal of Public Affairs*. — Vol. 22. — No. 1. — e2300, 2022, — doi: 10.1002/pa.2300.

L. Desport, S. Seloisse (2022). “An overview of CO₂ capture and utilization in energy models”. — Vol. 180. — 106150, 2022, — doi: 10.1016/j.resconrec.2021.106150.

N.K. Dosmukhamedov, E.E. Zholdasbay, M.G. Egizekov (2022). “Новые возможности развития угольной отрасли: технология очистки отходящих газов от SO₂, NO_x, CO₂”, *Engineering Journal of Satbayev University*. — Vol. 144. — No. 3. — Pp. 5–10, 2022, — doi: 10.51301/ejsu.2022.i3.01.

S. Adam, I. Delestre, P. Levell, H. Miller (2022). “Tax policies to reduce carbon emissions”. *Fiscal Studies*. — Vol. 43. — Pp. 235–263, 2022, — doi: 10.1111/1475-5890.12308.

S. Mukhtarov, S. Humbatova, I. Seyfullayev, Y. Kalbiyev (2020). “The effect of financial development on energy consumption in the case of Kazakhstan”, *Journal of Applied Economics*. — Vol. 23. — Pp. 75–88, 2020, — doi: 10.1080/15140326.2019.1709690.

S. Paraschiv, L.S. Paraschiv (2020). “Trends of carbon dioxide (CO₂) emissions from fossil fuels combustion (coal, gas and oil) in the EU member states from 1960 to 2018”, *Energy Reports*. — Vol. 6. — Pp. 237–242, 2020, — doi: 10.1016/j.egy.2020.11.116.

T.M. Gür (2022). “Carbon dioxide emissions, capture, storage and utilization: Review of materials, processes and technologies”, *Progress in Energy and Combustion Science*. — Vol. 89. — 100965, 2022, — doi: 10.1016/j.pecs.2021.100965.

V.R. Akhmetov, O.V. Smirnov (2020). “Carbon dioxide capture and storage. Problems and prospects”, *Bashkir Chemical Journal*. — Vol. 27. — No. 3. — Pp. 103–115, 2020, — doi: 10.17122/bcj-2020-3-103-115.

V.P. Glebov, V.F. Moskvichev, S.N. Pushkin, I.I. Shabanov, Yu.M. Afanasiev, A.M. Kuz'min (1993). “An installation for cleaning flue gases from sulfur and nitrogen oxides”, *Russian Patent No. 1813190*. — 3 pp., 1993.

X. Wang, H. Zheng, Z. Wang, Y. Shan, J. Meng, X. Liang, K. Feng, D. Guan (2019). “Kazakhstan's CO₂ emissions in the post-Kyoto Protocol era: Production-and consumption-based analysis”, *Journal of Environmental Management*. — Vol. 249. — 109393, 2019, — doi: 10.1016/j.jenvman.2019.109393.



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

МАЗМУНЫ

ФИЗИКА

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

ХИМИЯ

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

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

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

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

ХИМИЯ

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

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

CONTENTS
PHYSICAL

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

CHEMISTRY

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

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

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

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

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

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

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

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

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

www.nauka-nanrk.kz

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

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

Подписано в печать 29.03.2024.

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

19,0 п.л. Тираж 300. Заказ 1.