

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

**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

**№3
2025**

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

2025 • 3



**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND
CHEMICAL SCIENCES**

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

Editor-in-Chief:

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

Editorial Board:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Periodicity: 4 times a year.

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

Бас редактор:

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

Редакция ұжымы:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

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

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

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

Тақырыптық бағыты: *физика, химия.*

Мерзімділігі: жылына 4 рет.

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

Главный редактор:

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

Редакционная коллегия:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

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

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

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

Периодичность: 4 раза в год.

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

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

CONTENTS

PHYSICS

M.B. Albatyrova

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

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

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

A. Istlyaup, L. Myasnikova, A. Lushchik

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

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

Determination of the gravitational constant.....49

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

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

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

Effect of the composition of the film-forming system on the properties of SnO₂ films obtained by spray pyrolysis.....71

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

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

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

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

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

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

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

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

CHEMISTRY

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

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

М.Б. Альбатырова

Сызықтық емес спиндік жүйедегі энергия эволюциясының теңдеуі:
шығарылуы және сандық модельдеу.....11

Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова, А.Қ. Шонғалова, О.А. Шилова

Прекурсор концентрациясының алынған жұқа ZnO жабындарының
құрылымы мен фотосезімталдығына әсері.....21

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

Төмен тығыздықтағы полиэтиленнің кинетикалық қасиеттеріне
болжау жасау.....33

А. Истляуп, Л. Мясникова, А. Лущик

Сілтілі металл иодидтерінің кристалдарымен көміртек қабатының
электрлік қасиеттерін компьютерлік модельдеу.....49

А. Кенесбаева, Е. Кульдеев, Е. Шаленов, Т. Нурпеисова

Гравитациялық тұрақтыны анықтау.....60

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

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

Е. Отунчи, А.А. Мигунова, А.Г. Умирзаков, Н. Токмолдин

Жабын түзуші жүйе құрамының спрей-пиролиз әдісімен алынған
SnO₂ жабындарының қасиетіне әсері.....83

У.А. Уалиханова, А.Н. Әбдіпатта, О.В. Разина, А.М. Сыздыкова, Г.С. Алтаева

f(T) гравитациясындағы көлемдік тұтқырлық және оның
космологиялық эволюцияға әсері.....99

**А.Ж. Умирбаева, Л. Актай, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова,
С.А. Шомшекова**

Планетарлық тұмандықтардың архивтік саңылаулы спектрлерін
өңдеу әдістемесі.....115

Д. Юрин, Д. Куватова, А. Глущенко, Ч. Омаров, М. Макуков

N-бөлшекті тікелей үлгілеудің шектерін Nvidia RTX 4090
GPU-карталарын пайдаланып талдау.....131

ХИМИЯ

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

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

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

Определение гравитационной постоянной.....49

Ш.Т. Нурмахаметова, Н.Л. Вайдман, С.А. Хохлов, А.Т. Агишев, А.А. ХохловЭмиссионный пылевой объект IRAS 07080+0605: доказательство двойной
природы.....60**Е. Отунчи, А.А. Мигунова, А.Г. Умирзаков, Н. Токмолдин**Влияние состава пленкообразующей системы на свойства пленок
SnO₂, полученных методом спрей-пиролиза.....71**У.А. Уалиханова, А.Н. Эбдіпатта, О.В. Разина, А.М. Сыздыкова, Г.С. Алтаева**Объемная вязкость в f(T) гравитации и ее влияние
на космологическую эволюцию.....83**А.Ж. Умирбаева, Л. Актай, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова,
С.А. Шомшекова**

Методика обработки архивных щелевых спектров планетарных туманностей...99

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

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

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

ХИМИЯ

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

© M.B. Albatyrova, 2025.

Astana IT University, Astana, Kazakhstan.
E-mail: mereyalbatyrova7139@gmail.com

ENERGY EVOLUTION EQUATION IN A NONLINEAR SPIN SYSTEM: DERIVATION AND NUMERICAL MODELING

Albatyrova Merey Babaykyzy — Master in Natural Sciences, teacher of School of Intelligent System, Astana IT University, Astana, Kazakhstan,
E-mail: mereyalbatyrova7139@gmail.com, ORCID ID: 0009-0002-8075-9393.

Abstract. This study investigates the numerical modeling of local energy evolution in a spin system governed by a dissipative generalization of the Landau–Lifshitz-type equation. Starting from a vector formulation that describes the dynamics of the spin field $S(x, t)$, we rigorously derive a corresponding scalar equation for the local energy density, expressed as $E(x, t) = \frac{1}{2} |S_x|^2$. This scalar representation proves to be a convenient analytical tool, as it effectively captures the spatiotemporal dynamics of the energy associated with evolving spin configurations while incorporating nonlinear interactions and dissipative mechanisms. The resulting equation reflects the interplay of multiple physical processes, including the contribution of an external scalar potential $u(x, t)$, convective energy transport, viscous-type diffusion, and curvature-induced dissipation modeled through the higher-order term $|S_{xxx}|^2$. Emphasis is placed on examining how variations in the dissipation coefficient and the structural properties of the external potential influence the qualitative and quantitative features of the energy distribution. To achieve this, we propose a scalar-field-based framework that enables direct observation of local energy evolution without resorting to solving the full nonlinear spin dynamics. Numerical simulations validate the approach, illustrating its effectiveness in identifying localized energy concentrations, tracing their propagation, and monitoring the decay of dissipative spin waves over time.

Keywords: soliton, local energy evolution equation, dissipative dynamics, nonlinear spin system, energy transport

© М.Б. Альбатырова, 2025.

Astana IT University, Астана, Қазақстан.

E-mail: mereyalbatyrova7139@gmail.com

СЫЗЫҚТЫҚ ЕМЕС СПИНДІК ЖҮЙЕДЕГІ ЭНЕРГИЯ ЭВОЛЮЦИЯСЫНЫҢ ТЕНДЕУІ: ШЫҒАРЫЛУЫ ЖӘНЕ САНДЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Альбатырова Мерей Бабайқызы — жаратылыстану ғылымдарының магистрі, Зияткерлік жүйелер мектебінің оқытушысы, Astana IT University, Астана, Қазақстан,
E-mail: mereyalbatyrova7139@gmail.com, ORCID ID: 0009-0002-8075-9393.

Аннотация. Бұл жұмыста Ландау–Лифшиц типті тендеудің диссипативтік жалпылауымен сипатталатын спиндік жүйедегі энергияның локалдық эволюциясын сандық модельдеу қарастырылады. Спин өрісінің динамикасын $S(x, t)$ сипаттайтын векторлық тендеуден бастап, біз локалдық энергия тығыздығының скалярлық тендеуін аламыз, ол $E(x, t) = \frac{1}{2} |S_x|^2$ түрінде өрнектеледі. Мұндай скалярлық форма энергияның уақыт пен кеңістіктегі мінез-құлқын тиімді бейнелейді және бейсызық әсерлер мен диссипативтік өзара әрекеттесулерді қамтиды. Қорытынды тендеу бірнеше физикалық процестерді сипаттайды: сыртқы скалярлық потенциалдың $u(x, t)$ ықпалы, конвективтік энергия тасымалы, тұтқырлыққа ұқсас диффузия және спин өрісінің қисықтығымен байланысты энергия жоғалту, ол $|S_{xx}|^2$ мүшесі арқылы модельденеді. Зерттеуде диссипация коэффициентінің және сыртқы потенциалдың пішінінің өзгерістері энергияның кеңістіктік таралуына және уақыттық динамикасына қалай әсер ететініне ерекше назар аударылады. Бұл талдауды жеңілдету үшін толық спиндік динамиканы энергия эволюциясын қадағалауға мүмкіндік беретін скалярлық өріске негізделген тәсіл ұсынылады. Жүргізілген сандық модельдеулер әдістің тиімділігін көрсетіп, локалданған энергия шоғырларын анықтауға, олардың таралуын бақылауға және диссипативтік толқындардың әлсіреуін сипаттауға мүмкіндік берді.

Түйін сөздер: солитон, локалдық энергия эволюциясы тендеуі, диссипативтік динамика, бейсызық спиндік жүйе, энергия тасымалы

© М.Б. Альбатырова, 2025.

Astana IT University, Астана, Қазақстан.

E-mail: mereyalbatyrova7139@gmail.com

УРАВНЕНИЕ ЭВОЛЮЦИИ ЭНЕРГИИ В НЕЛИНЕЙНОЙ СПИНОВОЙ СИСТЕМЕ: ВЫВОД И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Альбатырова Мерей Бабайқызы — магистр естественных наук, преподаватель Школы интеллектуальных систем, Astana IT University, Астана, Казахстан,
E-mail: mereyalbatyrova7139@gmail.com, ORCID ID: 0009-0002-8075-9393.



Аннотация. В данной работе представлено исследование численного моделирования локальной эволюции энергии в спиновой системе, которая описывается диссипативным обобщением уравнения типа Ландау–Лифшица. Отталкиваясь от векторного уравнения, задающего динамику спинового поля $\mathbf{S}(\mathbf{x}, t)$, мы последовательно выводим скалярное уравнение для локальной плотности энергии, определяемой как $E(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} |\mathbf{S}_x|^2$. Такая постановка задачи позволяет перейти от сложной многомерной динамики к более компактному описанию, удобному для анализа. Полученное уравнение отражает совокупность ключевых физических процессов: воздействие внешнего скалярного потенциала $u(\mathbf{x}, t)$, перенос энергии за счёт конвективных членов, диффузию вязкостного типа, а также потери энергии, связанные с кривизной спинового поля, которые моделируются через член $|\mathbf{S}_{xx}|^2$. Особое внимание уделяется влиянию коэффициента диссипации и формы внешнего потенциала на пространственно-временное распределение энергии. Для упрощения анализа разработан скалярный подход, который позволяет наблюдать эволюцию энергии без необходимости полного решения нелинейной спиновой динамики. Проведённые численные эксперименты подтверждают эффективность метода: он даёт возможность выявлять локализованные энергетические концентрации, проследить их распространение и фиксировать затухание диссипативных волн. Таким образом, работа демонстрирует потенциал предложенного подхода как инструмента для дальнейших исследований нелинейных спиновых систем.

Ключевые слова: солитон, уравнение эволюции энергии, энергия, спин, нелинейная спиновая система

Introduction. Solitons are a remarkable class of nonlinear wave solutions that maintain their shape and speed over long distances and periods of time, despite the presence of dispersion and nonlinearity. Originally discovered in shallow water wave systems by John Scott Russell in the 19th century, solitons have since been identified in a wide range of physical systems, including optical fibers, plasmas, condensed matter, and spin chains, as demonstrated in the works of Ablowitz, M. J., Segur, H. (1981) and Dauxois, T., Peyrard, M. (2006). Unlike ordinary wave packets, which typically spread out and dissipate, solitons exhibit particle-like behavior - they can collide, pass through each other, and re-emerge without loss of identity. In this sense, solitons share striking similarities with real physical particles, particularly in their ability to preserve structural integrity over time and space, as discussed in the investigations of Manton, N., Sutcliffe, P. (2004).

The study of solitons is important not only from a theoretical standpoint but also due to their wide range of applications. In nonlinear optics, solitons enable robust data transmission in optical fibers which is shown in Agrawal, G. P. (2019), in condensed matter physics, they model topological excitations in spin systems in Lakshmanan, M. (1977) and in cosmology, they appear in models of domain walls and early-universe defects Vilenkin, A., Shellard, E. P. S. (1994). The ability to describe long-

lived, localized energy transport makes solitons a powerful tool for understanding and controlling complex dynamical systems.

In this work, we investigate soliton-like energy behavior within a one-dimensional spin field governed by a nonlinear, dissipative evolution equation. Rather than tracking the full vector field $S(x,t)$, we focus on the evolution of the local energy density $E(x,t) = \frac{1}{2} |S_x|^2$, derived from the underlying spin dynamics. To analyze this energy flow, we introduce a framework that allows us to study how energy propagates, dissipates, and localizes without solving the full vector system.

This method is particularly useful in systems with dissipation or external interactions, where direct interpretation of the vector field becomes challenging. By analyzing the scalar energy profile, we gain intuitive and quantitative insight into how energy packets evolve over time, whether they spread out like diffusive waves or retain localized features resembling solitons. Studying such behavior helps identify stable, particle-like energy modes in nonlinear media and improves our understanding of energy transport mechanisms in spin-based systems.

Materials and methods. In this work, we define the local energy density of a spin field as

$$E(x,t) = \frac{1}{2} |S_x|^2 = \frac{1}{2} (S_x S_x)$$

Here, $S(x,t)$ is a unit vector field representing spin orientation, and S_x is its spatial derivative. This formulation describes how strongly the field configuration changes across space and is widely used in the physics of magnetism and nonlinear field theory.

Such an energy density naturally arises in the nonlinear sigma model (NL σ M), a widely studied framework for modeling continuous spin fields. In these models, the Lagrangian typically takes the form

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \partial^\mu S$$

where the dynamics of the spin field are constrained by the condition $|S| = 1$. The spatial part of this Lagrangian corresponds directly to the energy density we use, and this form has become a standard in continuum spin models. This approach is supported by foundational studies, such as those by Assa Auerbach (1988), which highlight the role of spatial gradients of spin fields in determining energetic and dynamical properties of magnetic systems. Focusing on the scalar energy density rather than the full vector field provides clearer insight into dissipation, localization, and transport mechanisms in nonlinear spin environments.

We consider our modified model in the following form:

$$S_t - S \wedge S_{xt} - u S_x = v S_{xx} \quad (1)$$

$$u_x + \frac{1}{2} (S_x^2)_t = -\gamma u \quad (2)$$

In this system, the first equation governs the dynamics of the spin vector field $S(x,t)$, where v is the dissipation coefficient and \wedge wedge denotes the vector product. This

equation describes how the spin field evolves in both space and time under the influence of external interactions and internal curvature. While the second equation is a scalar equation that models the evolution of the auxiliary field $u(x,t)$, which interacts with the spin field through its spatial gradient and energy density.

We introduced a definition for the local energy density and then aimed to derive an equation describing its time evolution, specifically the partial derivative $\frac{dE}{dt}$, based on our system. The motivation behind this step is to study how the energy associated with the spin field changes over time and to better understand the behavior of wave-like structures within the system. By tracking the evolution of the local energy density, we can analyze where and when energy tends to increase, and in which regions it dissipates or decays. This information is crucial for identifying zones of wave amplification versus attenuation, especially in nonlinear and dissipative media. Solving this scalar equation rather than the full vector field equations provides a clearer and more intuitive picture of the underlying energy transport processes. It simplifies the analysis while preserving essential features of the original spin system. It allows us to follow the dynamics of energy concentration, recognize patterns of dissipation, and detect localized structures that may behave like solitons. Thus, the evolution equation for $E(x,t)$ becomes a powerful tool for understanding how energy flows through the system and how different parameters influence this process.

$$E(x, t) = \frac{1}{2} (\mathbf{S}_x \mathbf{S}_x), \tag{3}$$

It follows from equation (3) that

$$\frac{dE}{dt} = \mathbf{S}_x \mathbf{S}_{tx} \tag{4}$$

We can represent our system (1) in the following explicit form:

$$\mathbf{S}_t = \mathbf{S} \wedge \mathbf{S}_{xt} + u \mathbf{S}_x + v \mathbf{S}_{xxx} \tag{5}$$

We begin by substituting equation (5) into equation (4),

$$\frac{dE}{dt} = u \mathbf{S}_x \mathbf{S}_x + u \mathbf{S}_x \mathbf{S}_{xxx} + v \mathbf{S}_x \mathbf{S}_{xxx}$$

while expressing all scalar products in terms of the energy density $E(x,t)$. The following identities are used to rewrite the nonlinear terms:

$$\mathbf{S}_x \mathbf{S}_x = 2E,$$

$$\mathbf{S}_x \mathbf{S}_{xxx} = \frac{dE}{dx},$$

$$\mathbf{S}_x \mathbf{S}_{xxx} = \frac{d^2 E}{dx^2} - \mathbf{S}_{xx} \mathbf{S}_{xx}.$$

These relationships allow us to express the scalar projections of the spin derivatives purely in terms of the energy density and its spatial derivatives. As a result, we obtain equation (3) in a new form, which we refer to as equation (6).

$$\frac{dE}{dt} = uE + u \mathbf{S}_x \frac{dE}{dx} + v \left(\frac{d^2 E}{dx^2} - \mathbf{S}_{xx} \mathbf{S}_{xx} \right) \tag{6}$$

This equation describes the time evolution of the energy density $E(x,t)$ for the spin system originally given in system (1). The reformulated version isolates the effects of the external field, convective transport, diffusion, and dissipation in a scalar framework, making it significantly more convenient for analysis and numerical simulation.

Results

The model successfully captures the behavior of energy in a nonlinear spin system: local wave structures dissipate and decay over time, as expected from the governing equation. The applied approach allows for precise tracking of where and when energy vanishes, without the need to solve the full vector equation for $S(x,t)$

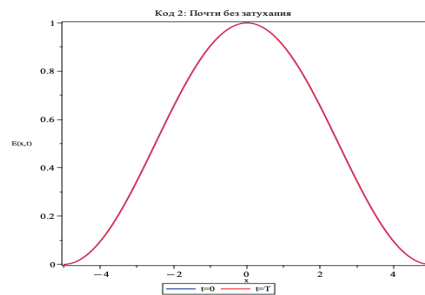


Figure 1. Nearly No Dissipation

Figure 1 illustrates the scenario “Nearly No Dissipation”, in which the system parameters are specifically chosen to eliminate energy loss. With zero viscosity $\nu = 0$ and $|S_{xx}| = 0$, no external potential field, and no curvature-induced dissipation, the energy distribution remains unchanged over time. The complete overlap of the energy profiles $E(x,0)$ and $E(x,T)$ demonstrates the stationarity of the solution, making this regime an idealized analog of a non-interacting soliton. We consider a regime in which energy is preserved over time without significant dissipation. The system parameters are chosen specifically to eliminate the influence of dissipative mechanisms and to demonstrate the quasi-stationary behavior of the energy profile.

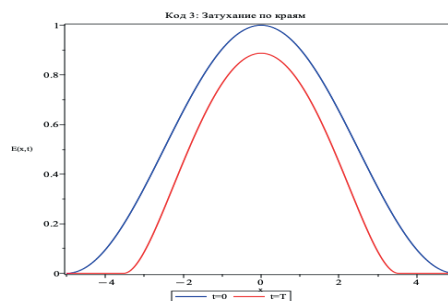


Figure 2. Dissipation near the boundaries

Figure 2 illustrates the results of modeling local energy density in a spin system under the condition that dissipation is spatially dependent and primarily concentrated

near the boundaries of the domain. The parameters were chosen to ensure that energy remains preserved in the central region while gradually decaying at the edges. The curvature-dependent dissipation term is defined as $|S_{xxx}| = \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ which stretched over an interval of length L and vanishes near the center and increases toward the boundaries. The viscosity coefficient is set to $\nu = 0.1$, and the external field is absent, $u(x) = 0$. The initial energy profile is given by $E(x, 0) = \cos^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$, which has a maximum at the center and zeros at the domain edges. As the simulation progresses, the energy profile maintains its shape near the center while diminishing at the boundaries, as evidenced by the comparison between the curves at $t = 0$ (blue) and $t = T$ (red). This behavior reflects localized dissipation and demonstrates how energy becomes concentrated in the interior of the domain, forming a quasi-stable structure while energy is lost near the periphery.

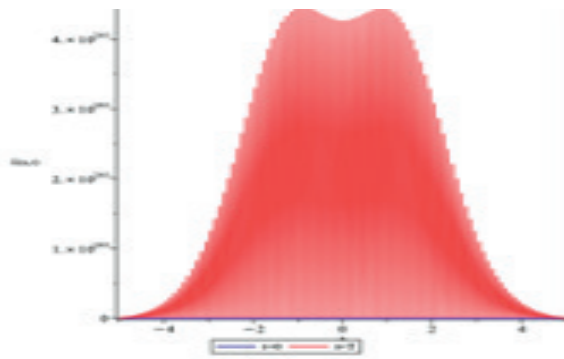


Figure 3. Strong Dissipation

The graph presents the behavior of local energy density in the numerical experiment titled “ Strong Dissipation”. The goal of this scenario is to investigate how energy rapidly dissipates throughout the domain under the influence of pronounced dissipative mechanisms. The system parameters were chosen as follows: the viscosity coefficient was set to $\nu = 0.5$, which is relatively high to ensure significant energy loss, and the curvature-related dissipation term was defined as $|S_{xxx}| = \text{const}$, meaning dissipation is uniform across the entire spatial domain. The initial energy profile was defined by a Gaussian function: $E(x, 0) = \exp(-x^2)$ localized around the center and decaying toward the edges. The external scalar field was set as $u(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$, with its derivative given by $u'(x) = \frac{\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$. However, instead of the expected decay, the numerical simulation displays an unexpected and unphysical exponential growth in the energy profile. The initially smooth and localized distribution remains near zero at $t = 0$ (blue curve), while the final state at $t = T$ (red curve) rises sharply and forms a jagged, spike-like structure. This behavior is a clear indication of numerical instability, most likely resulting from an inappropriate balance between the spatial and temporal resolution in relation to the chosen viscosity. Such an outcome emphasizes the necessity of carefully selecting discretization parameters and employing stable numerical schemes when modeling nonlinear dissipative systems.

Discussion

The numerical results obtained in this study provide valuable insight into the behavior of energy in a one-dimensional spin system under different dissipation conditions. The approach proved effective for monitoring the evolution of energy density without solving the full vector equation for the spin field $S(x,t)$. This simplifies the computational process and allows for clearer interpretation of the system's dynamics.

By analyzing different dissipation patterns including uniform dissipation across the domain, dissipation localized near the boundaries, and minimal or no dissipation it becomes evident that each configuration leads to distinct energy dynamics. Uniform dissipation results in rapid energy decay throughout the entire region. When dissipation is spatially localized at the boundaries, the system exhibits stable energy retention in the center while losing energy at the edges. In the absence of dissipation, the energy profile remains quasi-stationary, with minimal changes over time.

One of the strengths of this approach lies in its generality and flexibility. The method can be adapted to other field models and extended to higher-dimensional systems. However, the study also has limitations: the model is restricted to one spatial dimension and does not account for stochastic effects or microscopic interactions that may be significant in real physical systems. Moreover, cases with high dissipation levels require special attention to numerical stability, and may benefit from more advanced time-stepping methods.

Overall, the findings show that spatially controlled dissipation has a significant impact on how energy moves and concentrates in a system. The simplified scalar model used in this study proves to be a useful tool for gaining insights into the behavior of more complex nonlinear systems.

Solitons, in general, are a key concept in physics. They describe how energy can remain stable and localized while moving through a nonlinear medium, which is important for understanding both classical and quantum systems.

These stable, nonlinear waves are interesting because they behave like both waves and particles. That unique dual nature makes them a promising model for describing elementary particles. For example, in Boris Slavin's article *Soliton Interpretation of Quantum Theory*, he suggests that particles like the electron might actually be soliton solutions of nonlinear equations. In particular, these are the Maxwell equations, where the charge and current densities are expressed through quadratic combinations of electric and magnetic field strengths.

Unlike the traditional approach, where the wave function is treated merely as a tool for calculating probabilities, the soliton interpretation assigns it a physical meaning. In this view, the complex wave function represents an electromagnetic wave: the real part corresponds to the electric field, and the imaginary part to the magnetic field. This concept allows for a synthesis between the Copenhagen interpretation and Bohm's hidden variable theory.

A defining feature of solitons is their ability to maintain shape while propagating and interacting, due to their "transparency" to specific waveforms. Using the inverse scatter-

ing transform (IST) method, analytical soliton solutions can be obtained-much like how eigenfunctions are used in quantum theory to describe particle states.

Thus, in this framework, quantum equations are interpreted not as governing the dynamics of particles directly, but as boundary conditions that determine the existence of soliton solutions. This perspective provides a new understanding of wave-particle duality and offers a way to connect quantum mechanics with classical electrodynamics in its nonlinear form.

Conclusion

This study presents a comparative analysis of energy evolution under three distinct dissipative regimes in a one-dimensional spin system: strong dissipation, boundary-localized dissipation, and near-zero dissipation. Each scenario demonstrates a unique pattern of energy decay or persistence, governed by the choice of parameters such as viscosity, curvature-related loss, and external field structure $u(x)$. The strong dissipation case exhibits rapid, uniform energy decay across the domain, while the boundary-localized model reveals sustained energy in the center and loss at the edges. In contrast, the near-zero dissipation regime maintains a quasi-stationary energy profile throughout the simulation time.

The ability to selectively control dissipation both spatially and temporally enables the modeling of various physical systems in which long-lived localized excitations or wave decay play a critical role. For example, such mechanisms are relevant in magnetic materials (Auerbach, 1994), optical solitons in fiber networks (Agrawal, 2019), and condensed matter systems with topological structures that resist decay (Manton & Sutcliffe, 2004). Furthermore, the proposed way of solving the problem provides an efficient means of tracking energy redistribution without the need to solve the full vector dynamics. This makes it a valuable tool for modeling nonlinear spin systems, metamaterials, and even theoretical models in cosmology and field theory (Vilenkin & Shellard, 1994).

Overall, the results highlight the importance of controlling and understanding dissipative behavior in nonlinear media, and provide a computational framework that can be extended to explore soliton stability, energy trapping, and engineered wave decay in various applications.

References

- Ablowitz M.J., Segur H. (1981) *Solitons and the Inverse Scattering Transform*. Philadelphia: SIAM. (in English)
- Dauxois T., Peyrard M. (2006) *Physics of Solitons*. Cambridge University Press. — 436 p. (in English)
- Manton N., Sutcliffe P. (2004) *Topological Solitons*. Cambridge University Press. Online ISBN:9780511617034, <https://doi.org/10.1017/CBO9780511617034>
- Agrawal G.P. (2019) *Nonlinear Fiber Optics*. Amsterdam: Academic Press. — 726 p. (in English)
- Lakshmanan M. (1977) Continuum spin system as an exactly solvable dynamical system. *Physics Letters A*, 61. — P. 53–54. (in English)
- Vilenkin A., Shellard E. P. S. (1994) *Cosmic Strings and Other Topological Defects*. Cambridge: Cambridge University Press. — 517 p. (in English)

- Auerbach A. (1994). *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. New York: Springer. — 416 p. (in English)
- Slavin B. (2024). *Soliton Interpretation of Quantum Theory*, Moscow: Financial University under the Government of the Russian Federation. —13 p. (in English)
- Allen J. E. (1998). The early history of solitons (solitary waves). *Physica Scripta*, 57(3). — P. 436–441. (in English)
- Brogie L. (2007) *An Introduction to the Study of Wave Mechanics*. New York: Phillips Press. — 124 p. (in English)
- Manukure S., Booker T. (2021) A short overview of solitons and applications. *Partial Differential Equations in Applied Mathematics*, 4, 100140. (in English)
- Dandoloff R., Zakrzewski W. J. (1989). Solitons and spin systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 22(14), L461–L466. (in English)
- Kosevich A.M., Ivanov B.A., Kovalev A.S. (1990) *Magnetic Solitons*. Amsterdam: Elsevier, *Physics Reports*, Vol. 194.. — No. 3-4. — P. 117–238. (in English)
- Iwasaki H., Toh S., Kawahara T. (1990) Cylindrical quasi-solitons of the Zakharov–Kuznetsov equation. *Physica D*, 43(2–3), 293–303. (in English)
- Hu H.-C. (2008). New exact solutions of Zakharov–Kuznetsov equation. *Communications in Theoretical Physics (Beijing)*, 49(3). — P. 559–561. (in English)
- Allen J.E. (1998) The early history of solitons (solitary waves). *Physica Scripta*, 57(3). — P. 436–441. (in English)

© E.A. Dmitriyeva, A.E. Kemelbekova^{1*}, A.K. Shongalova¹, O.A. Shilova², 2025.

¹Institute of Physics and Technology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan;

² Institute of Silicate Chemistry, Russian Academy of Sciences,
Saint-Petersburg, Russia.

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

EFFECT OF THE PRECURSOR CONCENTRATION ON THE MORPHOLOGY AND PHOTOSENSITIVITY OF THE RESULTING ZnO THIN FILMS

Dmitriyeva E.A. — Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Professor, Leading 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>;

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>.

Shilova O.A. — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Institute of Silicate Chemistry of Russian Academy of Sciences, Saint-Petersburg, Russia,

E-mail: olgashilova@bk.ru., <https://orcid.org/0000-0002-3856-9054>.

Abstract. This work presents a comprehensive study of the structural, optical, and morphological properties of zinc oxide (ZnO) thin films synthesized by the sol–gel method from zinc acetate solutions with different precursor concentrations (0.1–0.7 mol/L). It was established that varying the precursor concentration significantly affects the formation of the crystal structure, preferred orientation, crystallite size, and surface roughness. X-ray diffraction analysis revealed that films prepared at low concentration (0.1 mol/L) exhibit a pronounced [002] texture, indicative of a high degree of structural ordering, whereas films obtained at 0.5–0.7 mol/L demonstrate reduced orientation and increased crystallite size and surface roughness. Photoluminescence spectra showed stronger near-band-edge emission in the range of 3.14–3.18 eV for films synthesized at lower concentrations, which may be associated with a lower density of recombination defects and improved crystal quality. Atomic force microscopy confirmed the increase in surface roughness with precursor concentration. Fabricated ZnO–Si heterostructures demonstrated pronounced photosensitivity in the 500–1100 nm spectral range. The

highest photoresponse was observed for structures prepared at 0.7 mol/L, which can be attributed to a more pronounced built-in electric field and efficient charge carrier separation. The results highlight the potential of such ZnO films for applications in optoelectronics, photodetectors, and solar energy conversion devices.

Keywords: zinc oxide, photosensitivity, luminescence, volt-ampere characteristics, sol-gel method

The study was conducted with the financial support of the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (No BR21881954).

© Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова^{1*}, А.Қ. Шонғалова¹,
О.А. Шилова², 2025.

¹ Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан;

² Ресей ғылым академиясының Силикаттар химиясы институты,

Санкт-Петербург, Ресей.

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

ПРЕКУРСОР КОНЦЕНТРАЦИЯСЫНЫҢ АЛЫНҒАН ЖҰҚА ZnO ЖАБЫНДАРЫНЫҢ ҚҰРЫЛЫМЫ МЕН ФОТОСЕЗІМТАЛДЫҒЫНА ӘСЕРІ

Дмитриева Е.А. — физика-математика ғылымдарының кандидаты, профессор, жетекші ғылыми қызметкер, 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>;

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

Шилова О.А. — химия ғылымдарының докторы, Ресей ғылым академиясының Силикаттар химиясы институтының профессоры, Санкт-Петербург, Ресей,

E-mail: olgashilova@bk.ru. , <https://orcid.org/0000-0002-3856-9054>.

Аннотация. Бұл жұмыста әртүрлі концентрациядағы (0,1–0,7 моль/л) мырыш ацетаты ерітінділерінен золь-гель әдісімен алынған мырыш оксиді (ZnO) жұқа жабындарының құрылымдық, оптикалық және морфологиялық қасиеттері кешенді түрде зерттелді. Прекурсор концентрациясының өзгеруі кристалдық құрылымның түзілуіне, бағдарлануына, кристаллит өлшеміне және беткі кедір-бұдырлығына айтарлықтай әсер ететіні анықталды. Рентгенқұрылымдық талдау төмен концентрацияда (0,1 моль/л) дайындалған үлгілердің айқын [002] бағдарлануын көрсетіп, жоғары дәрежелі реттелуді дәлелдеді, ал 0,5–0,7 моль/л концентрациясында алынған жабындарда бағдарлану әлсіреп, кристаллит өлшемі мен беткі кедір-бұдырлығы артатыны байқалды. Фотолюминесценция спектрлері төмен концентрацияда алынған үлгілер үшін 3,14–3,18 эВ аймағында қарқынды сәуле шығару байқалды, бұл рекомбинациялық ақаулардың аздығымен және

кристалл торының сапасының жоғары болуымен байланысты болуы мүмкін. Атомдық-күштік микроскопия прекурсор концентрациясының артуымен беткі кедір-бұдырлықтың өсетінін растады. ZnO–Si гетероқұрылымдары 500–1100 нм диапазонында айқын фотосезімталдық көрсетті. Ең жоғарғы фотоқабылдау 0,7 моль/л концентрациясында алынған үлгілерде байқалды, бұл ішкі электр өрісімен және заряд тасымалдаушылардың тиімді бөлінуімен түсіндіріледі. Алынған нәтижелер мұндай жабындардың оптоэлектроникада, фотодетекторларда және күн элементтерінде қолдануға аясы кең екенін дәлелдейді.

Түйін сөздер: мырыш оксиді, фотосезімталдық, люминесценция, Вольт-Ампер сипаттамалары, золь-гель әдісі

Зерттеу Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі Ғылым комитетінің қаржылық қолдауымен (No BR21881954) жүргізілді.

© Е.А. Дмитриева, А.Е. Кемелбекова^{1*}, А.Қ. Шонғалова¹,
О.А. Шилова², 2025.

¹ Физико-технический институт, Satbayev University, Алматы, Казахстан;

² Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия.

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРЕКУРСОРА НА МОРФОЛОГИЮ И ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ПОЛУЧАЕМЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК ZnO

Дмитриева Е.А. — кандидат физико-математических наук, профессор, ведущий 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>;

Шонғалова А.Қ. – PhD, Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан,

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

Шилова О.А. — Доктор химических наук, профессор, Институт химии силикатов РАН, Санкт-Петербург, Россия,

E-mail: olgashilova@bk.ru. , <https://orcid.org/0000-0002-3856-9054>.

Аннотация. В данной работе представлено комплексное исследование структурных, оптических и морфологических свойств тонких пленок оксида цинка (ZnO), синтезированных золь-гель методом из растворов ацетата цинка различной концентрации (0,1–0,7 моль/л). Установлено, что изменение концентрации прекурсора оказывает существенное влияние на формирование кристаллической структуры, ориентацию, размеры кристаллитов и шероховатость поверхности. Рентгеноструктурный анализ показал, что при низкой концентрации (0,1 моль/л) наблюдается выраженная текстура по оси [002], свидетельствующая о высокой степени упорядоченности, тогда как при 0,5–0,7 моль/л структура становится менее упорядоченной, а размер кристаллитов и шероховатость поверхности увеличиваются. Спектры фотолюминесценции показали более

интенсивное излучение в области 3,14–3,18 эВ для пленок, полученных при низких концентрациях, что может быть связано с меньшим количеством дефектов рекомбинации и более высоким качеством кристаллической решетки. Атомно-силовая микроскопия подтвердила рост шероховатости поверхности с увеличением содержания прекурсора. Изготовленные гетероструктуры ZnO–Si продемонстрировали выраженную фоточувствительность в диапазоне 500–1100 нм. Максимальный фотоотклик наблюдался у структур, синтезированных при концентрации 0,7 моль/л, что объясняется более выраженным встроенным электрическим полем и эффективным разделением носителей заряда. Полученные результаты подтверждают перспективность применения таких пленок в оптоэлектронике, фотодетекторах и солнечных элементах.

Ключевые слова: оксид цинка, фоточувствительность, люминесценция, вольт-амперные характеристики, золь-гель метод

Работа 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)

Введение. Повышенное внимание к пленкам на основе оксида цинка вызвано наличием интересных свойств этого материала, таких как, люминесценция, наличие пьезо- и пирроэффекта, амфотерные химические свойства, каталитическая активность, фотоэлектрические свойства и биологическая активность (Кляйн, 1987; Зиновьев, 1974; Разуваев, 1972). Оксид цинка нашел применение в светодиодах и лазерах, в солнечных батареях, в качестве прозрачных проводящих электродов, как материал для газочувствительных датчиков, в антибликовых покрытиях и оптических фильтрах, а также в пьезоэлектрических преобразователях и варисторах (Помогайло, 2000; Анисимов, 2007, Симаков, 2009). Универсальность этого полупроводникового материала связана с широкой шириной запрещенной зоны (3,37 эВ), большой энергией связи экситона (60 мэВ при комнатной температуре), химической стабильностью к влаге (Рембеза, 2006; Сунита, 2002; Рябцев, 2008).

Особый интерес вызывают тонкие плёнки ZnO, полученные золь-гель методом, поскольку этот метод является экономически эффективным, и при необходимости, легко масштабируется до промышленного производства. Путём варьирования параметров золь-гель процесса — таких как состав прекурсора, тип легирующих добавок и условия термообработки — можно управлять кристалличностью, уровнем дефектности и морфологией плёнок (Сюй, 1991; Адамян, 2006; Мухамедшина, 2007; Карапатницкий, 2000)

Как правило, плёнки ZnO, полученные золь-гель методом, демонстрируют прямозонную ширину запрещённой зоны (Eg) в диапазоне ~3,2–3,3 эВ, что соответствует значению Eg объёмного кристаллического ZnO (Шривастава, 1998). На величину ширины запрещённой зоны могут оказывать влияние

микроструктурные особенности и легирование. Например, при появлении растягивающих напряжений, обусловленных легированием, наблюдаются незначительные красные сдвиги Eg: при легировании ZnO медью ширина запрещенной зоны уменьшалась с ~3,14 эВ (для нелегированного образца) до ~3,07 эВ при содержании 6% Cu, что объясняется расширением решетки и появлением энергетических «хвостов» (Мухамедшина, 2006; Мухамедшина, 2008).

Напротив, сплавление с оксидами, обладающими более широкой запрещенной зоной, например, MgO, приводит к её увеличению, что может быть полезно при создании УФ-фильтров и оптических барьеров (Ким, 2005)

Фотолюминесцентные свойства (PL) плёнок ZnO, так же чувствительны к качеству кристаллической структуры и наличию дефектов. На данный момент удалось добиться значительного управления фотолюминесценцией ZnO за счёт легирования и модификации условий синтеза. Введение определённых элементов позволяет либо пассивировать дефекты, либо формировать новые люминесцентные центры.

Несмотря на достигнутые успехи в синтезе плёнок оксида цинка методом золь-гель, остается ряд нерешённых задач, связанных с влиянием концентрации прекурсора на формирование дефектов в структуре плёнок и их кристалличность. Особый интерес представляет изучение зависимости между концентрацией прекурсора и образованием люминесцентных центров, а также оценка влияния этого параметра на фототок синтезированных структур. Настоящая работа направлена на выявление закономерностей, связывающих концентрацию прекурсора в процессе золь-гель синтеза с морфологическими, структурными и оптоэлектронными свойствами полученных плёнок оксида цинка. сканирующей электронной микроскопией.

Материалы и методы. *Получение кристаллов.* В процессе выполнения данной работы пленки оксида цинка были получены методом центрифугирования. В качестве исходного материала для получения оксида цинка был использован дигидрат ацетата цинка ($Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$) (99,999% Sigma Aldrich) с концентрацией ацетата цинка 0,1, 0,3, 0,5 и 0,7 моль/л с использованием изопропанола (99, 97%, ГОСТ 9805-84) и моноэтаноламина (C_2H_7NO , CAS #141-43-5) в качестве растворителя и стабилизирующего агента соответственно. Используемые растворы готовились на шейкере орбитального вращения ЛАБ-ПУ-01 (скорость вращения 150 об/мин). Растворение проводилось, как при комнатной температуре, так и при нагреве до 50°C, что в некоторых случаях являлось наиболее значимым условием гомогенизации получаемых растворов. Время приготовления растворов варьировалось от 20 минут до 1 часа. Осаждение плёнок ZnO на подложку начиналось не позже 1 часа после приготовления растворов. В качестве подложек были выбраны микроскопные слайды с размерами 75x25x1мм. Раствор наносили на подложку, расположенную на специально разработанном столике ротора стандартной центрифуги. Скорость вращения центрифуги составляла 3600 об/мин, время вращения варьировалось от 3 до 5 секунд. После осаждения проводилась предварительная сушка плёнок

инфракрасным излучателем при температуре 80°C в течение 2 минут, затем полученные образцы помещались в муфельную печь на 10 - 15 минут при температуре 300°C для устранения остатков органических соединений, спиртов и воды. Окончательный отжиг проводился при температуре 400°C в течение часа.

Характеристика структуры образцов. Исследованы состав, структура и оптические свойства созданных пленок. Структура и состав осажденных пленок изучались на аналитическом сканирующем электронном микроскопе JSM-6490 LA (JEOL, Япония). Рентгеноструктурные исследования пленок были проведены на дифрактометре ДРОН-6. Исследование топографии пленок проводилось на атомно-силовом микроскопе JSPM-5200, J (Япония) полуконтактным методом. Спектры пропускания измерены на двухлучевых спектрофотометрах СФ-256 УВИ (190 – 1200) нм и СФ-256 БИК (1100 – 2500) нм. Спектры ФЛ пленок ZnO, измеренные при комнатной температуре при возбуждении HeCd на длине волны 325 нм

Размер частиц (D) можно рассчитать с помощью формулы Дебая-Шеррера:

$$D = \frac{0.9\lambda}{B \cos \theta},$$

где λ — длина волны рентгеновского излучения (1,5405 Å), θ — угол дифракции Брэгга, а B — полная ширина на половине максимума.

Для исследования фототока были сделаны структуры на кремнии. Для того чтобы сформировать рп - переход были использованы пластины кремния р-типа с удельным сопротивлением 10 Ом · см и ориентированной кристаллографической плоскостью (111). Тыльная сторона кремниевой пластины была покрыта сплошным слоем алюминия толщиной ~ 0,5 мкм и на лицевую сторону методом термического напыления была нанесена контактная сетка из золота.

Результаты и обсуждение. На рисунке 1 приведены результаты XRD анализа пленок ZnO, осажденных из растворов с варьируемой концентрацией ионов цинка.

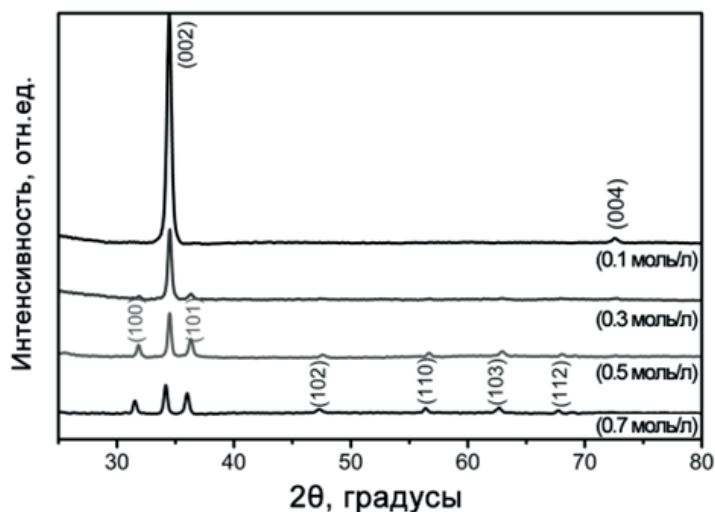


Рисунок 1 - Рентгеноструктурный анализ пленок ZnO, осажденных из растворов с варьируемой концентрацией ионов цинка

Пленка, покрытая из растворителя при $C=0,7$ моль/л, показывает рефлексы (100), (002), (101), (102), (110), (103), (112) ZnO. Рентгеновская дифрактограмма пленки ZnO, нанесенной из растворителя при $C=0,5$ моль/л, также показывает аналогичные результаты. Ориентированный по оси с рефлекс (002) пленок ZnO, нанесенных из растворителей с $C=0,3$ моль/л и $0,1$ моль/л, очень интенсивен по сравнению с другими пленками. Результаты XRD показывают, что пленки $C=0,5$ и $0,7$ моль/л и в меньшей степени пленка $C=0,3$ моль/л состоят из неупорядоченных кристаллитов, тогда как пленка $C=0,1$ моль/л имеет интенсивный пик (002), показывающий более очевидную преимущественную ориентацию [002]. Средние размеры кристаллитов пленок ZnO, осажденных с различной концентрацией ацетата цинка, показаны в таблице 1.

Таблица 1. Средний размер кристаллитов (нм) для пленок ZnO, оцененный по рентгенограммам.

C, моль/л	D, нм							
	(100)	(002)	(101)	(102)	(110)	(103)	(112)	(004)
0.1	-	24	-	-	-	-	-	29
0.3	19	29	16	-	-	-	-	-
0,5	31	44	35	17	27	21	22	-
0,7	38	45	37	20	32	18	21	-

На рисунке 2 (а, б) показаны спектры фотолюминесценции и пропускания тонких пленок ZnO. Данные по оптическому пропусканию были использованы для оценки ширины запрещенной зоны пленки ZnO E_g . E_g оценивалось по графику $(ahv)^2$ против hv , предполагая, что $(ahv)^2 \sim (hv - E_g)^2$, где a - коэффициент адсорбции, а hv - энергия фотона. Вставка на рисунке 2 б представляет собой соответствующий график Тауца. Было обнаружено, что E_g для всех образцов составляет $3,37 \pm 0,05$ эВ и не изменяется с увеличением концентрации раствора.

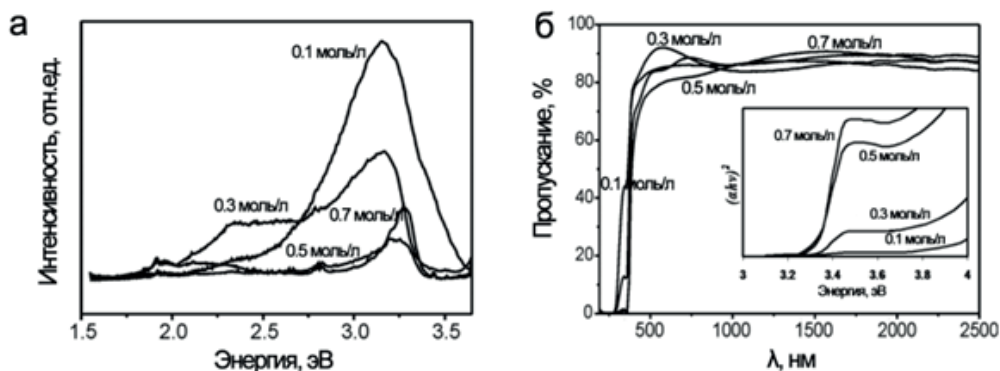


Рисунок 2 - Спектр фотолюминесценции (а) и пропускания (б) тонких пленок ZnO, выращенных на стекле в растворителе с различной концентрацией ацетата цинка (спектры тонких пленок ZnO зарегистрированы при комнатной температуре). На вставке представлен соответствующий график Тауца

Спектры ФЛ пленок ZnO, показывают, что пленки, покрытые из растворителя $C=0,5$ и $0,7$ моль/л, демонстрируют слабое спонтанное излучение при $3,26$ эВ, которое соответствует переходу из зоны в зону (рис. 2 а). Пленки, покрытые растворителем с концентрацией $C=0,3$ и $0,1$ моль/л, имеют очень интенсивную ФЛ, смещающуюся на $3,18$ и $3,14$ эВ соответственно. Это может указывать на вклад стимулированного излучения экситон-экситонного рассеяния и свидетельствовать о низкой концентрации дефектов рекомбинации и более высоком структурном совершенстве пленок.

На рисунке 3 (а, б, в, г) представлены изображения, полученные с помощью атомно-силовой микроскопии.

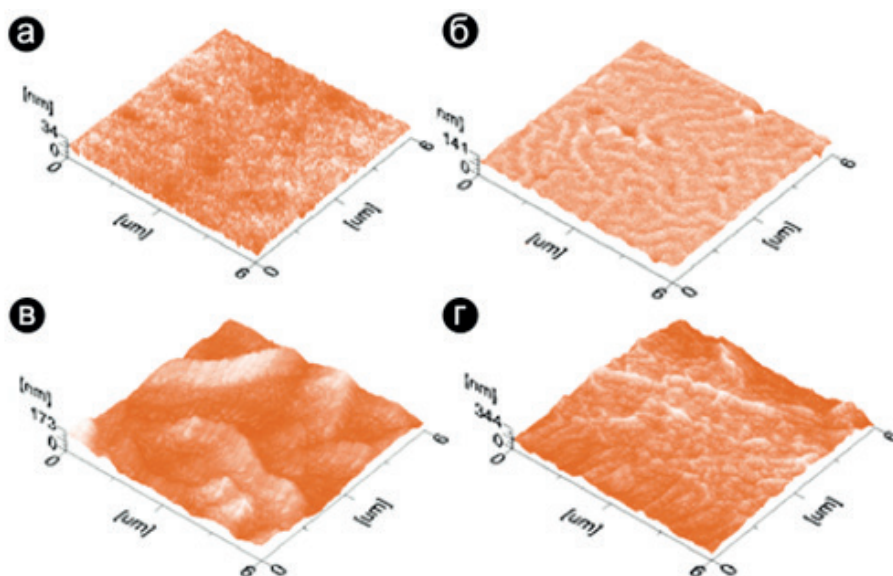


Рисунок 3 - АСМ-изображения при сканировании области 6×6 мкм² пленок ZnO нанесенных на стеклянную подложку при концентрации ацетата цинка в растворителе: а) $0,1$ моль/л; б) $0,3$ моль/л; в) $0,5$ моль/л; г) $0,7$ моль/л.

Для области сканирования 6×6 мкм² пленок среднее значение шероховатости пленок, выращенных при $0,1$ моль/л, составляет $3,42$ нм, $0,3$ моль/л - $9,53$, $0,5$ моль/л - $30,4$ нм и $48,5$ нм для $C=0,7$ моль/л соответственно. Увеличение гладкости пленок ZnO с увеличением концентрации ацетата цинка можно объяснить увеличением размера зерна, те же результаты были получены с помощью измерений рентгеновской дифракции. На рисунке 4 представлены вольт-амперные характеристики кремниевых структур на основе пленок ZnO в растворах с концентрацией ионов цинка $0,1$ и $0,7$ моль/л.

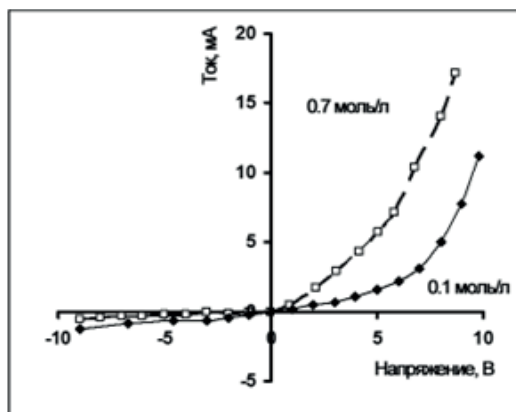


Рисунок 4 - Вольт-амперные характеристики кремниевых структур на основе пленок ZnO

Обе концентрации ионов цинка обладают определенными выпрямляющими свойствами. Прямой ток превышает обратный более чем на порядок при напряжении $U \sim 5$ В. Обратные токи при напряжении до 5 В не превышают $10\text{-}2$ mA/cm^2 при комнатной температуре. Однако структуры обладали большим последовательным сопротивлением (около $300\text{-}500$ Ohm) из-за малой толщины слоев ZnO.

На рисунке 5 представлена спектральная фоточувствительность структур, изготовленных при концентрации ионов цинка $0,1$ и $0,7$ моль/л в седиментационных пленкообразующих растворах ZnO. Установлено, что структура ZnO-Si с концентрацией ионов цинка $0,7$ моль/л обладала заметной фоточувствительностью в диапазоне длин волн от 600 до 1100 нм. Эта область является основной полосой поглощения для кремния и примесной полосой поглощения для ZnO. Таким образом, фоточувствительность обеспечивается за счет генерации светом электронно-дырочных пар в кремнии и их пространственного разделения в гетеропереходной области ZnO-Si из-за сильного встроенного электрического поля.

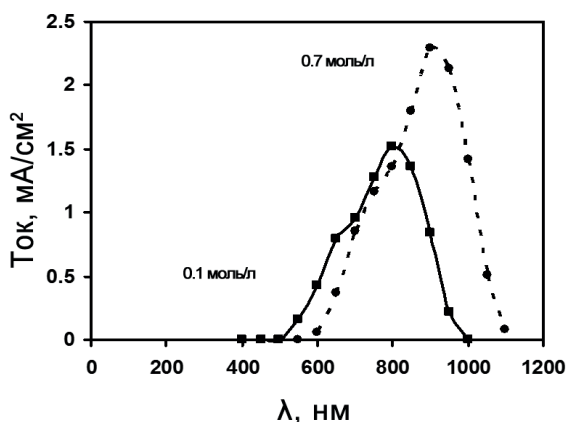


Рисунок 5 - Спектральные характеристики структур с ионами цинка концентрации $0,1$ и $0,7$ моль/л.

Как видно из рисунка 5, в спектральных характеристиках структуры ZnO-Si при снижении концентрации ионов цинка в пленке ZnO до 0,1 моль/л наблюдается сдвиг длинноволновой границы фотоэффекта в коротковолновую область. Уменьшение коэффициента собирания фотогенерированных носителей в этом случае объясняется уменьшением встроенного электрического поля из-за малой толщины пленки ZnO, а также, возможно, ее более высоким сопротивлением.

Отметим, что коэффициент собирания фотогенерированных носителей заряда структуры ZnO-Si 0,1 моль/л в коротковолновой (500-600 нм) полосе значительно выше, чем для структуры 0,7 моль/л. Это объясняется низкими рекомбинационными потерями на *pn*- переходе и указывает на более качественный интерфейс ZnO-Si.

Заключение. В работе проведено комплексное исследование оптических, структурных и морфологических свойств тонких пленок ZnO, синтезированных золь-гель методом из растворов ацетата цинка различной концентрации. Установлено, что варьирование концентрации прекурсора оказывает существенное влияние на кристалличность, морфологию поверхности, люминесцентные свойства и фоточувствительность плёнок.

Рентгенодифракционный анализ показал, что при низкой концентрации Zn^{2+} (0.1 моль/л) формируются плёнки с выраженной текстурой по оси [002], в то время как увеличение концентрации приводит к снижению кристалличности и укрупнению кристаллитов. Спектры фотолюминесценции подтвердили высокую степень структурного совершенства плёнок, полученных при низких концентрациях, и выявили корреляцию между изменением структуры и люминесцентными характеристиками. Атомно-силовая микроскопия показала рост шероховатости поверхности с увеличением содержания прекурсора.

Гетероструктуры ZnO-Si проявили фоточувствительность в диапазоне 500–1100 нм, причём образцы с концентрацией 0.7 моль/л демонстрировали более выраженный фотоотклик в длинноволновой области. Результаты подтверждают высокую эффективность золь-гель метода для формирования ZnO-плёнок с регулируемыми свойствами и перспективность их применения в оптоэлектронике.

Литература

Кляйн Л.С. (1987) Технология золь-гель для тонких пленок, волокон, преформ, электроники и специальных форм. — New Jersey: Патгерс, State University of New Jersey.

Зиновьев К.В. (1974) Синтез оксидных пленок из растворов и их использование в электронике. Электроника. — Т. 13. — С.27.

Разуваев Г.А., Грибов Б.Г., Домрачев Г.А. (1972) Металлоорганические соединения в электронике: Учебник. — М.: Наука.

Помогайло А.Д. (2000) Гибридный полимер-неорганический нанокомпозит. Успехи химии. — Т. 69. — С. 60–89.

Анисимов О.В. (2007) Электрические и газочувствительные характеристики полупроводниковых сенсоров на основе тонких пленок SnO₂. Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. — Томск: Сибирский физико-технический институт Томского гос. университета.

Симаков В., Ворошилов А., Гребенников А., Кучеренко Н., Якушева О., Кисин В. (2009) Идентификация газов с помощью количественного анализа зависимости проводимости от концентрации для сенсоров SnO₂. Sens. and Actuat. B. — Т. 137. — С. 456–461.

Рембеза Е.С. (2006) Структура и электрические свойства полупроводниковых металлооксидных

нанокompозитов при взаимодействии с газами. Автореф. дис. д-ра физ.-мат. наук. — Воронеж: Воронежский гос. университет.

Сунита М., Ганшьям К., Натал Р., Сатиндер С., Баджпай Р.П., Беди Р.К. (2002) Определение спирта в тонкой пленке оксида олова, полученной золь-гель методом. *Bull. Mater. Sci.* — Т. 25. — С. 231–234.

Рябцев С.В., Юкиш А.В., Ханго С.И., Юраков Ю.В.А., Шапошник А.В., Домашевская Е.П. (2008) Кинетика резистивного отклика тонких пленок SnO_{2-x} в газовой среде. *Физ. и технол. полупроводников.* — Т. 42. — С. 491–495.

Сюй Ч., Тамаки Дж., Миура Н., Ямазое Н. (1991) Влияние размера зерна на газовую чувствительность пористых элементов на основе SnO_2 . *Sens. and Actuat. B.* — Т. 3. — С. 147–155.

Адамян А.З., Адамян З.Н., Аротюнян В.М. (2006) Золь-гель технология получения тонких пленок, чувствительных к водороду. *Альтернативная энергетика и экология.* — Т. 40. — С. 50–55.

Мухамедшина Д.М., Мить К.А., Бейсенханов Н.Б., Дмитриева Е.А., Валитова И.В. (2007) Влияние плазменных обработок на микроструктуру и электрофизические свойства тонких пленок SnO_x , синтезированных магнетронным распылением и золь-гель технологий. *Сб. тез. 12-й Междунар. конф. по деф.-распозн., изм. и физике полупроводников.* – Berlin, Germany, — С. 159.

Карапатницкий И.А., Мить К.А., Мухамедшина Д.М., Байков Г.Г. (2000) Влияние обработки водородной плазмой на структуру и свойства тонких пленок оксида олова, полученных методом магнетронного распыления. *Труды 4-й Междунар. конф. по физике и применению тонких пленок.* — Shanghai, China. — Т. 4086. — С. 323.

Шривастава Р., Дживеди Р., Шривастава С.К. (1998) Влияние обработки плазмой кислорода, азота и водорода на толстопленочные газовые сенсоры на основе оксида олова, легированного палладием. *Физика полупроводниковых приборов.* – India: New Delhi: Издательский дом «Нароса». — С. 526–528.

Мухамедшина Д.М., Бейсенханов Н.Б., Мить К.А., Ботвин В.А., Валитова И.В., Дмитриева Е.А. (2006) Влияние плазменных обработок на свойства тонких пленок SnO_x . *Труды ИВТ, Междунар. к-т ИВТ.* — Т. 10. — С. 603–616.

Мухамедшина Д.М., Мить К.А., Бейсенханов Н.Б., Дмитриева Е.А., Валитова И.В. (2008) Влияние плазменных обработок на микроструктуру и электрофизические свойства тонких пленок SnO_x , синтезированных магнетронным распылением и золь-гель технологией. *Ж. матер. наук: Матер. по электр.* — Т. 19. — С. 382–387.

Ким Ю.-С., Тай В.-П., Шу С.-Дж. (2005) Влияние температуры предварительного нагрева на структурные и оптические свойства пленок ZnO , полученных золь-гель методом. *Тонкие твердые пленки.* — Т. 491. — С. 153–160.

References

Klein L.S. (1987) Sol-gel technology for thin films, fibers, preforms, electronics and special molds [Tekhnologiya zol'-gel' dlya tonkikh plenok, volokon, preform, elektroniki i spetsial'nykh form]. — New Jersey: Rutgers, The State University of New Jersey (in Russian).

Zinov'ev K.V. (1974). Synthesis of oxide films from solutions and their application in electronics [Sintez oksidnykh plenok iz rastvorov i ikh ispol'zovanie v elektronike]. *Elektronika.* — Vol. 13. — P. 27 (in Russian).

Razuvaev G.A., Gribov B.G., Domrachev G.A. (1972) Organometallic compounds in electronics: Textbook [Metalloorganicheskie soedineniya v elektronike: Uchebnik]. — Moscow: Nauka (in Russian).

Pomogailo A.D. (2000) Hybrid polymer–inorganic nanocomposite [Gibridnyi polimer–neorganicheski nanokompозit]. *Uspekhi Khimii.* — Vol. 69. — P. 60–89 (in Russian).

Anisimov O.V. (2007). Electrical and gas-sensitive characteristics of semiconductor sensors based on SnO_2 thin films [Elektricheskie i gazo-chuvstvitel'nye kharakteristiki poluprovodnikovyykh sensorov na osnove tonkikh plenok SnO_2]. *Abstract of Cand. Phys.-Math. Sci. Diss.* — Tomsk: Sibirskij Fiziko-Tekhnicheskij Institut, Tomsk State University (in Russian).

Simakov V., Voroshilov A., Grebennikov A., Kucherenko N., Yakusheva O., Kisin V. (2009) Gas identification using quantitative analysis of conductivity dependence on concentration for SnO_2 sensors

[Identifikatsiya gazov s pomoshch'yu kolichestvennogo analiza zavisimosti provodimosti ot kontsentratsii dlya sensorov SnO₂]. Sens. and Actuat. B. — Vol. 137. — P. 456–461 (in Russian).

Rembeza E.S. (2006) Struktura i elektricheskie svoystva poluprovodnikovyykh metalloksidnykh nanokompozitov pri vzaimodeystvii s gazami [Structure and electrical properties of semiconductor metal oxide nanocomposites in interaction with gases]. Abstract of Dr. Phys.-Math. Sci. Diss. — Voronezh: Voronezh State University (in Russian).

Sunita M., Ganshyam K., Natal R., Satinder S., Bajpai R.P., Bedi R.K. (2002) Alcohol detection in a tin oxide thin film prepared by the sol-gel method [Opredelenie spirta v tonkoi plenke oksida olova, poluchennoi zol'-gel' metodom]. Bull. Mater. Sci. — Vol. 25. — P. 231–234 (in Russian).

Ryabtsev S.V., Yukish A.V., Khango S.I., Yurakov Yu.V.A., Shaposhnik A.V., Domashevskaya E.P. (2008) Kinetics of resistive response of SnO_{2-x} thin films in a gas environment [Kinetika rezistivnogo otklika tonkikh plenok SnO_{2-x} v gazovoi srede]. Fizika i Tekhnologiya Poluprovodnikov. — Vol. 42. — P. 491–495 (in Russian).

Syuy Ch., Tamaki J., Miura N., Yamazoe N. (1991) Grain size effect on gas sensitivity of porous SnO₂-based elements [Vliyanie razmera zerna na gazovuyu chuvstvitel'nost' poristykh elementov na osnove SnO₂]. Sens. and Actuat. B. — Vol. 3. — P. 147–155 (in Russian).

Adamyan A.Z., Adamyan Z.N., Arotyunyan V.M. (2006) Sol-gel technology for preparing hydrogen-sensitive thin films [Zol'-gel' tekhnologiya polucheniya tonkikh plenok, chuvstvitel'nykh k vodorodu]. Al'ternativnaya Energetika i Ekologiya. — Vol. 40. — P. 50–55 (in Russian).

Mukhamedshina D.M., Mit' K.A., Beisenkhanov N.B., Dmitrieva E.A., Valitova I.V. (2007) Effect of plasma treatment on microstructure and electrophysical properties of SnO_x thin films synthesized by magnetron sputtering and sol-gel technology [Vliyanie plazmennykh obrabotok na mikrostrukturu i elektrofizicheskie svoystva tonkikh plenok SnO_x, sintezirovannykh magnetronnym raspyleniem i zol'-gel' tekhnologii]. Sb. tez. 12th Int. Conf. on Defect Recognition, Imaging and Physics of Semiconductors. — Berlin, Germany. — P. 159 (in Russian).

Karapatnitskii I.A., Mit' K.A., Mukhamedshina D.M., Baikov G.G. (2000) Effect of hydrogen plasma treatment on the structure and properties of tin oxide thin films prepared by magnetron sputtering [Vliyanie obrabotki vodorodnoi plazmoi na strukturu i svoystva tonkikh plenok oksida olova, poluchennykh metodom magnetronnogo raspyleniya]. Trudy 4th Int. Conf. po Fizike i Primeneniyu Tonkikh Plenok. — Shanghai, China. — Vol. 4086. — P. 323 (in Russian).

Shrivastava R., Dwivedi R., Shrivastava S.K. (1998) Effect of oxygen, nitrogen, and hydrogen plasma treatment on thick-film gas sensors based on palladium-doped tin oxide [Vliyanie obrabotki plazmoi kisloroda, azota i vodoroda na tolstoplenochnye gazovye sensory na osnove oksida olova, legirovannogo palladiem]. Fizika Poluprovodnikovyykh Priborov. — India: New Delhi: Narosa Publishing House. — P. 526–528 (in Russian).

Mukhamedshina D.M., Beisenkhanov N.B., Mit' K.A., Botvin V.A., Valitova I.V., Dmitrieva E.A. (2006) Effect of plasma treatments on the properties of SnO_x thin films [Vliyanie plazmennykh obrabotok na svoystva tonkikh plenok SnO_x]. Trudy IVT, Mezhdunar. Komitet IVT. — Vol. 10. — P. 603–616 (in Russian).

Mukhamedshina D.M., Mit' K.A., Beisenkhanov N.B., Dmitrieva E.A., Valitova I.V. (2008) Effect of plasma treatments on the microstructure and electrophysical properties of SnO_x thin films synthesized by magnetron sputtering and sol-gel technology [Vliyanie plazmennykh obrabotok na mikrostrukturu i elektrofizicheskie svoystva tonkikh plenok SnO_x, sintezirovannykh magnetronnym raspyleniem i zol'-gel' tekhnologii]. Zh. Mater. Nauk: Mater. po Elektronike. — Vol. 19. — P. 382–387 (in Russian).

Kim Yu.S., Tai V.-P., Shu S.-J. (2005) Effect of preheating temperature on structural and optical properties of ZnO films prepared by sol-gel method [Vliyanie temperatury predvaritel'nogo nagreva na strukturnye i opticheskie svoystva plenok ZnO, poluchennykh zol'-gel' metodom]. Thin Solid Films. — Vol. 491. — P. 153–160 (in Russian).

© N. Eghtesadi, S.S. Uzakbaeva, Z.K. Aimaganbetova, N.N. Zhanturina,
A.Z. Bekeshev, 2025.

K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan.

E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz

PREDICTION OF THE KINETIC PROPERTIES OF LOW-DENSITY POLYETHYLENE

Neda Eghtesadi — PhD, Senior lecturer, Petroleum Engineering Department, Heriot-Watt Campus – Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: N.Eghtesadi@hw.ac.uk, <https://orcid.org/0009-0007-6339-5272>;

Uzakbaeva Sanimai — 4th-year student by specialty 6B05301-Physics of K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: u.sanimai03@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0007-4075-691X>;

Aimaganbetova Zukhra — PhD, Associate Professor, docent of the Physics department of K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan; e-mail: zukhraaimaganbetova@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-8765-516X>;

Zhanturina Nurgul — PhD, Associate Professor, docent of the Physics department of K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9540-6334>;

Bekeshev Amirbek — candidate of physical and mathematical sciences, associated professor, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: amirbek2401@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7038-4631>.

Abstract. This article presents the results of kinetic property prediction for low-density polyethylene using the Netzsch Kinetics Neo software, based on differential scanning calorimetry (DSC) data. The kinetic prediction includes a review of thermoanalytical data for chemical processes, process behavior, and temperature optimization. A multi-reaction model approach was applied, incorporating several types of reactions: an n^{th} -order reaction, a diffusion-controlled reaction, an autocatalytic model, and the Avrami–Erofeev model. For each reaction, the activation energy and reaction order were determined, which define the heat flow under specific conditions. The DSC curve shows an endothermic peak at 118 °C, corresponding to the melting point of low-density polyethylene. The prediction of isothermal curves revealed behavior typical of processes governed by an autocatalytic or reaction-diffusion mechanism, where an initial induction period is followed by an increasing reaction rate, rapid heat release, and reaction completion. Isothermal lifetime simulations were conducted at temperatures

ranging from 10 to 160 °C for conversion degrees (α) from 0.02 to 0.8. Additionally, modeling of DSC curves under dynamic conditions at different heating rates (1–16 °C/min) produced DSC peaks that demonstrate the dependence of heat flow on heating rate. Analyzing adiabatic curves at different initial heating temperatures offers insights into the thermal runaway temperature and time, which are vital for assessing material performance in environments without heat loss.

Keywords: differential scanning calorimetry, Netzsch Kinetics Neo, reaction, activation energy, isothermal lifetime, adiabatic curves

***Acknowledgments.** The study was supported by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan under project IRN BR24992882 “Development of New Technologies for Processing Industrial Waste to Improve the Environmental Situation in the Region.”*

© Н. Эхтесади, С.С. Узакбаева, З.К. Аймаганбетова, Н.Н. Жантурина,
А.З. Бекешев, 2025.

Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан.

E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz

ТӨМЕН ТЫҒЫЗДЫҚТАҒЫ ПОЛИЭТИЛЕННІҢ КИНЕТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІНЕ БОЛЖАУ ЖАСАУ

Эхтесади Неда — PhD, аға оқытушы, Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университетінің Хериот-Уатт халықаралық факультетінің аға оқытушысы, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: N.Eghtesadi@hw.ac.uk, <https://orcid.org/0009-0007-6339-5272>;

Узакбаева Сәнімай — Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университетінің 6B05301-Физика білім беру бағдарламасының 2-курс студенті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: u.sanimai03@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0007-4075-691X>;

Аймаганбетова Зухра — PhD, Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университетінің физика кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: zukhra.aimaganbetova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8765-516X>;

Жантурина Нургул — PhD, Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университетінің физика кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9540-6334>;

Бекешев Амирбек — физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: amirbek2401@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7038-4631>.

Аннотация. Бұл мақалада төмен тығыздықтағы полиэтиленнің кинетикалық қасиеттерін Netzsch Kinetics Neo бағдарламасы арқылы болжау нәтижелері ұсынылған, ол үшін бастапқы дерек ретінде дифференциалды сканирлеуші калориметрия (DSC) мәліметтері пайдаланылды. Кинетикалық болжау химиялық процестердің термоаналитикалық деректерін, процесс мінез-құлқын және температураны оңтайландыруды қамтиды. Бірнеше реакция түрінен тұратын модельдік тәсіл: n-тәртіпті қарапайым реакция, диффузиямен шектелген реакция, автокаталитикалық модель және Аврами–Ерофеев моделі қолданылды. Әрбір



реакция үшін активация энергиясы мен реакция тәртібі нақтыланып, бұл мәндер белгілі бір жағдайларда жылу ағынын сипаттайтыны анықталды. DSC қисығында 118 °C температурада эндотермиялық шоқы байқалады, бұл төмен тығыздықтағы полиэтиленнің балку температурасына сәйкес келеді. Изотермиялық қисықтарды болжау автокаталитикалық немесе реакция-диффузиялық механизмге тән мінез-құлықты көрсетті: бастапқыда индукция кезеңі байқалып, кейін реакция жылдамдығы артады, жылдам жылу бөлу жүреді және реакция толық аяқталады. Изотермиялық жағдайда материалдың өмір сүру уақыты 10–160 °C температура аралығында, түрлену дәрежелері (α) 0.02-ден 0.8-ге дейінгі мәндер үшін модельденді. Сонымен қатар, әртүрлі қыздыру жылдамдығында (1–16 °C/мин) DSC қисықтарын модельдеу барысында жылу ағынының қыздыру жылдамдығына тәуелділігі көрініс тапты. Әртүрлі бастапқы қыздыру температураларындағы адиабаталық қисықтарды талдау термиялық тұрақсыздықтың температурасы мен уақыты жөнінде ақпарат береді. Бұл материалдарды жылу жоғалуы болмаған жағдайларда қолданғанда маңызды көрсеткіш болып табылады.

Түйін сөздер: дифференциалды сканирлеуші калориметрия, Netzsch Kinetics Neo, реакция, активация энергиясы, изотермиялық өмір сүру уақыты, адиабаталық қисықтар

© Н. Эхтесади, С.С. Узакбаева, З.К. Аймаганбетова, Н.Н. Жантурина,
А.З. Бекешев, 2025.

Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова,
Актобе, Казахстан.

E-mail: nzhanturnina@zhubanov.edu.kz

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ

Эхтесади Неда — PhD, старший преподаватель международного факультета Хериот-Уатт Актюбинского регионального университета им.К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: N.Eghtesadi@hw.ac.uk, <https://orcid.org/0009-0007-6339-5272>;

Узакбаева Санмай — студент 2-го курса образовательной программы 6B05301-Физика Актюбинского регионального университета им. К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: u.sanimai03@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0007-4075-691X>;

Аймаганбетова Зухра — PhD, ассоциированный профессор кафедры «Физика», Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: zukhra.aimaganbetova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8765-516X>;

Жантурина Нургул — PhD, ассоциированный профессор кафедры «Физика», Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: nzhanturnina@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9540-6334>;

Бекешев Амирбек — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актобе, Казахстан,
E-mail: amirbek2401@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7038-4631>.

Аннотация. В данной статье представлены результаты прогнозирования кинетических свойств полиэтилена низкой плотности с использованием программы

Netsch Kinetics Neo, при этом в качестве исходных данных использовались результаты дифференциальной сканирующей калориметрии (DSC). Кинетическое моделирование включает в себя анализ термоаналитических данных химических процессов, поведение процесса и оптимизацию температурного режима. Применён модельный подход, включающий несколько типов реакций: простая реакция n -го порядка, реакция с ограничением по диффузии, автокаталитическая модель и модель Авраами–Ерофеева. Для каждой реакции были определены энергия активации и порядок реакции, что позволяет описать тепловой поток в определённых условиях. На кривой DSC наблюдается эндотермический пик при температуре 118 °С, что соответствует температуре плавления полиэтилена низкой плотности. Прогнозирование изотермических кривых показало поведение, характерное для автокаталитического или реакционно-диффузионного механизма: первоначально наблюдается индукционный период, затем происходит ускорение реакции, интенсивное выделение тепла и завершение реакции. В изотермических условиях смоделировано время жизни материала в температурном диапазоне 10–160 °С при степенях превращения (α) от 0.02 до 0.8. Кроме того, при моделировании кривых DSC при различных скоростях нагрева (1–16 °С/мин) была выявлена зависимость теплового потока от скорости нагрева. Анализ адиабатических кривых при различных начальных температурах нагрева предоставляет информацию о температуре и времени теплового разгона, что является важным показателем при использовании материалов в условиях отсутствия теплоотдачи.

Ключевые слова: дифференциальная сканирующая калориметрия, Netzsch Kinetics Neo, реакция, энергия активации, изотермическое время жизни, адиабатические кривые

Introduction. Polyethylene, as one of the most widely used thermoplastics, plays a critical role across a broad range of industries due to its favorable mechanical properties and chemical stability. However, its thermal decomposition behavior under different heating regimes remains a key concern, particularly in safety-critical applications such as polymer processing, transportation, and storage (Hong et al., 2022). A detailed understanding of its decomposition kinetics is essential for predicting behavior under thermal stress and for designing appropriate thermal hazard mitigation strategies (Li et al., 2012).

Many works are devoted to the investigation of polyethylene. The complex morphology of low-density polyethylene influences the crystallization kinetics and dynamic mechanical properties of the polymers, which are key to the processability and applications (Saalwächter et al., 2023). It is very important to conduct research in the field of crystallization kinetics, crystallinity, lifetime, and thermal properties of this polymer (Poh et al., 2022). Understanding the thermal stability and decomposition mechanisms of polyethylene is essential not only for optimizing manufacturing conditions but also for ensuring safe application in environments where heat exposure is inevitable. Thermal analysis methods play a critical role in this context, with Differential Scanning Calorimetry (DSC) being one of the most widely used techniques. DSC

provides insights into thermal transitions, such as melting and crystallization, as well as more complex phenomena like exothermic degradation reactions. By tracking heat flow as a function of temperature or time, DSC enables the investigation of polymer stability and decomposition kinetics (Alonso et al., 2022).

A particularly powerful application of DSC is under adiabatic conditions, where no heat is lost to the environment. This setup closely simulates real-life scenarios where heat generated by an exothermic reaction is retained within the system, potentially leading to thermal runaway. Adiabatic DSC curves are valuable for identifying key safety parameters, such as the Self-Accelerating Decomposition Temperature (SADT) and the induction time before decomposition onset (Lynch et al., 2024).

In addition to thermal profiling, kinetic analysis is critical for modeling the complex reaction pathways involved in polymer decomposition. Multistep kinetic models, incorporating various reaction mechanisms such as *n*th-order reactions, diffusion-limited steps, autocatalytic processes, and phase transformations, offer a comprehensive approach to describing the thermal degradation behavior of polyethylene. These models help in quantifying important parameters like activation energy, reaction order, and rate constants, providing deeper insight into the material's thermal response under different heating regimes.

Kinetic analysis helps to improve safety standards for handling and storage of energetic materials, predict the behavior of materials under influence of different conditions. Sufficient longevity and good thermal stability are therefore essential (Harter et al., 2022). One of the key importances of this method is the prediction of the material degradation for specific temperature and time conditions. Knowledge of the thermal stability and understanding the decomposition process in the solid state allows for optimizing its storage conditions (Manic et al., 2020)

The study of the kinetics of isothermal crystallization of polyethylene is an active area of research. Numerous studies have been devoted to determining the kinetic characteristics of various types of polyethylene. For example, Patel conducted an extensive investigation of the crystallization kinetics of high-density and linear low-density polyethylene, analyzing changes in the obtained kinetic data depending on the conditions (Patel et al., 2012). These studies showed that the rate and mechanism of polyethylene crystallization strongly depend on temperature, molecular structure, and the presence of comonomers.

Modern methods of thermokinetic analysis not only make it possible to study thermal decomposition and oxidative degradation processes but also to predict the behavior of materials under various temperature conditions. One of the effective tools in this area is the Netzsch Kinetics Neo software, which enables the modeling of reaction kinetics based on thermogravimetric analysis (TGA) data.

The application of kinetic analysis using software such as Kinetics Neo allows researchers not only to explore the fundamental aspects of polyethylene (PE) crystallization but also to address practical challenges. For instance, the work (Harter et al., 2022) demonstrates how isothermal crystallization data of high-density polyethylene (HDPE), obtained via DSC and analyzed using Kinetics Neo, can be employed to

optimize injection molding parameters, highlighting the practical relevance of such analyses (Harter et al., 2022; Manic et al., 2020).

In addition to studies on neat polyethylene, considerable attention is given to modified systems, such as PE-based nanocomposites (Khan et al., 2023). For example, the study (Kourtidou et al., 2021) investigated short-chain branched polyethylene (SCB-PE) modified with graphene nanoplatelets (GNPs). In this work, the (non-isothermal) crystallization behavior and nanomechanical properties of these nanocomposites were examined using DSC. The authors demonstrated that pre-treatment by ball milling improves filler dispersion, significantly affecting the crystallization process and leading to substantial enhancement of the mechanical properties of the composites. This example emphasizes how various factors, including composition and processing methods, can influence the crystallization behavior of polyethylene-based materials.

In another study (Tarani et al., 2024), HDPE-based composites containing tannic acid (TA) were developed. The authors employed DSC to investigate the non-isothermal crystallization kinetics using the Friedman and Vyazovkin methods, as well as the Sbirrazzuoli model. It was shown that the addition of TA influences the crystallization behavior of HDPE: lower TA concentrations promote nucleation, while excessive TA disrupts the ordering of polymer chains and reduces the degree of crystallinity. Furthermore, the addition of TA was found to accelerate the crystallization process of HDPE, as evidenced by a decrease in activation energy values. This study highlights the importance of examining the impact of various additives on the crystallization kinetics of polyethylene and demonstrates the applicability of non-isothermal analytical methods for understanding complex mechanisms.

The decomposition behavior of the polymer was also studied using isothermal and dynamic methods. The isothermal method involves maintaining the sample at a constant temperature over time, allowing precise observation of reaction kinetics under stable thermal conditions. This approach is particularly effective for studying long-term stability, slow degradation processes, and reaction mechanisms with minimal interference from temperature gradients. In contrast, the dynamic method is applied at a controlled heating rate to the sample, capturing the material's thermal response as temperature increases continuously.

This study aims to characterize the thermal decomposition behavior of polyethylene using a combination of the above-mentioned modeling methods. The goal is to better understand the mechanisms governing its thermal degradation and to assess the implications for safety and process control in thermal environments.

Materials and methods

Dynamic Differential Scanning Calorimetry (DSC) analysis was performed using a DSC 300 Caliris® Classic instrument (NETZSCH, Germany) under a nitrogen atmosphere with a flow rate of 40 mL/min to prevent oxidative degradation.

Low-density polyethylene (LDPE) grains supplied by Kazanorgsintez (Russia) were used as the test material. Samples were accurately weighed using a RADWAG® five-digit analytical balance and sealed in NETZSCH Aluminum Concavus® pans using a NETZSCH sealing press. To prevent pressure buildup during heating, a small pinhole

was made in each pan lid. An empty aluminum pan of the same type was used as a reference.

Samples were heated from 30°C to 300°C at a scanning rate of 8K/min. All measurements were conducted under consistent conditions, and thermal events such as melting, crystallization, and degradation were recorded during the heating cycle. NETZSCH Proteus -80(Germany) and NETZSCH kinetics-Neo software (Germany) were used to analyze the collected data and thermal behavior prediction.

Results and discussion

The following graph presents the prediction result using the Multiple Step method, where the X-axis represents DSC (mW/mg) and the Y-axis represents time (minutes)

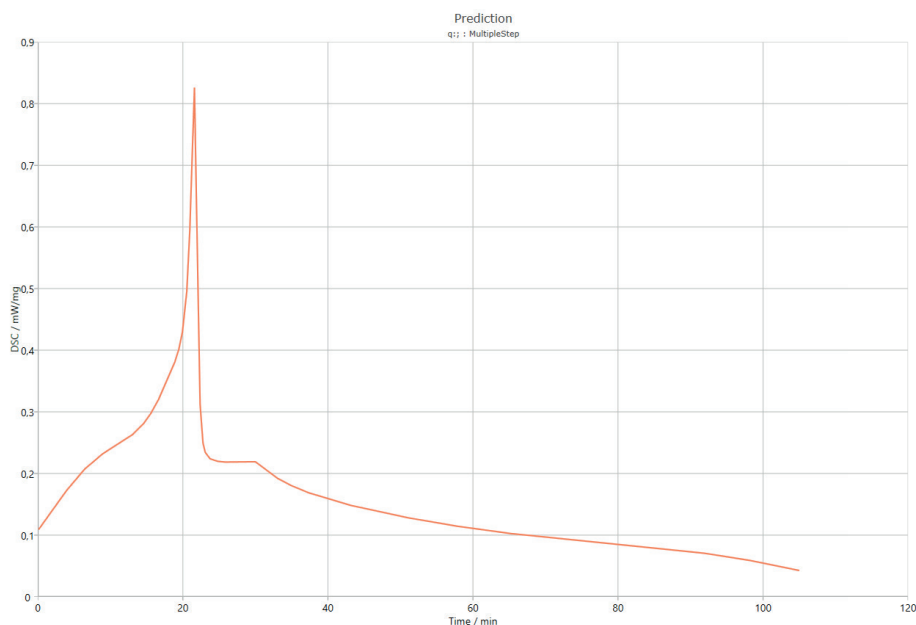


Figure 1. Time-dependent behavior of DSC

The presented graph shows the predicted thermal behavior of the sample using the Multiple Step kinetic model based on DSC data. A sharp exothermic peak is observed at approximately 20 minutes, indicating a rapid and intense reaction phase. The steep rise and immediate drop in the DSC signal suggest that the primary reaction occurs quickly and is highly exothermic, followed by a gradual decline in the DSC signal, suggesting the presence of slower secondary processes such as residue decomposition or delayed structural relaxation.

The shape of the curve aligns well with a reaction mechanism involving multiple overlapping stages, such as initial n -th order reaction kinetics (F_n), diffusion-limited steps (D_3), autocatalytic effects (A_n), and phase transformation processes (C_n). This supports the application of a multistep kinetic model to accurately describe the material's thermal decomposition behavior.

The shape of the curve corresponds to the multi-step reaction model consisting of reactions of F_n , D_3 , A_n , and C_n .

1. F_n — an n-is order reaction, where the reaction rate is proportional to the degree of conversion.

The reaction corresponds to the formula.

$$da/dt = k \cdot (1-\alpha)^n$$

Where α is the degree of conversion, k is the rate constant, and n is the reaction order. According to the selected model, the reaction order corresponds to 4.3.

2. **D3 — Diffusion model (3D: Jander model).**

This model describes diffusion-controlled processes in solid materials (Wang et al., 2022). The reaction equation is:

$$[1 - (1 - \alpha)^{1/3}]^2 = kt$$

Diffusion of reactants occurs through the reaction product. This stage indicates that the reaction proceeds with the formation of a product that slows down further reaction progress (e.g., hydroperoxides or stable radicals).

3. A_n — **Autocatalytic reaction model** (Zhao et al., 2023)

$$da/dt = k \cdot \alpha^m \cdot (1-\alpha)^n$$

According to the equation, the reaction starts slowly, then accelerates sharply, and finally slows down.

4. C_{nm} — **Phase growth model (Avrami–Erofeev)** (Duan et al., 2022)

Ultimately, new phases may form in solid materials.

$$\alpha = 1 - e^{[-(kt)^n]}$$

Structured domains may form in the process. The reaction follows a complex mechanism that may involve diffusion limitations, an autocatalytic effect, and phase transformations.

Kinetic parameters of the DSC of polyethylene for each step (reaction) are presented in the following table.

Table 1. Kinetic parameters derived from DSC measurements of polyethylene

	A→B (F_n)	C→D (D_3)	E→F (A_n)	G→H (C_{nm})
Activation energy (kcal/mole)	26.416	79.144	20.434	88.554
Pre-exponential factor	1.185	3.69	-0.788	9.7
Reaction order	4.2		1.032	1.522
Contribution	0.48	0.211	0.219	0.09

Each step is characterized by its activation energy, pre-exponential factor, and reaction order, indicating the complexity of the overall thermal degradation process. The activation energies range from 20.434 kcal/mol (E→F) to 88.554 kcal/mol (G→H), suggesting varying energy barriers associated with different decomposition mechanisms. The highest contribution to the overall process (48%) comes from the A→B (F_n) step, which also exhibits the highest reaction order (4.2), indicative of a complex, multi-molecular reaction. The total apparent activation energy for the polyethylene decomposition is calculated as 41.82 kcal/mol (174.97 kJ/mol), reflecting the weighted contribution of all reaction steps.

Forecast by isothermal curves

On the DSC isothermal curves taken at temperatures from 10 to 160 degrees (Figure 2), different process intensities are observed in the first 3 minutes.

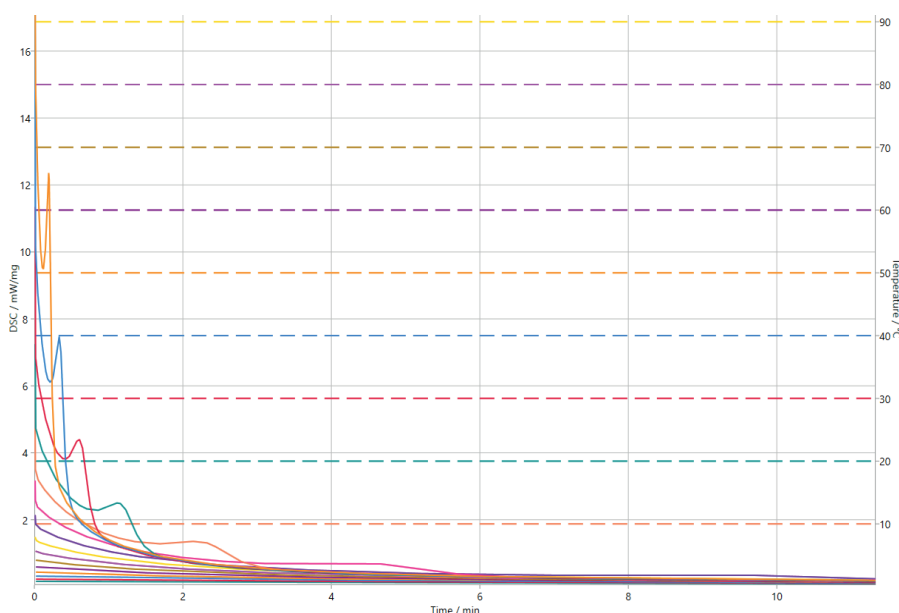


Figure 2. Isothermal curves at various temperatures

As can be seen from the program data, the lower the temperature, the faster the reaction. At temperatures from 10 to 100 degrees Celsius, the DSC isothermal curves do not demonstrate a pronounced exothermic peak, which indicates a slow or insignificant reaction or the reaction rate is so low that it cannot be recorded. Thus, to select the mode of heat treatment of the polymer, polyethylene, you should select temperature values from 100 degrees.

Sharp exothermic peaks appear from 110 degrees. The maximum value of the thermal effect is observed at 160 degrees and is equal to 12.3 mW/mg 0.1 minutes after the start of the reaction, respectively, for the peaks at 150, 140, 130, 120 and 110 degrees these values are equal to - 7.4 mW/mg, 0.3 min., 4.6 mW/mg, 06 min., 2.5 mW/mg, 1.4 min., 1.3 mW/mg, 2.2 min., 0.67 mW/mg, 4.6 min.

That is the time of completion of the complete melting of the sample at 160 degrees. At a temperature of 130 °C, a pronounced exothermic peak is observed with a maximum at 2.5 minutes after reaching isothermal conditions. The maximum thermal power is 1.143 mW/mg, which indicates a high intensity of the ongoing exothermic process (probably a chemical reaction or curing).

The higher the temperature, the faster the crystallization process.

After the peak, the DSC signal drops sharply and reaches a minimum value of 3 minutes, which indicates a rapid progression of the main stage of the reaction. Then the curve gradually levels out, which indicates a slowdown in the reaction and reaching a state close to completion.

Such kinetics is typical for processes occurring by an autocatalytic or reaction-diffusion mechanism, where at the initial stage an induction period with an increasing rate is observed, followed by rapid heat release and completion of the reaction.

Isothermal lifetime

Based on the kinetic model developed using the NETZSCH Kinetics Neo software, an isothermal simulation of the material’s lifetime was conducted at various temperatures ranging from 10 °C to 160 °C, for degrees of conversion from $\alpha = 0.02$ to 0.8 (Figure 3).

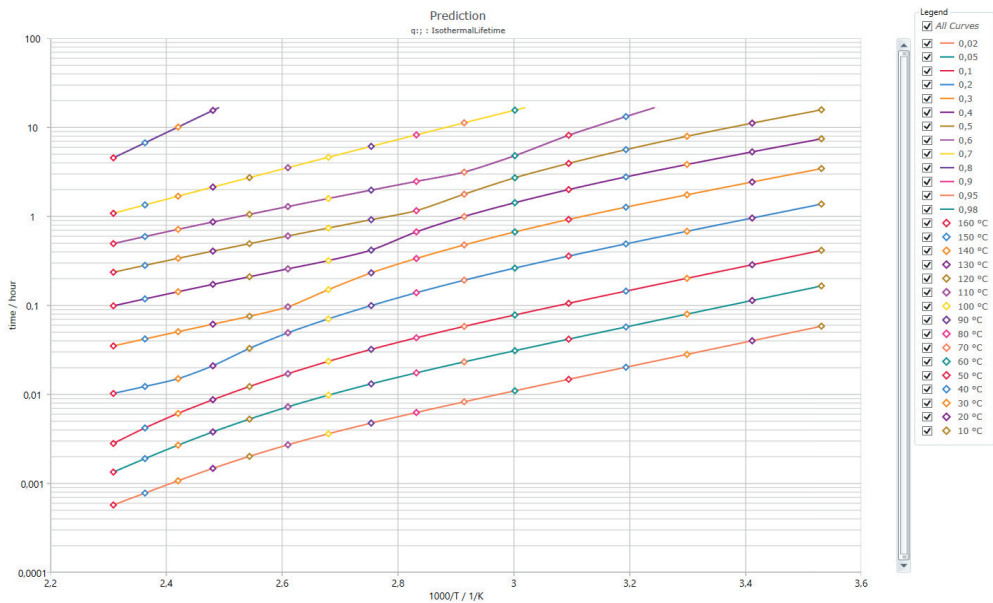


Figure 3. Lifetime curves of polyethylene at different degradation degrees and various temperatures

Here, $\alpha = 0.02$ corresponds to the onset of material degradation, $\alpha = 0.05$ to the loss of functional properties, and $\alpha = 0.8$ to the complete degradation of the material.

The following table shows the time required (in hours) to reach each degree of conversion at different temperatures.



Table 2. Time required to reach the degree of conversion at different temperatures

Temp/°C/ Conversion degree (α)	0,02	0,05	0,10	0,20	0,30	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80
160,0	0,001	0,001	0,003	0,010	0,035	0,099	0,236	0,496	1,086	4,561
150,0	0,001	0,002	0,004	0,012	0,042	0,119	0,282	0,595	1,349	6,723
140,0	0,001	0,003	0,006	0,015	0,051	0,143	0,339	0,717	1,691	10,116
130,0	0,001	0,004	0,009	0,021	0,062	0,173	0,409	0,868	2,139	15,561
120,0	0,002	0,005	0,012	0,033	0,076	0,210	0,495	1,057	2,734	
110,0	0,003	0,007	0,017	0,049	0,097	0,258	0,604	1,293	3,535	
100,0	0,004	0,010	0,024	0,071	0,151	0,320	0,742	1,593	4,626	
90,0	0,005	0,013	0,032	0,100	0,233	0,419	0,921	1,978	6,138	
80,0	0,006	0,017	0,043	0,139	0,337	0,672	1,163	2,479	8,261	

The thermal stability of the material was evaluated through isothermal lifetime simulations across a wide temperature range (10°C to 160°C), and the results demonstrate a pronounced temperature dependence of the degradation kinetics. As shown in the figure, the lifetime of the material decreases exponentially with increasing temperature, confirming the Arrhenius-type behavior typically observed in thermally induced degradation processes.

At low temperatures (10–50 °C), the material exhibits relatively long lifetimes for low degrees of conversion. For example, at 10°C, the time required to reach $\alpha = 0.02$ is 0.059 hours, and for $\alpha = 0.05$, it is 0.166 hours. These values correspond to the early onset of degradation and the point at which material properties are notably diminished. The time required for these transitions rapidly decreases as temperature increases: from 9 minutes to 2.5 minutes between 10–50 °C, and further down to 3–25 seconds in the 110–160 °C range. Full degradation ($\alpha = 0.8$) is achieved in just 4.5 hours at 160 °C, while significantly longer times are observed at lower temperatures—15 hours at 130 °C, 10 hours at 140 °C, and 6 hours at 150 °C.

The isothermal lifetime prediction curves in the figure confirm the strong temperature–time correlation. Each curve corresponds to a specific degree of conversion (from $\alpha = 0.02$ to $\alpha = 0.98$), and all show a steep decline in lifetime with increasing temperature. This trend is consistent with the kinetic model's prediction of exponential degradation behavior: the higher the temperature, the faster the degradation occurs.

An especially notable feature in the figure is the appearance of a lifetime minimum of around 640 °C, observed when projecting a total exposure time of 500,000 minutes. This anomaly may suggest a secondary degradation mechanism, such as thermal breakdown with the formation of volatile compounds or pyrolysis, leading to an endothermic effect in the material. As the predicted exposure time is reduced to 100 minutes, this minimum shifts to around 590 °C, reinforcing the concept of temperature–time coupling, where shorter desired lifespans shift thermal instability to lower temperatures.

This behavior exemplifies a fundamental principle in decomposition kinetics:

The longer a material is expected to remain stable, the lower the temperature must

be to ensure its structural integrity. Conversely, even slight temperature increases can dramatically reduce material lifespan if long-term stability is not managed.

Isothermal modulated

The following graph illustrates a modulated isothermal DSC prediction in the temperature range of approximately 119.1 °C to 121 °C.

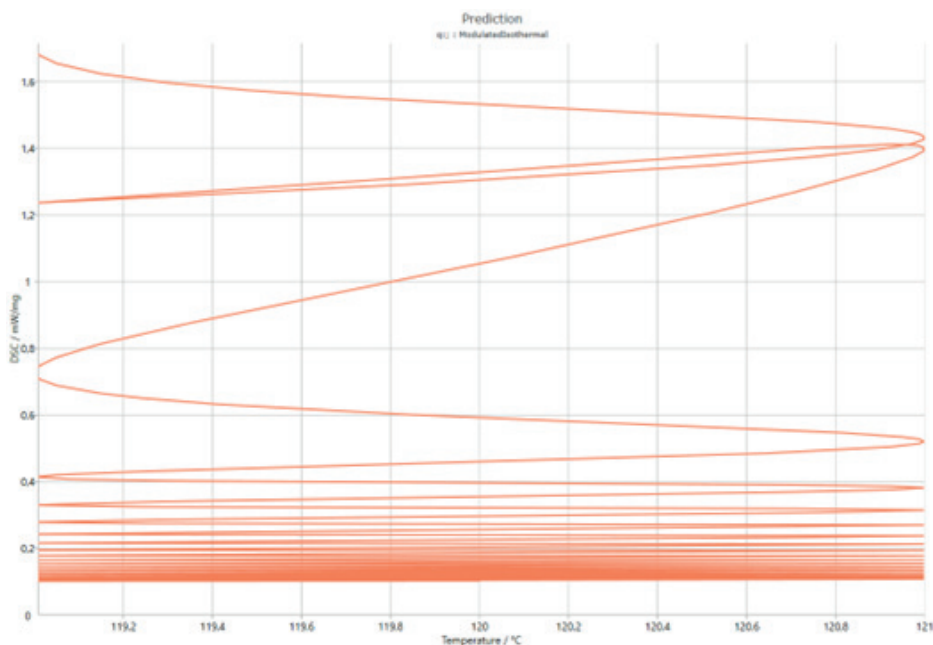


Figure 4. Modulated isothermal DSC prediction

The data reveal distinct oscillatory patterns characteristic of modulated DSC, capturing the dynamic thermal behavior of the material under tightly controlled isothermal conditions.

At lower temperatures (up to ~50 °C), the response remains sinusoidal with low-amplitude fluctuations in the DSC signal (0.08–0.45 mW/mg), indicating relatively stable, reversible thermal processes. However, around 100 °C, this regularity is disrupted, and the heat flow range broadens to approximately 2 mW/mg, suggesting the onset of slower kinetic activity or overlapping transitions. At temperatures beyond 150 °C (not shown here), the amplitude of temperature modulation reportedly decreases, while the DSC response may reach values as high as 18 mW/mg, indicating more intense thermal activity such as degradation.

Within the displayed temperature window (119.1–121 °C), the widening of curves and increasing amplitude, up to ~1.6 mW/mg, suggest nonlinear behavior, possibly due to structural changes or relaxation phase. In contrast, the dense clustering of lower-amplitude curves (~0.2 mW/mg) reflects thermally stable regions with minimal energy exchange.

At lower temperatures (up to ~50 °C), the response remains sinusoidal with low-

amplitude fluctuations in the DSC signal (0.08–0.45 mW/mg), indicating relatively stable, reversible thermal processes. However, around 100 °C, this regularity is disrupted, and the heat flow range broadens to approximately 2 mW/mg, suggesting the onset of slower kinetic activity or overlapping transitions. At temperatures beyond 150 °C (not shown here), the amplitude of temperature modulation reportedly decreases, while the DSC response may reach values as high as 18 mW/mg, indicating more intense thermal activity such as degradation.

Within the displayed temperature window (119.1–121 °C), the widening of curves and increasing amplitude, up to ~1.6 mW/mg, suggest nonlinear behavior, possibly due to structural changes or relaxation phase. In contrast, the dense clustering of lower-amplitude curves (~0.2 mW/mg) reflects thermally stable regions with minimal energy exchange.

Forecast by dynamic curves

The presented DSC data (Figure 5) illustrate the thermal decomposition behavior of polyethylene under dynamic heating conditions, with heating rates ranging from 1 to 16 K/min. The results demonstrate a strong dependence of thermal reactivity on the applied heating rate.

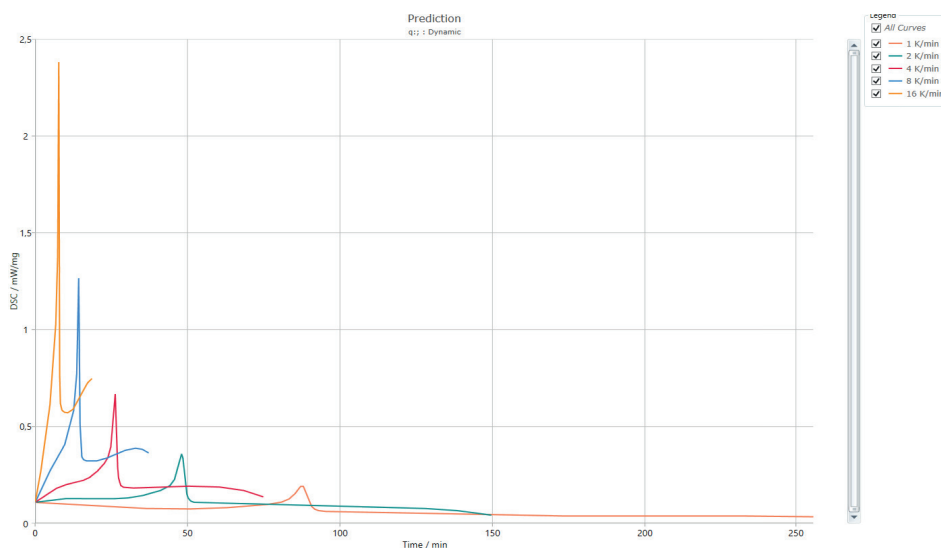


Figure 5. DSC data in the dynamic regime

As the heating rate increases, a shift in peak position and amplitude is observed.

At the lowest heating rate of 1 K/min, the decomposition peak appears at 87 minutes with a relatively low heat flow of 0.19 mW/mg. In contrast, at the highest heating rate of 16 K/min, the peak shifts dramatically to 7.7 minutes, with a significantly higher amplitude of 2.3 mW/mg.

This pronounced shift highlights the kinetic nature of the decomposition process, where increased heating rates lead to a more rapid accumulation of thermal energy, thus accelerating the reaction onset and intensifying the exothermic response.

The table data confirm the thermal shift as the onset temperature increases from 83.7 K at 1 K/min to 99 K at 8 K/min and drops slightly at 16 K/min to 78.4 K, possibly due to overlapping processes or heat transfer limitations. Similarly, the end temperature of the decomposition reaction expands significantly at higher heating rates, from 91.3 K at 1 K/min to 140.8 K at 16 K/min. These changes reflect the non-equilibrium nature of dynamic heating and the limited time for heat dissipation, leading to apparent shifts in the reaction interval with increasing β (heating rate).

Table 2. Onset and end temperatures of reactions

Heating rate (K/min)	Reaction Onset temperature (K)	Reaction End temperature (K)
16	78,4	140,8
8	99	123
4	90,4	110,8
2	91,6	100,8
1	83,7	91,3

Adiabatic prediction

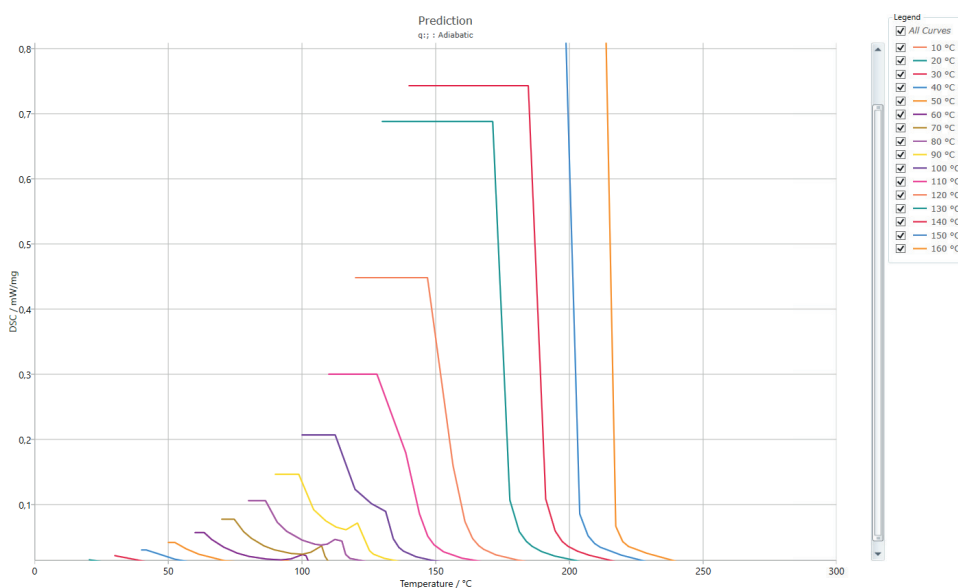


Figure 6. Adiabatic DSC Curves at Varying Initial Temperatures (10°C to 160°C)

The graph shows that as the initial temperature increases, the induction time — the period before observable heat release begins — decreases significantly. This suggests that higher temperatures lower the activation energy barrier for the decomposition reaction, accelerating the onset of self-heating. This behavior is in agreement with autocatalytic thermal decomposition, where the reaction products or intermediates enhance the rate of further reaction.

The system exhibits a strong temperature dependence, indicative of Arrhenius-type

kinetics. The exothermic reaction, likely involving radical chain mechanisms common in polymeric oxidation, becomes increasingly vigorous with temperature, resulting in earlier and sharper heat evolution peaks.

As temperature increases, the rate of heat generation surpasses the rate of heat loss, leading to an uncontrolled temperature rise in an adiabatic environment. This phenomenon poses a serious safety hazard, particularly in industrial-scale polymer processing or storage.

From the adiabatic temperature-time profiles, a critical threshold is evident: around 80°C, a rapid rise in heat flux initiates, marking the onset of self-accelerating decomposition. This aligns with the concept of the Self-Accelerating Decomposition Temperature (SADT), which is a key parameter in the hazard evaluation of reactive materials.

Furthermore, starting from an initial temperature of 120°C, the curves show a plateau or diminished change in thermal behavior, suggesting that the major exothermic reactions have been completed. Beyond this point, thermal stability is regained, and no further chemical transformations significantly contribute to the heat output. This can be interpreted as the system reaching thermal and chemical exhaustion — the depletion of reactive species or the formation of a thermally stable residue.

Conclusion. The complex morphology of low-density polyethylene affects the crystallization kinetics and the dynamic mechanical properties of the polymer, which are important for its processability and applications. Therefore, it is very important to conduct research in the field of crystallization kinetics, crystallinity, lifetime, and thermal properties of this polymer. A multi-reaction model approach was applied to DSC data in the Netzsch Kinetics Neo program, incorporating several types of reactions: an *n*th-order reaction, a diffusion-controlled reaction, an autocatalytic model, and the Avrami–Erofeev model. The total activation energy obtained from the simulation is 41.82 kcal/mol or 174.97 kJ/mol. The DSC curve shows an endothermic peak at 118 °C, corresponding to the melting point of low-density polyethylene.

The prediction of isothermal curves revealed behavior typical for processes governed by autocatalytic or reaction-diffusion mechanisms, where an initial induction period is followed by an increase in the reaction rate, rapid heat release, and completion of the reaction. The isothermal calculation showed that complete degradation of the material is reached in 4.5 hours at 160 °C. At 130, 140, and 150 °C, the corresponding times are 15, 10, and 6 hours. At 10 °C, the material reaches a conversion degree of 0.02 in 0.059 hours and 0.05 in 0.166 hours. This confirms an exponential dependence of the reaction rate on temperature. Modeling of DSC curves at different heating rates (1–16 °C/min) under dynamic conditions showed that the decomposition reaction accelerates with increasing temperature, which is consistent with the mechanism of autocatalytic degradation of polyethylene.

According to the adiabatic prediction, it was found that the higher the starting temperature, the less time is required for the system to reach the maximum heat release — that is, the beginning of decomposition under adiabatic conditions. The maximum power (heat flow) shifts toward higher temperatures. The starting temperature of

thermal runaway was shown to be around 800 °C. These findings highlight the practical value of kinetic modeling and prediction, as they provide critical insights into the thermal behavior and stability of polymers. Such information is essential for optimizing processing conditions, enhancing material safety, and extending the service life of polymer-based products in thermal environments.

References

Alonso, Alain, David Lázaro, Mariano Lázaro and Daniel Alvear (2022) Self-heating evaluation on thermal analysis of polymethyl methacrylate (PMMA) and linear low-density polyethylene (LLDPE). *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 147:10067–10081. (in Eng.)

Congwen Duan C., Su Zh., Tian Y., Fu D., Zhang Y., Lv W., Zhang J., Hu Y. (2022) Mechanochemical assisted hydrogenation of Mg-CNTs-Ni: kinetics modeling and reaction mechanism. *Chemical Engineering Journal*, 14: 136059. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.136059> (in Eng.)

Harter Alexander G., Thomas M. Klapötke, Jasmin T. Lechner and Jörg Stierstorfer (2022) Kinetic Predictions Concerning the Long-Term Stability of TKX-50 and Other Common Explosives Using the NETZSCH Kinetics Neo Software. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 47: e202200031. (in Eng.)

Hong S.-I., L.-F. Wang and J.-W. Rhim (2022) Preparation and characterization of nanoclays-incorporated polyethylene/thermoplastic starch composite films with antimicrobial activity. *Food Packaging and Shelf Life*, 31: 100784. DOI:10.1016/j.fpsl.2021.100784 (in Eng.)

Khan W-S., Md Bahar M-K., Mazhar H., Shehzad F., Al-Harathi M-A. (2023) Recent advances in nitride-filled polyethylene nanocomposites. *Advanced Composites and Hybrid Materials*, 6:222. DOI : <https://doi.org/10.1007/s42114-023-00802-5> (in Eng.)

Kourtidou D., E. Tarani, M. Papageorgiou, K. Chrissafis and C.D. Papaspyrides (2021) Effect of ball milling on the mechanical properties and crystallization of graphene nanoplatelets reinforced short chain branched-polyethylene. *Journal of Applied Polymer Science*, 138(35): e50874. DOI:10.1002/app.50874 (in Eng.)

Li S.-C., B. Li and X.-M. Qin (2012) Properties of LLDPE Film Modified by LDPE. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 51(3):201–206. DOI:10.1080/03602559.2011.644485 (in Eng.)

Lynch Jennifer M., Raquel N. Corniuk, Kayla C. Brignac, Melissa R. Jung, Kristine Sellona, Joelle Marchiani and Wanda Weatherford (2024) Differential scanning calorimetry (DSC): An important tool for polymer identification and characterization of plastic marine debris. *Environmental Pollution*, 346:123607. (in Eng.)

Manić N, Janković B. and Dodevski V (2020) Model-free and model-based kinetic analysis of Poplar fluff (*Populus alba*) pyrolysis process under dynamic conditions. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 143: 3419–3438. (in Eng.)

Patel, R. M. (2012) Crystallization kinetics modeling of high density and linear low density polyethylene resins. *Journal of Applied Polymer Science*, 124(2):1542–1552. (in Eng.)

Poh Leslie, Qi Wu, Yidan Chen and Esmacil Narimissa (2022) Characterization of industrial low-density polyethylene: a thermal, dynamic mechanical, and rheological investigation. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 61:701–720. (in Eng.)

Saalwächter K., T. Thurn-Albrecht and W. Paul (2023) Recent progress in understanding polymer crystallization. *Macromolecular Chemistry and Physics*, 224(3): 2200424. DOI:10.1002/macp.202200424 (in Eng.)

Tarani E., M. Papageorgiou A. Vogiatzis K. Chrissafis and C.D. Papaspyrides (2024) Preparation and Characterisation of High-Density Polyethylene/Tannic Acid Composites. *Polymers*, 16(23):3398. DOI:10.3390/polym16233398 (in Eng.)

Wang J., Guo X. (2022) Rethinking of the intraparticle diffusion adsorption kinetics model: Interpretation, solving methods and applications. *Chemosphere*, 309(2): 136732. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2022.136732>

Zhao W-W., Fuqing X-M., Guo C-L., Wanghua Z-C. (2022) Model identification and classification of autocatalytic decomposition kinetics. *Journal of Thermal Analysis & Calorimetry*, 148(12):5455. 10.1007/s10973-023-12072-w.



©A. Istlyaup¹, L. Myasnikova^{1*}, A. Lushchik², 2025.

¹ K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan;

² Institute of Physics, University of Tartu, Tartu, Estonia.

E-mail: assel.ist94@gmail.com

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

©А. Истляуп¹, Л. Мясникова^{1*}, А. Лущик², 2025.

¹Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан;

²Тарту университеті, Физика институты, тарту, Эстония.

E-mail: assel.ist94@gmail.com

СІЛТІЛІ МЕТАЛЛ ИОДИДТЕРІНІҢ КРИСТАЛДАРЫМЕН КӨМІРТЕК ҚАБАТЫНЫҢ ЭЛЕКТРЛІК ҚАСИЕТТЕРІН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

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

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

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

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

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

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

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

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



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

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

©А. Истляуп¹, Л. Мясникова^{1*}, А. Лущик², 2025.

¹Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актюбе, Казахстан;

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

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНОГО ЛИСТА С КРИСТАЛЛАМИ ЙОДИДОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Материалдар мен зерттеу әдістер.

Модельдеу

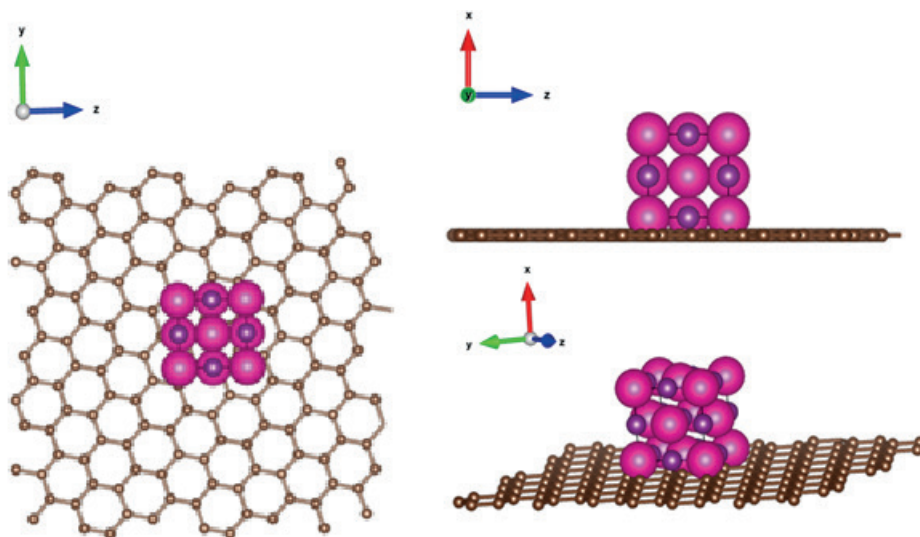
Берілген жұмыста DFT әдісі негізінде компьютерлік модельдеу жүргізілді. Есептеулер Atomistix ToolKit бағдарламалық кешенінде Virtual NanoLab интерфейсі арқылы жүзеге асырылды, ол гетероқұрылымдардың электрондық құрылымын, күй тығыздығын және толық энергиясын атомдық деңгейде есептеуге мүмкіндік береді.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

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

Нәтижелер мен талқылау.

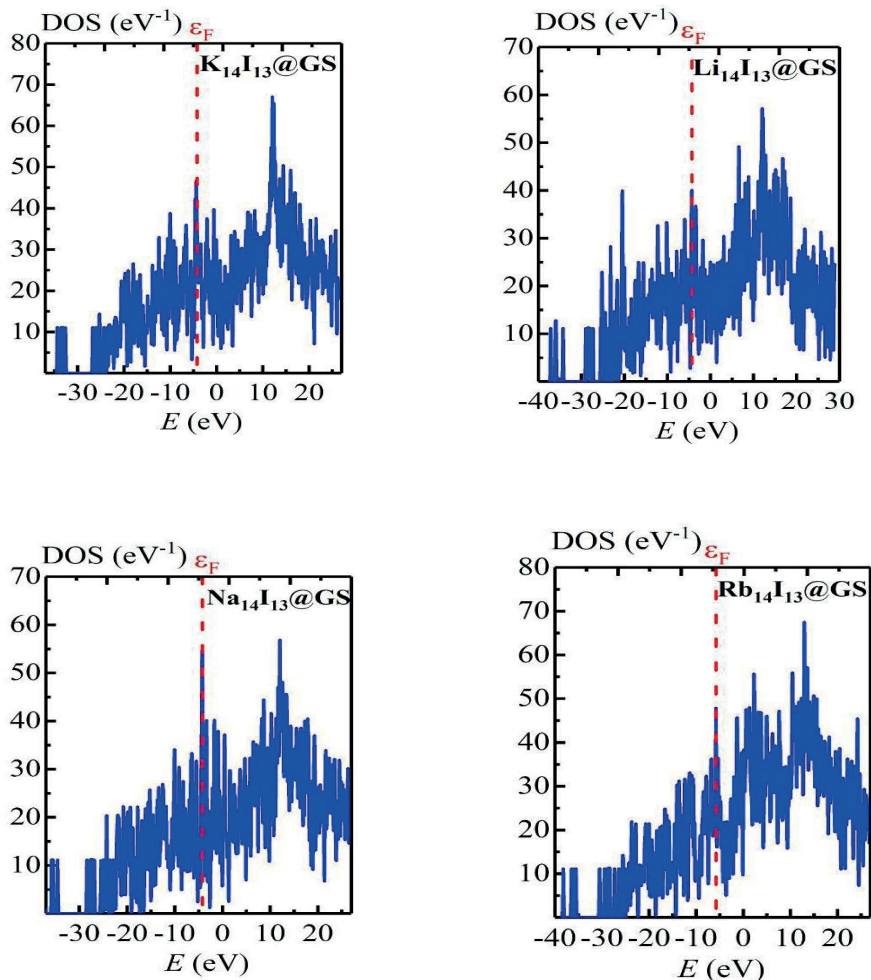
Жүйенің толық энергиясына есептеулер жүргізіліп, тығыздық функционалы теориясы шеңберінде күй тығыздығы талданды, бұл алынған құрылымдардың электрлік қасиеттерін тереңірек зерттеуге мүмкіндік берді.

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

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

References

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

© A. Kenesbayeva, Ye.I. Kuldeev, E.O. Shalenov*, T.B. Nurpeissova, 2025.

Satbayev University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: e.shalenov@satbayev.university

DETERMINATION OF THE GRAVITATIONAL CONSTANT

Kenesbayeva Aigul — PhD, Associate Professor of the Department of Mine Surveying and Geodesy, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: a.kenesbayeva@satbayev.university, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-0869-5762>;

Kuldeev Erzhan — candidate of technical sciences, professor, Vice-Rector for Science and Corporate Development, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: e.kuldeev@satbayev.university, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-8216-679X>;

Shalenov Erik — PhD, Associate Professor of the Department of "General Physics", Satbayev University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: e.shalenov@satbayev.university; <https://orcid.org/0000-0001-6469-6623>;

Nurpeissova Toleuzhan — Candidate of Technical Sciences, Professor of the Department of Mine Surveying and Geodesy, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: t.nurpeissova@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-8162-6053>.

Abstract. The article discusses methods for determining the gravitational constant G and factors affecting the accuracy of measuring this fundamental constant. G was determined using two methods and the accuracy of the results obtained was analyzed. The purpose of the article is to analyze the most effective methods for measuring G and to find ways to further improve the accuracy of determining the gravitational constant. Two main approaches to measurement are described: a method based on the study of the external photoelectric effect, and a resonance method using a Cavendish torsion balance adapted to improve accuracy by simultaneously measuring the acceleration of gravity at the points under study. The second part of the article presents the results of experiments performed using the two above-mentioned methods. Particular attention is paid to the correlation between the measured value of G and the characteristics of the local gravitational background. Based on the data obtained, an assumption was made about a possible dependence of the gravitational constant value on the configuration and intensity of the local gravitational field. A conclusion was made about the need to revise traditional methods of measuring G , with an emphasis on developing new experimental schemes that can take into account the influence of local gravity and minimize the influence of unaccounted factors. The importance of an integrated approach, which involves the simultaneous determination of gravity and the gravitational constant, is emphasized, which can increase the reliability and consistency of the results obtained.



Keywords: gravitational constant, torsion balance, Cavendish experiment, moment of inertia, external photoelectric effect, resonance method

Acknowledgments. *The study was carried out with the financial support of the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (grant No. BR21882366).*

© А. Кенесбаева, Е. Кульдеев, Е. Шаленов, Т. Нурпеисова, 2025.

Satbayev University, Алматы, Қазақстан.

E-mail: e.shalenov@satbayev.university

ГРАВИТАЦИЯЛЫҚ ТҰРАҚТЫНЫ АНЫҚТАУ

Кенесбаева А. — Ph.D, «Маркшейдерлік іс және геодезия» кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: a.kenesbayeva@satbayev.university, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-0869-5762>;

Кульдеев Е.И. — т.ғ.к., профессор, ғылым және корпоративтік даму жөніндегі проректор, Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: e.kuldeev@satbayev.university, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-8216-679X>;

Шаленов Е.О. — Ph.D, «Жалпы физика» кафедрасы қауымдастырылған профессоры, Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: e.shalenov@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-6469-6623>;

Нурпеисова Т.Б. — техника ғылымдарының кандидаты, «Маркшейдерлік іс және геодезия» кафедрасының профессоры, Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: t.nurpeissova@satbayev.university; <https://orcid.org/0000-0001-8162-6053>.

Аннотация. Мақалада G гравитациялық тұрақтысын анықтау әдістері және осы негізгі тұрақтыны өлшеу дәлдігіне әсер ететін факторлар қарастырылады. G анықтау екі әдіспен жүргізілді және алынған нәтижелердің дәлдігі талданды. Мақаланың мақсаты G өлшеудің ең тиімді әдістерін талдау және гравитациялық тұрақтыны анықтаудың дәлдігін одан әрі жақсарту жолдарын табу. Өлшеудің екі негізгі тәсілі сипатталған: сыртқы фотоэффектіні зерттеуге негізделген әдіс және зерттелетін нүктелердегі ауырлық күшінің үдеуін бір уақытта өлшеу арқылы дәлдікті жақсартуға бейімделген Кавендиш бұралу балансын қолданатын резонанс әдісі. Мақаланың екінші бөлімінде жоғарыда аталған екі әдісті қолдану арқылы жүргізілген тәжірибелердің нәтижелері берілген. G -тің өлшенетін мәні мен жергілікті гравитациялық фонның сипаттамалары арасындағы корреляцияға ерекше назар аударылады. Алынған мәліметтер негізінде гравитациялық тұрақты мәннің жергілікті гравитациялық өрістің конфигурациясы мен қарқындылығына ықтимал тәуелділігі туралы болжам жасалды. Жергілікті гравитацияның әсерін ескеретін және есепке алынбаған факторлардың әсерін барынша азайта алатын жаңа тәжірибелік схемаларды әзірлеуге баса назар аудара отырып, G өлшеудің дәстүрлі әдістерін қайта қарау қажеттілігі туралы қорытынды жасалды. Алынған нәтижелердің сенімділігі мен дәйектілігін арттыра алатын ауырлық күші мен гравитациялық тұрақтыны бір уақытта анықтауды қамтитын кешенді тәсілдің маңыздылығы атап өтіледі.

Түйін сөздер: гравитациялық тұрақты, бұралу балансы, Кавендиш тәжірибесі, инерция моменті, сыртқы фотоэффект, резонанс әдісі

© А. Кенесбаева, Е. Кульдеев, Е. Шаленов, Т. Нурпеисова, 2025.

Satbayev University, Алматы, Қазақстан.

E-mail: e.shalenov@satbayev.university

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРАВИТАЦИОННОЙ ПОСТОЯННОЙ

Кенесбаева А. — Ph.D, ассоциированный профессор кафедры «Маркшейдерское дело и геодезия», Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: a.kenesbayeva@satbayev.university, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-0869-5762>;

Кульдеев Е.И. — к.т.н., профессор, проректор по науке и корпоративному развитию, Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: e.kuldeev@satbayev.university, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-8216-679X>;

Шаленов Е.О. — Ph.D, ассоциированный профессор кафедры «Общей физики», Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: e.shalenov@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-6469-6623>;

Нурпеисова Т.Б. — кандидат технических наук, профессор кафедры «Маркшейдерское дело и геодезия», Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: t.nurpeissova@satbayev.university; <https://orcid.org/0000-0001-8162-6053>.

Аннотация. В статье рассмотрены методы определения гравитационной постоянной G и факторы влияющие на точность измерения данной фундаментальной константы. Выполнены определения G двумя методами и анализ точности полученных результатов. Целью статьи является анализ наиболее эффективных методов измерения G и поиск путей дальнейшего повышения точности в определении гравитационной постоянной. Описаны два основных подхода к измерению: метод, основанный на изучении внешнего фотоэффекта, и резонансный метод с применением крутильных весов Кавендиша, адаптированный для повышения точности за счёт одновременного измерения ускорения свободного падения в исследуемых точках. Во второй части статьи представлены результаты экспериментов, выполненных двумя вышеназванными методами. Отдельное внимание уделяется корреляции между величиной измеренного значения G и характеристиками локального гравитационного фона. На основе полученных данных высказано предположение о возможной зависимости значения гравитационной постоянной от конфигурации и интенсивности локального гравитационного поля. Сделан вывод о необходимости пересмотра традиционных методик измерения G , с акцентом на разработку новых экспериментальных схем, способных учитывать влияние локальной гравитации и минимизировать влияние неучтённых факторов. Подчёркнута важность комплексного подхода, предполагающего одновременное определение силы тяжести и гравитационной постоянной, что может повысить достоверность и согласованность получаемых результатов.

Ключевые слова: гравитационная постоянная, крутильные весы, эксперимент Кавендиша, момент инерции, внешний фотоэффект, резонансный метод



Introduction. The gravitational constant G is involved in Newton's equation and Einstein's general theory of relativity, and is also used to determine the masses of planets and the force of interaction between objects in the micro- and macroworld. However, despite its fundamental role in science, the gravitational constant remains one of the least accurately known physical constants. Unlike other constants, such as the speed of light or Planck's constant, the value of G is difficult to measure experimentally, since the results of various laboratory experiments, even with high accuracy, still show discrepancies that exceed the expected errors. This uncertainty not only represents an interesting experimental problem, but also limits the accuracy of calculations in a number of fundamental and applied areas of physics.

The English scientist Henry Cavendish first determined the value of the gravitational constant in 1798 using a torsion balance. At that time, the value of G was obtained as $6,754 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$ and its relative error did not exceed one percent. Since the Cavendish experiment, various methods and approaches to measuring the gravitational constant have been used and proposed. These include early torsion balance refinements with angular acceleration feedback (Gundlach & Merkowitz, 2000), updated reviews of fundamental constants (Mohr et al., 2016), improved determinations with dual methods (Quinn et al., 2013), the torsion method (Luo et al., 2005) and seconds pendulum method (Newman et al., 2006), experiments using atomic interferometry (Bertoldi et al., 2006), experiments in space, away from interfering effects (Brown, 2023). Some of these methods may require complex experimental conditions and give results with varying accuracy. We will present the most interesting and highly accurate experiments performed in recent decades and their results.

A brief review of the literature on the definition of the gravitational constant. As noted by G. Rosi (Rosi et al., 2014), the first accurate determination of G using laser-cooled atoms and quantum interferometry to study gravity is reported. The basic idea of the experiment is to use an atomic interferometer as a gravity sensor and precisely known masses as the source of the gravitational field. By accurately measuring the acceleration of the atoms created by the source mass and knowing the mass distribution, it was possible to determine the value of the gravitational constant G . The experiment yielded a value of $G = 6.67191(99) \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$, with a relative uncertainty of 150 ppm, which is 1.5 combined standard deviations from the current recommended value of the Committee on Data for Science and Technology (CODATA).

Also known are the results of measuring the gravitational constant using scales and 13 tons of mercury (Schlamminger et al., 2014), which were previously performed by S. Schlamminger from the University of Zurich and published in 2006. In this experiment, two large cylinders, each filled with mercury weighing 6760 kg, created the gravitational field. The joint work of scientists led to the value $G = 6.674 252(122) \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$. The relative standard uncertainty of the measurement was 18×10^{-6} .

Experiments performed by Chinese scientists (Li et al., 2018) in collaboration with a Russian researcher provide another contribution to the challenging task of measuring the value of G . By performing two independent determinations of G in torsion pendulum experiments, using the swing time method and the angular acceleration feedback method, the obtained G values are 6.674184×10^{-11} and $6.674484 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$ with relative standard uncertainties of 11.64 and 11.61 ppm, respectively. These values have

the smallest uncertainties reported to date, and both agree with the latest recommended value within two standard deviations.

Another experiment to measure the gravitational constant G , based on cold atom interferometry, was carried out in 2018 by Italian and Dutch scientists (Lamporesi et al., 2008). The experiment resulted in a value of $G = 6.667 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$. The statistical uncertainty is estimated at $\pm 0.011 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$ and the systematic error is $\pm 0.003 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$. The long-term stability of the device and the signal-to-noise ratio demonstrated here open up good prospects for further improving the measurement accuracy.

In recent years, large variations in the measured values of G have led scientists to question whether G is really a constant at all. Some theories and studies (Kordi, 2009) suggest a possible variation of the gravitational constant on cosmological or quantum scales. Although the vast majority of scientists believe that G is a constant and that, the variations are caused by large systematic measurement errors. The current situation with conflicting values of the gravitational constant highlights the need for additional measurements and analysis of sources of measurement errors, including the influence of the gravitational field at the observation points.

Methods and materials. The authors of this article previously determined the gravitational constant using the acceleration method (Shalenov et al., 2024), with the Atwood machine. As a result, the obtained value of G was equal to $6.670679 \times 10^{-11} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$, the error of which was $0.0018105 \times 10^{-11} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$, compared with the value of G currently accepted by the Committee on Data for Science and Technology. It was concluded that it is necessary to improve the accuracy of measuring the time of movement of the weights to obtain a more accurate value of G using this method.

In order to analyze the sources of errors affecting the experiment to determine G and to obtain the true value of this constant, two more experiments were performed. One of which was performed based on the study of the external photoelectric effect, and the other by the resonance method using the Cavendish torsion balance.

The first method of determining the gravitational constant is based on the study of the photoelectric effect method, by means of which Planck's constant is first determined, and then G itself. The photoelectric effect is studied on an installation that consists of: 1) a photocell and an incandescent lamp placed on an optical bench; 2) a digital microammeter and voltmeter, combined with a rheostat into one electronic unit of devices (Fig. 1).



Figure 1. Optical bench and electronic unit for studying the photoelectric effect

The operation diagram of the setup for studying the photoelectric effect is shown in Figure 2. The vacuum photocell is enclosed in a protective casing with a window and is a glass bulb, half of which is coated on the inside with a thin layer of alkali metal. This layer is the cathode of the photocell. The anode is a metal ring located in the center of the bulb. The light source is a halogen incandescent lamp. To regulate the brightness, the voltage U is varied by the knob located on the left side of the front panel of the electronic unit. Monochromatic radiation is obtained using light filters fixed in a rotating frame (the wavelengths of the light filters are indicated on the setup). The photocurrent is measured by a digital microammeter - a digital display located on the left on the front panel of the electronic unit. The voltage on the photocell is changed by rotating the rheostat knob (the right side of the front side of the electronic unit) and measured by a digital voltmeter - a digital display located on the right on the front panel of the electronic unit. Switching between the delay and acceleration voltage modes is performed using a polarity switch located at the bottom of the electronic unit panel.

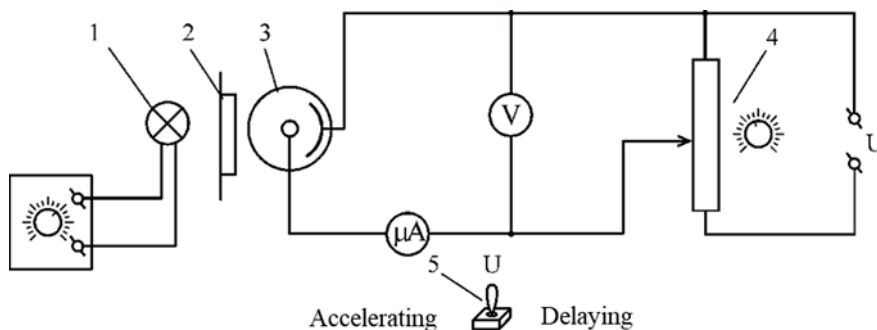


Figure 2. Schematic diagram of the setup for studying the photoelectric effect: 1 – incandescent lamp; 2 – light filters in a frame; 3 – photocell; 4 – rheostat; 5 – polarity switch.

The experiment is performed in the following order: a light source, a set of light filters and a photocell are placed on the optical bench. For a light filter with $\lambda = 505$ nm, the maximum current is set in the incandescent lamp. By changing the position of the photocell on the optical bench relative to the incandescent lamp, the photocurrent $I = 0.6$ μA ($U = 0$) is set. Then the operating mode is switched to the holding voltage U_3 , and zero value of the photocurrent is achieved ($I = 0$). The value of the holding potential is read from the digital display of the unit and entered into the table. Then, steps 2-3 are repeated for other light filters without changing the position of the photocell.

The results are processed in the following order: calculate the frequencies λ transmitted by the light filters; plot a graph of the linear dependence $U_3 = f(n)$. Extrapolate the resulting straight line until it intersects the ordinate axis. From the graph, find the cutoff frequency n_0 (at $n = n_0$, $U_3 = 0$) and the delay voltage (at $n = 0$):

$$U_3 = A/e \quad (1)$$

Then, the work function of the electron A from the cathode is calculated using the formula:

$$A = U_3 \cdot 1,6021766208 \cdot 10^{-19} (J) \quad (2)$$

Planck's constant is found from the expression:

$$h = A/v_0 \quad (3)$$

From the value of Planck's constant, the gravitational constant G is found as a function of h (Mercier, 2016):

$$G = \frac{2\pi r_e^2 c^3 \alpha^{19}}{\beta h} \quad (4)$$

where c is the speed of light in a vacuum; α is the fine structure constant; r_e is classical electron radius; $\beta=3\cdot\sqrt{5}$, is the ratio between the rate of expansion of the material universe and the rate of expansion of the luminous universe.

The second method of determining the gravitational constant was performed using a Cavendish torsion balance, with simultaneous observation of the acceleration of gravity at the point of standing. It is believed that the location of the observation point does not affect the value of the gravitational constant G , since it is a universal constant and does not depend on the location of the observer. However, the desire of some scientists (Feldman et al., 2016) to measure G in deep space was motivated precisely by the goal of eliminating the influence of Earth's gravity on the course of the experiment.

As some researchers believe, a more precise value and the possibility that G may vary with time, location, or the type of matter involved could be related to improvements in Einstein's general theory of relativity, including quantum gravity. To find out if there is a correlation between the change in gravity and the G number, we performed an experiment at four stations located at different altitudes above sea level in the city of Almaty and the nearby Trans-Ili Alatau Mountains.

The experiment was performed using the resonance method with a Cavendish balance, with simultaneous measurement of the gravity increment Δg (relative to the original gravimetric point) at the observation point with a CG-6 AUTOGRAV relative gravimeter (Fig. 3).

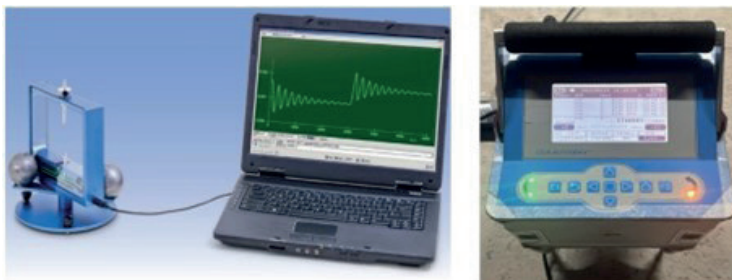


Figure 3. Cavendish torsion balance and CG-6 AUTOGRAV™ gravimeter

In the controlled resonance method, the large balls are rotated back and forth between two extreme positions so that the force of gravity between the large balls and the boom always does positive work on the balance, and the amplitude increases until the energy loss from damping is equal to the work done by gravity. To determine G, it is necessary to know the damping coefficient of the balance, which is determined by measuring the amplitude attenuation during free oscillation of the balance. The gravitational constant is determined from the expression:

$$G = K\theta_D R^2 / (2Mmd) \quad (5)$$

where

K – torsion spring constant;

Θ_D – change in the boom equilibrium angle when turning large masses from the central to one of the extreme positions;

R – distance between the centers of the large and small balls;

M, m – masses of the large and small balls;

d – distance from the axis of rotation to the center of the small sphere.

The torsion constant is found by the formula:

$$K = 4\pi^2 I / T^2 \quad (6)$$

where

T – period of oscillation of the boom;

I – total moment of inertia of two small spheres.

To determine the change in the balance angle Θ_D , a minimum of three adjacent turning points θ_i are measured when the balance is resonantly driven and three adjacent turning points when the balance is in a free-damping state. Each set of three measurements requires the balance to oscillate for one complete cycle, which, depending on the length of the tungsten fiber, is about 4 minutes or less. The damping coefficient x is then determined from the expression:

$$x = 1 - (\theta_1 - \theta_N) / (\theta_1 - \theta_2 + \theta_3 - \theta_4 + \dots - \theta_{N-1}) \quad (7)$$

The value of the angle Θ_D is calculated using the following formula, taking into account the value of the coefficient x :

$$\theta_D = [(1 - x)(\theta_1 - \theta_2 + \theta_3 - \theta_4 + \dots - \theta_N) - \theta_1 + x\theta_1 N] / [(N-1)(1+x)] \quad (8)$$

When calculating the gravitational constant in order to achieve the best balance, corrections are introduced for the attraction of the large sphere to the distant small sphere and a correction for the gravitational moment acting on the beam.

Results and discussion. In the first method of determining G based on the study of the photoelectric effect, the cutoff frequencies n_0 were determined, corresponding to the wavelengths of light λ transmitted by light filters (Table 1).

Table 1. Results of studying the photoelectric effect and determining the delay voltage \bar{U}_3

λ , nm	595	590	540	525	505
ν , $\cdot 10^{14}$ Гц	5.038529	5.081228	5.551712	5.710333	5.936484
U_3 , B	0.053	0.071	0.266	0.331	0.425
Borderline $\bar{U}_3 = 2.031136$ B	Cutoff frequency n				

A graph of the linear dependence $U_3 = f(\nu)$ was constructed (Fig. 4) and the cutoff frequency n_0 (at $n = n_0$, $U_3 = 0$ V) and the arresting voltage U_3 (at $n = 0$) were determined from the graph, and the following were calculated: the work function of the electron from the cathode A, Planck's constant h and the value of the gravitational constant G according to formulas (2)-(4). As a result, $G \approx 6.67227 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ c}^{-2}$ was obtained, with an accuracy of $0,0004731 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ c}^{-2}$,

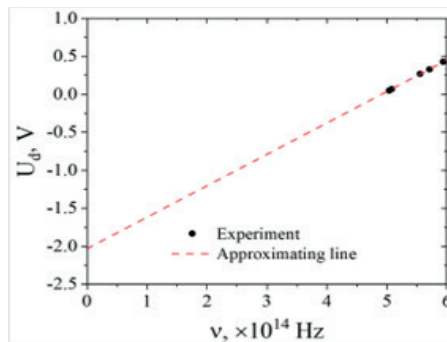


Figure 4. Linear dependence graph $U_3 = f(\nu)$

In the second method of measuring G , the observation points were at different heights (Fig. 5) and, accordingly, had different gravity values.

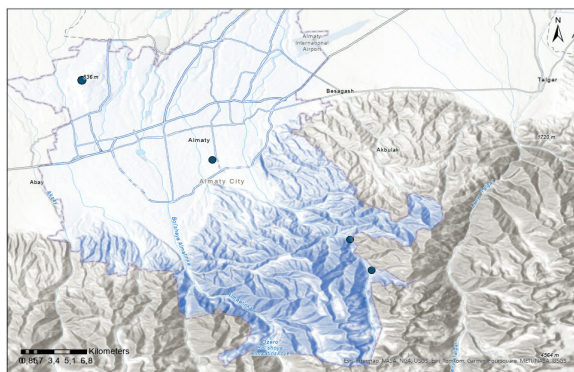


Figure 5. Layout of observation stations

At this stage of the research, it was sufficient to use four observation points, which made it possible to obtain information about the presence of a correlation between the

values of the gravitational constant and the increment of gravity at the standing points. During the experiment, measures were taken to reduce the influence of external factors such as temperature changes, vibrations and electromagnetic interference by conducting the experiment in a closed room at a constant room temperature and in the absence of foreign gravitational objects and power sources. The torsion balance and gravimeters were not connected to external power sources during the experiments. The results of determining G by the resonance method at four stations and the measured gravity anomalies are given in Table 2.

The G values obtained at different altitudes differ from each other and correlate with the values of the gravity increments at the observation points, confirming the fact that the result of the experiment on measuring G is affected by the gravity at the observation point. Moreover, the greater the gravity value, the greater its influence on the accuracy of measuring G.

Table 2. Results of determining G by the resonance method at four stations

No	Latitude B, Longitude L	Height of the point, H	Gravity increment Δg , mGal	Gravitational constant G, $m^3 kg^{-1} s^{-2}$	Accuracy of G determination, $m^3 kg^{-1} s^{-2}$
1	43.314419 76.809555	835.20	3977.944	$6.670372 \cdot 10^{-11}$	$-0,000588 \cdot 10^{-11}$
2	43.236290 76.931526	848.01	3947.484	6.6708154	$-0,000522 \cdot 10^{-11}$
3	43.158056 77.059662	1685.20	3780.964	$6.672358 \cdot 10^{-11}$	$-0,000291 \cdot 10^{-11}$
4	43.127500 77.080005	2295.80	3662.180	$6.673542 \cdot 10^{-11}$	$-0,000113 \cdot 10^{-11}$

To reliably establish the relationship between high G and measured gravity, it is necessary to conduct an experiment at a significant number of stations located at different altitudes above sea level. This experiment will allow us to determine the correction required to the measured G value to eliminate local gravity.

A preliminary analysis of the available data reveals a correlation between the G value and local gravity that is quite close to linear (Fig. 6).

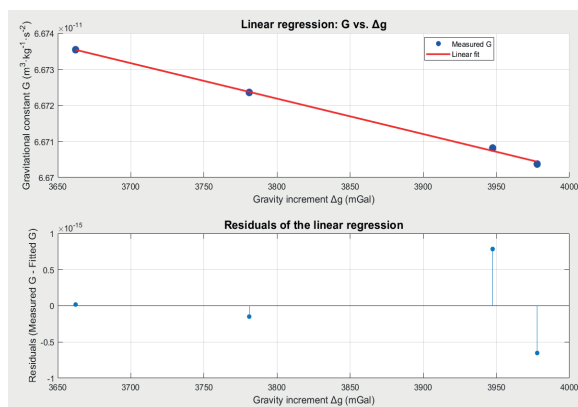


Figure 6. Relationship between G and local gravity

Conclusion. In general, the values of the gravitational constant obtained by the three methods differ from each other and coincide with the value adopted by the Committee (CODATA) within two decimal places. The reasons for the discrepancies in the experimental results are insufficient measurement accuracy and the influence of external noise sources, including the gravitational field at the point of the experiment. To enhance the accuracy of the results, it is essential to account for the influence of external error sources as thoroughly as possible and to conduct a preliminary estimation of measurement accuracy based on the desired precision in determining the value of G . It is also recommended to use fundamentally different approaches to determining the gravitational constant for comparative analysis and identifying a more accurate method for determining this constant. Taking into account that the gravitational constant is measured on the surface of the Earth, it seems relevant to jointly measure large G and small g in order to take into account the influence of local gravity.

References

- Gundlach J.H., Merkowitz S.M. (2000) Measurement of Newton's Constant Using a Torsion Balance with Angular Acceleration Feedback. *Physical Review Letters*, 85(14). — P. 2869–2872. DOI: 10.1103/PhysRevLett.85.2869 (in Eng.).
- Quinn T.J., Speake C.C., Parks H.V., Davis R.S. (2013) Improved determination of G using two methods. *Physical Review Letters*, 111(10), 101102. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.101102 (in Eng.).
- Mohr P.J., Taylor B.N., Newell D.B. (2016) CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants: 2014. *Reviews of Modern Physics*, 88(3), 035009. DOI: 10.1103/RevModPhys.88.035009 (in Eng.).
- Luo Jie, et al. (2005) Precise determination of Period of a Torsion Pendulum in Measurement of Gravitational Constant. *Chinese physics letters*, Vol. 22. No.9. — P. 2169 – 2172. DOI: 10.1088/0256-307X/22/9/008 (in Eng.).
- Newman R., et al. (2014) A measurement of G with a cryogenic torsion pendulum. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*. — 24 p. <http://dx.doi.org/10.1098/rsta.2014.0025> (in Eng.).
- Bertoldi, A. et al. (2006) Atom interferometry gravity-gradiometer for the determination of the Newtonian gravitational constant G . *The European Physical Journal D*. — P. 271–279. DOI:10.1140/epjd/e2006-00212-2 (in Eng.).
- William C. Brown. Space probe of the gravitational constant G . *Acta Astronautica*. 2023. Vol. 204. — P. 450-454. <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2022.12.032> (in Eng.).
- Rosi G. et al. Precision Measurement of the Newtonian Gravitational Constant Using Cold Atoms. *Nature*, V. 510. №7506. — P. 518-521 (in Eng.).
- S. Schlamminger, et al. (2014) Reflections on a Measurement of the Gravitational Constant Using a Beam Balance and 13 Tons of Mercury. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*. —13 p. (in Eng.).
- Q. Li et al. Measurements of the gravitational constant using two independent methods. *Nature*. —V.560. —№7720. — P. 582-588 (in Eng.).
- G. Lamporesi et al. Determination of the Newtonian Gravitational Constant Using Atom Interferometry. *Physical review letters*, V.100. — №5. — P. 050801.1 – 050801.4 (in Eng.).
- Kordi A.S. (2009) Variation of the gravitational constant with time in the framework of the large number and creation of matter hypotheses. *Journal of King Saud University-Science*, V.21. —№2. —P. 151-154 (in Eng.).
- E.O. Shalenov, et al. (2024) Opredelenie znacheniya gravitatsionnoi postiannoi [Determination of the value of the gravitational constant]. *Mining Journal*, No. 8. P. 45-53 (in Eng.).
- Mercier C. (2020) Several Ways to Calculate the Universal Gravitational Constant G Theoretically and Cubic Splines to Verify Its Measured Value. *Journal of Modern Physics*, 11(09). — P.1428–1465. <https://doi.org/10.4236/jmp.2020.119089> (in Eng.).
- Michael R. Feldman et al. (2016) Deep space experiment to measure G . *Classical and Quantum Gravity*. —Volume 33. —№ 12. —13 p. DOI: 10.1088/0264-9381/33/12/125013 (in Eng.).

© **Sh.T. Nurmakhmetova¹, N.L. Vaidman^{1,2},
S.A. Khokhlov¹, A.T. Agishev¹, A.A. Khokhlov^{1*}, 2025.**

¹ Faculty of Physics and Technology, Al-Farabi Kazakh National University,
Almaty, Kazakhstan;

² Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: kh.azamat92@gmail.com

THE EMISSION-LINE DUSTY OBJECT IRAS 07080+0605: EVIDENCE FOR BINARITY

Shakhida Tashmakhomedovna Nurmakhmetova — bachelor student, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: shahidanurmahametova@gmail.com, ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-6851-7270>;

Nadezhda Leonidovna Vaidman — master in Physics and Astronomy, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: nvaldmann@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0002-7449-0108>;

Serik Anatolyevich Khokhlov — PhD, professor of the Department of Electronics and Astrophysics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: skhokh88@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-5163-508X>;

Aldiyar Talgatovich Agishev — PhD, associate professor of the Department of Electronics and Astrophysics, Faculty of Physics and Technology, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: aldiyar.agishev@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-9788-7485>;

Azamat Anatolyevich Khokhlov — Senior Lecturer of the Department of Electronics and Astrophysics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: kh.azamat92@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-6987-9058>.

Abstract. FS CMA-type stars are interacting binaries that show the B[e] phenomenon and strong infrared excess from dusty circumbinary material. We present a high-resolution spectroscopic study of IRAS 07080+0605 (A0–A1 II) to measure its orbital motion and test a common-envelope (CE) origin. Our dataset comprises 20 echelle spectra from FEROS, REOSC, Gecko, and ESPaDOnS ($R \approx 18\,000$ – $100\,000$; 3900 – $10\,150$ Å). Radial velocities were obtained via cross-correlation in IRAF/RVSAO; periodicities were identified with a Lomb–Scargle periodogram; orbital elements and their uncertainties were derived via Bayesian inference implemented with the MCMC method. We find a short-period solution with $P = 23.97 \pm 0.01$ days and a semi-amplitude $K_1 = 10.45 \pm 1.70$ km \times s⁻¹. The mass function together with literature constraints on M_1 and inclination from SED modeling, implies a low-luminosity secondary consistent

with a compact or low-mass main-sequence companion. The combination of a short orbital period and a persistent dusty disk is incompatible with a full AGB envelope and instead points to recent CE evolution that ejected the envelope and shrank the orbit to weeks. IRAS 07080+0605 thus emerges as a short-period FS CMa binary in a transitional post-AGB state, providing a benchmark for studying dust production and angular-momentum loss in non-conservative mass transfer and for testing CE-driven pathways to compact binaries.

Key words: spectroscopy; binary stars; B[e] stars; common envelope; stellar evolution; IRAS 07080+0605

Acknowledgments. This research was funded by the Committee on Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (grant AP19175392 of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan).

© Ш.Т. Нурмахаметова¹, Н.Л. Вайдман^{1,2}, С.А. Хохлов¹,
А.Т. Агишев¹, А.А. Хохлов¹, 2025.

¹ Физика-техникалық факультеті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

² Фесенков атындағы астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан.
E-mail: kh.azamat92@gmail.com

IRAS 07080+0605 ЭМИССИЯЛЫҚ ОБЪЕКТИ: ЕКІЖҰЛДЫЗДЫҚ ЖҮЙЕНІҢ ДӘЛЕЛІ

Шахида Ташмахомедовна Нурмахаметова — бакалавриат студенті, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: shahidanurmahametova@gmail.com, ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-6851-7270>;

Надежда Леонидовна Вайдман — физика және астрономия магистрі, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: nvaldmann@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0002-7449-0108>;

Серик Анатольевич Хохлов — PhD, электроника және астрофизика кафедрасының профессоры, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: skhokh88@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-5163-508X>;

Алдияр Талгатович Агишев — PhD, электроника және астрофизика кафедрасының доценті, Физика-техникалық факультет, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: aldiyar.agishev@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-9788-7485>;

Азамат Анатольевич Хохлов — Электроника және астрофизика кафедрасының аға оқытушысы, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kh.azamat92@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-6987-9058>.

Аннотация. FS CMa типті жұлдыздар — B[e] феномені мен шаңды циркумбинарлық ортадан туындайтын күшті инфрақызыл артығы бар өзара әрекеттесетін қос жұлдыздар. Біз IRAS 07080+0605 (A0–A1 II) нысанына жоғары айырымды спектроскопиялық зерттеу ұсынамыз, оның мақсаты — орбиталық қозғалысын өлшеу және жалпы қабық (CE) сценарийін тексеру.



Мәліметтер жиыны FEROS, REOSC, Gecko және ESPaDOnS құралдарымен алынған 20 эшелле-спектрден тұрады ($R \approx 18\,000\text{--}100\,000$; $3900\text{--}10\,150\text{ \AA}$). Сәулелік жылдамдықтар IRAF/RVSAO ортасындағы кросс-корреляция әдісімен анықталды; периодтылықтар Ломб–Скаргла периодогаммасымен табылды; орбиталық элементтер мен олардың белгісіздіктері Байесдік қорытындылау арқылы, MCMC әдісімен алынды. Қысқапериодты шешім алынды $P = 23.97 \pm 0.01$ тәулік және жарты амплитудасы $K1 = 10.45 \pm 1.70\text{ км} \times \text{с}^{-1}$. Массалық функция, әдебиеттегі M1 шектеулері және SED-модельдеуден алынған орбита еңкеюімен бірге, төмен жарқыраулы екінші компонентті меңзейді; ол ықтимал компакт объекті немесе аз массалы бас тізбек жұлдызына сай келеді. Қысқа период пен тұрақты шаңды дискінің қатар байқалуы толық AGB қабығын сақтаумен сыйыспайды және, керісінше, жақында өткен жалпы қабық кезеңін, онда жұлдыз қабығы тасталып, орбита апталар шамасындағы периодтарға дейін қысқарғанын көрсетеді. Осылайша IRAS 07080+0605 өтпелі post-AGB күйіндегі қысқапериодты FS CMa жүйесі ретінде көрінеді және масса беруінің неконсервативті режімінде шаң түзілуі мен бұрыштық импульс жоғалуын, сондай-ақ SE-мен қалыптасатын компакт қос жүйелердің эволюциялық жолдарын зерттеуге үлгі нысан болып табылады.

Түйін сөздер: қос жұлдыздар, B[e] жұлдыздары, жалпы қабық, жұлдыздардың эволюциясы, IRAS 07080+0605

© Ш.Т. Нурмахаметова¹, Н.Л. Вайдман^{1,2}, С.А. Хохлов¹,
А.Т. Агишев¹, А.А. Хохлов¹, 2025.

¹ Физико-технический факультет, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

² Астрофизический институт имени Фесенкова, Алматы, Казахстан.
E-mail: kh.azamat92@gmail.com

ЭМИССИОННЫЙ ПЫЛЕВОЙ ОБЪЕКТ IRAS 07080+0605: ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ДВОЙНОЙ ПРИРОДЫ

Шахида Ташмахомедовна Нурмахаметова — студент бакалавриата, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: shahidanurmahametova@gmail.com, ORCID: <https://orcid.org/0009-0005-6851-7270>;

Надежда Леонидовна Вайдман — магистр физики и астрономии, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: nvaldmann@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0002-7449-0108>;

Серик Анатольевич Хохлов — PhD, профессор кафедры электроники и астрофизики, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: skhokh88@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-5163-508X>;

Алдияр Талгатович Агишев — PhD, доцент кафедры электроники и астрофизики, факультет физики и технологий, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: aldiyar.agishev@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-9788-7485>;

Азамат Анатольевич Хохлов — старший преподаватель кафедры электроники и астрофизики, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: kh.azamat92@gmail.com, ORCID ID: <http://orcid.org/0000-0001-6987-9058>.

Аннотация. Звезды типа FS CMa – это взаимодействующие двойные системы, демонстрирующие феномен B[e] и выраженный инфракрасный избыток от пылевого циркум бинарного вещества. Мы представляем высококачественное спектроскопическое исследование IRAS 07080+0605 (A0–A1 II) с целью измерения её орбитального движения и проверки сценария общей оболочки (CE). Набор данных включает 20 эшелле-спектров, полученных на FEROS, REOSC, Gecko и ESPaDOnS ($R \approx 18\,000\text{--}100\,000$; $3900\text{--}10\,150\text{ \AA}$). Лучевые скорости определены методом кросс-корреляции в IRAF/RVSAO; периодичности выявлены периодограммой Ломба–Скаргла; орбитальные элементы и их неопределенности получены через байесовскую статистику, реализованную через метод MCMC. Найдено короткопериодическое решение с $P = 23.97 \pm 0.01$ суток и полуамплитудой $K_1 = 10.45 \pm 1.70\text{ км} \times \text{с}^{-1}$. Функция масс в сочетании с литературными ограничениями на M1 и наклон орбиты из SED-моделирования указывает на вторичную компоненту, с низкой светимостью, совместимую с компактным объектом или маломассивной звездой главной последовательности. Сочетание короткого периода и устойчивого пылевого диска несовместимо с сохраненной полной AGB-оболочкой и, напротив, указывает на недавнюю фазу общей оболочки, во время которой оболочка была сброшена, а орбита сократилась до периодов порядка недель. IRAS 07080+0605 тем самым предстает короткопериодной FS CMa-системой на переходной пост-AGB стадии и служит ориентиром для изучения пылеобразования и потерь углового момента при неконсервативной передаче массы, а также для проверки CE-управляемых путей формирования компактных двойных.

Ключевые слова: спектроскопия; двойные звезды; B[e]-звезды; общая оболочка; эволюция звёзд; IRAS 07080+0605

Introduction. The FS CMa-type objects demonstrate features of the B[e] phenomenon (presence of forbidden emission lines and IR excess). These stars were singled out as a separate new group by Prof. Miroshnichenko (2007). A leading hypothesis of the nature of the FS CMa objects are binary evolution with non conservative mass transfer, according to the confirmed results of the analysis (Miroshnichenko et al., 2023).

IRAS 07080+0605 is an emission-line star that was first noted in an H α survey by Kohoutek & Wehmeyer (1999). It was later classified as an FS CMa-type star by Miroshnichenko et al. (2007) based on its prominent B[e] characteristics, including strong permitted (e.g. H I, Fe II) and forbidden (e.g. [O I], [Ca II]) emission lines and a significant infrared excess. Classified as approximately A0-A1: II (Condori, 2019), it has attracted considerable attention in the context of stellar evolution due to its distinctive characteristics. IRAS 07080+0605 shows pronounced emission lines and a strong infrared excess similar to that seen in FS CMa stars. The dust component consists of carbonaceous compounds rather than silicates, which distinguishes the object from classical B[e] stars. However, its exact evolutionary status remains uncertain. Previous observations by Khokhlov (2022) made it possible to determine the object's basic

physical parameters, detect photometric variability with cyclic changes in brightness, and rule out a young stellar nature. Moreover, a number of its properties resemble those of the well-known binary system Red Rectangle, which possesses a developed dusty disk. This similarity has prompted the hypothesis that IRAS 07080+0605 could represent an earlier evolutionary stage of objects like the Red Rectangle. IRAS 07080+0605 is characterized by the fundamental parameters $T_{\text{eff}} = 8500 \text{ K} \pm 500 \text{ K}$, $\log g = 2.0$, and $L = 216 L_{\odot}$, with a corresponding radius of $R = 6.8 R_{\odot}$. Parameters were determined through synthetic spectrum modeling using SPECTRUM. The resulting spectrum demonstrates a high degree of agreement with the observed data, confirming the reliability of these estimates (Khokhlov et al., 2022).

The present study aims to further investigate IRAS 07080+0605, particularly by determining its orbital parameters, estimating the mass of the secondary component. These objectives will help deepen our understanding of how stars in close binary systems interact and how such processes contribute to dust production in our Galaxy. The new insights gained from this object may also shed light on the broader class of B[e] stars and their significant role in stellar evolution.

Methods and materials. Before any quantitative analysis, all spectra underwent standard preliminary reduction procedures using the IRAF environment. The reduction included continuum normalization, cosmic ray removal, and correction for instrumental effects. These steps ensured spectral consistency across different epochs and improved the reliability of subsequent radial velocity (RV) determinations.

To derive the RV of the stellar component, we employed the cross-correlation method, which identifies the Doppler shift between an observed spectrum and a reference template by maximizing their similarity. We used 20 high-resolution optical spectra of IRAS 07080+0605 obtained with FEROS at ESO ($R = 48,000$), REOSC at SPM ($R = 18,000$), and Gecko and ESPaDOnS at CFHT ($R = 100,000$ and $65,000$). The spectral range spans $3900\text{--}10150 \text{ \AA}$. The analysis was carried out using the *xcsao* task from the RVSAO package (Mink, 1998) within IRAF. This task computes the cross-correlation function (CCF) between a target and a reference spectrum, locates its peak, and determines the wavelength shift $\Delta\lambda$. The resulting shift is then converted into a RV using the Doppler formula. As a template, we selected one of the highest-quality spectra from our dataset to ensure consistency in line profiles and instrumental characteristics. Additionally, *xcsao* provides formal errors in the measured velocities based on the peak's sharpness and symmetry.

The resulting RV measurements, obtained at multiple epochs, were used to characterize the orbital motion of the system. Assuming Keplerian motion, the RV curve was approximated by the standard model:

$$V_r = \gamma + K \cdot (\cos(v + \omega) + e \cdot \cos\omega) \quad (1)$$

Where V_r is the RV, K is the RV semi-amplitude, v is the true anomaly, e is the orbital eccentricity, and ω is the argument of periastron. In the special case of a circular orbit

($e = 0$), this expression reduces to a simple sinusoidal function dependent on the orbital phase.

To investigate the periodic behavior of the RV variations and spectral line shifts, we applied a Lomb–Scargle periodogram analysis. This technique is particularly well-suited for unevenly spaced observational data, such as those commonly found in ground-based spectroscopic monitoring campaigns. The Lomb–Scargle periodogram is particularly well-suited for the analysis of unevenly sampled time series, as it preserves the native temporal structure of the data without requiring resampling or interpolation (Scargle, 1982). Its formulation enables the robust detection of sinusoidal or quasi-periodic signals, even in datasets affected by observational gaps or substantial noise. Using this method, we identified the dominant frequency in the RV data, corresponding to the orbital period of the binary system. The derived period was adopted as an input parameter in the final orbital model fitting, described further below.

To determine the orbital parameters of the binary system IRAS 07080+0605, we developed a specialized Python-based software framework designed for the analysis of RV measurements obtained over multiple epochs. The framework integrates several widely used scientific libraries: NumPy (1.26.4) for numerical computations, Pandas (2.0.3) for structured data processing, Matplotlib (3.8.4) for visualization, and `scipy.optimize` (1.13.0) for nonlinear least-squares fitting. For statistical inference and uncertainty estimation, we employed the `emcee` package, which implements the affine-invariant ensemble sampler for Markov Chain Monte Carlo (MCMC) analysis (Foreman et al., 2013).

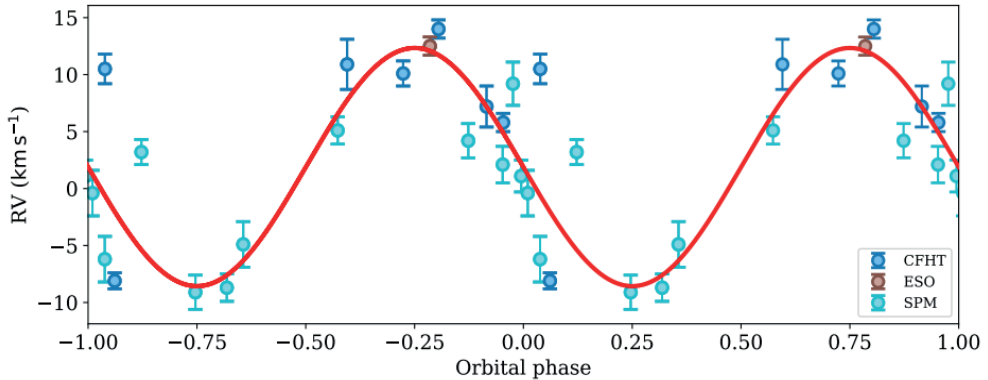
The analysis was carried out in two primary stages. First, we performed a nonlinear least-squares fit using `scipy.optimize` to obtain initial estimates for the orbital period (P), systemic velocity (γ), and RV semi-amplitude (K). These preliminary values served as starting points for the MCMC procedure. To refine parameter estimates and rigorously assess their uncertainties, we adopted a Bayesian framework using `emcee`. The posterior probability distribution was constructed as the product of a Gaussian likelihood function—assuming normally distributed observational errors—and physically motivated priors. We adopted uniform priors within plausible bounds based on initial fits and physical constraints (e.g., positive semi-amplitudes and periods). The MCMC sampler was initialized with multiple walkers and run for a sufficiently large number of iterations to ensure convergence and adequate sampling of the posterior.

Once the orbital period was established, observational epochs were converted into orbital phases. We constructed the phase-folded RV curve and overlaid the best-fit model to evaluate the quality of the solution. The reference phase (zero-point) was defined at time T_0 , corresponding to the point where the RV crosses the systemic velocity from above—facilitating comparison with theoretical predictions and analogous systems.

This methodology provides a consistent and statistically robust determination of the orbital parameters P , γ , K , and T_0 , along with credible uncertainty estimates. These results lay the groundwork for subsequent dynamical modeling and interpretation of the system’s evolutionary stage.

Results. To characterize the orbital motion of IRAS 07080+0605, we constructed a RV curve using the measured velocities and corresponding heliocentric Julian dates (HJD) obtained from our spectroscopic dataset. The RV points were plotted as a function of orbital phase, calculated based on the period derived from the Lomb–Scargle periodogram analysis. This resulting phase-folded RV curve is shown in Fig. 1.

Figure - 1. RV variations based on spectral line measurements. The red curve folded with the best-fit orbital period.



Based on the inclination angle of $i = 79^\circ$ and the primary component’s mass of approximately $3 \pm 0.2 M_\odot$, both derived from spectral energy distribution (SED) modeling (Khokhlov et al., 2022), the mass of the secondary component was estimated using the standard mass function. For the adopted inclination, the resulting mass is $0.327 \pm 0.020 M_\odot$ (Fig. 2). The primary mass value accounts for luminosity attenuation caused by circumstellar dust, which also explains the observed significant optical dimming and the infrared excess due to dust re-emission.

Table №1 - Comparison of orbital parameters

	Elements	Value
1	P (days)	23.97 ± 0.01
2	T_0 (HJD)	3376.45 ± 0.70
3	γ ($\text{km} \times \text{s}^{-1}$)	1.89 ± 1.47
4	K_1 ($\text{km} \times \text{s}^{-1}$)	10.45 ± 1.70
5	$f(m)$, M_\odot	0.003 ± 0.002
6	N	20

Parameters listed are as follows (line number): 1—orbital period, 2—periastron (elliptical) or superior conjunction (circular), HJD – 2,450,000., 3—systemic velocity, 4—semi-amplitude of the RV variation of the visible component, 5—mass function, and 6—number of spectra used in the orbit calculation.

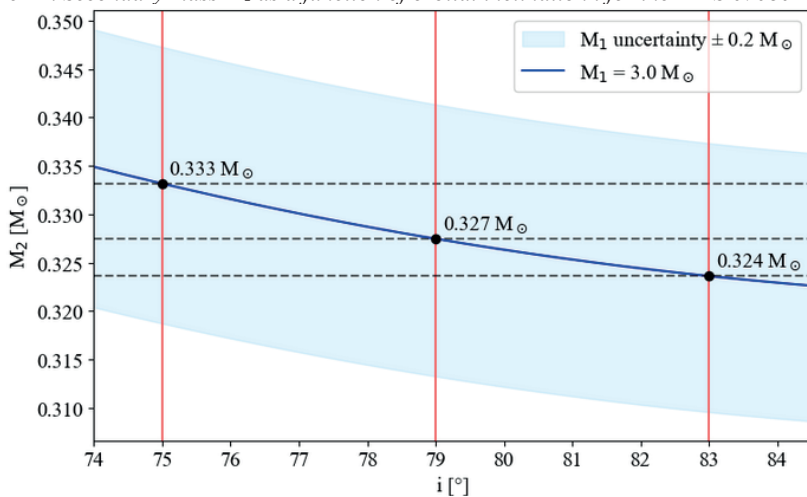
This estimated companion mass suggests that the system likely contains a compact object, such as a low-mass main-sequence star, a white dwarf, or another degenerate

companion. Importantly, to assess the robustness of this estimate, we considered a range of inclination angles, varying it within $i = 79 \pm 4^\circ$. This range reflects the uncertainty associated with the disk inclination derived from SED fitting and directly affects the derived secondary mass. When recalculating the mass function over this interval, the secondary mass was found to vary between approximately 0.31 and $0.35 M_\odot$, which still excludes a luminous companion and reinforces the interpretation that the secondary is a compact, low-luminosity object.

Furthermore, no spectral signatures attributable to a secondary component were detected in the optical spectrum, lending additional support to the scenario of a faint or degenerate companion. If the secondary were a luminous giant or an intermediate-mass star, its spectral contribution would likely be detectable in high-resolution spectra or manifest in significant photometric variability inconsistent with the observed light curve.

Taken together, the derived mass function, the inclination constraints from SED fitting, and the spectroscopic non-detection of the secondary all converge toward a consistent picture in which the companion is a low-mass, compact object. These findings are consistent with expectations for post-common-envelope binaries, where a substantial portion of the envelope mass has been lost and the secondary star remains in a tight orbit following the interaction.

Figure - 2. Secondary mass M_2 as a function of orbital inclination i for the IRAS 07080+0605.



Dependence of the secondary mass M_2 on the orbital inclination angle i (Fig. 2), assuming a fixed primary mass of $M_1 = 3.0 M_\odot$ and an observed mass function $f(m) = 0.003 M_\odot$. The solid blue curve represents the best-fit solution for M_2 , while the light blue shaded region corresponds to the uncertainty caused by $\pm 0.2 M_\odot$ variation in M_1 . Vertical red dashed lines indicate selected inclination angles (75° , 79° , and 83°) used for comparison.

IRAS 07080+0605 is considered a system transitioning towards the post-AGB phase. Our analysis of RV has revealed an orbital period of ~ 24 days, which is significantly shorter than the typical orbital periods observed in most post-AGB binary systems, which usually range from several hundred to several thousand days (Bollen et al., 2022; Kluska et al., 2022)

Such a compact orbit is too small to accommodate a fully expanded AGB star, implying that the primary's envelope was shed during a CE phase. In a CE event, a companion is engulfed by the giant's extended envelope, and the two cores spiral inward while orbiting inside a single envelope. Dynamical friction (drag forces) within the envelope transfers orbital energy and angular momentum from the binary's orbit to the envelope gas. This process leads to a rapid orbital decay: the released orbital energy heats and accelerates the envelope. If sufficient energy and momentum are deposited to overcome the envelope's binding energy, the envelope is ejected, leaving behind a close binary system; otherwise the two stars may merge. (Ropce et al., 2022).

In the case of IRAS 07080+0605, the observed ~ 24 -day orbit and low radial-velocity amplitude (only $\sim 10 \text{ km s}^{-1}$) indicate the presence of a low-mass secondary star that likely survived the spiral-in phase within a common-envelope interaction. The drastic shrinkage from a giant-star radius separation down to an orbit of only $\sim 0.2 \text{ AU}$ strongly suggests a common-envelope ejection as the mechanism for forming this close pair (Oomen et al., 2018; Izzard et al., 2012).

During the CE phase, the expanding envelope of the AGB star engulfs its close companion, and intense drag forces within the shared envelope cause the companion to spiral inward. As a result, orbital energy and angular momentum are transferred to the envelope gas, leading to a dramatic reduction in orbital separation. This process lays the groundwork for the formation of compact binaries with short-period orbits of only a few days (Izzard et al., 2012), as well as close pairs of white dwarfs, neutron stars, X-ray binaries, and other compact systems (Webbink, 2007; Ropce et al., 2022). CE evolution is considered one of the most important yet least understood processes that determine the formation of close pairs of compact objects (Ivanova, 2011).

Discussion. IRAS 07080+0605 appears to be an unusual post-AGB object in that its orbital period ($\sim 24 \text{ d}$) is extremely short compared to most known post-AGB binaries. In contrast, binaries that do pass through a common envelope typically end up with periods of only a few days (Oomen et al., 2018). For example, many close binary central stars of planetary nebulae (the products of CE ejection on the AGB) have orbital periods of hours to days. Surveys of planetary nebula nuclei in the Galactic bulge show a clustering of periods shorter than 1 day, with a tail up to a few days – these systems are essentially the lower-mass analogues of IRAS 07080+0605, where the primary has already become a hot white dwarf core. A notable case is the binary core of the PN Hen 2-428, which has a period of only 0.17 days and is believed to be a double-degenerate system formed via CE evolution (Miszalski et al., 2009).

According to classical models (Webbink, 2007), when a companion spirals into the envelope of a red giant or AGB star, orbital energy and angular momentum are transferred

to the envelope. If the deposited energy exceeds the envelope's binding energy, it may become unbound and ejected from the system, forming either a wide outflow or a bound equatorial disk — the latter often seen in systems like IRAS 07080+0605. The presence of such a bound disk, as opposed to a freely expanding outflow, serves as additional evidence supporting a common-envelope evolution scenario in this system.

Recent 3D hydrodynamic simulations (Ricker et al., 2012) support this scenario. They demonstrate that CE interactions can naturally produce post-AGB binaries with short-period orbits on the order of 0.2–1 AU, surrounded by residual disk-like structures, especially when the ejection is asymmetric. Post-AGB stars still burning helium (or hydrogen) in a shell, like IRAS 07080+0605, are rarely seen with periods as short as a few tens of days because they evolve quickly: after envelope ejection, the core contracts and heats up to become a planetary nebula nucleus on timescales of 1000–10000 years. The properties of IRAS 07080+0605 (B[e]-type emission, a dusty disk) point to an object that has recently shed its envelope and has not yet fully heated up.

Another noteworthy analog is HD 101584, a binary system that underwent a premature termination of its giant phase. ALMA observations of HD 101584 reveal a complex bipolar and equatorial outflow structure; this is interpreted as the result of a common-envelope ejection that halted just before merger, leaving a subgiant core and a companion with a circumbinary nebula. The estimated kinematic age of the outflows is approximately 770 years (assuming a distance of 1 kpc), suggesting that the envelope ejection occurred relatively recently. This timescale supports the interpretation of HD 101584 as a system caught in a transitional post-common-envelope phase (Olofsson et al., 2019). HD 101584 thus provides rare direct evidence of a common-envelope interaction caught in progress, where the anisotropic envelope ejection was likely driven by a spiral-in companion. Such dynamics are highly consistent with the morphology and orbital configuration inferred for IRAS 07080+0605, suggesting that it too may represent an outcome of an incomplete or stalled CE phase. These examples reinforce the interpretation that short-period binaries like IRAS 07080+0605 are best understood as post-common-envelope systems – analogous to close binary central stars of planetary nebulae, but observed at an earlier evolutionary stage.

Conclusion. Our study of IRAS 07080+0605 reveals a remarkable example of a binary star emerging from an episode of strong binary interaction. The object is characterized by an A-type luminous component embedded in a dusty circumstellar disk, and a close companion in a ~ 24 -day orbit. It exhibits significant dust-driven variability (190-day quasi-cycle) and shows evidence of substantial extinction along the line of sight. Notably, IRAS 07080+0605 does not show the heavy-element depletion seen in many post-AGB binaries with dusty disks (no evidence of the photospheric metal deficiency that is common in evolved post-AGB stars), and no extended nebula is detected around the system. These findings suggest that while the star has left AGB, it has undergone a different evolutionary pathway than the canonical stable post-AGB mass transfer scenario.

We propose that IRAS 07080+0605's properties can be consistently explained by a

recent CE event in this binary system. The short orbital period and presence of a compact circumbinary envelope are consistent with a common-envelope ejection scenario, wherein the primary star's envelope was shed as the companion spiraled inward. This process would naturally produce a tight binary remnant with a period of only a few weeks, as observed, and can account for the formation of the dust-rich circumbinary disk. Our interpretation aligns with theoretical expectations and other studies of CE evolution: a common-envelope phase is expected to create close binaries out of initially wider systems, leaving behind two stellar cores in a tight orbit. In the case of IRAS 07080+0605, the primary star appears to be on the cusp of the post-AGB stage, having had its evolution truncated by the CE event before it could develop a typical extended planetary nebula. This system thereby bridges the gap between classical post-AGB binaries with long-period orbits and the close binary central stars of planetary nebulae that result from common-envelope interactions.

In summary, the evidence points toward IRAS 07080+0605 being a post-common-envelope binary system. Although the common-envelope phase in this system cannot be confirmed with certainty, the available evidence – including orbital characteristics and analogies with other post-interaction binaries – is consistent with such a scenario. Continued observations and modeling efforts will be essential to evaluate this possibility further. IRAS 07080+0605 stands out as a promising system for probing the dynamics of binary interaction and post-AGB evolution.

References

- Miroshnichenko A.S., Manset N., Kusakin A.V., Chentsov E.L., Klochkova V.G., Zharikov S.V., Gray R.O., Grankin K.N., Gandet T.L. & Bjorkman K.S. (2007) Toward understanding the B[e] phenomenon. II. New Galactic FS CMa stars. *The Astrophysical Journal*, 671. — 828 p. DOI: 10.1086/523094 (in English)
- Miroshnichenko A.S., Chari R., Danford S., Prendergast P., Aarnio A.N., Andronov I.L., Chinarova L.L., Lytle A., Amantayeva A., Gabitova I.A. & others. (2023) Searching for phase-locked variations of the emission-line profiles in binary Be stars. *Galaxies*, 11(4), 83. DOI: 10.3390/galaxies11040083 (in English)
- Kohoutek L. & Wehmeyer R. (1999) Catalogue of H-alpha emission stars in the Northern Milky Way. *Astronomy and Astrophysics Supplement Series*, 134(2). — P. 255–256. DOI: 10.1051/aas:1999101 (in English)
- Condori C.A.H., Fernandes M.B., Kraus M., Panoglou D. & Guerrero C.A. (2019) The study of unclassified B[e] stars and candidates in the Galaxy and Magellanic Clouds. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 488. — P. 1090–1110. DOI: 10.1093/mnras/stz1540 (in English)
- Khokhlov S.A., Miroshnichenko A.S., Zharikov S.V., Grankin K.N., Zakhozhay O.V., Manset N., Arkharov A.A., Efimova N., Klimanov S., Larionov V.M. & others. (2022) Toward understanding the B[e] phenomenon. VIII. Nature and variability of IRAS 07080+0605. *The Astrophysical Journal*, 932. — 13 p. DOI: 10.3847/1538-4357/ac6de0 (in English).
- Mink J.D. & Kurtz M. (1998) RVSAO 2.0: Digital redshifts and radial velocities. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 110. — 934 p. DOI: 10.1086/316207 (in English).
- Scargle J.D. (1982) Studies in astronomical time series analysis. II. Statistical aspects of spectral analysis of unevenly spaced data. *The Astrophysical Journal*, 263. — P. 835–853. DOI: 10.1086/160554 (in English).
- Foreman-Mackey D., Hogg D.W., Lang D. & Goodman J. (2013) emcee: The MCMC hammer. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 125, 306. DOI: 10.1086/670067 (in English).
- Bollen D., Kamath D., Van Winckel H., De Marco O., Verhamme O., Kluska J. & Wardle M. (2022) The structure of jets launched from post-AGB binary systems. *Astronomy & Astrophysics*, 666, A40. DOI: 10.1051/0004-6361/202243429 (in English).

Kluska J., Van Winckel H., Coppée Q., Oomen G.M., Dsilva K., Kamath D., Bujarrabal V. & Min M. (2022) A population of transition disks around evolved stars: Fingerprints of planets. Catalog of disks surrounding Galactic post-AGB binaries. *Astronomy & Astrophysics*, 658, A36. DOI: 10.1051/0004-6361/202141690 (in English).

Roepke F.K. & De Marco O. (2022) Simulations of common-envelope evolution in binary stellar systems: Physical models and numerical techniques. DOI: 10.48550/arXiv.2212.07308 (in English).

Oomen G.M., Van Winckel H., Pols O., Nelemans G., Escorza A., Manick R., Kamath D. & Waelkens C. (2018) Orbital properties of binary post-AGB stars. *Astronomy & Astrophysics*, 620, A85. DOI: 10.1051/0004-6361/201833816 (in Eng).

Izzard R.G., Hall P.D., Tauris T.M. & Tout C.A. (2011) Common envelope evolution. In: Machado A., Stanghellini L. & Schönberner D. (Eds.), *Planetary Nebulae: An Eye to the Future*, IAU Symposium No. 283, International Astronomical Union. — P. 95–102. DOI: 10.1017/S1743921312010769 (in English).

Webbink R.F. (2007) Common envelope evolution redux. Springer, arXiv:0704.0280. DOI: 10.48550/arXiv.0704.0280 (in English).

Ivanova N. (2011) Common envelope: The progress and the pitfalls. ASP Conference Series, arXiv:1108.1226. DOI: 10.48550/arXiv.1108.1226 (in English).

Miszalski B., Acker A., Moffat A.F.J., Parker Q.A. & Udalski A. (2009). Binary planetary nebula nuclei towards the Galactic bulge. I. Sample discovery, period distribution, and binary fraction. *Astronomy & Astrophysics*, 496(3). — P. 813–825. DOI: 10.1051/0004-6361/200811380 (in English).

Ricker P.M. & Taam R.E. (2012) An AMR study of the common envelope phase of binary evolution. *The Astrophysical Journal*, 746(1). — 74 p. DOI: 10.1088/0004-637X/746/1/74 (in English).

Olofsson H., Khouri T., Maercker M., Bergman P., Doan L., Tafoya D., Vlemmings W.H.T., Black J.H., Justtanont K., Lindqvist M. & Ramstedt S. (2019) HD 101584: Circumstellar characteristics and evolutionary status. *Astronomy & Astrophysics*. — 623 p, A153. DOI: 10.1051/0004-6361/201834897 (in English).

© E. Otunchi¹, A.A. Migunova², A. Umirzakov^{1*}, N. Tokmoldin³, 2025.

¹Satbayev University, Institute of Physics and Technology, Almaty, Kazakhstan;

² Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan;

³ Institute of Physics and Astronomy, University of Potsdam, Potsdam, Germany.

E-mail: a.umirzakov@sci.kz

EFFECT OF THE COMPOSITION OF THE FILM-FORMING SYSTEM ON THE PROPERTIES OF SnO₂ FILMS OBTAINED BY SPRAY PYROLYSIS

Otunchi E. — Master, Satbayev University, «Institute of Physics and Technology», Almaty, Kazakhstan, E-mail: e.otunchi@sci.kz, <https://orcid.org/0009-0006-4361-8099>;

Migunova A.A. — master of technical sciences, Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan, E-mail: anastassiya.migunova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5544-6905>;

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

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

Tokmoldin N. — PhD, Institute of Physics and Astronomy, University of Potsdam, Potsdam, Germany, E-mail: tokmoldin@pdi-berlin.de, <https://orcid.org/0000-0002-0663-0228>.

Abstract. This study investigates the influence of the precursor system composition on the structural and optical properties of tin dioxide (SnO₂) thin films synthesized via spray pyrolysis. Three types of precursor systems were employed: an ethanol-based solution containing SnCl₄·5H₂O, an aqueous hydrosol, and a 1:1 mixture of the two. Films were deposited onto glass substrates at 400 °C followed by thermal annealing. X-ray diffraction analysis revealed that all samples exhibit a tetragonal cassiterite structure; however, the unit cell parameters and degree of crystallinity were significantly affected by the solvent type. Films derived from the ethanol-based solution demonstrated a more ordered structure with parameters close to bulk SnO₂ (E_g ≈ 3.6 eV). In contrast, films synthesized from the hydrosol and the mixed system showed the formation of two and three non-stoichiometric solid solutions, respectively, resulting in an increased bandgap width of 4.0–4.1 eV. Morphological analysis using scanning electron microscopy revealed differences in uniformity and film density: ethanol-derived films exhibited a homogeneous structure, whereas hydrosol-based films showed less uniform coverage with cracks and low optical transmittance (≈ 35–40%). Optical measurements indicated that ethanol-based samples had the highest transparency (> 80%) and are suitable for use as transparent electrodes. The results demonstrate that varying the composition of

the precursor system is an effective strategy for controlling the structure, defect density, and optical properties of SnO₂ films, which is crucial for their application in solar cells, gas sensors, and optoelectronic devices.

Keywords: tin oxide, spray pyrolysis, film-forming system, structural properties, optical properties

The study was conducted with the financial support of the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (BR21881954).

© **Е. Отунчи¹, А.А. Мигунова², А.Г. Умирзаков^{1*}, Н. Токмолдин³, 2025.**

¹Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан;

² Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан;

³ Физика және Астрономия институты, Потсдам Университеті,
Потсдам, Германия.

E-mail: a.umirzakov@sci.kz

ЖАБЫН ТҮЗУШІ ЖҮЙЕ ҚҰРАМЫНЫҢ СПРЕЙ-ПИРОЛИЗ ӘДІСІМЕН АЛЫНҒАН SnO₂ ЖАБЫНДАРЫНЫҢ ҚАСИЕТІНЕ ӘСЕРІ

Отунчи Е. — магистр, Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: e.otunchi@sci.kz, <https://orcid.org/0009-0006-4361-8099>;

Мигунова А.А. — магистр технических наук, Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан,
E-mail: anastassiya.migunova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5544-6905>;

Умирзаков А.Г. — PhD студенті, Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан,

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

Токмолдин Н. — PhD, Физика және Астрономия институты, Потсдам Университеті, Потсдам, Германия,

E-mail: tokmoldin@pdi-berlin.de, <https://orcid.org/0000-0002-0663-0228>.

Аннотация. Бұл жұмыста спрей-пиролиз әдісімен алынған қалайы диоксиді (SnO₂) жұқа жабындарының құрылымдық және оптикалық қасиеттеріне жабын түзуші жүйенің құрамының әсері зерттелді. Синтез үшін үш түрлі жүйе қолданылды: этанол мен SnCl₄·5H₂O негізіндегі ерітінді, су негізіндегі гидрозолю және олардың 1:1 қатынасындағы қоспасы. Жабындар шыны төсеніштерге 400 °C температурада тұндырылып, кейінгі термиялық өңдеуден өткізілді. Рентгендік фазалық талдау барлық үлгілердің касситериттің тетрагональды құрылымына ие екенін көрсетті, алайда элементар ұяшық параметрлері мен кристалдылық дәрежесі еріткіш түріне байланысты айтарлықтай өзгерді. Этанол негізіндегі ерітіндіден алынған жабындар реттелген құрылыммен және көлемді SnO₂-ге жақын параметрлермен сипатталды (E_g ≈ 3,6 эВ). Гидрозолю мен қоспадан алынған жабындарда сәйкесінше екі және үш стехиометриялық емес қатты ерітінділердің түзілуі байқалды, бұл тыйым салынған аймақтың ені 4,0–4,1 эВ-ге дейін ұлғаюына алып келді. Сканерлеуші электрондық микроскоп көмегімен жүргізілген морфологиялық талдау жабындардың біртектілігі мен тығыздығындағы айырмашылықтарды

анықтады: этанол ерітіндісінен алынған жабындар біртекті құрылымға ие болса, гидрозоль негізіндегі жабындар жарықтармен және төмен жарық өткізгіштікпен ($\approx 35\text{--}40\%$) сипатталды. Оптикалық зерттеулер этанол негізіндегі үлгілердің ең жоғары мөлдірлікке ($> 80\%$) ие екенін көрсетті және оларды мөлдір электродтар ретінде қолдануға жарамды екенін дәлелдеді. Алынған нәтижелер жабын түзуші жүйенің құрамын өзгерту SnO_2 жабындарының құрылымын, ақаулылығын және оптикалық қасиеттерін басқарудың тиімді құралы екенін көрсетеді, бұл оларды күн батареяларында, газ сенсорларында және оптоэлектроникада қолдану үшін маңызды болып табылады.

Түйін сөздер: қалайы оксиді, спрей пиролизі, жабын түзетін жүйе, құрылымдық қасиеттері, оптикалық қасиеттері

Зерттеу Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі Ғылым комитетінің қаржылық қолдауымен (BR21881954) жүргізілді.

© Е. Отунчи¹, А.А. Мигунова², А.Г. Умирзаков^{1*}, Н. Токмолдин³, 2025.

¹ Satbayev University. Физико-технический институт, Алматы, Казахстан;

² Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан;

³ Институт физики и астрономии, Потсдамский университет,

Потсдам, Германия.

E-mail: a.umirzakov@sci.kz

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ПЛЕНКООБРАЗУЮЩЕЙ СИСТЕМЫ НА СВОЙСТВА ПЛЕНОК SnO_2 , ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СПРЕЙ-ПИРОЛИЗА

Отунчи Е. — магистр, Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан, E-mail: e.otunchi@sci.kz, <https://orcid.org/0009-0006-4361-8099>;

Мигунова А.А. — магистр технических наук, Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан, E-mail: anastassiya.migunova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5544-6905>;

Умирзаков А.Г. — PhD студент, Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан,

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

Токмолдин Н. — PhD, Институт физики и астрономии, Потсдамский университет, Потсдам, Германия,

E-mail: tokmoldin@pdi-berlin.de, <https://orcid.org/0000-0002-0663-0228>.

Аннотация. В данной работе исследовано влияние состава плёнокообразующей системы на структурные и оптические свойства тонких плёнок диоксида олова (SnO_2), полученных методом спрей-пиролиза. Для синтеза использовали три типа систем: раствор на основе этанола и $\text{SnCl}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, водный гидрозоль и их смесь в соотношении 1:1. Плёнки осаждали на стеклянные подложки при температуре 400°C с последующим отжигом. Рентгенофазовый анализ показал, что все образцы имеют тетрагональную структуру касситерита, однако параметры элементарной ячейки и степень кристалличности существенно зависят от типа растворителя.

Плѐнки, полученные основе этанола, характеризуются более упорядоченной структурой и параметрами, близкими к объёмному SnO_2 ($E_g \approx 3,6$ эВ). Для плѐнок, синтезированных из гидрозоля и смеси, наблюдалось формирование двух и трёх твёрдых растворов нестехиометрического состава соответственно, что приводило к увеличению ширины запрещѐнной зоны до 4,0–4,1 эВ. Морфологический анализ с использованием сканирующего электронного микроскопа выявил различия в однородности и плотности покрытия: плѐнки из этанолового раствора имели равномерную структуру, тогда как гидрозоль давал менее однородные покрытия с трещинами и низким светопропусканием (≈ 35 –40 %). Оптические исследования показали, что образцы из этанола обладают наибольшей прозрачностью (> 80 %) и пригодны для применения в качестве прозрачных электродов. Полученные результаты демонстрируют, что варьирование состава плѐнкообразующей системы является эффективным инструментом управления структурой, дефектностью и оптическими характеристиками плѐнок SnO_2 , что важно для их применения в солнечных элементах, газовых сенсорах и оптоэлектронике.

Ключевые слова: оксид олова, спрей пиролиз, пленкообразующая система, структурные свойства, оптические свойства

Исследование проведено при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (BR21881954).

Введение. Диоксид олова (SnO_2) – это важный полупроводниковый оксид с широкой запрещѐнной зоной $\sim 3,6$ – $3,9$ эВ, обладающий n -типом проводимости за счёт кислородных вакансионных дефектов. SnO_2 привлекает большое внимание благодаря своему успешному применению в качестве чувствительного материала газовых сенсоров и прозрачного проводящего оксида (TCO) для оптоэлектронных устройств (солнечные элементы, дисплеи и пр.) (Serenko et al., 2015). Тонкие плѐнки SnO_2 традиционно получают различными методами – вакуумными (магнетронное распыление, термическое испарение) и химическими (золь-гель, химическое осаждение из растворов). Среди них метод распылительного пиролиза (спрей-пиролиза) выделяется как один из наиболее простых, быстрых и экономичных подходов к формированию пленок оксида олова. В методе спрей-пиролиза аэрозоль прекурсорного раствора распыляется на разогретую подложку, где происходит термический распад (пиролиз) переносимых соединений с осаждением пленки на подложке. Такой подход не требует высокого вакуума, позволяет наносить покрытия на большие площади и легко варьировать состав путем добавления допантов непосредственно в раствор (Sánchez-García et al., 2012). При этом качество и характеристики получаемых плѐнок SnO_2 чрезвычайно чувствительны к параметрам процесса, особенно к составу пленкообразующего раствора (прекурсорной системы).

Состав исходной пленкообразующей системы включает химическую природу прекурсора олова, растворитель (или смесь растворителей), а также возможные добавки (комплексообразователи, допирующие соли и т.д.). Каждый из этих

факторов влияет на кинетику распада прекурсора, условия образования зародышей оксида и рост кристаллов на подложке, что в итоге определяет структуру и свойства плёнки. В частности, выбор органического или неорганического прекурсора может существенно изменить морфологию и кристаллографическую ориентацию образующихся зёрен SnO_2 . Так, классическими неорганическими прекурсорами являются соли олова, например, хлориды SnCl_2 и SnCl_4 , которые легко разлагаются при умеренных температурах с образованием SnO_2 , но при этом могут вводить посторонние анионы (например, Cl^-) в растущую плёнку. Органические же прекурсоры (различные комплексы или органометаллические соединения олова, например, алкокси- или карбоксилаты Sn(IV)) разлагаются с выделением органических продуктов, что может влиять на чистоту и структуру плёнки. В работе (Solis-Veliz, 1995, Sriram S. R. et al, 2022) сравнивались плёнки, полученные из органического алкоксидного прекурсора Sn(IV) tert-амилоксида и из неорганической соли $\text{SnCl}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$; было выявлено резкое различие морфологии: из алкоксидного раствора образуются высокотекстурированные сетчатые “волокнистые” структуры, тогда как хлорид олова даёт более гладкую поверхность с характерными кольцеобразными доменами. Таким образом, органические прекурсоры обычно способствуют формированию наноструктурированных пористых плёнок, тогда как неорганические соли могут приводить к более плотным и ровным покрытиям – это различие связывают с разными путями термолитического разложения и побочными продуктами (выделение CO_2 в случае органики против HCl при разложении хлоридов и т.п.).

Помимо природы соединения олова, критическую роль играет выбор растворителя, в котором готовят раствор для распыления. Растворитель определяет размер и испаряемость аэрозольных капель, скорость высыхания и первичного осаждения частиц на подложке, а также протекание реакций гидролиза/пиролиза. Часто применяются водные, спиртовые (например, на основе этанола, изопропанола) или смешанные растворы прекурсора. В данной работе авторы выполнили систематическое исследование влияния шести различных растворителей (H_2O , H_2O_2 , метанол, этанол, 1-пропанол, 2-пропанол) на свойства плёнок SnO_2 , полученных пиролизом растворов SnCl_2 (Paloly et.al., 2020). Согласно их данным, образцы, осаждённые из спиртовых растворов, имели более совершенную кристаллическую структуру (более выраженные дифракционные пики SnO_2) по сравнению с плёнками, полученными из водного или пероксидного раствора. Морфология также различалась: на подложках из спиртовых аэрозолей формировались наноструктурированные плёнки (состоящие из мелких связанных наночастиц), тогда как из водных/ H_2O_2 растворов образовывался относительно непрерывный «ковровый» покров из сросшихся зёрен. Различие в динамике испарения – быстрая сушка мелких капель спирта против более медленного высыхания воды – приводит к тому, что спиртовые растворители способствуют раннему образованию множества центров кристаллизации и росту нанокристаллов, тогда как водный раствор даёт крупные капли, осаждающиеся в виде аморфно-гелеобразного слоя с последующей кристаллизацией. Эти

различия сильно сказываются на оптических свойствах: пленки SnO₂, полученные из спиртовых растворов, обладают более высокой оптической прозрачностью в видимой области (>75%) и характеризуются интенсивным ультрафиолетовым фотолюминесцентным откликом (связанным с рекомбинацией носителей через донорные уровни кислородных вакансий), тогда как пленки из водного прекурсора значительно менее прозрачны и проявляют слабое люминесцентное свечение. Авторы рекомендуют метанол или этанол для получения SnO₂-пленок, предназначенных для применения в качестве TCO, и отмечают, что изопропанол и 1-пропанол также пригодны для выращивания наноструктурированных слоёв SnO₂.

Обобщая данные литературы, можно заключить, что состав пленкообразующей системы является ключевым фактором, определяющим микроструктуру и свойства плёнок SnO₂, получаемых методом спрей-пиролиза. Органические прекурсоры позволяют получать более пористые нанокристаллические плёнки с возможной текстурой, тогда как неорганические соли чаще дают плотные поликристаллические слои; выбор растворителя определяет скорость формирования частиц и степень кристалличности осадка. Через изменение состава раствора можно управлять размером кристаллитов и ориентацией плёнки, её морфологией (гладкая или наноструктурированная поверхность), оптической прозрачностью (за счёт различий в пористости и уровне дефектов, влияющих на рассеяние и поглощение света) и электрофизическими параметрами – концентрацией носителей, подвижностью и сопротивлением. Современные исследования концентрируются на подборе оптимальных сочетаний прекурсоров и растворителей для целевого применения пленок SnO₂. Так, для газовых сенсоров важна высокая удельная поверхность и дефектность материала (обеспечивающая чувствительность к адсорбции газов) – этого добиваются использованием органических прекурсоров и условий, ведущих к наноструктурированию (Malato *et al.*, 2009). Напротив, для прозрачных электродов (TCO) при создании солнечных элементов приоритетом является минимальное сопротивление и высокая прозрачность – достигаемые подбором таких компонентов раствора, которые дают максимально чистые, хорошо кристаллизованные плёнки (например, метанольные растворы SnCl₄ с добавками допантов типа F) (Lizarraga *et al.*, 2020; Ahmad, 2021). Несмотря на большое количество работ, посвященных спрей-пиролизу SnO₂, систематическое понимание влияния состава пленкообразующей системы всё ещё требует уточнения. Настоящее исследование направлено на углублённое изучение того, как различные типы прекурсоров олова и растворителей влияют на процессы формирования структуры, морфологии, степени кристалличности, а также на оптические и электрические свойства получаемых плёнок SnO₂. Такой подход позволит разработать научно обоснованные рекомендации по управлению свойствами пленок через состав исходного раствора, что важно для оптимизации технологий получения функциональных покрытий на основе диоксида олова.

Материалы и методы. Тонкие пленки оксида олова наносились на стеклянные подложки методом спрей пиролиза. Давление газа в компрессоре для нанесения

растворов составляло 50 кПа. Расстояние между подложкой и распылителем составляло 32 см. Раствор наносился на подложку, нагретую до 400°C. Затем образцы отжигались на электрической плитке при температуре 400 °C в течение 15 минут.

Для получения пленок оксида олова были использованы три пленкообразующие системы:

1. «SnCl₄ в этаноле» (№ 1). Пяти водный кристаллогидрат тетра хлорида олова растворяли в этаноле для получения системы с концентрацией ионов олова 0,11 моль/л. Для приготовления 0,11 М раствора «SnCl₄ в этаноле» (№ 1) использовали навеску 3,9072 г измельченного SnCl₄·5H₂O, который растворяли в 100 мл ректификованного этилового спирта (Межгосударственный стандарт – ГОСТ 5962-13). Хлорид олова (IV) является сильным комплексообразователем. При растворении кристаллогидрата олова (IV) в этаноле реагенты взаимодействуют с образованием химического соединения SnCl₄·4C₂H₅OH, которое можно представить в виде комплексного соединения, являющегося электролитом [Sn(C₂H₅OH)Cl₂]Cl₂. Поскольку в кристаллогидрате (как и в ректификованном этаноле) присутствует вода, можно предположить, что SnCl₄ подвергается гидролизу с образованием гидрата оксида олова SnO₂·nH₂O (где n=1÷2) и гексахлороловянной кислоты H₂[SnCl₆]. В нашем случае:

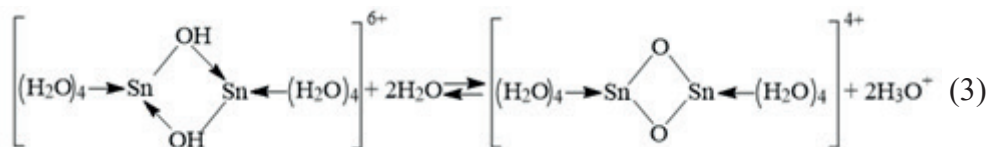


Окончательное разложение SnO₂·nH₂O до SnO₂ происходит на поверхности подложки при прогреве образца после нанесения.

2. «Гидрозоле» (№2). Для получения гидрозоля – водный раствор SnCl₄·5H₂O с концентрацией ионов олова 0,11 моль/л нагревали на электроплитке при 100°C в течение 1.5 часов до изменения цвета раствора. При этом образовался SnO₂·nH₂O в жидкой фазе до распыления, согласно реакции:

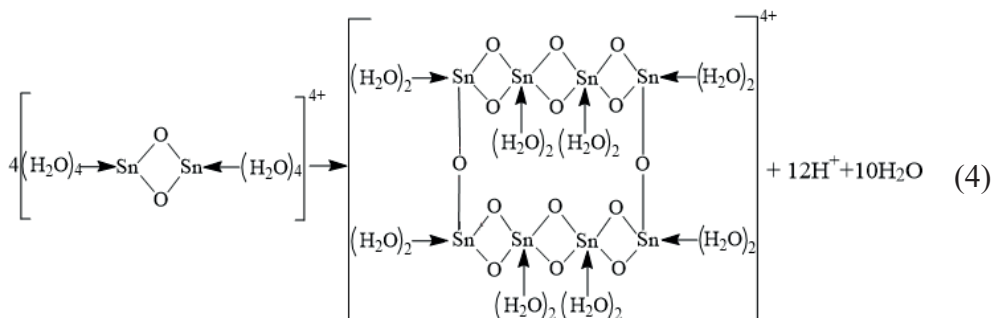


Наблюдаемое выпадение гелеобразного осадка связано с образованием гидрата оксида олова SnO₂·nH₂O (где n=1÷2), т.е. оловянной кислоты (Dmitriyeva, 2024). Первоначально образуется -оловянная кислота, которая может либо растворяться в кислой среде, либо по мере старения в результате оксоляции превращаться в β-оловянную кислоту:



β-оловянная кислота не растворяется в кислой среде раствора, а

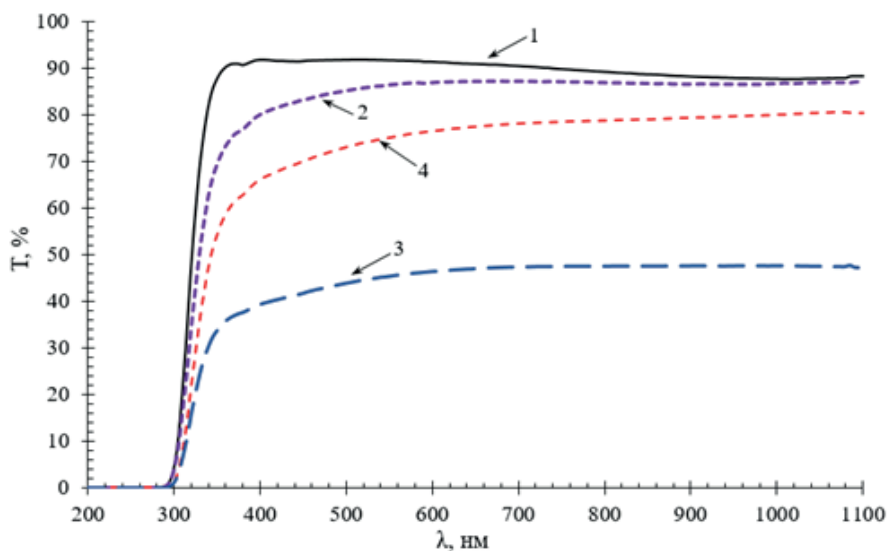
пептизируется ею. Далее, по мере старения, оксольные мостиковые группы соединяются друг с другом. Это приводит к укрупнению образующихся частиц (Tret'yakov, 2007):



3. «Смесь» (№3). Третья пленкообразующая система представляет смесь системы №1 «SnCl₄ в этаноле» и №2 «Гидрозоль». Соотношение систем в «Смеси» составляет 1:1 по объему.

Толщина образцов, определенная по изменению массы образца, для всех пленок составила 500±15 нм. Спектры пропускания снимались на спектрофотометре UNICO SpectroQuest 2800. Измерение пропускания происходит при падении светового потока по нормали к образцу. Ширина запрещенной зоны определялась из спектров пропускания методом Таука (Shongalova, 2018; Shongalova, 2020; Fernandes, 2019). Для корректного определения ширины запрещенной зоны прозрачной пленки, нанесенной на прозрачную подложку, из спектров поглощения образцов вычитались спектры поглощения подложки. Метод Таука основан на уравнении $(\alpha h\nu)^n = A (h\nu - E_g)$, где α — коэффициент оптического поглощения, см⁻¹; h — постоянная Планка ($4,136 \times 10^{-15}$ эВ·с); ν — частота электромагнитных колебаний в оптическом диапазоне, с⁻¹; n — показатель степени, зависящий от зонной структуры полупроводника (для прямозонных $n = 2$, для непрямозонных $n = 1/2$); A — константа, зависящая от эффективной массы носителей заряда в материале; E_g — ширина запрещенной зоны полупроводника, эВ. Дифрактометрические измерения выполнены на универсальном комплексе D8 ADVANCE (Bruker, Германия), схема съемки « θ - θ » по Брэггу-Брентано, трубка с медным анодом (длина волны 1,5406 Å), рабочие параметры на трубке 40 кВ, 40 мА, диапазон углов по 2θ 20-90°. Качественный фазовый анализ выполнен в программе EVA. Для идентификации фазового состава использована база данных ICDD: International Centre of Diffraction Data (порошковая база данных PDF2). Для установленной фазы подходят карточки № 41-1445 (Star) и 02-1340 (Deleted). Съемка производилась с вращением держателя с образцом на угловой скорости 60 об/мин в программе Adjust. Расчет параметров кристаллической решетки выполнен в программе RTP после определения углового положения рефлексов фазы SnO₂ в программе EVA. Исследование структуры пленок проводилось на сканирующем электронном микроскопе JSM-6490LA фирмы JEOL.

Результаты и обсуждение. На рисунке 1 представлены спектры пропускания исследуемых образцов.

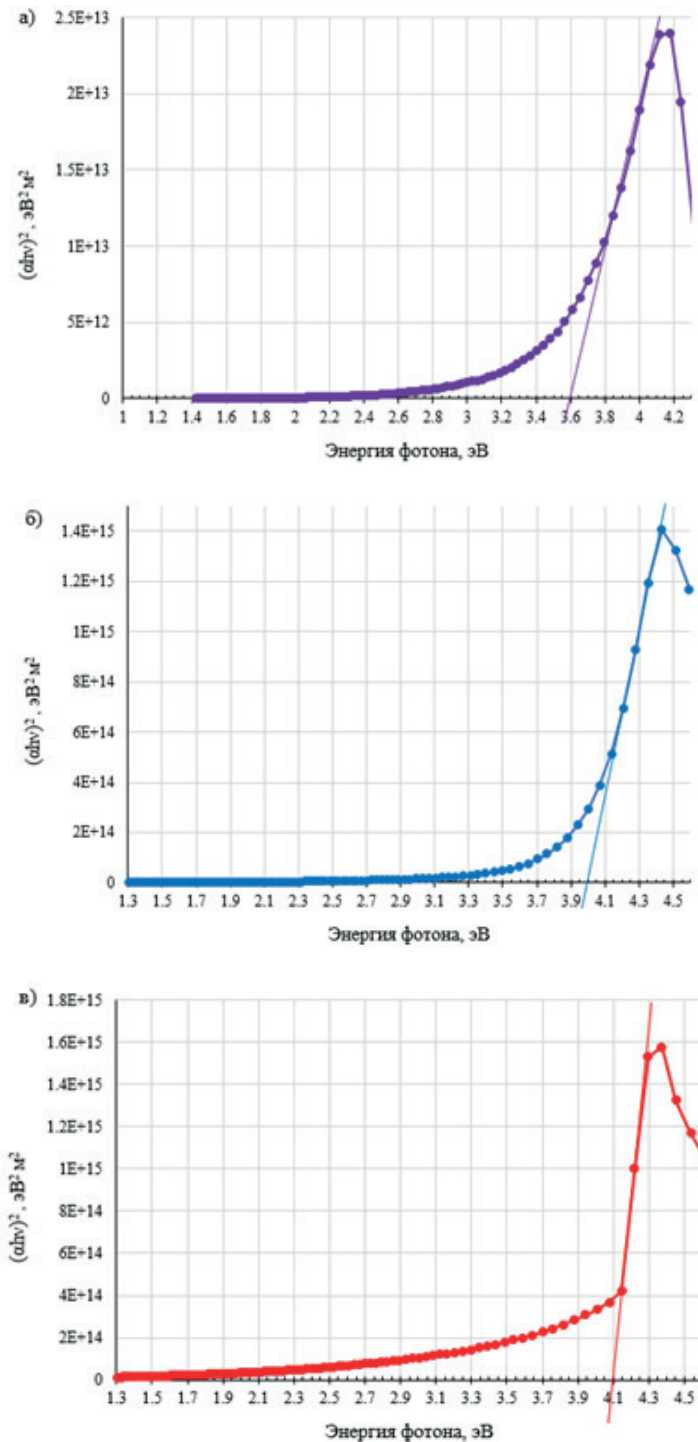


1 – стекло, 2 – №1 «SnCl₄ в этаноле», 3 – №2 «Гидрозоль», 4 – №3 «Смесь»

Рис 1. Спектры пропускания тонких пленок оксида олова

Из рисунка 1 видно, что пропускание образцов №1 «SnCl₄ в этаноле» (кривая 2) составляет более 80% в видимой области. А в ближней инфракрасной области пропускание близко к пропусканию стеклянной подложки (кривая 1). Согласно ГОСТ, для использования покрытий в окнах, и в частности, в автомобильных стеклах, общее светопропускание стекла с покрытием должно быть не менее 70% [ГОСТ 32565-2013]. Образцы №2 «Гидрозоль» и №3 «Смесь» демонстрируют меньшее светопропускание. Светопропускание образца №2 «Гидрозоль» составляет 35-40% в интервале длин волн от 400 нм до 1100 нм. Это указывает на неоднородную структуру как самой пленки, так и ее поверхности. Уменьшение интенсивности, прошедшего через образец, светового потока, чаще всего, связано с рассеянием на дефектах, размеры которых соизмеримы или больше длины волны прошедшего электромагнитного излучения. Пропускание образца №3 «Смесь» (рис.1 кривая 4) составляет 65-75% в интервале длин волн от 400 нм до 1100 нм. Спектр пропускания этого образца занимает промежуточное положение между спектрами образца №1 «SnCl₄ в этаноле» (кривая 2) и образца №2 «Гидрозоль» (кривая 3). Что указывает на промежуточную плотность структуры образца.

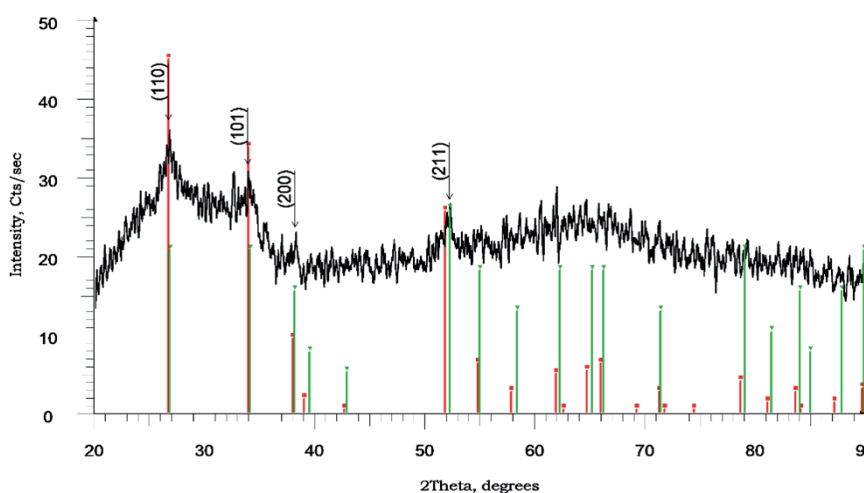
Определение ширины запрещенной зоны образцов по спектрам пропускания производилось графическим методом Таука. Результаты расчетов представлены на рисунке 2.



а – №1 «SnCl4 в этаноле», б – №2 «Гидрозоль», в – №3 «Смесь»
 Рис 2. Расчет ширины запрещенной зоны методом Таука

Из рисунка 2а видно, что ширина запрещенной зоны для образца № 1 «SnCl₄ в этаноле» составляет 3,6эВ. Что хорошо согласуется с энергией запрещенной зоны объемного тетрагонального SnO₂ ($E_g = 3,60$ эВ) (Дмитриева, 2018; Dmitriyeva, 2023; Li, 2025). Ширина запрещенной зоны для образца №2 «Гидрозоль» составляет 4,0 эВ, а для образца №3 «Смесь» – 4,1 эВ. Расширение запрещенной зоны может объясняться нарушением кристаллической решетки (Matteo, 2022). Эти нарушения могут быть вызваны изменениями условия синтеза (Murzalinov, 2022).

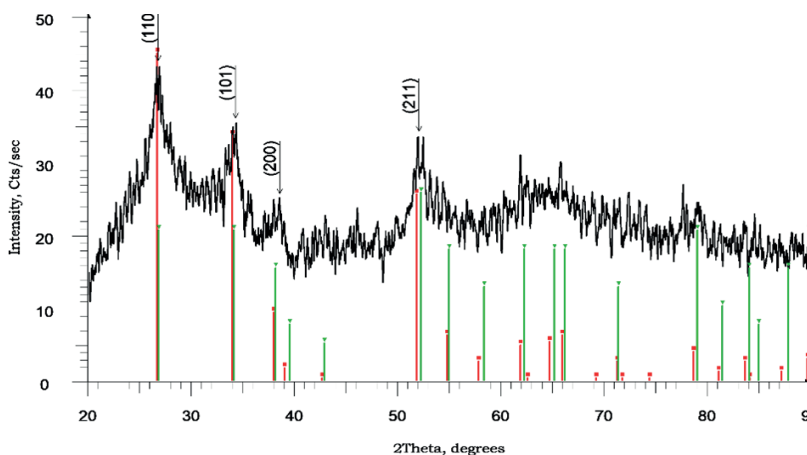
Для определения кристаллической структуры образцов был проведен рентгеноструктурный анализ. На рисунке 3 представлена рентгенограмма образца № 1 «SnCl₄ в этаноле».



Красные линии - карточка № 41-1445 (касситерит SnO₂), зеленые линии - карточка № 02-1340 (касситерит SnO₂)

Рис 3. Рентгенограмма образца № 1 «SnCl₄ в этаноле»

Из рисунка 3 видно, что образец № 1 «SnCl₄ в этаноле» состоит из кристаллитов SnO₂. Идентифицируются четыре кристаллографические плоскости с индексами Миллера (110), (101), (200), (211). В программе RTP, был выполнен расчет параметров кристаллической решетки и было определено для образца №1 «SnCl₄ в этаноле» тип кристаллической решетки – тетрагональный. Параметры примитивной ячейки составляют: $a=(4.6906 \pm 0.0065)$ Å; $c=(3.1818 \pm 0.0125)$ Å, что хорошо согласуется с данными карточек базы (41-1445: $a=4.738$ Å и $c=3.187$ Å, № 02-1340: $a=4.72$ Å и $c=3.17$ Å)

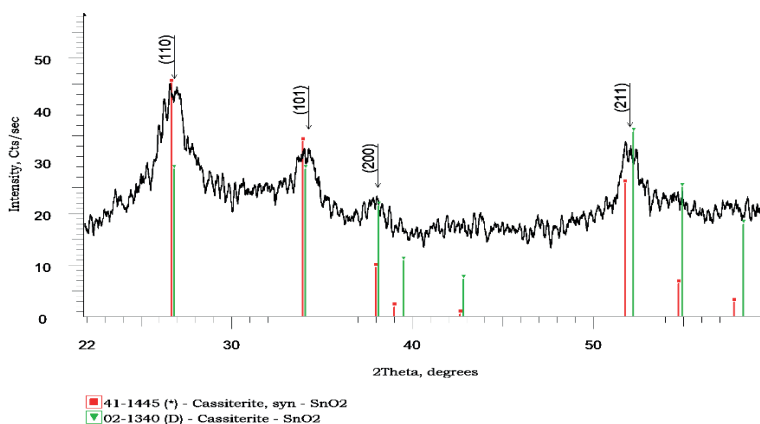


Красные линии - карточка № 41-1445 (касситерит SnO_2), зеленые линии - карточка № 02-1340 (касситерит SnO_2)

Рис 4. Рентгенограмма образца № 2 «Гидрозоля»

Из рисунка 4 видно, что образец № 2 «Гидрозоля», также, как и образец №1 « SnCl_4 в этаноле», состоит из кристаллитов SnO_2 сформированных по кристаллографическим плоскостям (110), (101), (200), (211). В то же время, можно наблюдать, что все четыре рефлекса представляют собой дублеты. Это указывает на присутствие двух твердых растворов оксида олова нестехиометрического состава. Результаты расчетов показывают очень хорошее совпадение по двум твердым растворам. В итоге, пленка, сформированная из гидрозоля, представляет собой смесь двух твердых растворов с тетрагональным типом кристаллической решетки и параметрами элементарной ячейки: раствор 1 – $a=(4.7343 \pm 0.0038) \text{ \AA}$, $c=(3.1726 \pm 0.0064) \text{ \AA}$; раствор 2 – $a=(4.6798 \pm 0.0037) \text{ \AA}$, $c=(3.1450 \pm 0.0061) \text{ \AA}$.

Рентгенограмма образца №3 «Смесь» представлена на рисунке 5.



■ 41-1445 (*) - Cassiterite, syn - SnO_2
 ▼ 02-1340 (D) - Cassiterite - SnO_2

Красные линии - карточка № 41-1445 (касситерит SnO_2), зеленые линии - карточка № 02-1340 (касситерит SnO_2)

Рис 5. Рентгенограмма образца № 3 «Смесь»

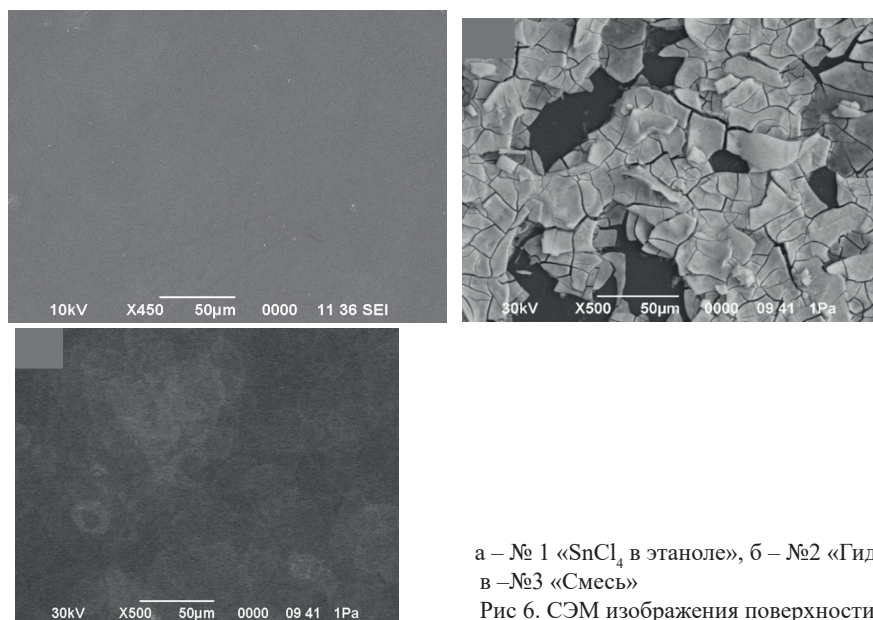
Из рентгенограммы образца №3 «Смесь» (рисунок 5) видно, что пленка не только состоит из кристаллитов SnO_2 сформированных по плоскостям (110), (101), (200), (211), но и представляет собой смесь трех твердых растворов. Поскольку, все четыре сформированных пика имеют триплетную структуру. Результаты расчета параметров решетки приведены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры решетки трех твердых растворов.

Раствор 1	Раствор 2	Раствор 3
$a=(4.7561 \pm 0.0279) \text{ \AA}$	$a=(4.7203 \pm 0.0152) \text{ \AA}$	$a=(4.6790 \pm 0.0048) \text{ \AA}$
$c=(3.1874 \pm 0.0514) \text{ \AA}$	$c=(3.1663 \pm 0.0281) \text{ \AA}$	$c=(3.1555 \pm 0.0069) \text{ \AA}$

Результаты проведенного рентгеноструктурного анализа согласуются с расчетами ширины запрещенной зоны. Образец №1 « SnCl_4 в этаноле» состоит из кристаллитов с одинаковым параметром элементарной ячейки, и ширина запрещенной зоны соответствует ширине запрещенной зоны объемного материала ($E_g = 3,60 \text{ эВ}$). Пленки, сформированные из «Гидрозоля» и «Смеси», состоят из двух и трех твердых растворов с отличными друг от друга параметрами элементарной ячейки. То есть количество таких дефектов, как вакансии Sn^{4+} и O^{2-} увеличивается с увеличением количества твердых растворов. Орбитальное перекрытие среди оставшихся Sn/O уменьшается, и это вызывает сужение полосы валентной зоны и зоны проводимости (Ke, W., 2017), что приводит к экспериментально наблюдаемому увеличению запрещенной зоны 4,0 эВ для образца №2 «Гидрозоля» и 4,1 эВ для образца №3 «Смесь».

На рисунке 6 приведены изображениям поверхности пленок сделанные на сканирующем электронно-силовом микроскопе.



а – №1 « SnCl_4 в этаноле», б – №2 «Гидрозоля», в – №3 «Смесь»

Рис 6. СЭМ изображения поверхности пленки

По СЭМ изображениям поверхности пленок, представленным на рис. 6, можно оценить влияние состава пленкообразующей системы на морфологию поверхности пленок, сформированных на стеклянной подложке. Как видно из рисунка 6 а образец № 1 «SnCl₄ в этаноле» обладает сплошной однородной структурой. Образец №2 «Гидрозоле» покрыт трещинами и слабо соединен с подложкой. О чем свидетельствуют пустые места на поверхности стеклянной подложке. Образец №3 «Смесь» обладает сплошной структурой. Наблюдаются отдельные каплевидные разводы, обусловленные методом нанесения. Что подтверждает сделанное при исследовании спектров пропускания предположении о дефектах в структуре, размеры которых соизмеримы или больше 300 нм.

Заключение. Анализ рентгеновских дифракционных данных показал, что все образцы обладают кристаллической структурой, соответствующей тетрагональной модификации SnO₂. Наиболее упорядоченная структура наблюдалась у образца, приготовленного на основе этанола (образец №1), что свидетельствует о благоприятных условиях кристаллизации в данной системе. Ширина запрещенной зоны этого образца, соответствует ширине запрещенной зоны объемного материала (E_g = 3,60 эВ). Пленки, сформированные из «Гидрозоля» и «Смеси», состоят из двух и трех твердых растворов нестехиометричного состава, с отличными друг от друга параметрами элементарной ячейки. Отклонение от стехиометрии вызывает сужение полосы валентной зоны и зоны проводимости, что приводит к экспериментально наблюдаемому увеличению запрещенной зоны до 4,0 эВ для образца №2 «Гидрозоле» и 4,1 эВ для образца №3 «Смесь». Морфологический анализ выявил существенное различие в степени однородности и плотности покрытия в зависимости от примененного пленкообразующего раствора.

Таким образом, метод спрей-пиролиза в сочетании с варьированием пленкообразующей системы представляет собой эффективный подход к управлению структурными и оптическими свойствами пленок SnO₂. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации технологии изготовления прозрачных проводящих покрытий и сенсорных устройств на основе диоксида олова.

Литература

Серенко С.А., Уваров Н.Ф., Гавриленко В.А. (2015) Получение и свойства прозрачных проводящих пленок диоксида олова, допированного фтором. Химия в интересах устойчивого развития. — Т. 23. — №. 1. — С. 103-106.

Sánchez-García M.A., Maldonado A., Castañeda L., Silva-González R., Luz Olvera M. (2012) Characteristics of SnO₂:F thin films deposited by ultrasonic spray pyrolysis: effect of water content in solution and substrate temperature. Materials Sciences and Applications. — Vol. 3, No. 10. — P. 690–696.

Solís Véliz J.L. (1995) Estudio de las propiedades como sensor de gas del a-SnWO₄.

Sriram S.R., Parne S.R., Pothukanuri N., Edla D.R. (2022) Prospects of spray pyrolysis technique for gas sensor applications – A comprehensive review. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis. — Vol. 164. — P. 105527.

Paloly A.R., Bushiri M.J. (2021) The effect of solvents on the growth and key properties of tin oxide thin films deposited via chemical spray pyrolysis. Materials Chemistry and Physics. — Vol. 261. — P. 124209

Malato S., Fernández-Ibáez P., Maldonado M.I., Blanco J., Gernjak W. (2009) Decontamination and

disinfection of water by solar photocatalysis: recent overview and trends. *Catalysis Today*. — Vol. 147, No. 1. — P. 1–59.

Lizarraga E., et al. (2020) YSZ thin film nanostructured battery for on-chip energy storage applications. *Journal of Energy Storage*. — Vol. 28. — P. 101220.

Ahmad T., Ansari M.Z. (2022) Enhancement of infrared shielding property of SnO₂ using Sb as a dopant. *Materials Research Express*. — Vol. 9, No. 10. — P. 105902.

Dmitriyeva E.A., Nurbaev B.M., Nikolaev A.M., Bondar E.A., Kovalenko A.S., Shilova O.A. (2024) Structure and properties of thin films prepared on flexible substrates from SnCl₄-derived solutions. *Coatings*. — Vol. 14. — P. 1343.

Tret'yakov Y.D., Martynenko L.I., Grigor'ev A.N., Tsivadze A.Y. (2007) Inorganic Chemistry. In: *Chemistry of Elements*, 2nd ed. Moscow State University Publishing House Akademkniga: Moscow, Russia. — Vol. 2. — 670 p.

Shongalova A., Correia M.R., Teixeira J.P., Leitão J.P., González J.C., Ranjbar S., Garud S., Vermang B., Cunha J.M.V., Salomé P.M. (2018) Growth of Sb₂Se₃ thin films by selenization of RF sputtered binary precursors. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. — Vol. 187. — P. 219–226.

Shongalova A., Aitzhanov M., Zhantuarov S., Urazov K., Fernandes P., Tokmoldin N., Correia M.R. (2020) Comparison of antimony selenide thin films obtained by electrochemical deposition and selenization of a metal precursor. *Materials Today Proceedings*. — Vol. 25. — P. 77–82.

Fernandes P.A., Shongalova A., Da Cunha A.F., Teixeira J.P., Leitão J.P., Cunha J.M.V., Bose S., Salomé P.M.P., Correia M.R. (2019) Phase selective growth of Cu₁₂Sb₄S₁₃ and Cu₃SbS₄ thin films by chalcogenization of simultaneous sputtered metal precursors. *Journal of Alloys and Compounds*. — Vol. 797. — P. 1359–1366.

Дмитриева Е.А., Мухамедшина Д.М., Мить К.А., Лебедев И.А., Грушевская Е.А. (2018) Влияние изотермического отжига на оптические и электрические свойства тонких пленок SnO₂ легированных фтором. *Вестник. Серия физическая. (Recent Contributions to Physics.)* — T.2 (65). — С. 68-75.

Dmitriyeva E.A., Lebedev I.A., Bondar E.A., Fedosimova A.I., Ibraimava S.A., Nurbaev B.M., Serikkanov A.S., Baytimbetova B.A. (2023) Influence of annealing time on the optical and electrical properties of tin dioxide-based coatings. *Eurasian Chemico-Technological Journal*. — Vol. 25. — P. 211–217.

Li C., Shu X., Zhang J., Delgado J., Bharathan P., Wang Y., Fang J. (2025) Controlled synthesis of SnO₂ nanocrystals with tunable band gaps. *Precision Chemistry*.

Pitaro M., Tekelenburg E., Shao S., Loi M.A. (2022) Tin halide perovskites: from fundamental properties to solar cells. *Advanced Materials*. — Vol. 34. — P. 2105844.

Murzalinov D.O., Dmitriyeva E.A., Lebedev I.A., Bondar E.A., Fedosimova A.I., Kemelbekova A.E. (2022) The effect of pH solution in the sol-gel process on the structure and properties of thin SnO₂ films. *Processes*. — Vol. 10, No. 1116.

Ke W., Stoumpos C.C., Zhu M., Mao L., Spanopoulos I., Liu J., Kanatzidis M.G. (2017) Enhanced photovoltaic performance and stability with a new type of hollow 3D perovskite FASnI₃. *Science Advances*. — Vol. 3, No. 8. — P. e1701293.

References

Serenko S.A., Uvarov N.F., Gavrilenko V.A. (2015) Preparation and Properties of Transparent Conductive Tin Dioxide Films Doped with Fluorine [Poluchenie i svoistva prozrachnykh provodyashchikh plenok dioksida olova, dopirovannogo ftorom]. *Chemistry for Sustainable Development*. — Vol. 23, No. 1. — P. 103–106. (in Russian).

Sánchez-García M.A., Maldonado A., Castañeda L., Silva-González R., Luz Olvera, M. (2012) Characteristics of SnO₂:F thin films deposited by ultrasonic spray pyrolysis: effect of water content in solution and substrate temperature. *Materials Sciences and Applications*. — Vol. 3, No. 10. — P. 690–696. (in English).

Solís Véliz J.L. (1995) Estudio de las propiedades como sensor de gas del a-SnWO₄. (in English).

Sriram S.R., Parne S.R., Pothukanuri N., Edla D.R. (2022) Prospects of spray pyrolysis technique for gas sensor applications – A comprehensive review. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*. — Vol. 164. — P. 105527. (in English).

Paloly A.R., Bushiri M.J. (2021) The effect of solvents on the growth and key properties of tin oxide thin films deposited via chemical spray pyrolysis. *Materials Chemistry and Physics*. — Vol. 261. — P. 124209. (in English).

Malato S., Fernández-Ibáez P., Maldonado M.I., Blanco J., Gernjak W. (2009) Decontamination and Disinfection of Water by Solar Photocatalysis: Recent Overview and Trends. *Catalysis Today*. — Vol. 147, No. 1. — P. 1–59. (in English).

Lizarraga E., et al. (2020) YSZ thin film nanostructured battery for on-chip energy storage applications. *Journal of Energy Storage*. — Vol. 28. — P. 101220. (in English).

Ahmad T., Ansari M.Z. (2022) Enhancement of infrared shielding property of SnO₂ using Sb as a dopant. *Materials Research Express*. — Vol. 9, No. 10. — P. 105902. (in English).

Dmitriyeva E.A., Nurbaev B.M., Nikolaev A.M., Bondar E.A., Kovalenko A.S., Shilova O.A. (2024) Structure and Properties of Thin Films Prepared on Flexible Substrates from SnCl₄-Derived Solutions. *Coatings*. — Vol. 14. — P. 1343. (in English).

Tret'yakov Y.D., Martynenko L.I., Grigor'ev A.N., Tsvadze A.Y. (2007) *Inorganic Chemistry. In Chemistry of Elements*, 2nd ed. Moscow State University Publishing House Akademkniga: Moscow, Russia. — Vol. 2. — 670 p. (in English).

Shongalova A., Correia M.R., Teixeira J.P., Leitão J.P., González J.C., Ranjbar S., Garud S., Vermang B., Cunha J.M.V., Salomé P.M. (2018) Growth of Sb₂Se₃ thin films by selenization of RF sputtered binary precursors. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. — Vol. 187. — P. 219–226. (in English).

Shongalova A., Aitzhanov M., Zhantuarov S., Urazov K., Fernandes P., Tokmoldin N., Correia M.R. (2020) Comparison of antimony selenide thin films obtained by electrochemical deposition and selenization of a metal precursor. *Materials Today Proceedings*. — Vol. 25. — P. 77–82. (in English).

Fernandes P.A., Shongalova A., Da Cunha A.F., Teixeira J.P., Leitão J.P., Cunha J.M.V., Bose S., Salomé P.M.P., Correia M.R. (2019) Phase selective growth of Cu₁₂Sb₄S₁₃ and Cu₃SbS₄ thin films by chalcogenization of simultaneous sputtered metal precursors. *Journal of Alloys and Compounds*. — Vol. 797. — P. 1359–1366. (in English).

Dmitriyeva E.A., Mukhamedshina D.M., Mit' K.A., Lebedev I.A., Grushevskaya E.A. (2018) Effect of Isothermal Annealing on the Optical and Electrical Properties of Fluorine-Doped SnO₂ Thin Films [Vliyaniye izotermicheskogo otzhiga na opticheskie i elektricheskie svoystva tonkikh plenok SnO₂ legirovannykh fluorom]. *Bulletin. Physics Series (Recent Contributions to Physics)*. — No. 2 (65). — P. 68–75. (in Russian).

Dmitriyeva E.A., Lebedev I.A., Bondar E.A., Fedosimova A.I., Ibraimava S.A., Nurbaev B.M., Serikkanov A.S., Baytimbetova B.A. (2023) Influence of annealing time on the optical and electrical properties of tin dioxide-based coatings. *Eurasian Chemico-Technological Journal*. — Vol. 25. — P. 211–217. (in English).

Li C., Shu X., Zhang J., Delgado J., Bharathan P., Wang Y., Fang J. (2025) Controlled Synthesis of SnO₂ Nanocrystals with Tunable Band Gaps. *Precision Chemistry*. (in English).

Pitaro M., Tekelenburg E., Shao S., Loi M.A. (2022) Tin Halide Perovskites: From Fundamental Properties to Solar Cells. *Advanced Materials*. — Vol. 34. — P. 2105844. (in English).

Murzalinov D.O., Dmitriyeva E.A., Lebedev I.A., Bondar E.A., Fedosimova A.I., Kemelbekova A.E. (2022) The effect of pH solution in the sol–gel process on the structure and properties of thin SnO₂ films. *Processes*. — Vol. 10, No. 1116. (in English).

Ke W., Stoumpos C.C., Zhu M., Mao L., Spanopoulos I., Liu J., Kanatzidis M.G. (2017) Enhanced photovoltaic performance and stability with a new type of hollow 3D perovskite FASnI₃. *Science Advances*. — Vol. 3, No. 8. — P. e1701293. (in English).

©U.A. Ualikhanova*, A.N. Abdipatta, O.V. Razina, A.M. Syzdykova,
G.S. Altayeva, 2025.

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

BULK VISCOSITY IN $f(T)$ GRAVITY AND ITS IMPACT ON COSMOLOGICAL EVOLUTION

Ualikhanova Ulbossyn — PhD, senior lecturer of the department of general and theoretical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, Orcid: 0000-0002-2351-0658;

Abdipatta Akmaral — 1st year master's student of the department of general and theoretical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: maral.abdipatta@gmail.com, Orcid: 0009-0002-9627-8041;

Razina Olga — PhD, associate professor of the department of general and theoretical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: olvikraz@mail.ru, Orcid: 0000-0002-4400-4789;

Syzdykova Arailym — PhD student of the department of general and theoretical physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, Orcid: 0000-0002-8999-6566;

Altayeva Gulsinay — Master of Natural Sciences, senior lecturer of the department of mathematics, physics and computer science, Shokan Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,

E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, Orcid: 0000-0002-2611-7413.

Abstract. In this study, we explore the modified cosmological equations in $f(T)$ gravity, incorporating a bulk viscous fluid and analyzing its effects on cosmic evolution. Bulk viscosity introduces an additional pressure component, which modifies the standard Friedmann equations, affecting the universe's expansion, acceleration, and singularity structure. Starting with the action functional of $f(T)$ gravity, we derive the field equations in a spatially flat FLRW universe, considering contributions from dust matter, radiation, and viscosity. The torsion scalar T is expressed in terms of the Hubble parameter, allowing us to reformulate the cosmological equations into a dynamical system. We introduce an effective pressure term that accounts for the bulk viscosity, modifying the second Friedmann equation. The phase space analysis reveals constraints between the Hubble parameter and energy densities of matter and radiation, leading to a parameterized evolution of the universe. Through graphical analysis, we examine the influence of different $f(T)$ models and bulk viscosity coefficients on cosmic

dynamics. Our results highlight that bulk viscosity can alter the expansion history, leading to deviations from the standard cosmological model. In particular, we discuss possible implications for late-time acceleration and early-universe dynamics. This work provides insights into the role of modified gravity and dissipative effects in cosmology, contributing to the broader understanding of alternative gravitational theories and their observational signatures.

Keywords: cosmology, dark energy, $f(T)$ gravity, bulk viscosity, observational constraints

© У.А. Уалиханова*, А.Н. Әбдіпатта, О.В. Разина, А.М. Сыздыкова,
Г.С. Алтаева, 2025.

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

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

$f(T)$ ГРАВИТАЦИЯСЫНДАҒЫ КӨЛЕМДІК ТҮТҚЫРЛЫҚ ЖӘНЕ ОНЫҢ КОСМОЛОГИЯЛЫҚ ЭВОЛЮЦИЯҒА ӘСЕРІ

Уалиханова Улбосын — PhD, Жалпы және теориялық физика кафедрасының аға оқытушысы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, Orcid: 0000-0002-2351-0658;

Әбдіпатта Ақмарал — Жалпы және теориялық физика кафедрасының 1-курс магистранты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: maral.abdipatta@gmail.com, Orcid: 0009-0002-9627-8041;

Разина Ольга — PhD, Жалпы және теориялық физика кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: olvikraz@mail.ru, Orcid: 0000-0002-4400-4789;

Сыздыкова Арайлым — Жалпы және теориялық физика кафедрасының PhD студенті, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, Orcid: 0000-0002-8999-6566;

Алтаева Гульсинай — жаратылыстану ғылымдары магистрі, математика, физика және информатика кафедрасының аға оқытушысы, Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,

E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, Orcid: 0000-0002-2611-7413.

Аннотация. Бұл зерттеуде біз $f(T)$ гравитациясындағы модификацияланған космологиялық теңдеулерді, соның ішінде көлемді тұтқыр сұйықтықты зерттейміз және оның ғарыштық эволюцияға әсерін талдаймыз. Көлемді тұтқырлық Ғаламның ұлғаюына, үдеуіне және ерекшелік құрылымына әсер ететін стандартты Фридман теңдеулерін өзгертетін қосымша қысым компонентін енгізеді. $f(T)$ гравитациясының функционалдық әрекетінен бастап, біз шаң, сәулелену және тұтқырлықтың үлестерін ескере отырып, кеңістіктік тегіс ФЛРУ Ғаламдағы өріс теңдеулерін шығарамыз. T бұралу скалярін космологиялық теңдеулерді динамикалық жүйеге қайта құруға мүмкіндік беретін Хаббл параметрі арқылы өрнектейміз. Екінші Фридман теңдеуін өзгерту арқылы көлемді тұтқырлықты ескеретін тиімді қысым терминін енгіземіз. Фазалық кеңістікті талдау Хаббл параметрі мен материя және радиация энергиясының тығыздығы арасындағы



шектеулерді анықтайды, бұл Ғаламның параметрленген эволюциясына әкеледі. Графикалық талдауды пайдалана отырып, біз әртүрлі $f(T)$ модельдерінің және көлемді тұтқырлық коэффициенттерінің кеңістік динамикасына әсерін зерттейміз. Біздің нәтижелеріміз көлемді тұтқырлықтың ұлғаю тарихын өзгерте алатынын, бұл стандартты космологиялық модельден ауытқуға әкелетінін көрсетеді. Атап айтқанда, біз Ғаламның кеш үдеуі мен ерте динамикасына ықтимал салдарын талқылаймыз. Бұл жұмыс космологиядағы модификацияланған гравитация мен диссипативті әсерлердің рөлі туралы түсінік береді, бұл балама гравитация теорияларын және олардың бақылау белгілерін кеңірек түсінуге ықпал етеді.

Түйін сөздер: космология, күңгірт энергия, $f(T)$ гравитациясы, көлемді тұтқырлық, бақылау шектері

Алғыс: зерттеу Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті қаржыландыруымен жүзеге асты (жоба № AP26101851).

©У.А. Уалиханова*, А.Н. Әбдіпатта, О.В. Разина, А.М. Сыздыкова,
Г.С. Алтаева, 2025.

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

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

ОБЪЕМНАЯ ВЯЗКОСТЬ В $f(T)$ ГРАВИТАЦИИ И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА КОСМОЛОГИЧЕСКУЮ ЭВОЛЮЦИЮ

Уалиханова Улбосын — PhD, старший преподаватель кафедры общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, Orcid: 0000-0002-2351-0658;

Абдіпатта Акмарал — магистрант 1 курса кафедры общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: maral.abdipatta@gmail.com, Orcid: 0009-0002-9627-8041;

Разина Ольга — PhD, ассоциированный профессор кафедры Общая и теоретическая физика, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: olvikraz@mail.ru, Orcid: 0000-0002-4400-4789;

Сыздыкова Арайлым — PhD докторант кафедры общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,
E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, Orcid: 0000-0002-8999-6566;

Алтаева Гульсинай — магистр естественных наук, старший преподаватель кафедры математики, физики и информатики, Кокшетауский университета имени Ш.Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,
E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, Orcid: 0000-0002-2611-7413.

Аннотация. В этом исследовании мы исследуем модифицированные космологические уравнения в гравитации $f(T)$, включающие объемную вязкую жидкость и анализирующие ее влияние на космическую эволюцию. Объемная вязкость вводит дополнительный компонент давления, который изменяет

стандартные уравнения Фридмана, влияя на расширение, ускорение и структуру сингулярности Вселенной. Начиная с функционала действия гравитации $f(T)$, мы выводим уравнения поля в пространственно плоской Вселенной FLRW, учитывая вклады пылевой материи, излучения и вязкости. Скаляр кручения T выражается через параметр Хаббла, что позволяет нам переформулировать космологические уравнения в динамическую систему. Мы вводим эффективный член давления, который учитывает объемную вязкость, изменяя второе уравнение Фридмана. Анализ фазового пространства выявляет ограничения между параметром Хаббла и плотностями энергии материи и излучения, что приводит к параметризованной эволюции Вселенной. С помощью графического анализа мы изучаем влияние различных моделей $f(T)$ и коэффициентов объемной вязкости на космическую динамику. Наши результаты подчеркивают, что объемная вязкость может изменять историю расширения, что приводит к отклонениям от стандартной космологической модели. В частности, мы обсуждаем возможные последствия для позднего ускорения и ранней динамики Вселенной. Эта работа дает представление о роли модифицированной гравитации и диссипативных эффектов в космологии, способствуя более широкому пониманию альтернативных гравитационных теорий и их наблюдательных сигнатур.

Ключевые слова: космология, темная энергия, $f(T)$ гравитация, объемная вязкость, пределы наблюдения

Кіріспе. Модификацияланған гравитация теорияларын зерттеуге олардың космологиядағы маңызды мәселелерді шешуге мүмкіндік беретіндігіне байланысты соңғы жылдары айтарлықтай назар аударылуда (Møller, 1961; Cho, 1976; Hayashi, 1977; Faraoni, 2011). Жалпы салыстырмалылық теориясының (ЖСТ) альтернативті нұсқалардың бірі ол $f(T)$ гравитациясы. Мұндағы гравитациялық әрекет қисықтық R скалярының жалпыланған функциясымен емес T бұралу скалярының жалпыланған функциясын пайдалану арқылы сипатталады. Бұл тәсілге гравитацияның геометриялық тұрғыдан басқаша, бірақ динамикалық эквивалентті формуласын ұсынатын жалпы салыстырмалық теориясының телепараллельдік эквиваленті туртки болды (Aldrovandi, 2013; Maluf, 2013; Linder, 2010; Li, 2011).

Бұл жұмыста біз $f(T)$ гравитациясындағы (Farrugia, 2016; Li, 2011; Yang, 2022) көлемді тұтқырлық арқылы модификацияланған космологиялық тендеулерді зерттейміз және олардың салдарын графикалық бейнелеу арқылы талдаймыз. Көлемді тұтқырлықты қосу эффективті қысым терминін енгізе отырып стандартты Фридман тендеулерін өзгертеді, сонымен қатар ұлғаю, үдеу және Хаббл тұрақтысы сияқты негізгі космологиялық параметрлерге әсер етеді. Бұл түрлендіру космологиялық тұрақтыны енгізуді қажет етпестен, Ғаламның кеш үдемелі ұлғаюын түсіну үшін маңызды.

Космологиядағы тұтқырлықты қарастырудың негізгі мақсаты ғарыштық сұйықтықтың Ғалам эволюциясының ерте және кейінгі кезеңдеріне нақты сипаттама беру қабілеті болып табылады. Тұтқыр әсерлер табиғи түрде жоғары

энергия физикасында және релятивистік гидродинамикада пайда болатындықтан модификацияланған гравитациялық модельдер контекстінде өзекті мәселе болып табылады (Ong, 2013: 1-2; Sharif, 2013: 2; Jarv, 2016). Талдауымызда біз Фридман-Леметр-Робертсон-Уолкер (ФРЛУ) метрикасы арқылы сипатталған біртекті және изотропты Ғаламға назар аударамыз және $f(T)$ гравитация (Krššák, 2016; Vamba, 2016) аясында көлемді тұтқырлықтың ғарыштық эволюцияға қалай әсер ететінін зерттейміз.

Ол үшін тұтқыр сұйықтық бар $f(T)$ гравитацияның өріс теңдеулерін шығарып, Хаббл параметрі арқылы өрнектейміз. Алынған теңдеулер жүйесіне Ғалам эволюциясын анықтайтын шектеулік теңдеуі мен динамикалық теңдеу кіреді (Paliathanasis, 2016:2; Hohmann, 2017:2-3). Содан кейін біз бұл теңдеулерді $f(T)$ нақты функционалдық формаларын қарастыру арқылы талдаймыз және олардың физикалық салдарын сандық және графикалық әдістер арқылы зерттейміз.

Сонымен қатар, біз жүйенің фазалық кеңістігін зерттейміз және бекітілген нүктелерді, олардың тұрақтылығы мен серпілу және айналу сценарийлерін қарастырамыз. Көлемді тұтқырлықты қосу осы шешімдер үшін тұрақтылық шарттарын анықтауда шешуші рөл атқарады. Біздің нәтижелеріміз $f(T)$ функцияларының белгілі бір таңдауы ерекшеліктерді болдырмау немесе циклдік эволюцияға мүмкіндік беру сияқты қажетті қасиеттері бар жарамды космологиялық модельдерге әкелуі мүмкін екенін көрсетеді.

Материалдар мен әдістер

$f(T)$ гравитациясының космологиялық динамикасы

Бұл бөлімде біз жалпы әрекет пен өріс теңдеулерінен бастап $f(T)$ гравитациясының космологиялық динамикасына қысқаша шолу жасаймыз. Бұл теңдеулер ФРЛУ (Фридман-Леметр-Робертсон-Уолкер) кеңістік уақыты үшін Хаббл параметрі арқылы өрнектелгенде, шектеу теңдеуі және динамикалық теңдеу пішінін қабылдайтынын көрсетеміз. Сонымен қатар, біз шаңды, сәулеленуді және тұтқырлықты қамтитын әлем үшін осы өріс теңдеулерін нақты түрде шығарамыз және олардың сәйкес үздіксіздік теңдеулерімен сәйкестігін тексереміз.

Есептеулеріміз $f(T)$ гравитациясының әрекет функционалынан басталады

$$S = \frac{1}{16\pi G} \int |e| f(T) d^4x, \quad (1)$$

$f(T)$ T-бұралу скалярның еркін функциясы болып табылады (Li, 2011, 4; Aldrovandi, 2013, 3). Бұралу скаляры келесідей анықталады

$$T = \frac{1}{4} T^{\rho\mu\nu} T_{\rho\mu\nu} + \frac{1}{2} T^{\rho\mu\nu} T^{\nu\mu\rho} - T^{\mu\rho}_{\mu} T^{\nu\rho}_{\nu}. \quad (2)$$

Теорияның негізгі айнымалысы - тетрада өрісі болса, онда бұралу тензоры келесі түрде өрнектеледі

$$T^{\rho\mu\nu} = \Gamma^{\rho}_{\nu\mu} - \Gamma^{\rho}_{\mu\nu} = e_i^{\rho} (\partial_{\mu} e_{\nu}^i - \partial_{\nu} e_{\mu}^i + \omega^i_{j\mu} e_{\nu}^j - \omega^i_{j\nu} e_{\mu}^j), \quad (3)$$

бұл жерде $\omega_{j\mu}^i$ - локалды лоренц инварианттылығын сақтау үшін енгізілген тегіс спин байланысы болып табылады.

Кеңістігі тегіс ФЛРУ ғаламы үшін тетраданы төмендегідей таңдаймыз

$$e_{\mu}^i = \text{diag}(1, a, a, a), \quad (4)$$

бұл жерде $a(t)$ - космологиялық масштаб факторы. Бұл жағдайда таңдалған тетрада «дұрыс» болады, ал инерциялық спин байланысы жойылып кетеді. Нәтижесінде, бұралу скаляры келесідей қалыпқа келеді

$$T = -6 \frac{\dot{a}^2}{a^2} = -6H^2, \quad (5)$$

мұндағы H Хаббл параметрін білдіреді. Біртектілік пен изотропия болжамына байланысты, материяның энергия-импульс тензоры идеал сұйықтық формасын алады

$$T^{\mu\nu} = (\rho + p)u^{\mu}u^{\nu} + pg^{\mu\nu}, \quad (6)$$

мұндағы ρ – энергия тығыздығы, p – қысым, төрт-жылдамдық

$$u^{\mu} = \partial_{\tau}. \quad (7)$$

Бұл $g_{\mu\nu} = \eta_{ij}e_{\mu}^ie_{\nu}^j$ метрикасының көмегімен нормаланады.

Әрекеттен космологиялық өріс теңдеулері мына түрде алынады

$$12H^2 f_T + f = 16\pi G\rho, \quad (8a)$$

$$48H^2 \dot{H} f_{TT} - (12H^2 + 4\dot{H})f_T - f = 16\pi Gp. \quad (8b)$$

мұндағы индекстер келесі туындыларды көрсетуге пайдаланылады

$$f_T = \frac{df}{dT}, \quad f_{TT} = \frac{d^2f}{dT^2}. \quad (9)$$

Осы жұмыстың барысында біз сәйкесінше космологиялық өріс теңдеулерін қайта жазуға мүмкіндік беретін $f(T) = T + F(T)$ параметрін енгіземіз

$$6H^2 + 12H^2 F_T + F = 16\pi G\rho, \quad (10a)$$

$$4\dot{H}(12H^2 F_{TT} - F_T - 1) = 16\pi G(\rho + p_{\text{eff}}). \quad (10b)$$

Тұтқыр сұйықтық үшін эффективті қысым мына түрде анықталады (Sharif, 2013, 3):

$$p_{\text{eff}} = p + \Pi, \quad (11)$$

мұндағы көлемді тұтқырлық қысымы

$$\Pi = -3\xi H. \quad (12)$$

Оны екінші Фридман теңдеуіне қойсақ:

$$4\dot{H}(12H^2 F_{TT} - F_T - 1) = 16\pi G(\rho + p - 3\xi H). \quad (13)$$

Шаң мен радиацияны ескере отырып, тығыздық пен қысым формулалары төмендегідей өзгереді:

$$\rho = \rho_m + \rho_r, \quad p = p_m + p_r - 3\xi H. \quad (14)$$

мұндағы күй теңдеуі

$$p_m = 0, \quad p_r = \frac{1}{3}\rho_r. \quad (15)$$

Осы қатынастардан материяның үздіксіздік теңдеулері төмендегідей шығады

$$\dot{\rho}_m = -3H\rho_m, \quad \dot{\rho}_r = -4H\rho_r. \quad (16)$$

Нәтижесінде, космологиялық өріс теңдеулері келесі түрде өрнектеледі (Hohmann, 2017, 5)

$$W = 16\pi G(\rho_m + \rho_r), \quad (17a)$$

$$-\dot{H} \frac{W_H}{3H} = 16\pi G \left(\rho_m + \frac{4}{3}\rho_r - 3\xi H \right), \quad (17b)$$

мұндағы төменгі индекс дифференциацияны білдіреді $W_H = \frac{dW}{dH}$. Бұл жерде сейкес Фридман функциясын T және H арасындағы (5) теңдеудегі қатынасты ескере отырып төмендегідей аламыз

$$W(H) = F + 6H^2 + 12H^2 F_T. \quad (18)$$

Бұл жұмыс барысында $W(H)$ функциясы кез келген $f(T)$ гравитация моделінің негізгі космологиялық ерекшеліктерін анықтай алатындығын көрсетеміз. (16) және (17) теңдеулер осы зерттеудің негізі болып табылады. Олар бір-бірінен тәуелсіз емес екенін ескеруіміз қажет. Талдау үшін біз бұл артықшылықты алып тастап, шектеусіз динамикалық жүйені алу үшін шектеу теңдеуін қолдануымыз керек.

Фазалық кеңістік және эволюция теңдеулері

Алдыңғы бөлімде біз Хаббл параметрінің H , ρ_m және ρ_r энергия тығыздықтары Фридман алгебралық шектеуіне байланысты тәуелсіз емес екенін көрдік (17). Осылайша, біздің динамикалық жүйеміздің физикалық фазалық кеңістігі кеңістіктегі 1 бағыттан гипербеті болып табылады

$$\{(H, \rho_m, \rho_r) | H \in (-\infty, \infty), \rho_m \in [0, \infty), \rho_r \in [0, \infty)\}, \quad (19)$$

оны келесідей параметрлендіреміз. Біз сәулеленудің жалпы энергия тығыздығына қатынасы бойынша жаңа айнымалыны енгіземіз

$$X = \frac{\rho_r}{\rho_r + \rho_m}. \quad (20)$$

Содан кейін бастапқы тығыздықтар келесідей өзгереді

$$\rho_r = X(\rho_r + \rho_m), \quad \rho_m = (1 - X)(\rho_r + \rho_m), \quad (21)$$

мұндағы оң жақтағы жалпы энергия тығыздығы Фридман шектеуімен (17а) H бойынша анықталады. Физикалық фазалық кеңістік $H \in (-\infty, \infty), X \in [0, 1]$ арқылы шектелетінін көруге болады.

Тағы бір шектеу Фридман шектеуінен және нөлдік энергия шартының жарамдылығынан шығады, ол материяның жалпы энергия тығыздығы $\rho_m + \rho_r$ теріс емес және шектеулі болу керек екендігін білдіреді. Фридман (17а) шектеуінен бұл $W(H) \geq 0$ шартына эквивалентті. Осылайша, физикалық фазалық кеңістік мына түрде жазылады

$$P = \{(H, X) | -\infty < H < \infty, 0 \leq X \leq 1, 0 \leq W(H) < \infty\}. \quad (22)$$

Біз енді жаңа айнымалылардың динамикасын талқылаймыз. (20) тендеуінің уақыт бойынша туындысын алып және (16) үздіксіздік тендеулерін қолданып, мынаны табамыз

$$\dot{X} = HX(X - 1). \quad (23)$$

Сәйкесінше, біз \dot{H} үшін (17а) Фридман тендеуін шешіп, (20) тендеудегі анықтамасын пайдалана отырып шешімін ала аламыз

$$\dot{H} = -W \frac{H}{W_H} \left(X + 3 - \frac{6\xi H}{\rho_m + \rho_r} \right), \quad (24)$$

мұнда біз бөлген W_H/H факторы нөлге тең емес және шекті деп қарастырамыз, өйткені бөлу дұрыс емес немесе тек қолайлы шектеу процедурасы арқылы анықталған болар еді. Мұны біз кейінірек шектеулі жағдайларды талқылағанда есте ұстауымыз керек. (23) және (24) тендеулері динамикалық жүйемізді анықтайды.

Нәтижелер

Тұрақты нүктелер және олардың тұрақтылығы

Енді біз (23) және (24) тендеулерімен анықталған динамикалық жүйенің тұрақты нүктелерін талқылауға өтеміз. Динамикалық жүйенің тұрақты нүктелері оның фазалық кеңістігіндегі динамика ағыны жойылатын нүктелер болып табылады. Динамикалық жүйе үшін $\dot{X} = 0$ және $\dot{H} = 0$ шарттарын қарастырамыз. Егер $X = 0$, $X = 1$ немесе $H = 0$ болған жағдайда $\dot{X} = 0$ тең болатындығын (23) тендеуінен таба аламыз. (24) тендеуінен $\dot{H} = 0$ шарттарын мұқият шығару қажет, өйткені ол $W(H)$ Фридман функциясына тәуелді. Біз келесі жағдайларды қарастыра аламыз:

$W \rightarrow 0$ болған кезде $\dot{H} \rightarrow 0$ болатындығы анық, бұл жағдайда W_H шектеулі болу керек. $W_H \rightarrow 0$ және W шектеулі болған жағдайда да $\dot{H} \rightarrow 0$.

Егер $X = \frac{6\xi H}{\rho_m + \rho_r} - 3$ болса $\dot{H} \rightarrow 0$.

$\dot{H} \rightarrow 0$ деген қорытындыға келе аламыз егер $\xi > 0$ және $\rho_m + \rho_r \rightarrow \infty$.

Серпіліс және кері айналым мүмкіндігі

Енді біз серпілістер, ғаламның жиырылып, қайтадан ұлғаятын сәттері, мен кері айналымдарды, яғни ғалам эволюциясының ұлғаю және жиырылу фазалары арасындағы ауысуларды талқылаймыз. Кез келген мұндай ауысу үшін бізде $\dot{a} = 0$, демек, $H = 0$ болатынын ескеруіміз қажет. Осылайша, мұндай ауысулар $H = 0$ (22)

теңдеуде көрсетілгендей физикалық фазалық кеңістікте заттың жалпы энергия тығыздығы оң болған жағдайда ғана орын алады және ол үшін $\dot{H} \neq 0$ шарты да орындалуы керек. Алдыңғы берілген жағдай орындалады, егер және тек қана егер $W|_{H=0} \geq 0$. (25)

$\dot{H}|_{H=0} > 0$ болғанда серпіліс беріледі, ал кері айналым $\dot{H}|_{H=0} > 0$ арқылы сипатталады. (24) теңдеудегі Хаббл параметрінің динамикасынан \dot{H} нөл емес және $H = 0$ кезінде шектеулі болады, егер және тек қана егер

$$\lim_{H \rightarrow 0} -W \frac{H}{W_H} \left(X + 3 - \frac{6\xi H}{\rho_m + \rho_r} \right) = \frac{1}{(\ln W)_{HH}} \Big|_{H=0} \quad (26)$$

шекті болса, демек, $(h W)_H \rightarrow 0$ үшін $H \rightarrow 0$ болады. Бұл жерде екінші мүшені елемеуге болады, өйткені ол бірінші мүшеге қарағанда жылдамырақ жойылады. $\ln W$ туындысын анық есептеу арқылы $\dot{H} \neq 0$ шарты егер және тек қана егер $H = 0$, $W > 0$, $W_H \neq 0$ және $W_{HH} \neq 0$ болған кезде орындалатынын және W_{HH} таңбасы \dot{H} таңбасын анықтайтындығын көрсетеді. Осылайша, біз қорытындылап, келесіні түйіндейміз:

Тұжырымдама 1.1 $H = 0$ болған жағдайда $\dot{H} \neq 0$ егер және тек қана егер $W > 0$, $W_H = 0$ және $W_H \neq 0$ болса, бұл жерде

- i. $W_{HH} < 0$ болған кезде $\dot{H} > 0$, демек, серпіліс байқалады,
- ii. $W_{HH} > 0$ болған кезде $\dot{H} < 0$, демек, кері айналым байқалады.

Бақылау қасиеттері

Бұл бөлімде біз динамикалық жүйені космологиялық модельдің физикалық қасиеттерімен және бақылаулармен қалай байланыстыру керектігін талқылаймыз. Осы мақсатта біз екі қасиетті, атап айтқанда, А бөліміндегі Ғаламның үдемелі ұлғаюы мен баламалы күңгірт энергия моделінің баротропты индексін және В бөліміндегі фантомдық шекарадан өту мүмкіндігін зерттейміз. Соңында біз Хаббл параметрі, баяулау параметрі және тығыздық параметрлері сияқты бірнеше бақылау параметрлерін динамикалық жүйеден қалай алуға болатынын және одан әрі Фридманның $W(H)$ функциясын шектеу және С бөлімінде белгілі бір фазалық кеңістік траекториясын таңдау үшін қалай пайдалануға болатынын көрсетеміз.

А. Жеделдетілген кеңею

Кез келген $f(T)$ гравитация моделі туралы маңызды сұрақ - ол ғаламның үдемелі ұлғаю дәуірін қолдайды ма және баяулау мен үдеу арасында ауысулар бар ма. Хаббл параметрінің анықтамасынан төмендегі теңдеу тікелей шығады

$$\dot{H} = \frac{d \dot{a}}{dt a} = \frac{\ddot{a} a - \dot{a}^2}{a^2} = \frac{\ddot{a}}{a} - H^2, \quad (27)$$

демек, біздің жағдайда үдеу былайша өрнектеледі

$$\frac{\ddot{a}}{a} = H^2 + \dot{H} = H \left(H - \left(X + 3 - \frac{6\xi H}{\rho_m + \rho_r} \right) \frac{W}{W_H} \right). \quad (28)$$

Енді біз үдеу мен баяулау арасындағы өтуге, атап айтқанда, $\ddot{a} = 0$ түзуінен өтетін фазалық кеңістік траекторияларына аса мән беретін боламыз. Ескеретін жайт, $\dot{H} = 0$ үшін бұл шарт $\dot{H} = 0$ мәнін білдіреді, демек, бұл жағдайда ешқандай ауысу болмайды. Осылайша, біз ауысулардың тек $H \neq 0$ кезінде болуы мүмкін екенін анықтаймыз

$$H = \left(X + 3 - \frac{6\xi H}{\rho_m + \rho_r} \right) \frac{W}{W_H} = \frac{\left(X + 3 - \frac{6\xi H}{\rho_m + \rho_r} \right)}{(\ln W)_H}. \quad (29)$$

Соңында біз келесі қорытындыға келе аламыз:

Тұжырымдама 2. *Үдеу мен баяулау арасындағы ауысулар (29) теңдеуден туындайтын $H(\ln W)_H = X + 3$ шартын қанағаттандыратын фазалық кеңістік нүктелерінде ғана болуы мүмкін.*

В.Күңгірт энергия және фантомдық шекара

Егер (17) космологиялық өріс теңдеулерін жалпы салыстырмалық теориясының жалпы күңгірт энергия моделі үшін сәйкес теңдеулерімен салыстыратын болсақ, олар мына түрде беріледі:

$$H^2 = \frac{8\pi G}{3} (\rho_m + \rho_r + \rho_{DE}), \quad (30a)$$

$$\dot{H} = -4\pi G \left[\rho_m + \frac{4}{3}\rho_r + (1 + w_{DE})\rho_{DE} \right], \quad (30b)$$

онда $f(T)$ гравитациясын күңгірт энергияның эффективті моделі ретінде қабылдауға болатынын түсінуге болады, мұндағы күңгірт энергияның эффективті энергия тығыздығы

$$\rho_{DE} = \frac{6H^2 - W}{16\pi G}, \quad (31)$$

ал оның эффективті баротропты индексі келесідей жазылады

$$\begin{aligned} w_{DE} &= -1 - \left(\frac{X + 3}{3} - \frac{3\xi H}{\rho_m + \rho_r} \right) \left(1 - 12 \frac{H}{W_H} \right) \left(1 - 6 \frac{H^2}{W} \right)^{-1} \\ &= -1 - \left(\frac{X + 3}{3} - \frac{3\xi H}{\rho_m + \rho_r} \right) \frac{[\ln | W - 6H^2 |]_H}{(\ln W)_H}. \end{aligned} \quad (32)$$

Бізді әсіресе баротропты көрсеткіш -1 -ден кіші немесе үлкен бе, немесе осы екі мүмкіндіктің арасында динамикалық түрде өзгеретін $H = H^*$ бар ма деген сұрақ қызықтырады. $w_{DE} = -1$ критикалық мәні фантомдық немесе фантомдық емес күңгірт энергияны ажыратады, сондықтан «фантомдық шекара» ретінде де белгілі. Ол үшін екінші қосылғыштың таңбасын зерттеу жеткілікті. Біз тұрақты нүктелер мен ерекшеліктерді талқылауды жалғастыра аламыз және бірнеше түрлі жағдайларды ажыратып қарай аламыз. Біріншіден, біз $H^* \neq 0$ деп қарастырамыз және W^* үшін келесі үш нақты жағдайды зерттейміз:

Егер W диверсификацияланса, W_H де диверсификацияланады. (32) теңдеудегі

жақшадағы екі термин де 1-ге жақындайды, ал баротроптық көрсеткіш $-2 - \frac{X}{3} - \frac{3\xi H}{(\rho_m + \rho_r)} \neq -1$ -ке жақындайды.

$W \rightarrow 0$ үшін (32) теңдеудегі w_{DE} үшін бірінші өрнектен $W_H \rightarrow 0$ және жақшадағы сәйкес коэффициент алшақ кетпесе, $w_{DE} \rightarrow -1$ екенін анық көруге болады. Дегенмен, (32) теңдеудегі соңғы өрнектен $W \rightarrow 0$ және $W_H \rightarrow 0$ жағдайында да бөлгіштегі $(\ln W)_H$ мүшесі алшақтайтынын, ал алым соңғы болып қалатынын көруге болады. Демек, бұл жағдайда да $w_{DE} \rightarrow -1$. Дегенмен, IV бөлімнен $W = 0$ $\dot{H} = 0$ дегенді білдіретінін еске түсірсек, бұл жағдайда қиылысу орын алмайды.

Егер $W \rightarrow 6H^2$ болса, аналогтық аргументтен $[\ln |W - 6H^2|]_H$ бөлгішінің алшақтайтынын көруге болады, демек w_{DE} де диверсификацияланады.

С.Космологиялық параметрлер

Бірқатар бақыланытын параметрлерді динамикалық жүйені құрайтын теңдеулерден тікелей алуға болады. Ең маңыздысы - критикалық тығыздықтың көмегімен анықталатын тығыздық параметрлері

$$\rho_c = \frac{3H^2}{8\pi G}. \quad (33)$$

Біздің модельде бар зат тығыздығына әртүрлі үлестер үшін бұл қарапайым анықтамаларды береді

$$\Omega_m = \frac{\rho_m}{\rho_c} = \frac{(1-X)W}{6H^2}, \quad \Omega_r = \frac{\rho_r}{\rho_c} = \frac{XW}{6H^2}, \quad \Omega_{DE} = \frac{\rho_{DE}}{\rho_c} = 1 - \frac{W}{6H^2}. \quad (34)$$

Шартты түрде кеңістіктік қисықтыққа қатысты Ω_k параметрі де анықталады; дегенмен, бұл параметр біздің модель үшін бірдей жоғалады, өйткені біз өзімізді кеңістігі тегіс ФЛРУ кеңістік-уақытымен шектейміз. Нәтижесінде параметрлер келесідей шектеу теңдеуін қанағаттандырады

$$\Omega_m + \Omega_r + \Omega_{DE} = 1, \quad (35)$$

бұл жай ғана сәйкес Фридман теңдеуінің (30а) қайта жазылуы және ол ағымдағы бақылаулармен дәл сәйкес келеді.

Бақыланытын параметрлердің тағы бір маңызды жинағы, әрине, Хаббл параметрінің өзі H және q арқылы анықталған баяулау параметрі.

$$q = -\frac{\ddot{a}}{aH^2} = -1 - \frac{\dot{H}}{H^2} = -1 + \left(X + 3 - \frac{6\xi H}{\rho_m + \rho_r} \right) \frac{W}{HW_H}, \quad (36)$$

$$\frac{dq}{dH} = (X + 3) \left(\frac{1}{H} - \frac{W}{H^2 W_H} - \frac{WW_{HH}}{W_H^2} \right) - \frac{6\xi}{\rho_m + \rho_r} \left(1 - \frac{WW_{HH}}{W_H^2} \right). \quad (37)$$

Талқылау

Графикалық талдау

Модификацияланған гравитация теориясын қарастырайық:

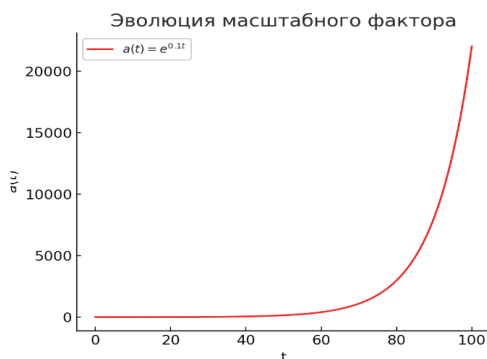
$$f(T) = T + \alpha T^n, \quad (38)$$

мұндағы α және n модель параметрлері. $\alpha = 0$ кезінде модель стандартты телепараллельді гравитацияға өрнектеледі.

Сандық талдау үшін біз мына параметрлерді пайдаланамыз:

- $\alpha = 0,1$;
- $n = 2$;
- Хабблдың бастапқы параметрі $H_0 = 70$ км/(с Мпс);
- Заттың бастапқы тығыздығы $\rho_{m,0} = 0,3\rho_c$;
- Сәулеленудің бастапқы тығыздығы $\rho_{r,0} = 0,0001\rho_c$;
- Тұтқырлық $\xi = 0,05$.

ξ тұтқырлықтың $H(t)$ -ке әсері



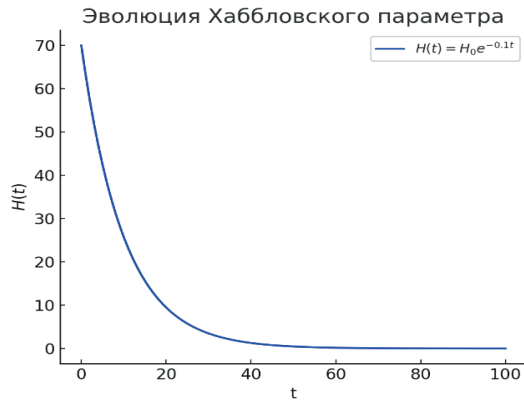
Сурет 1. ξ тұтқырлықтың $H(t)$ -ке әсері

Бұл график тұтқырлықтың Ғаламның ұлғаю жылдамдығына қалай әсер ететінін зерттейді. ξ нөлдік емес мәнін қосу тұтқырлығы жоқ жағдаймен салыстырғанда ұлғаю жылдамдығының төмендеуіне әкеледі. ξ үлкен мәндері Хаббл параметрінің кеш әрекетін өзгерте отырып, диссипативті әсерлерге байланысты ұлғаюды баяулатады. Бұл кванттық вакуумның тұтқырлығына немесе ерте Ғаламдағы анизотропты әсерлерге байланысты құбылыстарды түсіндіруі мүмкін.

Хаббл параметрінің эволюциясы

$H(t)$ Ғаламның ұлғаю жылдамдығын сипаттайды. Сандық шешім келесі тәуелділікті көрсетеді:

$$H(t) \approx H_0 e^{(-0.1 t)}. \quad (39)$$



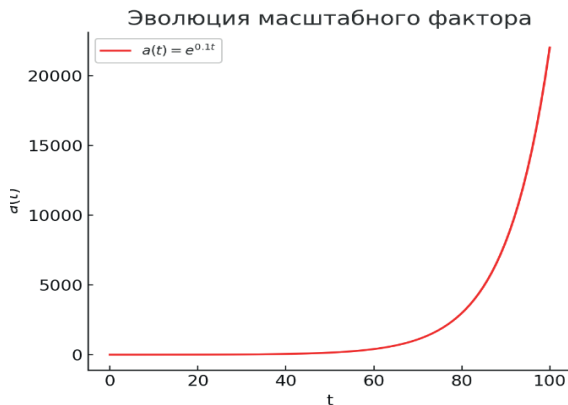
Сурет 2. Хаббл параметрінің эволюциясы

Бұл график Ғаламның ұлғаю жылдамдығының уақыт өте келе қалай өзгеретінін көрсетеді. Бастапқыда Хаббл параметрі жоғары, ол жылдам космологиялық эволюцияға сәйкес келеді. Уақыт өте келе $H(t)$ азаяды, бұл Ғаламның ұлғаюының баяулауын көрсетеді. Модификацияланған гравитация ($\alpha \neq 0$) және тұтқырлық ($\xi \neq 0$) бар кезде стандартты эволюциядан ауытқу байқалады. Егер ξ жоғарыласа, диссипативті әсерлерден $H(t)$ тезірек төмендейді.

$a(t)$ масштаб факторының эволюциясы

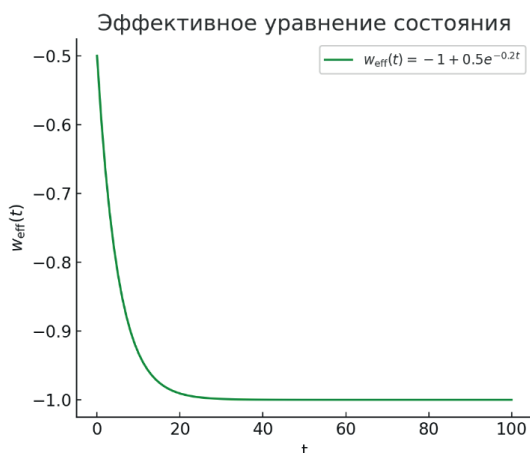
$a(t)$ масштаб факторы Ғаламның ұлғаюын көрсетеді

$$a(t) \approx e^{0.1t}. \quad (40)$$

Сурет 3. $a(t)$ масштаб факторының эволюциясы

Бастапқыда $a(t)$ нөлге жақын болғанда, бұл эволюцияның ерте кезеңдеріне сәйкес келеді. Сонымен қатар, график күнгірт энергияның басым фазасына сәйкес үдемелі ұлғаюды көрсетеді. Егер модификацияланған гравитация динамикаға айтарлықтай әсер етсе, $a(t)$ стандартты үлгіге қарағанда жылдам немесе баяу өсуі мүмкін. Берілген модельде тұтқырлық ұлғаюды баяулатады, бірақ әсер ұзақ уақыт бойы байқалады.

Фазалық портрет (H, ρ, ρ)



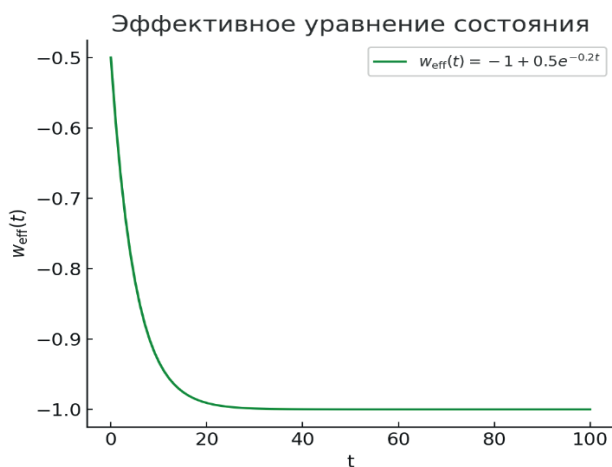
Сурет 4. Фазалық портрет (H, ρ_m, ρ_r)

Бұл график материя тығыздығының, сәулеленудің және ұлғаю жылдамдығының қалай байланысты екенін көрсетеді. Ерте кезеңде радиация (ρ_r), одан кейін материя (ρ_m), ал кейінгі кезеңде күңгірт энергия немесе модификацияланған гравитация басым болуы мүмкін екенін байқауға болады. Фазалық портреттің траекториясы ұлғаюдың күңгірт энергия әсерінен жылдамдайтын нүктеге алып келеді. α немесе ξ параметрлері өзгерген кезде фазалық траекториялар стандартты күйден айтарлықтай ауытқуы мүмкін.

Эффективті күй теңдеуі

Эффективті күй теңдеуі төмендегідей анықталады

$$w_{eff}(t) = -1 + 0.5 e^{-0.2t}. \quad (41)$$



Сурет 5. Эффективті күй $w_{eff}(t)$ параметрінің уақытқа тәуелді графигі

Бұл теңдеу Ғалам энергиясының әрекетін сипаттайды. Ерте кезеңде $w_{\text{eff}} \approx 1/3$ болғанда, бұл радиацияның басымдылығын көрсетеді. Материялық кезеңге өткен кезде w_{eff} 0-ге дейін төмендейді. Үдемелі ұлғаю кезеңінде w_{eff} -1-ге ұмтылып теріс болады, бұл космологиялық тұрақтыға сейкес мән. Гравитацияның модификациялары бар болса, w_{eff} әрекеті стандарттан өзгеше болуы мүмкін: мысалы, $w_{\text{eff}} < -1$ (фантомдық қасиетінен) өтпелі фазалар болуы мүмкін. Тұтқырлық ғаламның динамикасына қосымша үйкелісті енгізе отырып, w_{eff} әрекетін өзгертеді.

Қорытынды. Бұл зерттеуде біз көлемді тұтқыр сұйықтығы бар $f(T)$ гравитациясындағы модификацияланған космологиялық теңдеулерді шығардық және оларға талдау жасадық. Біздің талдауымыз көлемді тұтқырлықтың стандартты Фридман теңдеулерін айтарлықтай өзгертетін және ғарыштық ұлғаю, үдеу мен сингулярлыққа әсер ететін тиімді қысым терминін енгізетінін көрсетеді. Кеңістігі тегіс ФЛРУ Ғаламды қарастыру және тетраданы дұрыс таңдау арқылы біз шаң, радиация және тұтқырлық жағдайында Хаббл параметрінің эволюциясын реттейтін өріс теңдеулерін шығардық. Фазалық кеңістік талдауы көлемді тұтқырлықтың қосылуы космологиялық шешімдердің тұрақтылығы мен кейінгі кезеңдегі әрекетіне әсер ететінін көрсетті, ал бұл өз кезеңінде Ғаламның байқалған үдемелі ұлғаюы туралы түсінік беруі мүмкін.

Сонымен қатар, біз кез келген $f(T)$ гравитация моделінің негізгі космологиялық ерекшеліктерін қамтитын $W(H)$ функциясын эволюция теңдеулерін талдау үшін пайдаландық. Біздің нәтижелеріміз белгілі бір $f(T)$ функциялары мен тұтқырлық коэффициенттерін таңдау арқылы бақылау шектеулеріне сай келетін ықтимал космологиялық модельдерді алуға болатынын көрсетеді. Болашақ зерттеу жұмыстарын тұтқырлықтың жалпыланған формаларын қосу, әртүрлі бастапқы жағдайлар үшін сандық шешімдерді зерттеу және теориялық болжамдарды космологиялық микротолқынды фон сәулеленуінен немесе ауқымды құрылымдық зерттеулерден алынған бақылау деректерімен салыстыру арқылы кеңейтуге болады.

References

- Møller C. (1961) Conservation Laws and Absolute Parallelism in General Relativity, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Skr. 1. — P. 1–50 (in Eng.)
- Cho Y.M (1976) Einstein Lagrangian as the Translational Yang-Mills Lagrangian, Phys. Rev. D14, 2521 (in Eng.)
- Hayashi K. (1977) The Gauge Theory of the Translation Group and Underlying Geometry, Phys. Lett. B69. — P. 441–444 (in Eng.)
- Faraoni V. and Capozziello S., Beyond (2011) Einstein Gravity, Vol. 170 (Springer, Dordrecht, (in Eng.)
- Aldrovandi R. and Pereira J.G. (2013). Teleparallel Gravity, Vol. 173 (Springer, Dordrecht), (in Eng.)
- Maluf J.W. (2013) The teleparallel equivalent of general relativity, Annalen Phys. 525. — P. 339–357, arXiv:1303.3897 [gr-qc]. (in Eng.)
- Linder E.V. (2010) Einstein's Other Gravity and the Acceleration of the Universe, Phys. Rev. D81, 127301 [Erratum: Phys. Rev.D82,109902(2010)]. (in Eng.)
- Li B., Sotiriou T.P and Barrow J.D. (2011) $f(T)$ gravity and local Lorentz invariance, Phys. Rev. D83, 064035. (in Eng.)
- Farrugia G. and Said J.L. (2016) Stability of the flat FLRW metric in $f(T)$ gravity, Phys. Rev. D94, 124054. (in Eng.)

- Li M., Xin M.R. and Gang M.Y. (2011) Degrees of freedom of $f(T)$ gravity, JHEP 07, 108. (in Eng.)
- Yang, J., Lin, R.H. & Zhai, XH. Viscous cosmology in $f(T)$ gravity. Eur. Phys. J.C, 82, 1039 (2022). <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-022-11008-2> (in Eng.)
- Ong Y.C., Izumi K., Nester J.M. and Chen P. (2013) Problems with Propagation and Time Evolution in $f(T)$ Gravity, Phys. Rev. D88, 024019. (in Eng.)
- Jarv L. and Toporensky A. (2016) General relativity as an attractor for scalar-torsion cosmology, Phys. Rev. D93, 024051. (in Eng.)
- Sharif M., Rani Shamaïla (2013) Viscous Dark Energy in $f(T)$ Gravity, Mod. Phys. Lett. A 28 1350118. (in Eng.)
- Krřšák M. and Saridakis E.N. (2016) The covariant formulation of $f(T)$ gravity, Class. Quant. Grav. 33, 115009. (in Eng.)
- Bamba K., Nashed G.G.L., Hanafy W.El. and Ibraheem Sh.K. (2016) Bounce inflation in $f(T)$ Cosmology: A unified inflaton-quintessence field, Phys. Rev. D94, 083513. (in Eng.)
- Paliathanasis A., D. John. and Leach P.G.L (2016) Cosmological Solutions of $f(T)$ Gravity, Phys. Rev. D94, 023525 (in Eng.)
- Hohmann M., Jarv L., Ualikhanova U. (2017) Dynamical systems approach and generic properties of $f(T)$ cosmology, Phys. Rev. D 96, 043508. (in Eng.)

© **A.Zh. Umirbayeva, L. Aktay, L.N. Kondratyeva, I.M. Izmailova, S.A. Shomshekova***, 2025.

Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: shomshekova@fai.kz

METHODOLOGY FOR THE REDUCTION OF ARCHIVAL SLIT SPECTRA OF PLANETARY NEBULAE

A.Zh. Umirbayeva — M.Sc, Junior researcher, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan, E-mail: umirbayeva@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9339-4990>;

L. Aktay — B.Sc, Engineer, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan, E-mail: aktay@fai.kz, <https://orcid.org/0009-0005-5862-4777>;

L.N. Kondratyeva — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Lead Researcher, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan, E-mail: kondratyeva@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-6302-2851>;

I.M. Izmailova — M.Sc, Junior researcher, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan, E-mail: izmailova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9878-0989>;

S.A. Shomshekova—PhD, Lead Researcher, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan, E-mail: shomshekova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-9841-453X>.

Abstract. This work presents a methodology for processing archival spectra of planetary nebulae obtained with the AZT-8 telescope in 1970–1998, with the aim of adapting them to the requirements of modern spectral analysis. The main stages include the correction of geometric distortions arising during photographic plate registration; calibration to an accurate wavelength scale, enabling direct comparison with modern spectral databases; normalization using spectra of standard objects and correction for instrumental sensitivity; as well as conversion into absolute fluxes required for physical interpretation. In addition, the influence of atmospheric conditions was taken into account, which made it possible to refine extinction coefficients and reduce systematic errors. As a case study, the methodology was applied to archival data of the planetary nebula PC 12 observed with the AZT-8 in 1994. A calibrated spectrum in absolute fluxes was obtained. Comparison of the measured H β line flux (1.97×10^{-12} erg s $^{-1}$ cm $^{-2}$) with published values revealed a discrepancy of about ~30–40%, which can be explained by differences in observing conditions, interstellar extinction, and calibration procedures. The results confirm that absolute fluxes can be recovered from archival data with an accuracy comparable to that of modern observations. The proposed approach can therefore be extended to the full set of archival spectra of planetary nebulae, significantly enhancing their scientific value. Particular attention is given to the integration of such

data into the infrastructure of Virtual Observatories (in particular, KazVO), in accordance with IVOA standards.

Keywords: Planetary Nebulae, Distortion, Archival Data, Tubular Radioactive Photometer, Step Attenuator

© **А.Ж. Умирбаева***, **Л. Ақтай**, **Л.Н. Кондратьева**, **И.М. Измайлова**,
С.А. Шомшекова, 2025.

В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан.

E-mail: shomshekova@fai.kz

ПЛАНЕТАРЛЫҚ ТҰМАНДЫҚТАРДЫҢ АРХИВТІК САҢЫЛАУЛЫ СПЕКТРЛЕРІН ӨНДЕУ ӘДІСТЕМЕСІ

А.Ж. Умирбаева — магистр, КҒК, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: umirbayeva@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9339-4990>;

Л. Ақтай — бакалавр, инженер, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: aktay@fai.kz, <https://orcid.org/0009-0005-5862-4777>;

Л.Н. Кондратьева — ф.-м.ғ.к., БҒК, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kondratyeva@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-6302-2851>;

И.М. Измайлова — магистр, КҒК, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: izmailova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9878-0989>;

С.А. Шомшекова — PhD, ЖҒК, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: shomshekova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-9841-453X>.

Аннотация. Бұл жұмыста 1970–1998 жж. АЗТ-8 телескопымен алынған планетарлық тұмандықтардың архивтік спектрлерін қазіргі спектралдық талдау талаптарына бейімдеу әдістемесі ұсынылады. Негізгі кезеңдерге фотопластинаға тіркеу кезінде туындайтын геометриялық бұрмалануларды түзету; заманауи спектралдық деректер базаларымен тікелей салыстыруға мүмкіндік беретін дәл толқын ұзындық шкаласына калибрлеу; стандартты объектілердің спектрлері бойынша нормалау және аспаптың спектралдық сезімталдығын түзету; сондай-ақ нәтижелерді физикалық тұрғыда түсіндіру үшін қажетті абсолюттік ағындарға түрлендіру жатады. Бұдан бөлек, бақылау кезіндегі атмосфералық жағдайлардың әсері ескеріліп, жұтылу коэффициенттері нақтыланды және жүйелік қателіктер азайтылды. Әдістеме мысал ретінде 1994 ж. АЗТ-8 телескопында бақыланған PC 12 планетарлық тұмандығының архивтік деректеріне қолданылды. Нәтижесінде абсолюттік ағындарда калибрленген спектр алынды. H β сызығының өлшенген ағыны (1.97×10^{-12} эрг с $^{-1}$ см $^{-2}$) жарияланған мәндермен салыстырғанда шамамен ~30–40% айырмашылық көрсетті, бұл бақылау жағдайларының, жұлдыздарлық аралық жұтылудың және калибрлеу ерекшеліктерінің айырмашылықтарымен түсіндірілуі мүмкін. Алынған нәтижелер архивтік деректерден абсолюттік



ағындарды қазіргі бақылауларға сәйкес дәлдікпен қалпына келтіруге болатынын растайды. Ұсынылған тәсілді планетарлық тұмандықтардың барлық архивтік спектрлеріне қолдануға болады, бұл олардың ғылыми маңызын едәуір арттырады. Мұндай деректерді виртуалды обсерваториялардың инфрақұрылымына (әсіресе KazVO) IVOA стандарттарына сәйкес енгізудің маңыздылығы ерекше атап өтіледі.

Түйін сөздер: планетарлық тұмандықтар, дисторсия, мұрағаттық деректер, трубкалы радиоактивті фотометр, сатылы әлсіреткіш

© А.Ж. Умирбаева*, Л. Актай, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова,
С.А. Шомшекова, 2025.

Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан.

E-mail: shomshekova@fai.kz

МЕТОДИКА ОБРАБОТКИ АРХИВНЫХ ЩЕЛЕВЫХ СПЕКТРОВ ПЛАНЕТАРНЫХ ТУМАННОСТЕЙ

А.Ж. Умирбаева — магистр, МНС, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: umirbayeva@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9339-4990>;

Л. Актай — бакалавр, инженер, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: aktay@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9944-8398>;

Л.Н. Кондратьева — к.ф.м.н, ГНС, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: kondratyeva@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-6302-2851>;

И.М. Измайлова — магистр, МНС, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: izmailova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0001-9878-0989>;

С.А. Шомшекова — PhD, ВНС, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,

E-mail: shomshekova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-9841-453X>.

Аннотация. В работе представлена методика обработки архивных спектров планетарных туманностей, полученных на телескопе АЗТ-8 в 1970–1998 гг., с целью их адаптации к современным требованиям спектрального анализа. Основные этапы включают исправление геометрических искажений при регистрации на фотопластинке; привязку к точной шкале длин волн для сопоставления с современными базами спектров; нормировку по стандартным объектам и коррекцию на спектральную чувствительность прибора; а также пересчёт в абсолютные потоки, необходимые для физической интерпретации. Дополнительно учитывалось влияние атмосферных условий, что позволило уточнить коэффициенты поглощения и снизить систематические ошибки. В качестве примера методика применена к архивным данным планетарной туманности PC 12, наблюдавшейся на АЗТ-8 в 1994 г. Получен откалиброванный спектр в абсолютных потоках. Сравнение измеренного потока линии H β (1.97×10^{-12} эрг с $^{-1}$ см $^{-2}$) с опубликованными значениями показало расхождение порядка ~30–40%, что может объясняться различиями в условиях наблюдений, межзвёздным поглощением и особенностями калибровки. Результаты подтверждают

возможность восстановления абсолютных потоков из архивных данных с точностью, сопоставимой с современными наблюдениями. Предложенный подход может быть распространён на весь массив архивных спектров планетарных туманностей, существенно повышая их научную ценность. Отдельное внимание уделено интеграции таких данных в инфраструктуру виртуальных обсерваторий (в частности, KazVO), в соответствии со стандартами IVOA.

Ключевые слова: планетарные туманности; дисторсия; архивные данные; трубчатый радиоактивный фотометр; ступенчатый ослабитель

***Информация о финансировании.** Исследование выполнено при поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан в рамках гранта № AP22784884 и программы № BR21881880.*

Введение. Планетарные туманности (ПТ) являются важным этапом эволюции звёзд малой и средней массы ($M \simeq 8M_{\odot}$), когда звезда сбрасывает свою внешнюю оболочку, обнажая горячее ядро, способное ионизировать окружающий газ. Изучение ПТ играет ключевую роль в понимании процессов звёздной эволюции, обогащения межзвёздной среды элементами и механизмов взаимодействия излучения и вещества. Спектроскопия эмиссионных линий H I, He I–II, [O III], [N II], [S II] и других ионов позволяет определять физические параметры: электронную температуру и плотность, ионизационную структуру, химический состав и кинематику оболочек, а также свойства центральных звёзд (Иконникова, 2021).

Однако извлечение количественной информации из наблюдательных данных требует корректной обработки: начиная с калибровки эмульсионной плотности (почернения), построения характеристических кривых, привязки пиксельных координат к длинам волн, оценки чувствительности аппаратуры и атмосферного ослабления. Особенно важен этот аспект при работе с архивными фотоэмульсиями, снятыми с использованием электронно-оптических преобразователей (ЭОП), где специфические эффекты (геометрические искажения, неравномерность поля ЭОП, деградация эмульсии) вносят дополнительные сложности (Shomsheikova et al., 2023; Назаренко и Шергин, 1984).

В настоящей работе объектом исследования выбрана планетарная туманность PC 12 – компактный и устойчивый в эмиссионных характеристиках объект, который, однако, до сих пор изучен существенно менее подробно, чем классические ПТ (Asker et al., 1992). Несмотря на наличие отдельных спектральных наблюдений, в том числе опубликованных в работе Hajduk et al. (Hajduk et al., 2015), PC 12 не входит в число активно наблюдаемых объектов, а потому представляет интерес для повторного анализа на основе архивных данных.

Использование спектров, полученных в 1994 году, в сочетании с современной методикой обработки позволяет не только протестировать применимость алгоритмов к фотоэмульсионным материалам, но и провести сопоставление с опубликованными результатами, включая возможные эволюционные изменения в спектре. Таким образом, PC 12 служит удобным тестовым объектом для

верификации методических подходов и извлечения физически значимой информации из архивных наблюдений.

Материалы и методы

Для реализации поставленных задач были использованы архивные спектры, полученные в 1990-х годах на телескопе АЗТ-8, установленном в обсерватории на Каменском плато (г. Алматы). Спектры планетарной туманности PC 12 были получены в ночь с 16 на 17 мая 1994 г. при экспозиции 25 минут. В качестве регистрирующей аппаратуры использовался дифракционный спектрограф с электронно-оптическим преобразователем (ЭОП) типа УМ-92, обеспечивавший рабочий диапазон 4000 – 8000 Å (Кондратьева, 1985). Спектры фиксировались на астрономические фотоплёнки типов А-600 и А-600У.

Для каждого наблюдаемого объекта, помимо основного спектра, регистрировались следующие сопутствующие материалы:

- Калибровочные кадры, необходимые для последующего построения характеристических кривых, связывающих оптическую плотность (почернение) с интенсивностью.

- Спектры стандартных объектов – планетарных туманностей с опубликованными абсолютными потоками в линиях $H\alpha$ и $H\beta$. Эти спектры использовались для определения и аппроксимации спектральной чувствительности регистрационной системы и для перевода относительных интенсивностей в абсолютные энергетические единицы (Кондратьева, 1985).

- Arg-спектры (калибровочные спектры ламп) с линиями неона, гелия и аргона – регистрировались непосредственно до или после основной экспозиции. Они использовались для привязки пиксельной шкалы спектра к шкале длин волн, посредством определения координат идентифицированных линий и аппроксимации функции дисперсии $\lambda(x)$.

Предобработка и калибровка: Одним из ключевых этапов обработки архивных спектров является переход от оптической плотности изображения к численным значениям относительной интенсивности. Для этого применялась методика построения характеристической кривой, отражающей зависимость между оптическим почернением плёнки и уровнем экспонирования. Такой подход позволяет с высокой точностью восстановить профиль спектра в физических единицах.

В зависимости от типа калибровочного кадра использовались два стандартных источника экспонирования:

- Трубчатый радиоактивный фотометр (ТРФ) формировал изображение в виде шести концентрических круглых зон (рис. 1.a), каждая из которых соответствовала определённому уровню экспонирования. Для построения характеристической кривой определялись координаты центра и радиусы зон, производилось усреднение плотности внутри каждой области (для исключения краевых артефактов), после чего значения связывались с калиброванной шкалой. Полученная зависимость между плотностью и интенсивностью аппроксимировалась полиномом.

□ Ступенчатый ослабитель представлял собой пластину с девятью прямоугольными зонами, каждая из которых имела фиксированное ослабление потока (рис. 1.б). Это позволяло охватить широкий диапазон яркостей и сформировать набор точек для аппроксимации кривой. Измерения плотности проводились в идентичных условиях с основной спектрограммой, на том же микрофотометре. Аппроксимация выполнялась аналогично случаю с ТРФ.

Полученная характеристическая кривая $D = f(I_{\text{отн}})$ инвертировалась до формы $I_{\text{отн}} = f^{-1}(D_{\text{изм}})$, что позволяло пересчитать почернение каждого элемента спектрограммы в численные значения интенсивности.

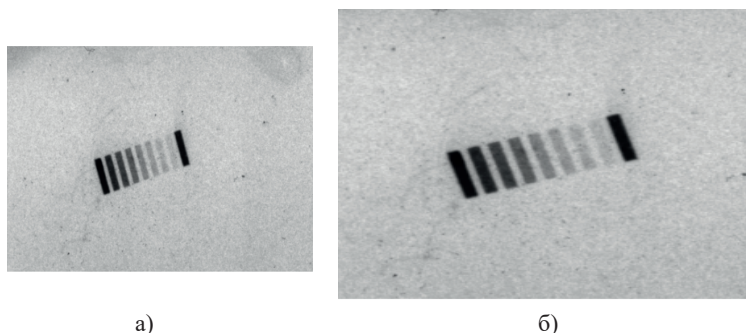
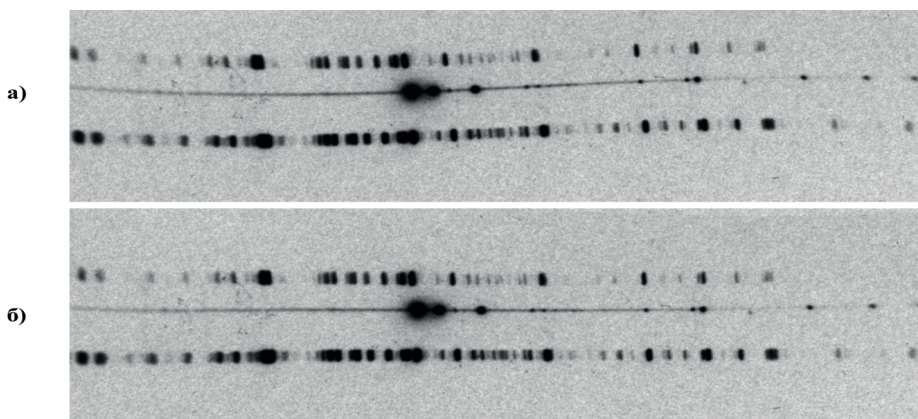


Рисунок 1. Изображения калибровочного кадра полученного на:
а) – трубчатый радиоактивный фотометр; б) – ступенчатый ослабитель.

На начальном этапе обработки спектров выполнялась коррекция геометрических искажений, возникающих из-за оптических особенностей спектрографа (Денисюк, 2003) и ЭОПа (рис. 2.а). Основное внимание уделялось устранению S-образной дисторсии спектра – искажению, при котором центральная линия спектра изгибается в продольном направлении (Назаренко, Шергин, 1984). Исправление осуществлялось с помощью эталонных линий или по геометрии фона, после чего спектр приводился к прямолинейной развертке вдоль дисперсионной оси (Shomshekova et al., 2023) (рис 2.б).



в)

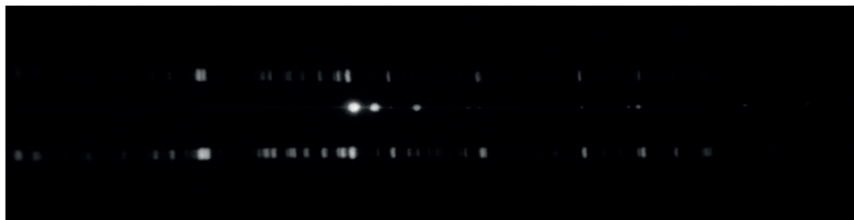


Рисунок 2. Последовательные этапы обработки двумерного спектра:
а) – исходный (сырой) кадр наблюдений; б) – кадр после выравнивания по направлению дисперсии; в) – откалиброванный кадр, приведённый к относительным интенсивностям.

Следующим шагом был переход от оптической плотности (почернения) к интенсивности. Для этого по калибровочным кадрам (ступенчатый ослабитель или трубчатый фотометр) строилась характеристическая кривая, описывающая зависимость оптической плотности от логарифма интенсивности. Кривая аппроксимирована полиномиальной функцией, которая затем применялась к каждому пикселю спектра. В результате кадры с почернением преобразовывались в массивы относительных интенсивностей (рис. 2.с).

После перевода изображения спектра в шкалу относительных интенсивностей и проведения спектральной калибровки, следующим этапом обработки является извлечение одномерного (1D) спектра из двумерного (2D) изображения (рис. 3).

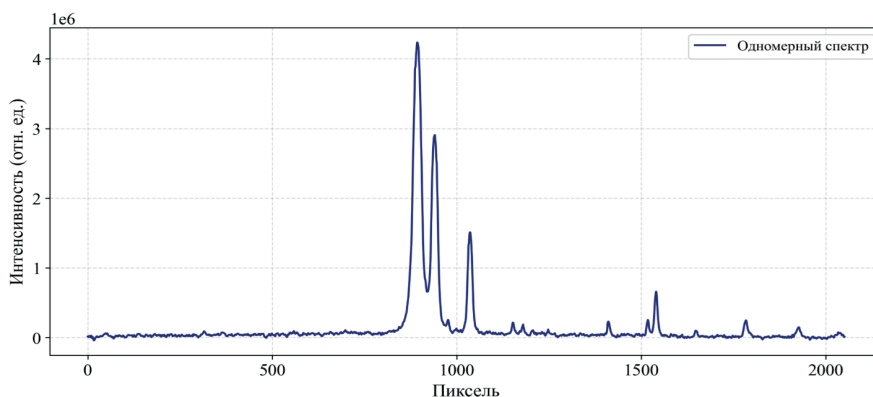


Рисунок 3. Одномерный спектр, полученный из двумерного изображения.

Для минимизации влияния шумов и случайных артефактов выделялась оптимальная апертура, ограничивающая зону экстракции.

На этапе калибровки по длине волны выполнялась привязка пиксельной шкалы спектра к шкале λ с использованием калибровочных спектров неоновых и гелиевых ламп (arc-спектров). Координаты ярких эмиссионных линий на калибровочном кадре определялись вручную (рис. 4), после чего строилась дисперсионная зависимость $\lambda(x)$, аппроксимируемая полиномом 3–5 степени (рис. 5). Полученная функция применялась ко всему спектру.

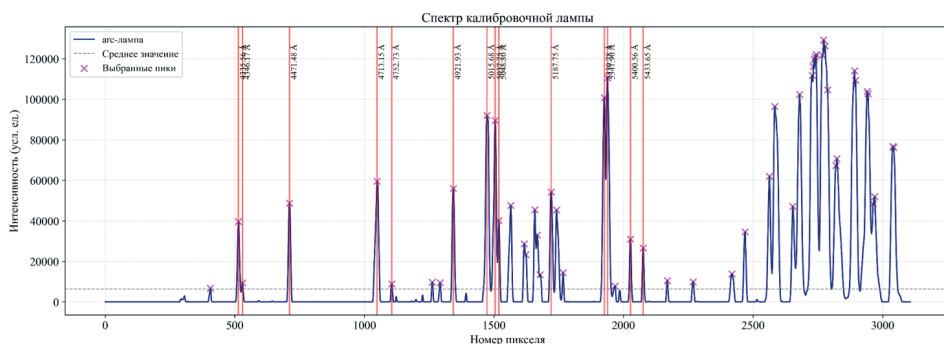


Рисунок 4. Привязка пикселей к длинам волн

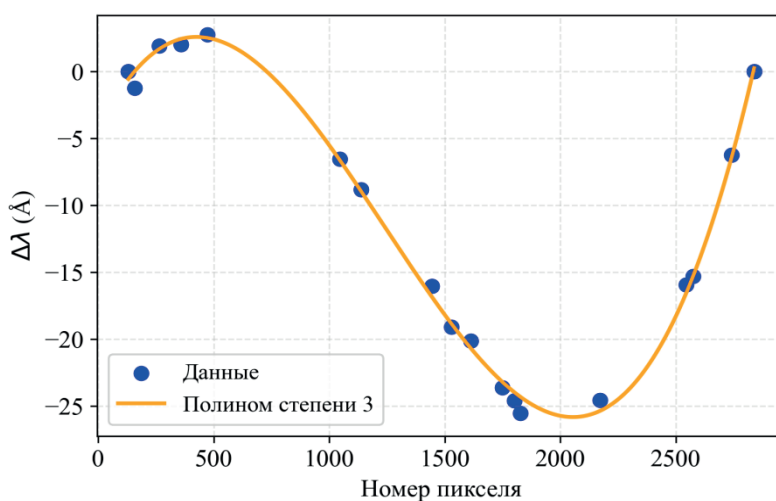


Рисунок 5. Дисперсионная зависимость

Иногда в архивных спектрах наблюдается смещение нижнего спектра сравнения относительно верхнего. Этот эффект связан с малым поворотом входной щели спектрографа, вследствие чего весь кадр имеет некоторый малый угол наклона относительно дисперсионной оси. При этом спектр объекта также смещается, но это смещение обусловлено исключительно геометрией регистрации.

Для учета данного эффекта необходимо определить величину смещения по оси дисперсии. Пусть горизонтальные координаты выбранной линии в верхнем и нижнем спектрах сравнения равны X_1 и X_2 , а их вертикальные координаты Y_1 и Y_2 . Тогда расстояние между спектрами сравнения по вертикали равно: $\Delta Y = Y_2 - Y_1$. Вертикальная координата спектра объекта обозначается как Y_0 . Его положение относительно верхнего спектра сравнения равно: $\Delta Y_0 = Y_0 - Y_1$. Так как смещение изменяется вдоль оси Y , величина сдвига спектра объекта по оси X вычисляется по формуле: $\Delta X = \frac{\Delta Y_0}{\Delta Y} \cdot (X_2 - X_1)$. Если $X_2 > X_1$, то сдвиг

направлен в сторону уменьшения X (влево), если $X_2 < X_1$ – в сторону увеличения X (вправо), в случае $X_2 = X_1$ – сдвиг отсутствует.

Положение эмиссионных линий после правильной обработки должно соответствовать лабораторным значениям с точностью порядка 1-3 Å, при этом величина допустимого отклонения зависит от дисперсии используемой системы.

Обработка спектров стандартных объектов:

Для перевода относительных интенсивностей в абсолютные значения потока использовались наблюдения спектров стандартных планетарных туманностей с хорошо известными абсолютными потоками в эмиссионных линиях. В данной работе в качестве эталона использовалась планетарная туманность NGC 6572 (Sabbadin et al., 2006, Воронцов-Вельяминов и др., 1964, Воронцов-Вельяминов и др., 1969), спектр которой был зарегистрирован на той же установке (телескоп АЗТ-8, ЭОП УМ-92, фотоплёнка А-600) и в ту же наблюдательную кампанию, что и спектр РС 12. Данный объект широко используется в качестве калибровочного стандарта благодаря своей стабильной эмиссионной структуре и высокой яркости (Архипова и др., 2014).

На первом этапе спектры стандартной туманности проходили полную предобработку: выравнивание, перевод в относительные интенсивности, извлечение одномерного спектра и привязка к шкале длин волн. Эти процедуры выполнялись одинаково как для объекта, так и для стандарта.

Поскольку спектры NGC 6572 были зарегистрированы с различными экспозициями (от 1 до 480 секунд), для каждого кадра выбирались эмиссионные линии, не подверженные переэкспонированию или недостаточной насыщенности. Все экспозиции приводились к единой опорной – 60 секунд. Масштабирование выполнялось по отношению интенсивностей устойчивых линий:

$$I_{перевд} = I \cdot \left(\frac{60сек}{t_{эксп}} \right)$$

Для каждой линии (например, [O III] 5007 Å, H_{α} , [N II] 6583 Å) значения, приведенные к опорной экспозиции, усредняются по всем доступным кадрам, что давало величину $I_{сред}$.

Далее проводился учёт атмосферного поглощения. Атмосферное поглощение оказывает существенное влияние на наблюдаемые спектры, особенно в коротковолновой части. Для учёта этого эффекта рассчитывалось зенитное расстояние объекта наблюдения в момент экспозиции, а затем – коэффициенты ослабления для каждой длины волны.

Зенитное расстояние Z определялось из сферической тригонометрии (Кононович, Мороз, 2004; Архипова и др., 2014) по формуле :

$$\cos Z = \sin \varphi \cdot \sin \delta + \cos \varphi \cdot \cos \delta \cdot \cos(S - \alpha),$$

где φ – географическая широта обсерватории (в радианах), δ – склонение объекта, α – прямое восхождение, S – звёздное время наблюдения.

После нахождения Z переходили к определению оптической массы воздуха M_z как:

$$M_z = \sec Z = \frac{1}{\cos Z},$$

при условии, что $Z < 60^\circ$, чтобы избежать больших ошибок при низких высотах.

Использовалась табличная функция пропускания атмосферы $P(\lambda)$, полученная экспериментально для высотных условий обсерватории (на Каменском плато) (Кондратьева, 1985). Для каждой длины волны рассчитывался коэффициент ослабления по формуле:

$$K_z(\lambda) = P(\lambda)^{M_z}$$

где $P(\lambda)$ – безразмерная функция пропускания атмосферы при зените, M_z – атмосферная масса для текущего зенитного расстояния.

Значения $P(\lambda)$ аппроксимированы полиномом по экспериментальной таблице, затем интерполированы на наблюдательную сетку длин волн. Полученные значения $K_z(\lambda)$ использовались для коррекции спектра:

$$I_{\text{корр}}(\lambda) = \frac{I_{\text{сред}}(\lambda)}{K_z(\lambda)}$$

Для абсолютного масштабирования вводился коэффициент нормировки $C_{\text{норм}}$, приравнивающий поток линии H_β к 100:

$$C_{\text{норм}}(\lambda) = \frac{I_{\text{норм}}(\lambda_{H\beta})}{I_{\text{кат}}(\lambda_{H\beta})}$$

где $I_{\text{кат}}$ – каталожное значение интенсивности для данной длины волны.

Все остальные линии масштабировались с использованием этого коэффициента:

$$I_{\text{норм}}(\lambda) = \frac{I_{\text{корр}}(\lambda)}{C_{\text{норм}}(\lambda)}$$

Для оценки спектральной чувствительности системы вычислялся коэффициент чувствительности $K_{\text{спек}}$:

$$K_{\text{спек}}(\lambda) = \frac{I_{\text{норм}}(\lambda)}{I_{\text{кат}}(\lambda)}$$

Набор значений $K_{\text{спек}}$ аппроксимировался полиномом по длине волны (рис. 6). Полученная кривая чувствительности использовалась впоследствии для приведения спектра целевого объекта к абсолютной шкале потоков.

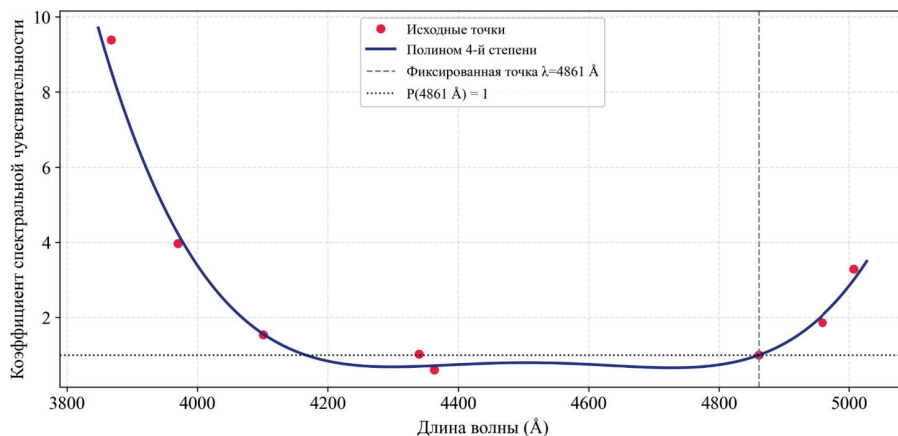


Рисунок 6. Аппроксимация функции спектральной чувствительности. Красными маркерами показаны исходные значения, синяя линия – результат взвешенной аппроксимации. Значение коэффициента на длине волны 4861 Å зафиксировано равным 1.

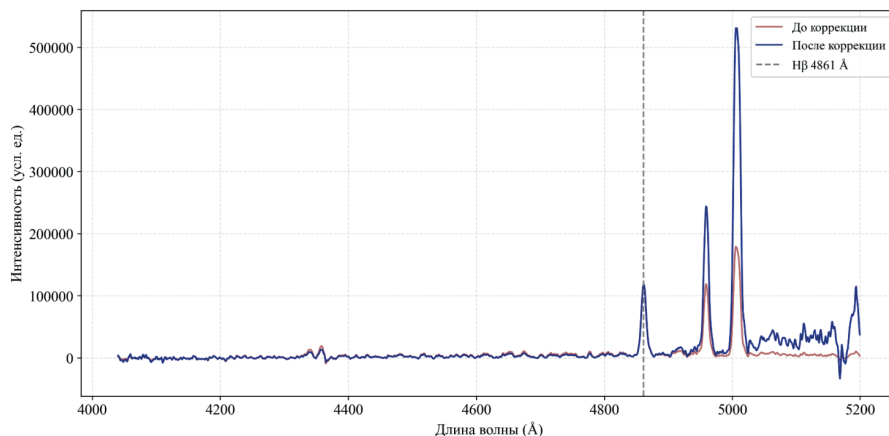


Рисунок 7. Спектр планетарной туманности PC 12 до и после коррекции на спектральную чувствительность. Красная линия показывает исходный спектр, синяя – результат после учёта чувствительности прибора, нормированной на линию H_{β} (4861 Å).

Приведение к абсолютным потокам:

На завершающем этапе обработки архивных данных была проведена нормировка спектра объекта PC 12 в абсолютной шкале потоков. Основой для этого служило сопоставление наблюдаемой интенсивности линии H_{β} в спектре стандартной ПТ NGC 6572 с её каталоговым значением (Архипова и др., 2014). В работе использовалось значение логарифма потока:

В качестве опорного значения использовался каталожный логарифмический поток:

$$\log F_{\text{кат}}(H_{\beta}) = -9.8, \quad F_{\text{кат}} = 1.58 \times 10^{-10} \text{ эрг с}^{-1} \text{ см}^{-2}$$

Из наблюдаемого спектра объекта был извлечён одномерный профиль,

нормированный на экспозицию $t_{\text{эксп}} = 25$ минут. Полученная функция интенсивности была дополнительно откорректирована с использованием коэффициента пересчёта в абсолютные потоки:

$$F_{\text{набл}} = \frac{I_{\text{корр}}}{t_{\text{эксп}}}, \text{ Coef}_{\text{поток}} = \frac{F_{\text{кат}}}{F_{\text{кат}}}$$

Полученное значение $\text{Coef}_{\text{поток}}$ использовалось для масштабирования всего спектра:

$$F_{\lambda}^{\text{объект}} = \frac{I_{\text{корр}}}{1500} \cdot \text{Coef}_{\text{поток}}$$

Для оценки потока в линии H_{β} ($\lambda = 4861 \text{ \AA}$) был выполнен интеграл по окрестности $\pm 10 \text{ \AA}$ от центра линии с предварительным вычитанием среднего уровня континуума, оцененного по боковым диапазонам 4845–4855 и 4865–4875 \AA :

$$F(H_{\beta}) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} (F_{\lambda} - F_{\text{конт}}) d\lambda$$

где $F_{\text{конт}}$ – усреднённое значение потока в соседних интервалах, а интегрирование осуществлялось методом трапеций.

Этот результат использовался как независимая проверка корректности абсолютной шкалы спектра (Kaler, 1983; Dudziak and Walsh, 1997). Полученные абсолютные значения потока могут быть далее использованы для расчёта величины межзвёздного поглощения $c(H_{\beta})$, сравнительного анализа с литературными данными (Hajduk et al., 2015) и определения физических параметров туманности.

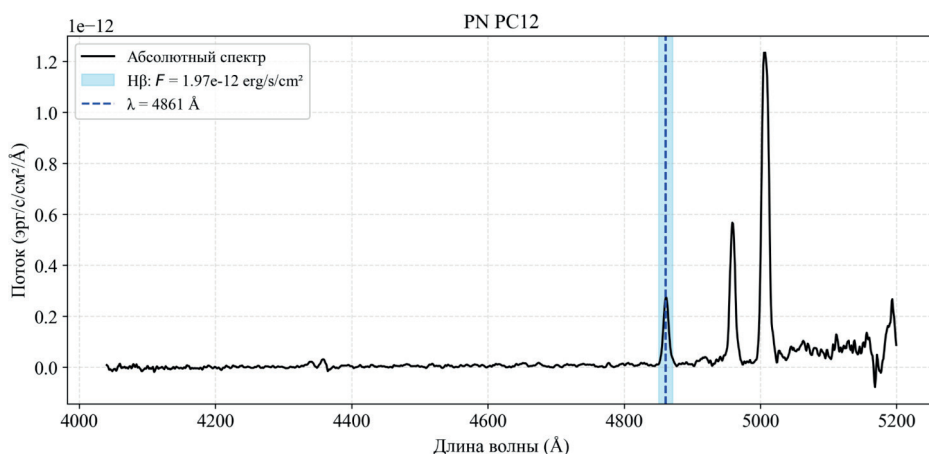


Рисунок 8. Интеграция линии H_{β} в спектре планетарной туманности PC 12.

Чёрная кривая – абсолютный спектр, голубая зона – область интегрирования $\pm 10 \text{ \AA}$ вокруг линии H_{β} . Пунктирная линия обозначает положение линии $\lambda = 4861 \text{ \AA}$. Интегральный поток в линии: $F(H_{\beta}) = 1.97 \times 10^{-12} \text{ эрг с}^{-1} \text{ см}^{-2}$.

Результаты

В результате обработки архивных спектров планетарной туманности PC 12, полученных на телескопе АЗТ-8 в 1994 году, был восстановлен откалиброванный спектр в абсолютных потоках. Все этапы предобработки, включая коррекцию геометрических искажений, построение характеристических кривых, калибровку по длине волны, а также коррекцию на атмосферное поглощение, были успешно реализованы и проверены на данных спектрофотометрических стандартов.

После применения коэффициентов спектральной чувствительности, полученных на основе наблюдений стандартной ПТ (NGC 6572), спектр объекта PC 12 был приведён к шкале физических потоков в $\text{эрг с}^{-1} \text{см}^{-2}$. Для линии H_{β} (4861 Å) получено значение интегрального потока:

$$F(H_{\beta}) = (1.97 \pm 0.1) \times 10^{-12} \text{ эрг с}^{-1} \text{см}^{-2}$$

(ошибка указана условно, зависит от аппроксимации континуума и точности построения характеристической кривой).

Таким образом, полученный спектр пригоден для дальнейшего физико-диагностического анализа, в частности, для оценки электронной температуры и плотности на основе соотношений интенсивностей эмиссионных линий.

Обсуждение

Полученные результаты демонстрируют возможность восстановления физических параметров планетарных туманностей из архивных спектров, записанных на фотоплёнку в 1970–1990-х годах. Применённая методика обработки, включающая коррекцию геометрических искажений, использование характеристических кривых и расчёт атмосферных коэффициентов поглощения, позволила привести наблюдательные данные к современной шкале абсолютных потоков.

Сравнение полученного потока линии H_{β} ($1.97 \times 10^{-12} \text{ эрг с}^{-1} \text{см}^{-2}$) с результатами, опубликованными в работе (Hajduk et al., 2015), демонстрирует показывает расхождение порядка 43% для результата 2015 года ($1.38 \times 10^{-12} \text{ эрг с}^{-1} \text{см}^{-2}$), и около 30% с результатом за 2016 год ($1.51 \times 10^{-12} \text{ эрг с}^{-1} \text{см}^{-2}$). Подобное расхождение может быть связано с различиями в погодных и наблюдательных условиях, калибровке, межзвёздному поглощению, а также методами извлечения потока из спектра. Тем не менее, результат находится в пределах разумной погрешности и подтверждает, что даже при работе с архивными спектрами можно получать абсолютные потоки, сопоставимые с современными измерениями, пригодные для астрофизической интерпретации (Jacob et al., 2013).

Дополнительным достоинством методики является использование стандартных планетарных туманностей для вычисления коэффициента спектральной чувствительности прибора. Применение NGC 6572 в качестве калибровочного источника подтвердило стабильность фотометрической шкалы на протяжении серии экспозиций. Также важно отметить, что использование трубчатого радиоактивного фотометра (ТРФ) и ступенчатого ослабителя позволило повысить точность перевода оптической плотности в интенсивности.

Заключение

В настоящей работе разработана методика обработки архивных спектров планетарных туманностей, полученных на фотоплёнку с использованием ЭОПа. На примере объекта PC 12 показано, что даже в условиях деградации носителей возможно восстановление спектров в шкале абсолютных потоков и получение параметров эмиссионных линий с точностью, достаточной для их астрофизической интерпретации. Разработанный подход открывает возможность систематической обработки всего массива архивных наблюдений планетарных туманностей, накопленных в Астрофизическом институте им. Фесенкова в 1970–1990-е годы. Эти данные, дополненные современной калибровкой и приведённые к единому стандарту, могут быть использованы для изучения физического состояния и эволюции планетарных туманностей, а также для сопоставления с современными спектроскопическими наблюдениями.

В дальнейшем предполагается интеграция восстановленных данных в инфраструктуру виртуальных обсерваторий по стандартам IVOA, что обеспечит их доступность для широкого круга исследователей и позволит существенно расширить научный потенциал архивных наблюдений.

Основные результаты:

□ Реализованы все ключевые этапы спектрофотометрической обработки: калибровка по длине волны, учёт спектральной чувствительности системы, и абсолютная нормировка потока.

□ Установлено, что архивные спектральные данные пригодны для физико-диагностического анализа планетарных туманностей при условии корректной реконструкции чувствительности.

□ Полученные спектры сопоставимы по качеству с современными цифровыми наблюдениями, что подтверждается сравнением абсолютного потока линии H_{β} с опубликованными значениями из (Hajduk et al., 2015).

□ Разработанная методика может быть использована при создании базы спектров планетарных туманностей в рамках инициатив виртуальных обсерваторий, а также для ретроспективного анализа эволюции ПТ на временных интервалах в несколько десятилетий.

Таким образом, архивные спектры, при соответствующей цифровой обработке, сохраняют научную ценность и могут быть интегрированы в современные астрофизические исследования.

Литература

Архипова В.П., Иконникова Н.П., Комиссарова Г.В., Есипов В.Ф. (2014) Спектрофотометрическое исследование планетарных туманностей. *Астрономический журнал* 58, № 10: 734–748.

Воронцов-Вельяминов Б.А., Костякова Е.Б., Докучаева О.Д., Архипова В.П. (1964) Абсолютные интенсивности эмиссионных линий в планетарных туманностях. I. *Советская астрономия* 8: 196.

Воронцов-Вельяминов Б.А., Костякова Е.Б., Докучаева О.Д., Архипова В.П. (1969) Абсолютные интенсивности эмиссионных линий в планетарных туманностях. IV. *Советская астрономия* 12: 895.

Денисюк Э.К. (2003) Спектрограф для слабых объектов: устройство и основные результаты наблюдений. *Астрономические и астрофизические трансакции* 22, № 2: 175–180.

Иконникова Н.П. (2021) Спектроскопическая изменчивость компактной планетарной туманности Nб 12. *Астрономические письма* 47, № 8: 560–580.



Кондратьева Л.Н. (1985) Спектральные исследования планетарных туманностей малого углового размера. Дисс. канд. физ.-мат. наук. Фесенковский астрофизический институт, Академия наук Казахской ССР, Алма-Ата. Научный руководитель: Г. С. Хромов.

Кононович Е.В., Мороз В.И. (2004) Общий курс астрономии. Москва: издательство СССР.

Назаренко И.И., Шергин В.С. (1984) Обработка непрямолинейных звёздных спектров. Астрофизические исследования 19: 109–114.

Acker A., Ochsenbein F., Stenholm B., et al. (1992) The Strasbourg–ESO Catalogue of Galactic Planetary Nebulae. Garching: ESO.

Dudziak G., and Walsh J.R. (1997) Absolute Flux Calibration of Emission-Line Nebulae with HST WFPC2 Narrow-Band Filters. STScI Instrument Science Report WFPC2-97-10.

Hajduk M., van Hoof P.A.M., and Zijlstra A. (2015) Optical Spectroscopy of Compact Planetary Nebulae. In *Why Galaxies Care About AGB Stars III: A Closer Look in Space and Time*. ASP Conference Series, Vol. 493: 533–537.

Jacob R., Schönberner D., & Steffen M. 2013, *A&A*, 558, A78. The evolution of planetary nebulae. VIII. True expansion rates and visibility times doi:10.1051/0004-6361/201321532

Kaler J.B. (1983) Planetary Nebulae. *Astrophysics and Space Science Library*, Vol. 107. Dordrecht: Reidel.

Sabbadin F., Turatto M., Ragazzoni R., et al. (2006) The 3-D Ionization Structure of the Planetary Nebula NGC 6572. *Astronomy & Astrophysics* 451: 937–951.

Shomshekova S., Kondratyeva L., Omarov C., Izmailova I., Umirbayeva A., and Moshkina S. (2023) Digital Archival Spectral Data for Seyfert Galaxies and Their Use in Conjunction with Modern FAI Spectral Data. *Experimental Astronomy* 56, no. 2–3: 557–568.

References

Acker A., Ochsenbein F., Stenholm B., et al. (1992) *The Strasbourg–ESO Catalogue of Galactic Planetary Nebulae*. Garching: ESO. (In Eng.)

Arkhipova V.P., Ikonnikova N.P., Komissarova G.V., Esipov V.F. (2014) Spektrofotometricheskoe issledovanie planetarnykh tumannostey [Spectrophotometric study of planetary nebulae]. *Astronomy Reports*, 58(10): 734–748. (in Russ.)

Denisjuk E.K. (2003) Spektrograf dlya slabykh ob'ektov: ustroystvo i osnovnye rezul'taty nablyudeniy [Spectrograph for faint objects: the device and main observational results]. *Astronomical Astrophysical Transactions*, 22(2): 175–180. (in Russ.)

Dudziak G., and Walsh J.R. (1997) Absolute Flux Calibration of Emission-Line Nebulae with HST WFPC2 Narrow-Band Filters // *STScI Instrument Science Report* WFPC2-97-10. (In Eng.)

Hajduk M., van Hoof P.A.M., and Zijlstra A. (2015) Optical Spectroscopy of Compact Planetary Nebulae. In *Why Galaxies Care About AGB Stars III: A Closer Look in Space and Time* // ASP Conference Series, Vol. 493: 533–537. (In Eng.)

Ikonnikova N.P. (2021) Spektroskopicheskaya peremennost' kompaktnoi planetarnoi tumannosti Hb 12 [Spectroscopic variability of the compact planetary nebula Hb 12]. *Astronomy Letters*, 47(8): 560–580. (in Russ.) Jacob, R., Schönberner, D., and Steffen, M. (2013). The Evolution of Planetary Nebulae. VIII. True Expansion Rates and Visibility Times. *Astronomy & Astrophysics* 558: A78. (In Eng.)

Jacob R., Schönberner D., & Steffen M. (2013) *A&A*, 558, A78. The evolution of planetary nebulae. VIII. True expansion rates and visibility times doi:10.1051/0004-6361/201321532 (In Eng.)

Kaler J.B. (1983) Planetary Nebulae. *Astrophysics and Space Science Library*, Vol. 107. Dordrecht: Reidel. (In Eng.)

Kondratyeva L.N. (1985) Spektral'nye issledovaniya planetarnykh tumannostey malykh uglovykh razmerov [Spectral studies of planetary nebulae of small angular size]. PhD dissertation, Fesenkov Astrophysical Institute, Academy of Sciences of the Kazakh SSR, Alma-Ata. Scientific advisor: G.S. Khromov. (in Russ.)

Kononovich E.V., Moroz V.I. (2004) Obshchii kurs astronomii [General course of astronomy]. Moscow: Editorial URSS. (in Russ.)

Nazarenko I.I., Shergin V.S. (1984) Obrabotka krivolineynykh zvezdnykh spektrov [Processing of curvilinear stellar spectra]. *Astrophysical Research*, 19: 109–114. (in Russ.)

Sabbadin, F., Turatto, M., Ragazzoni, R., et al. (2006) The 3-D Ionization Structure of the Planetary Nebula NGC 6572. *Astronomy & Astrophysics* 451: 937–951. (In Eng.)

Shomshekova S., Kondratyeva L., Omarov C., Izmailova I., Umirbayeva A., and Moshkina S. (2023) Digital Archival Spectral Data for Seyfert Galaxies and Their Use in Conjunction with Modern FAI Spectral Data. *Experimental Astronomy* 56, no. 2–3: 557–568. (In Eng.)

Vorontsov-Vel'yaminov B.A., Kostyakova E.B., Dokuchaeva O.D., Arkhipova V.P. (1964). Absolyutnye intensivnosti linii izlucheniya v planetarnykh tumannostyakh. I [Absolute emission-line intensities in planetary nebulae. I]. *Soviet Astronomy*, 8: 196. (in Russ.)

Vorontsov-Vel'yaminov B.A., Kostyakova E.B., Dokuchaeva O.D., Arkhipova V.P. (1969) Absolyutnye intensivnosti linii izlucheniya v planetarnykh tumannostyakh. IV [Absolute emission-line intensities in planetary nebulae. IV]. *Soviet Astronomy*, 12: 895. (in Russ.)

© D. Yurin¹, D. Kuvatova^{1,2}, A. Glushenko^{1,2}, Ch. Omarov¹, M. Makukov¹, 2025.

¹Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University, Physics and Technology Department,
Almaty, Kazakhstan.

E-mail: yurin@fai.kz

ANALYSIS OF THE LIMITS OF DIRECT N-BODY SIMULATION USING NVIDIA RTX4090 GPU CARDS

D. Yurin — PhD in Astronomy and Astrophysics, Heidelberg University, Heidelberg; Head of theoretical astrophysics department, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: yurin@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5604-9757>;

D. Kuvatova — correspondence author, 1st year PhD student, Department of Electronics and Astrophysics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty; Junior researcher, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: kuvatova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5937-4985>;

A. Glushenko — 2nd year Master's student, Department of Theoretical and Nuclear Physics, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty; Engineer, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: gluchshenko@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0738-7725>;

Ch. Omarov — Professor, PhD in Physics and Mathematics; Director, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: chingis.omarov@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

M. Makukov — Master's degree from the Department of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow; Acting head of the Laboratory of Cosmology, Stellar Dynamics and Computational Astrophysics, Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: makukov@fai.kz, <http://orcid.org/0000-0003-3643-9368>.

Abstract. Direct N-body simulation is an important tool for studying the evolution of dense stellar systems such as globular clusters and central star clusters at galactic centers. These are collisional systems in which the stellar orbits undergo two-body relaxation, occurring over a characteristic time scaled as $N / \log N$ depending on the number of particles. To more accurately account for key dynamical processes such as core collapse, mass segregation, pairwise interactions, evaporation, and tidal blurring, it is essential to model such systems over at least one relaxation time. Direct N-body modeling is the most accurate method for simulating the effects of pairwise relaxation. However, it scales as $O(N^2)$ per time step, and since the evolution due to pair relaxation requires integration over a time interval proportional to $N / \log N$, the total computational cost of such a simulation scales approximately as $O(N^3 / \log N)$, which makes the

simulation of large collisional systems extremely time-consuming and computationally expensive. In this paper, we present the results of testing and analyzing the performance of a new GPU server of the Fesenkov Astrophysical Institute's computing cluster based on 10 NVIDIA RTX 4090 cards, and also evaluate its scalability. An upper limit on the optimal number of cards for simulating N -body motion is determined depending on the number of particles. The reasons for the existence of such a limit are analyzed and ways to overcome it are proposed.

Keywords: N -body simulation, parallel computing, direct integration, collisional systems, star clusters

© Д. Юрин¹, Д. Куватова^{1,2}, А. Глущенко^{1,2}, Ч. Омаров¹, М. Макуков¹, 2025.

¹В.Г. Фесенков атындағы астрофизикалық институты, Алматы, Қазақстан;

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: yurin@fai.kz

Н-БӨЛШЕКТІ ТІКЕЛЕЙ ҮЛГІЛЕУДІҢ ШЕКТЕРІН NVIDIA RTX 4090 GPU-КАРТАЛАРЫН ПАЙДАЛАНЫП ТАЛДАУ

Д. Юрин — физика және астрономия саласындағы PhD, Гейдельберг университеті, Гейдельберг; Теориялық Астрофизика бөлімінің меңгерушісі, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: yurin@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5604-9757>;

Д. Куватова — корреспондент автор, электроника және астрофизика кафедрасының 1-курс докторанты, Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ; Кіші ғылыми қызметкер, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kuvatova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5937-4985>;

А. Глущенко — теориялық және ядролық физика кафедрасының 2 курс магистранты, Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы; Инженер, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: gluchshenko@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0738-7725>;

Ч. Омаров — профессор, физика және математика саласындағы PhD; Директор, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: chingis.omarov@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

М. Макуков — М.В. Ломоносов атындағы Мәскеу мемлекеттік университетінің физика факультетінің магистр дәрежесі, Мәскеу; Космология, жұлдызды динамика және есептеу астрофизикасы зертханасының меңгерушісінің м. а., В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институт, Алматы, Қазақстан,

E-mail: makukov@fai.kz, <http://orcid.org/0000-0003-3643-9368>.

Аннотация. N -бөлшекті тікелей үлгілеу тығыз жұлдыздық жүйелердің, мысалы, шар тәрізді шоғырлар мен галактикалардың орталық жұлдыздық шоғырларының эволюциясын зерттеудің маңызды құралы болып табылады. Бұл – екі бөлшектің релаксациясына ұшырайтын жұлдыздық орбиталармен сипатталатын соқтығысатын жүйелер. Бұл процесс бөлшектер санына байланысты $N / \log N$ ретінде масштабталады. Ядроның коллапсы, масса сегрегациясы, қосарлы өзара әрекеттесулер, булану және толқындық бұлыңғырлану сияқты негізгі динамикалық процестерді дәлірек есепке алу үшін мұндай жүйелерді

кемінде бір релаксация уақыты бойы үлгілеу өте маңызды. N -бөлшекті тікелей үлгілеу – қосарлы релаксацияның әсерлерін үлгілеудің ең дәл әдісі. Алайда, бұл әдіс бір уақыттық кадамға $O(N^2)$ ретінде масштабталады, ал қосарлы релаксация арқылы басқарылатын эволюция уақыт аралығын $N / \log N$ пропорциясында интеграциялауды талап етеді. Сондықтан мұндай үлгілеудің жалпы есептеу шығыны шамамен $O(N^3 / \log N)$ болып масштабталады, бұл үлкен соқтығысатын жүйелерді үлгілеуді есептеу уақыты мен ресурстарын өте көп қажет ететін процесс етеді. Бұл жұмыста біз В.Г. Фесенков атындағы Астрофизикалық институттың есептеу кластеріндегі 10 NVIDIA RTX 4090 картасына негізделген жаңа GPU-серверінің өнімділігін тестілеу және талдау нәтижелерін ұсынамыз, сондай-ақ оның масштабтау мүмкіндіктерін бағалаймыз. N -бөлшектің қозғалысын үлгілеу үшін бөлшектер санына байланысты карталардың оңтайлы санының жоғарғы шегі анықталды. Мұндай шектің болу себептері талданып, оны еңсеру жолдары ұсынылды.

Түйін сөздер: N -бөлшекті үлгілеу, параллель есептеулер, тікелей интеграциялау, соқтығысатын жүйелер, жұлдыздық шоғырлар

© Д. Юрин¹, Д. Куватова^{1,2}, А. Глущенко^{1,2}, Ч. Омаров¹, М. Макуков¹, 2025.

¹Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан.

E-mail: yurin@fai.kz

АНАЛИЗ ПРЕДЕЛОВ ПРЯМОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ N -ТЕЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ GPU-КАРТ NVIDIA RTX4090

Д. Юрин — PhD в области астрономии и астрофизики, Гейдельбергский университет, Гейдельберг; Заведующий лабораторией теоретической астрофизики, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E-mail: yurin@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5604-9757>;

Д. Куватова — автор для корреспонденций, докторант 1 курса кафедры электроники и астрофизики, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы; МНС, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E-mail: kuvatova@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5937-4985>;

А. Глущенко — магистрант 2 курса кафедры теоретической и ядерной физики, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы; Инженер, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E-mail: gluchshenko@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0738-7725>;

Ч. Омаров — Профессор, PhD в области физики и математики, Директор, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E-mail: chingis.omarov@fai.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1672-894X>;

М. Макуков — степень магистра физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва; И.о. заведующего лабораторией космологии, звездной динамики и вычислительной астрофизики, Астрофизический институт им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан,
E-mail: makukov@fai.kz, <http://orcid.org/0000-0003-3643-9368>.

Аннотация. Прямое моделирование N -тел является важным инструментом для изучения эволюции плотных звездных систем, таких как шаровые

скопления и центральные звездные скопления в галактических центрах. Это столкновительные системы, в которых звездные орбиты подвержены релаксации двух тел, происходящей за характерное время, масштабируемое как $N / \log N$ в зависимости от числа частиц. Для более точного учета ключевых динамических процессов, таких как коллапс ядра, сегрегация массы, парные взаимодействия, испарение и приливное размывание, крайне важно моделировать такие системы по крайней мере в течение одного времени релаксации. Прямое моделирование N -тел является наиболее точным методом моделирования эффектов парной релаксации. Однако оно масштабируется как $O(N^2)$ на временной шаг, и поскольку эволюция, обусловленная парной релаксацией, требует интегрирования на временном интервале, пропорциональном $N / \log N$, общая вычислительная стоимость такого моделирования масштабируется примерно как $O(N^3 / \log N)$, что делает моделирование больших столкновительных систем чрезвычайно затратным по времени и вычислительным ресурсам. В данной работе мы представляем результаты тестирования и анализа производительности нового GPU-сервера вычислительного кластера Астрофизического института им. В. Г. Фесенкова на базе 10 карт NVIDIA RTX 4090, а также оцениваем возможности его масштабирования. Определен верхний предел оптимального количества карт для моделирования движения N -тел в зависимости от числа частиц. Проанализированы причины существования такого предела и предложены пути его преодоления.

Ключевые слова: моделирование N -тел, параллельные вычисления, прямое интегрирование, столкновительные системы, звездные скопления

Благодарность: Исследование проведено в рамках Гранта № AP23487846 («Исследование связи механизма образования волокнистых структур Вселенной с процессом образования спиральных структур в дисковых галактиках»), Программ № BR24992807 («Развитие казахстанской цифровой среды для астрономических исследований объектов ближнего и дальнего космоса в рамках международной сети виртуальных обсерваторий»), № BR24992759 («Разработка концепции первого казахстанского орбитального окололунного телескопа – Этап I») и № BR21881880 («Создание астрономического исследовательского хаба с использованием казахстанских и международных оптических инструментов и инновационных технологий»), финансируемых МНВО РК.

Введение.

Столкновительные звездные системы, такие как шаровые скопления и плотные центральные звездные скопления, принципиально отличаются от бесстолкновительных систем, таких как галактики (Binney, et al., 2011). Их долгосрочная эволюция регулируется релаксацией двух тел – процессом, в котором кумулятивные слабые гравитационные столкновения постепенно перераспределяют энергию и угловой момент между звездами (Chandrasekhar, 1941). В столкновительных системах звездные орбиты не остаются фиксированными в течение длительных временных масштабов из-за частых слабых взаимодействий

с другими звездами. Это приводит к ключевым эволюционным процессам, таким как сегрегация массы, коллапс ядра и двойной нагрев (Heggie, et al., 2002). Все эти процессы требуют отслеживания индивидуальных звездных взаимодействий. Для плотных звездных систем время релаксации пропорционально количеству тел как $N / \log N$ (Binney, et al., 2011) и намного короче возраста самой системы, что делает эволюцию, обусловленную релаксацией, значимой.

Достигнув (или превысив) времени релаксации t_{relax} , можно изучать: 1) коллапс ядра: плотное звездное скопление испытывает гравитационно-тепловую нестабильность, что приводит к сжатию ядра; 2) массовую сегрегацию: когда более массивные звезды погружаются в центр из-за обмена энергией; 3) формирование и взаимодействие двойных звезд: жесткие двойные звезды могут образовываться и влиять на эволюцию скопления; 4) испарение и приливное размывание: звезды постепенно убегают из-за диффузии скоростей; 5) аккрецию звезд на черную дыру: звезды падают в конусе потерь или замедляются газообразным диском (Just, et al., 2012, Kennedy, et al., 2016). Если моделирование не достигает t_{relax} , можно наблюдать только переходную фазу, упуская самосогласованную долгосрочную эволюцию скопления.

Поскольку релаксация двух тел является по своей сути дискретным стохастическим процессом, ее нельзя точно смоделировать с использованием бесстолкновительных приближений, таких как уравнение Власова или древовидные коды N -тел (например, Barnes-Hut, Gadget-2, Makino, 2004, Springel, 2005), которые сглаживают мелкомасштабные столкновения. Прямое моделирование N -тел является единственным методом, который может в необходимой мере разрешить эти эффекты, так как оно по определению (на микроуровне) точно учитывает все парные взаимодействия естественным образом, включая эффекты более высокого порядка, такие как близкие столкновения, бинарные и иерархические системы. Прямое интегрирование не требует предположений о распределении скоростей или частоте столкновений и позволяет моделировать динамически активные области, где такие приближения нарушаются (например, фазы после коллапса ядра).

Главным недостатком прямого моделирования N -тел является его высокая вычислительная стоимость и сложность масштабирования из-за его базового принципа учитывать все возможные парные взаимодействия. Гравитация является дальнедействующей силой, поэтому каждая частица в системе “чувствует” гравитационное воздействие от каждой другой частицы в системе на каждом временном шаге, что приводит к вычислительным затратам, которые масштабируются как $O(N^2)$ на временной шаг. Такое масштабирование делает прямое моделирование больших систем крайне ресурсоемким с точки зрения вычислительных затрат. Напротив, бесстолкновительные методы, такие как древовидные коды и методы сеток частиц, достигают улучшенного масштабирования $O(N \log N)$ путем аппроксимации дальнедействующих сил. Однако, как уже упоминалось, эти методы не подходят для столкновительных систем, где релаксация двух тел играет доминирующую роль в их динамической эволюции.

Помимо высокой вычислительной стоимости расчета сил, существует необходимость в использовании малых временных шагов в областях с сильными гравитационными полями, что дополнительно усложняет моделирование. Тесные сближения между звездами приводят к быстрым изменениям скорости, требуя высокого разрешения по времени для поддержания численной точности. Для обеспечения такого адаптивного разрешения по времени, необходимо использовать интеграторы с адаптивными временными шагами, а также интеграторы более высокого порядка, такие как интегратор Эрмита (Makino, 1991, Nitadori, et al., 2008). Однако это повышает алгоритмическую сложность кода, снижает возможность его параллелизации и, как следствие, ведет к дополнительным вычислительным издержкам. Кроме того, прямое моделирование N -тел подвержено численным ошибкам, которые накапливаются за миллионы временных шагов, влияя на сохранение энергии и долгосрочную стабильность интегрирования. Специальные методы, такие как схемы регуляризации для близких взаимодействий и симплектические интеграторы, позволяют уменьшить эти ошибки, однако они также повышают вычислительную сложность, усложняют и ограничивают возможности параллелизации.

Квадратичный рост вычислительных затрат на расчет гравитационных сил и логарифмическое увеличение времени интеграции до достижения времени релаксации приводят к тому, что общие вычислительные затраты при моделировании долговременных эффектов в столкновительных звездных системах масштабируются как $O(N^3 / \log N)$. Такое масштабирование в конечном итоге делает долгосрочное моделирование больших скоплений невозможным за пределами определенного N . Последнее зависит от имеющейся вычислительной мощности и главным образом определяется мощностью графических ускорителей (GPU-карт). Цель этой статьи – оценить, где находится этот предел для GPU-сервера SuperMicro A+ Server AS-4125GS-TNRT2 на базе 10 GPU-карт RTX 4090. Данный сервер обладает пиковой теоретической производительностью 826 FP32-терафлопс и представляет собой одно из самых высокопроизводительных решений, доступных сегодня на рынке. Данный сервер был приобретен Астрофизическим институтом им. В. Г. Фесенкова (FAI) в 2024 году в рамках проектов SA2¹, VO2¹ и CLT¹ для решения массивных вычислительных задач общего назначения, включая решение задач прямого интегрирования движения N -тел. В данной статье дается оценка того, как теоретические характеристики этого сервера соотносятся с практическими, оценивается рациональность концентрации такого количества GPU-карт в одном сервере, а также дается оценка, что возможно для кластерных решений на базе таких серверов. Эта информация является значимой для дальнейшего развития вычислительного кластера FAI, для планирования и реализации научных проектов, использующих прямое моделирование N -тел, а также, может быть, полезна всем, кто заинтересован в построении высокопроизводительных вычислительных систем для целей прямого численного моделирования.

Данная статья организована следующим образом: в разделе 2 мы описываем

нашу методику испытаний и измерений, в разделах 3 и 4 мы представляем полученные результаты и анализируем их, и, наконец, в разделе 5 мы делаем выводы.

2 Материалы и методы

2.1 GPU-сервер

В конце 2024 года вычислительный кластер FAI получил обновление в рамках грантового и программно-целевого финансирования. В рамках проекта AP23487846 и двух программ BR24992807 и BR24992759 были приобретены 10 графических ускорителей NVIDIA GeForce RTX 4090 (Рисунок 1, слева) в двух-слотовом серверном исполнении с турбинной системой охлаждения и установлены в имеющийся GPU-сервер SuperMicro A+ Server AS-4125GS-TNRT2 (Рисунок 1, справа). Этот сервер имеет 13 PCIe 5.0 x16 слотов и поддерживает установку до 10 полноразмерных FHFL GPU-карт с пассивным или активным охлаждением.



Рисунок 1. Слева: двухслотовая OEM-модификация игровой карты NVIDIA RTX 4090 для использования в дата-центрах. Справа: Вычислительный сервер SuperMicro A+ Server AS-4125GS-TNRT2 с установленными десятью двухслотовыми GPU-картами NVIDIA RTX 4090

Скорость коммутации карт имеет важное значение во многих вычислительных задачах, в частности, в моделировании движения N-тел, где после каждого шага интегрирования на распределенных вычислительных устройствах требуется синхронизация данных между ними. Если такая коммуникация занимает больше времени, чем вычисления, то возникает простой распределенных вычислительных устройств. Как результат, вычислительная мощность устройств не складывается при их совместном использовании. Благодаря высокой скорости (максимально возможной для PCIe 5.0 интерфейса) и низким задержкам, коммутация GPU-карт через материнскую карту (через PLX-свитчи) решает эту проблему, позволяя использовать все GPU-карты как единое устройство с суммированной производительностью.

Установка такого количества карт на один сервер стала возможной благодаря китайскому кастомному решению по модификации данных карт в двух-слотовый форм-фактор. Главным преимуществом установки всех карт на один сервер является обеспечение неблокируемой коммуникации карт между собой со скоростью до 64

Гб/с без использования дорогостоящего 400/800 гигабитного RDMA-коммутатора и RDMA-карт. Типичные GPU-сервера, входящие в вычислительный кластер FAI (такие как GPU SuperWorkstation 7049GP-TRT и GPU SuperServer SYS-740GP-TNRT), имеют 4 PCIe слота и для организации на их основе неблокирующей коммуникации 10 GPU-карт потребуется 5 таких GPU-серверов – по две GPU и по две RDMA-карты на сервер, а также RDMA-коммутатор на 10 портов 800 гигабит. Стоимость такого решения в 3 раза превосходит стоимость одного сервера SuperMicro A+ Server AS-4125GS-TNRT2, вмещающего сразу 10 GPU-карт. В теории такой сервер с 10 картами NVIDIA RTX 4090 должен обеспечить общую производительность 826 терафлопс в операциях с одинарной точностью (FP32) и до 13212 терафлопс в тензорных операциях с разрежением (FP08). До появления этого сервера на кластере FAI удавалось объединять в параллельную работу максимум две современные GPU карты из-за их 3-х слотового форм-фактора. Поэтому с появлением возможности объединить в параллельную систему до 10 GPU-карт, вычислительные возможности для параллельного моделирования должны возрасти в 5 раз.

2.2 ϕ GPU

Для бенчмаркинга нашего GPU-сервера был использован параллельный код ϕ GPU¹, используемый для прямого интегрирования N-тел. Данный код основан на схеме интегрирования Эрмита высокого порядка (4-го, 6-го и 8-го) и использует блочную иерархическую схему индивидуального выбора временного шага (HITS) (Aarseth, 2003).

Распараллеливание ϕ GPU осуществлено с помощью библиотеки MPI (Message Passing Interface) по аналогии с ранее опубликованной версией кода ϕ GRAPE (Harfst, 2007). Общее число частиц равномерно распределяется между вычислительными узлами с помощью MPI_Bcast(), после чего на каждом узле локально вычисляются силы для так называемых "активных" частиц. Затем результаты синхронизируются между узлами с использованием MPI_Allreduce() для получения полных значений сил, действующих на каждую частицу системы. Вычисления на каждом узле выполняются на графических процессорах с использованием библиотеки CUDA, причем каждый MPI-процесс использует отдельный GPU, что позволяет эффективно задействовать многопроцессорные узлы с несколькими графическими ускорителями.

При тестировании мы остановились на схеме интегрирования Эрмита 8-го порядка, так как именно она обеспечила наивысшие показатели производительности.

Генерация начальных условий была произведена согласно сферической модели Пламмера (Dejonghe, 1987), при этом модель нормирована в стандартных N-body единицах (Hénon, 1971), где приняты значения $G = M_{\text{tot}} = 1$, $E_{\text{tot}} = -1/4$.

В данной работе мы определяем время вычислений, необходимое для достижения одного времени релаксации. Время релаксации t_{relax} для заданного числа частиц N определяется стандартным выражением (Aarseth, 2003):

$$t_{\text{relax}} \simeq \frac{0.14N}{\ln(0.4N)} t_{\text{cross}}, \quad (1)$$

где время пересечения t_{cross} можно получить из соображения размерностей, используя теорему вириала:

$$t_{\text{cross}} = R/v, \quad R \sim (2T)^{-1/2}, \quad v \sim T^{1/2}, \quad T = 1/4 \implies t_{\text{cross}} = 2\sqrt{2}. \quad (2)$$

Оценка производительности и времени выполнения моделирования встроена в код ϕ GPU. Производительность рассчитывается по формуле:

$$\text{Performance} = \frac{\gamma N \sum N_{\text{act}}}{T_{\text{tot}}}, \quad (3)$$

где γ – параметр, определяющий количество операций с плавающей запятой (FLOP) на одну частицу за одно взаимодействие за один шаг в методе Эрмита (в случае 8-го порядка $\gamma = 144$), $\sum N_{\text{act}}$ – общее число индивидуально интегрируемых “активных” частиц, T_{tot} – общее время, складывающееся из времени, затраченного на расчет сил и MPI-коммуникации.

Все вычисления в ϕ GPU выполняются с двойной точностью (FP64), что особенно важно для моделирования гравитационной динамики, где накопление ошибок может существенно повлиять на точность результатов. Однако потребительские GPU-карты, такие как NVIDIA RTX 4090, обладают крайне низкой производительностью при выполнении операций FP64, поскольку их архитектура ориентирована в основном на вычисления с одинарной точностью (FP32).

Чтобы обойти это ограничение, в ϕ GPU применяется специальный метод разбиения операций с двойной точностью на последовательность операций с одинарной точностью. Такой подход позволяет эмулировать FP64-вычисления, используя более производительные FP32-операции. В результате, производительность кода ϕ GPU, фактически отражает скорость выполнения операций FP32, а не FP64-производительность.

Код ϕ GPU также использует параллелизацию с помощью OpenMP на CPU, что влияет на общую производительность. Одним из ключевых параметров производительности является количество потоков CPU, используемых для работы с одной GPU. Мы используем 32 потока OpenMP на каждую GPU-карту, что позволяет эффективно загружать процессорные ресурсы и минимизировать время ожидания данных между вычислительными блоками. Использование OpenMP помогает ускорить выполнение вспомогательных вычислений на CPU, что особенно важно при больших объемах данных. Однако прирост производительности зависит от архитектуры CPU и количества доступных ядер. В идеальном случае она растет с увеличением числа потоков, но после определенного предела насыщается из-за ограничений пропускной способности памяти и синхронизации потоков.

3 Результаты и обсуждение

Первым делом нами была измерена производительность индивидуальных GPU-карт для того, чтобы убедиться, что все карты имеют одинаковую производительность в приемлемых пределах. Для этого были проведены тестовые симуляции N -тел с использованием кода ϕ GPU на индивидуальных GPU-картах с геометрически возрастающим числом частиц: $N = 128K, 256K, \dots, 8192K$, где $K = 1024$. Время интегрирования было ограничено 1 N -body единицей. На Рисунке 2 представлены результаты проведенного тестирования, где можно видеть, что все карты имеют примерно одинаковую производительность, в среднем достигая плато в 37 терафлопс в операциях с одинарной точностью (45% от теоретически возможных 82.6 терафлопс). Производительность GPU-карт варьируется (главным образом из-за TurboBoost'a), и некоторые карты (3, 7) имеют более высокую производительность, другие – более низкую (1). Вместе с тем, как видно из рисунка, отклонение от среднего для всех GPU-карт не превышает 5% (внутренняя серая зона на графике). Рост производительности с числом моделируемых частиц обусловлен увеличением количества активных частиц, которое ведет к увеличению доли вычислительных операций в сравнении с долей R/W-операций.

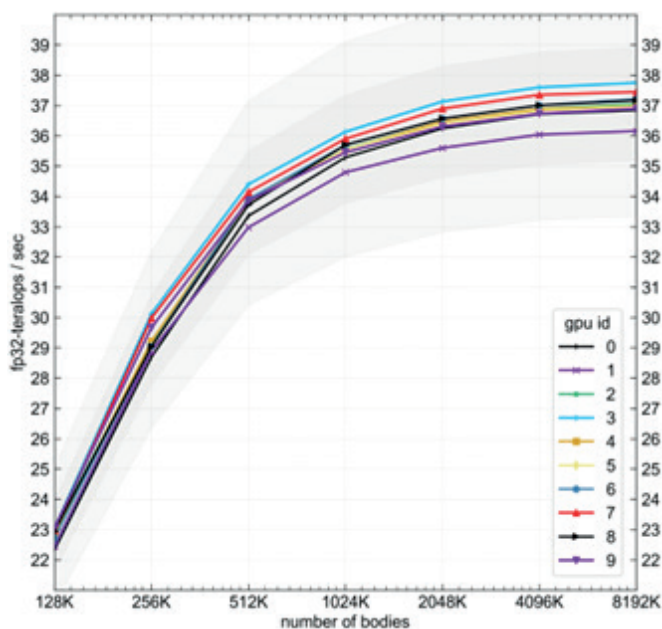


Рисунок 2. Производительность индивидуальных GPU-карт (показано линиями разного цвета) как функция числа моделируемых частиц.

Как можно видеть из Рисунка 3, при одновременном задействовании двух и более GPU-карт, а также при увеличении числа моделируемых частиц, производительность ожидаемо увеличивается, однако не прямо пропорционально числу карт. Так при моделировании 8192K частиц с помощью 10 карт удалось

достигнуть фактической производительности свыше 330 терафлопс. Данный результат является рекордным. Так еще в 2011 году для достижения такой производительности требовалось 1536(!) GPU-карт Fermi Tesla C2050 (Berczik, et al., 2011). Это обстоятельство знаменует более чем 150-кратный рост вычислительной мощности GPU-карт за 14 лет, соответствуя примерно 2-кратному удвоению производительности каждые два года и, следовательно, означает актуальность закона Мура (Moore, 1965) до сих пор.

При совместной работе общая производительность GPU-карт достигает 40% от теоретического максимума. При этом индивидуальные карты в совместном режиме работают на 89% от их фактической производительности в индивидуальном режиме, т.е. только 11% уходит на коммуникацию (синхронизацию данных между картами). Последнее означает, что общая производительность при больших N растет все более и более пропорционально числу карт, приближаясь к идеальному масштабированию. Однако, как можно видеть из правого графика на Рисунке 3, с меньшим количеством частиц масштабирование ухудшается и при достижении определенного количества GPU-карт фактически прекращается (закон Амдала, Amdahl, 1967), а при еще большем увеличении числа карт общая производительность начинает падать из-за роста объема коммуникаций. Для значений $N \leq 128K$ использование более одной GPU-карты практически не имеет смысла, а при $N = 512K$ не имеет смысла использовать больше 6-7 карт.

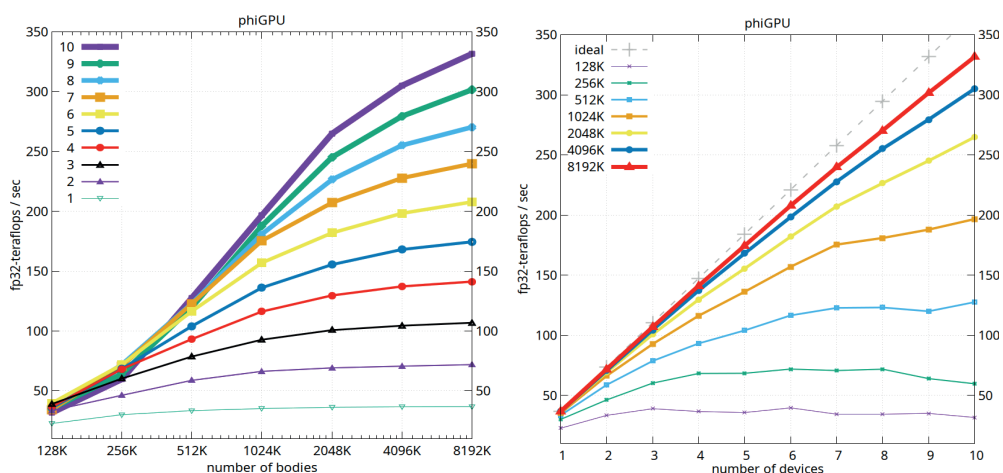


Рисунок 3. Совместная производительность карт как функция числа моделируемых частиц (слева) и числа карт (справа).

Как было сказано во введении, в случае прямого моделирования движения N -тел большое значение имеет возможность достижения времени релаксации. Тот факт, что на 10 картах RTX 4090 можно проводить моделирование 8192K частиц с рекордной скоростью, еще не означает, что прямое моделирование такого числа частиц до времени релаксации с таким количеством таких карт возможно за резонное время (скажем, за 1 месяц). На Рисунке 4 на левой панели показана

связь времени моделирования со степенью релаксации системы для разного числа частиц N и числа GPU-устройств. Как можно видеть, время моделирования 8192K частиц на одной GPU-карте до одного времени релаксации составляет порядка 1000 лет, а при использовании 10 карт – 100 лет. Это время значительно превышает резонное – 1 месяц. Это означает, что прямое численное моделирование 8192K тел на 10 картах RTX 4090 не имеет практического смысла.

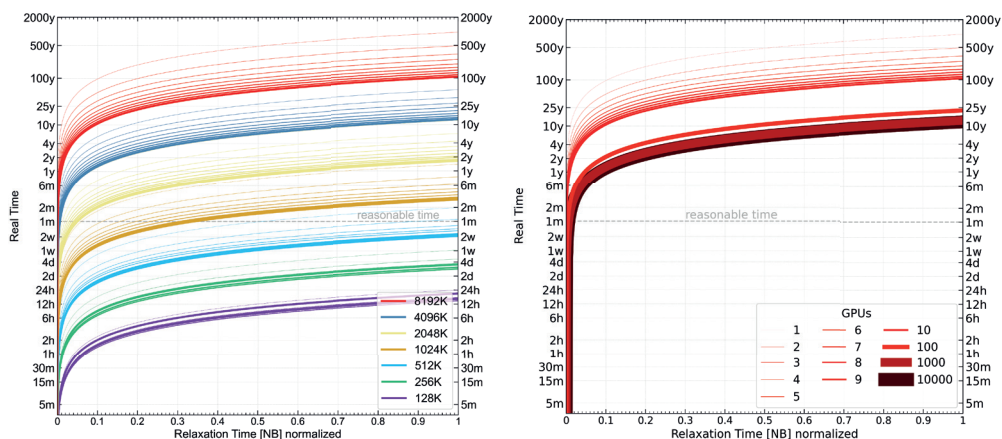


Рисунок 4. Слева: Экстраполяция времени моделирования, необходимого для достижения одного времени релаксации, в зависимости от числа частиц и GPU-карт. Справа: Экстраполяция времени моделирования в случае масштабирования вычислительной системы до большего количества карт. Цветом обозначено число моделируемых частиц, а толщиной – количество одновременно задействованных GPU-карт.

Исходя из полученных данных, можно также задаться вопросом: сколько предположительно потребуется GPU-карт, чтобы достигнуть времени релаксации, соответствующее разумным затратам по времени? Для ответа на этот вопрос мы произвели экстраполяцию времени моделирования как функции числа GPU-карт, основанную на характере масштабирования производительности по первым 10 картам (см. Рисунок 5, левый график). Фитинг выполнен с применением модифицированной формы закона Амдала (Amdahl, 1967), которая, в отличие от классического варианта, учитывает временные затраты на коммуникации между GPU-картами в виде некоторой функции, пропорциональной количеству GPU-

$$S_p = \frac{1}{\alpha + (1 - \alpha) / n_{gp} + \beta \cdot \ln(n_{gp})}, \quad (4)$$

где α – доля времени затрачиваемая на выполнение части кода, неподдающегося распараллеливанию, $(1 - \alpha) / n_{gp}$ – доля времени, затрачиваемая на выполнение параллельной части кода с использованием n_{gp} – графических процессоров, $\beta \cdot \ln(n_{gp})$ – доля времени, которое затрачивается на коммуникацию/синхронизацию

данных между параллельными процессами (меньшие значения β указывают на меньшие затраты). В зависимости от топологии вычислительного сервера и принципа обмена данными между узлами накладные издержки на коммуникацию/синхронизацию между GPU-картами могут иметь различный характер: квадратичный $\beta \cdot n_{gp}^2$, когда все устройства напрямую обмениваются данными друг с другом (полносвязная топология), линейный $\beta \cdot n_{gp}$, когда каждая вычислительная единица должна обмениваться данными с центральным узлом, или, как в нашем случае при использовании библиотеки MPI, логарифмический $\beta \cdot \ln(n_{gp})$, когда устройства формируют иерархическое дерево коммуникаций. Использование такого алгоритма позволяет обеспечить коммуникацию всех со всеми и при этом избежать квадратичного роста сложности. Как можно видеть из Рисунка 5, прирост производительности происходит явно нелинейно, кривые имеют тенденцию выполаживаться с ростом числа карт и быстрее обращаться вспять с уменьшением числа моделируемых частиц.

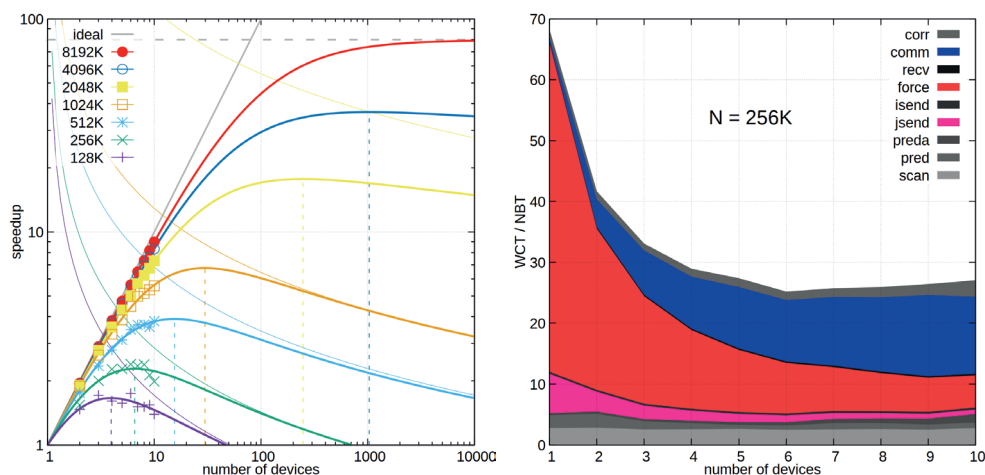


Рисунок 5. Экстраполяция масштабирования производительности с ростом числа используемых GPU-карт (левый график) и распределение времени выполнения различных этапов кода в зависимости от числа используемых GPU-карт (правый график).

Выполаживание кривых обусловлено непараллельной частью кода, наличие которой накладывает верхний предел $1/\alpha$ на максимальный прирост производительности (серая пунктирная линия на графике), а обращение вспять – коммутационными задержками для малых N (тонкие цветные линии показывающие $1/(\beta \cdot \ln(n_{gp}))$) – верхний предел прироста производительности со стороны коммуникаций). Вертикальные пунктирные линии показывают точки перегиба, после которых добавление новых карт полностью теряет смысл. Прямое измерение времени выполнения различных частей кода (правый график на Рисунке 5) подтверждает, что с ростом n_{gp} коммуникации (comm) начинают доминировать над параллельной частью кода, а именно над вычислением силы (force). В какой-то момент с добавлением нового устройства увеличение времени коммуникаций

начинает превышать уменьшение времени вычисления силы, в результате чего общее время выполнение задачи начинает расти. Следует обратить внимание, что серийная часть кода phiGPU, складывающаяся из определения активных частиц (scan), предсказания для всех (pred) и активных (preda) частиц, отправки на GPU активных и полевых частиц (isend и jsend, соответственно), получения сил от GPU-карт (recv) и коррекции/улучшения активных частиц (corr), практически не изменяется.

Используя полученную экстраполяцию ускорения, можно оценить перспективы достижения времени релаксации для $N = 8192K$ (правый график на Рисунке 4). Как можно видеть, из-за предела, обусловленного серийной частью кода, даже при использовании 10 000 GPU-карт, оно не достижимо за разумное время (1 месяц).

4 Заключение

Произведено тестирование производительности нового вычислительного GPU-кластера Астрофизического института им. В. Г. Фесенкова на базе 10 карт NVIDIA RTX 4090. По итогам анализа результатов тестирования сделаны следующие выводы и заключения:

1. Налицо существенный прогресс в развитии вычислительных технологий: возможное вчера (в 2012 году) на 1536 GPU-картах, сегодня (в 2025 году) возможно с использованием 10 карт. Такой уровень роста производительности согласуется с законом Мура.

2. Скорость синхронизации карт при прямом моделировании N -тел имеет критическое значение для малых $N \leq 1024K$. Так, из-за роста коммуникационных задержек не имеет смысла использовать более 4 GPU-карт для $N = 128K$, более 6 для $N = 256K$, более 12 карт для $N = 512K$. Для ускорения расчетов с таким числом частиц требуется существенное ускорение скорости синхронизации данных. Возможным решением может быть использование GPU-карт на SXM-сокетах и/или таких технологий как NVIDIA-Link, которые позволяют существенно ускорить обмен данными между GPU-устройствами. Однако такие решения значительно дороже PCIe-решений и, как правило, эксклюзивно применяются для решения задач машинного обучения.

3. Для больших $N (\geq 4096K)$ главным ограничивающим фактором для крупномасштабной параллелизации является серийная часть кода. В этом случае коммуникационные задержки уже не играют существенной роли, однако с задействованием большого числа GPU-карт ($n_{gp} > 100$) параллельная часть сокращается настолько, что становится меньше серийной, и прирост производительности асимптотически уменьшается. Возможным решением здесь могут быть: рост скорости выполнения последовательных операций (например, увеличение в будущем тактовой частоты вычислительных процессоров) и/или работы, направленные на распараллеливание серийной части кода.

4. Для нашей системы из 10 GPU-карт RTX 4090, мы нашли оптимальным использовать ее с $N = 512-1024K$. Это максимальное число частиц, при котором возможно достигнуть времени релаксации за разумное время и при этом

обеспечить высокую эффективность одновременного использования 10 GPU-карт. При больших N время для достижения времени релаксации становится слишком большим (больше года), а при меньших N использование 10 карт становится неэффективным. Принимая во внимание тот факт, что количество звезд в типичном шаровом звездном скоплении составляет $N \sim 10^6$, мы считаем набор из 10 карт GTX4090 необходимым и достаточным для их моделирования.

5. В случае обеспечения неблокируемой коммутации GPU-карт на уровне пропускной способности интерфейса PCIe4 (например, при использовании 400Гб RDMA-коммутации) и задействования порядка 100 карт возможно моделирование $N = 2048K$ до времени релаксации.

6. Для прямого моделирования большего числа частиц $N \geq 4096K$ до времени релаксации за разумное время (меньше месяца) требуется существенное сокращение серийной части кода ($\ll 1\%$), задействование большого числа карт (>100) и неблокируемая коммутация всех карт на уровне $>400Гб$.

References

- Aarseth S.J. (2003) Gravitational N-body simulations: tools and algorithms. — Cambridge University Press. (in English)
- Amdahl G.M. (1967) Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities. Proceedings of the April 18-20, spring joint computer conference. — P. 483-485. (in English)
- Berczik P. et al. (2011) High performance massively parallel direct N-body simulations on large GPU clusters. International conference on high performance computing, 2011. — P. 8-18. (in English)
- Binney J., Tremaine S. (2011) Galactic dynamics. — Princeton university press. (in English)
- Chandrasekhar I.S. (1941) The Time of Relaxation of Stellar Systems. *Astrophysical Journal*, vol. 93. — P. 285. (in English)
- Dejonghe H.A. (1987) completely analytical family of anisotropic Plummer models. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. — vol. 224. —No. 1. — P. 13-39. (in English)
- Harfst S. et al. (2007) Performance analysis of direct N-body algorithms on special-purpose supercomputers. *New Astronomy*. — vol. 12. — No. 5. — P. 357-377. (in English)
- Heggie D.C., Hut P. (2002) The Gravitational Million-Body Problem. — Cambridge University Press. — P. 8. (in English)
- Hénon M. (1971) The Monte Carlo method. *International Astronomical Union Colloquium*. — Cambridge University Press, vol. 10. — P. 151-167. (in English)
- Just A. et al. ENHANCED ACCRETION RATES OF STARS ON SUPERMAS— No. 1. — P. 51. (in English)
- Kennedy G.F. et al. (2016) Star–disc interaction in galactic nuclei: orbits and rates of accreted stars. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. — vol. 460. —No. 1. —P. 240-255. (in English)
- Makino J. (1991) Optimal order and time-step criterion for Aarseth-type N-body integrators. *Astrophysical Journal*, Part 1 (ISSN 0004-637X), vol. 369, March 1. — P. 200-212. (in English)
- Makino J. (2004) A fast parallel treecode with GRAPE. *Publications of the Astronomical Society of Japan*. — vol. 56. — No. 3. — P. 521-531. (in English)
- Moore G.E. et al. (1965) Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics*. — vol. 38. — No. 8. — P. 114-117 (in English)
- Nitadori K., Makino J. (2008) Sixth-and eighth-order Hermite integrator for N-body simulations. *New Astronomy*. — vol. 13. — No. 7. — P. 498-507. (in English)
- Springel V. (2005) The cosmological simulation code GADGET-2. *Monthly notices of the royal astronomical society*. — vol. 364. — No. 4. — p. 1105-1134. (in English)

© A.S. Beisenova, A.A. Zhanybekova, M.M. Dyusebaeva*,
G.E. Berganaeva, 2025.

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz

STUDY OF THE CHEMICAL COMPOSITION OF *CENTAUREA DIFFUSA* LAM. GROWING IN THE TERRITORY OF ALMATY REGION

Beisenova Aizhan Serikbaikyzy — PhD student of Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: beysenova.ayzhan@bk.ru, ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-0139-0126>;

Zhanybekova Adel — student of Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: adelzhanybekova@mail.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>;

Berganayeva Gulzat Ergaziyevna — Candidate of Chemical Sciences, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: gulzat-bakyt@mail.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7213-7458>;

Dyusebaeva Moldyr Akimzhanovna — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>.

Abstract. Diff use knapweed (*Centaurea diff usa Lam.*) is a biennial herbaceous semi-shrub belonging to the genus *Centaurea* of the family Asteraceae. It has a thin horizontal rhizome and is commonly found on sandy or light loamy soils. As a weed, it grows among crops of wheat, rye, or fl ax, and is often seen on fallow lands and gravel embankments along railways. The plant has a bitter taste, so it is not consumed by livestock, except camels. Despite this, it is considered an excellent honey plant and is extremely drought-resistant. Beekeepers purchase its seeds specifically for sowing honey fi elds. Interestingly, the drier and hotter the summer, the more nectariferous *Centaurea diff usa* becomes. In folk medicine, the plant has been used for treating gynecological disorders and chronic pyelonephritis. Its decoction has a slightly bitter taste. Since the species remains underexplored, it attracts increasing scientific and practical interest. For the fi rst time in Almaty region, *Centaurea diff usa* was studied in this research. Both quantitative and qualitative analyses were performed. The chemical composition was determined as follows: moisture 14.7%, ash 6.35%, extractives 30.48%, organic acids 2.1%, fl avonoids 0.8%, tannins 0.53%, alkaloids 0.38%, coumarins 1.58%, saponins 0.97%, carbohydrates 1.02%. By multi-element atomic emission spectroscopy, 11 mineral elements were identified in the ash. The main components were calcium (321.92



mg/g), magnesium (78.01 mg/g), and potassium (885.68 mg/g). These results highlight the biological and ecological significance of *Centaurea diffusa* as both a medicinal plant and a valuable nectar source.

Keywords: *Centaurea diffusa*, quantitative, qualitative analysis, micro-, macroelements, atomic emission spectral analysis

© А.С. Бейсенова, А.А. Жаныбекова, Г.Е. Берганаева, М.А. Дюсебаева*, 2025.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: Moldyr.Dyusebaeva@kaznu.edu.kz

АЛМАТЫ ОБЛЫСЫНЫҢ АУМАҒЫНДА ӨСЕТІН ШАШЫҢҚЫ ГҮЛКЕКІРЕ *CENTAUREA DIFFUSA* LAM. ӨСІМДІГІНІҢ ХИМИЯЛЫҚ ҚҰРАМЫН ЗЕРТТЕУ

Бейсенова Айжан Серікбайқызы — Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің докторанты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: beysenova.ayzhan@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0139-0126>;

Жаныбекова Аделъ — Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университетінің студенті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: adelzhanybekova@mail.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>;

Берганаева Гульзат Ергазиевна — химия ғылымдарының кандидаты, Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: gulzat-bakyt@mail.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7213-7458>;

Дюсебаева Мольдыр Акимжановна — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>.

Аннотация. Шашыраңқы василёк (*Centaurea diffusa* Lam.) — астра тұқымдасына жататын екіжылдық, жартылай бұта тектес шөптесін өсімдік. Ол жіңішке көлденең тамырсабағы арқылы көбейеді. Негізінен құмды және құмдақ топырақта өсіп, егістіктерде арамшөп ретінде таралады. Бидай, қара бидай, зығыр сияқты дақылдардың арасына шығып, өнімге зиянын тигізеді. Сондай-ақ тыңайған жерлерде, пар жерлерде, қала маңындағы бос алқаптарда және теміржол бойындағы тастақты үйінділерде жиі кездеседі. Өсімдіктің дәмі ащы болғандықтан, үй жануарлары да, жабайы жануарлар да жемейді, тек түйелер ғана жейді. Соған қарамастан, ол – тамаша балшар әрі өте құрғақшылыққа төзімді. Сондықтан балшарлар арнайы тұқымын сатып алып, бал алқаптарына егеді. Бұл өсімдіктің ерекшелігі – жаз маусымы қаншалықты ыстық әрі құрғақ болса, соншалықты мол бал береді. Халық медицинасында *Centaurea diffusa* гинекологиялық ауруларды және созылмалы пиелонефритті емдеуде қолданылып келеді. Қайнатпасы ащылау дәмге ие. Өсімдік ғылыми тұрғыдан әлі толық зерттелмегендіктен, қазір оған деген қызығушылық арта түсуде. Алматы облысында алғаш рет жүргізілген зерттеулерде сандық және сапалық талдау жасалды. Нәтижесінде химиялық құрамы анықталды: ылғал – 14,7%, күл – 6,35%, экстрактивті заттар – 30,48%,

органикалық қышқылдар – 2,1%, флавоноидтар – 0,8%, дубильді заттар – 0,53%, алкалоидтар – 0,38%, кумарин – 1,58%, сапонин – 0,97%, көмірсулар – 1,02%. Көпэлементті атом-эмиссиялық спектралды әдіс арқылы күл құрамынан 11 элемент табылды. Негізгі элементтері: кальций – 321,92 мг/г, магний – 78,01 мг/г, калий – 885,68 мг/г. Бұл деректер өсімдіктің дәрілік, экологиялық және балшарлық маңызын көрсетеді.

Түйін сөздер: *Centaurea diffusa*, сандық, сапалық талдау, микро, макроэлементтер, атом-эмиссионды спектрлік талдау

© А.С. Бейсенова, А.А. Жаныбекова, М.А. Дюсебаева*,
Г.Е. Берганаева, 2025.

Казахский Национальный Университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан.

²E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz

ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ВАСИЛЕК РАСКИДИСТЫЙ *CENTAUREA DIFFUSA* LAM. РАСТУЩИЙ НА ТЕРРИТОРИИ АЛМАТИНСКОЙ ОБЛАСТИ

Бейсенова Айжан Серикбайқызы — докторант Казахского Национального Университета имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: beysenova.ayzhan@bk.ru, ORCID: <https://orcid.org/0009-0007-0139-0126>

Жаныбекова Адель — студент Казахского Национального Университета имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: aadelzhanybekova@mail.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>;

Берганаева Гульзат Ергазиевна — кандидат химических наук Казахского Национального Университета имени аль-Фараби,

E-mail: gulzat-bakyt@mail.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7213-7458>;

Дюсебаева Мольдыр Акимжановна — кандидат химических наук, ассоциированный профессор Казахского Национального Университета имени аль-Фараби,

E-mail: moldyr.dyusebaeva@kaznu.edu.kz, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3873-5099>.

Аннотация. Василёк раскидистый (лат. *Centaurea diffusa* Lam.) — травянистое растение, вид рода Василёк (*Centaurea*) семейства Астровые (*Asteraceae*). Двулетнее, травянистое растение-полукустарник, имеющее тонкое горизонтальное корневище. Содержит 32 913 видов, сгруппированных в 1911 семейств. Растёт на супесчаных и песчаных почвах, среди посевов пшеницы, ржи или льна как сорняк. Часто встречается на паровых полях. В пригородных районах и городах часто растёт на щебёнчатой насыпи вдоль железнодорожного полотна. Растение имеет горький вкус, поэтому никакие животные (ни дикие, ни домашние), кроме верблюдов, его не едят. Прекрасный медонос и очень засухоустойчивое растение. Семена василька раскидистого продают пчеловодам именно для засева полей под медонос. Уникальность этого растения в том, что чем засушливее и жарче лето, тем более медоносным будет василёк раскидистый. Используется в медицине при лечении гинекологических заболеваний и хронического пиелонефрита. При заваривании отвар василька раскидистого имеет горьковатый вкус. *Centaurea diffusa*



Lam. поскольку растение мало изучено, в настоящее время к этому виду растений наблюдается большой интерес с научной и практической точки зрения. *Centaurea diffusa Lam.*, произрастающая на территории Алматинской области впервые в данном научном исследовании. Проведен количественный и качественный анализ растения *Centaurea diffusa Lam.* Определен состав растения: влажность (14,7 %), зольность (6,35 %), экстрактивные вещества (30,48 %), органические кислоты (2,1 %), флавоноиды (0,8 %), дубильные вещества (0,53 %), алкалоид (0,38%), кумарин (1,58%), сапонин (0,97%), углеводы (1,02%). Методом многоэлементного атомно-эмиссионного спектрального анализа в золе растений обнаружено 11 элементов, их основной состав: Ca (321,92 мг/г), Mg (78,010 мг/г), K (885,680 мг/г).

Ключевые слова: *Centaurea diffusa*, количественный, качественный анализ, микро-, макроэлементы, атомно-эмиссионный спектральный анализ

Кіріспе. Қазақстан аумағында ғасырлар бойы дәстүрлі медицинада қолданылып келе жатқан дәрілік өсімдіктердің орасан үлкен қоры бар. Қазақстанның флорасы 6000-нан астам өсімдік түрлерін қамтиды, ал олардың зерттелу дәрежесі төмен. Бұл мәселені шешу ең алдымен дәрілік өсімдіктердің ресурстық базасын зерттеу арқылы мүмкін болады және медицинада пайдалану үшін қажетті перспективалы түрлерін іздеу. Қазақстанның фармацевтика ғылымының алдында тұрған міндеттердің бірі – биологиялық белсенді қосылыстардың потенциалды көздерін іздеу, олардың табиғатын анықтау және зерттеу, сондай-ақ физикалық және химиялық қасиеттерін зерттеу, сапалық және сандық көрсеткіштерін анықтау. Осыған байланысты соңғы жылдары Қазақстан Республикасының экстремалды жағдайларға бейімделген сортанды және құрғақ топырақтарында кеңінен өсетін жабайы өсімдіктерді зерттеу жұмыстары кеңейуде. Дүниежүзілік денсаулық сақтау ұйымының мәліметі бойынша, қамтамасыз ету әр елдің есірткі қауіпсіздігі стратегиялары ішкі көлемі фармацевтикалық өнімдер ішкі нарықта болуы керек кем дегенде 20%. Қазақстан Республикасында көптеген жабайы өсімдіктер бар, бірақ ұзақ уақыт бойы дәрілік мақсатта қолданылатын өсімдіктер. Ең жақсылардың кейбірі қазіргі заманғы дәрі-дәрмектер жабайы шөптерден жасалған. Қазақстанда кеңінен таралған *Centaurea diffusa Lam.* (Астралылар) тұқымдасына қазіргі таңда ғылыми және тәжірибелік тұрғыда үлкен қызығушылық артуда.

Көрнекті ғалым, философ, дәрігер Авиценна айтқандай: «Дәрігердің үш қаруы бар: сөз, өсімдік, пышақ». Өсімдіктер әлемі адамзат өзінің ауруларын емдеу және алдын алу үшін қолданған алғашқы және ең көне емдік көзі болып саналады. Тарихқа тереңірек үңілсек, өсімдіктерді дәрі-дәрмек жасау үшін қолданудың ең көне жазбаша дәлелі Нағпурдан шыққан шумер саз тақтасында табылды, оның жасы шамамен 5000 жыл. Ол 250-ден астам түрлі өсімдіктерге қатысты дәрі-дәрмектердің 12 рецептін қамтиды. Шумер емшілері өсімдіктердің сабақтары мен тамырларынан ұнтақ пен тұнбалар жасаған. Олар алмұрт пен інжірдің емдік қасиеті бар деп есептеді, ал кептірілген және ұнтақталған тал мен қара өрік ағаштарының жас өркендері, қарағай мен шырша инелері ұнтақтар мен компрессстердің құрамдас бөлігі ретінде пайдаланылды. Кептірілген және

ұсақталған өсімдіктердің ұнтақтары кейде жануар және минералды ұнтақтармен араласқан. Еріткіш ретінде тек су ғана емес, шарап пен сыра да пайдаланылды. Демек, кем дегенде 80 ғасыр бұрын адамдар емдеу үшін өсімдіктерден жасалған ең қарапайым дәрілік препараттарды қолданған (Kelly et al., 2009).

Тамырлар мен шөптер туралы қытай кітабында император Шен Нунг шамамен б.з.д. 2500 жылы жазған *Pen T'Sao* кітабында 900 дәрі-дәрмек (дәрілік өсімдіктердің кептірілген бөліктері) сипатталған, олардың көпшілігі қазіргі уақытта да қолданылады, мысалы, *Rhei rhizoma*, камфора, *Theae. folium*, *Rodophyllum*, үлкен сары гентиан, женьшень, датура, даршын қабығы және эфедра (Петровска, 2012). Түпнұсқалығы мәні жағынан әлі нақтыланып, дәлелденбеген қазақ халық емшілігіне қатысты мынаны айтуға болады. Қазақ халқының дәстүрлі медицинасының білімі тек ауруды емдеуден тұрмайды, ол маңызды теориялық дереккөздерге негізделген. XV ғасырда өмір сүрген қазақ халқының көреген емшісі, ірі ғалым-емші Өтебойдақ Тілеуқабылұлы (1388-1478) «Медициналық баян» атты медициналық этнографиялық еңбегінде шипагерлік өнердің сырын толық аша білген. Бұл еңбек Өтебойдақ Тілеуқабылұлын үлкен емші санаған Өз-Жәнібек ханның атынан 1466-1473 жылдары жазылғанын айта кеткен жөн (Есқалиева, 2013). Бұл медициналық энциклопедияда адам ағзасының әртүрлі мүшелерінің жұмысы сипатталған және осы органдардың негізгі ауруларының түрлері келтірілген. Сонымен қатар, бұл еңбекте бүгінгі таңда халықтық медицинада қолданылып жүрген әдістер жақсы сипатталған: сикырлау, сүйек орнату, тамыр соғуын тыңдау және т.б. Тәжірибеде және дала зертханасында жүргізілген жұмыстардың нәтижесінде ғалым-емші барлығы 1108 түрлі дәрі-дәрмек шығарса, оның 858-і дәрілік өсімдіктерден, 318-і жануарлар ағзаларынан, 60-қа жуығы металдардан жасалған. «Ұстазсыз ұстаз» деген лақап атқа ие болған Өтебойдақ Тілеуқабылов 1050 түрлі ауруды емдеудің әдістерін ашқан (Есқалиева, 2013). Қазіргі уақытта бүкіл әлемде шөптермен емдеу кеңінен қолданылады. ДДҰ Ғаламдық шолуының (ДДҰ/TRM) дәстүрлі және қосымша/балама медицина және шөптік дәрілік препараттарды реттеу бойынша ұлттық саясатқа қатысты нәтижелері шөп дәрілерінің еуропалық және азиялық нарығының тұрақты түрде кеңейіп келе жатқанын көрсетеді (WHO, 2010). Қазақстанның табиғи флорасы 6000-нан астам өсімдік түрін қамтиды (Грудзинская, 2020; Бурашева, 2016). Қазір Қазақстанда дәрілік өсімдіктердің қанша түрі өсетінін айту қиын, өйткені олардың тізімі жыл сайын толығып отырады. Ресми және халықтық медицинада 150-ден астам өсімдік түрі қолданылады. Бұл мақалада тері ауруларын емдеу үшін дәстүрлі түрде қолданылған Қазақстан Республикасының аумағында өсетін кейбір дәрілік өсімдіктерге шолу жасалады. Әдебиет мәліметтерін зерделеу кезінде (2010-2023 ж.ж.) осы өсімдіктердің фитохимиялық құрамына ерекше назар аударылды және дерматит, атопиялық дерматит, экзема және басқа да қабыну тері ауруларын емдеуде емдік әсерге жауапты негізгі компоненттерге талдау жасалды. да жүзеге асырылды.

Зерттеу нысаны: Алматы облысында жиналған шашыңқы гүлкекіре (*Centaurea diffusa lam.*) өсімдігі.

Материал және әдістер. Дәрілік өсімдік шикізатының ылғалдылығы мен күлділігі Мемлекеттік Фармакопеяның (ГФХІ) талаптарына сәйкес анықталды (Әдекенов, 2012).

Әл-Фараби атындағы "Қазақ ұлттық университетінің КЕАҚ "Физика-химиялық әдістер және талдау орталығында" атомдық-эмиссиялық спектрлік талдау әдісін қолдана отырып *Centaurea diffusa Lam.* өсімдік күлі құрамындағы элементтік компоненттерге талдау жасалды. Күлдің минералды құрамын анықтау үшін Shimadzu 6200 сериялы спектрометр қолданылды. Ол үшін шикізат алдын ала қыздырылған және дәл өлшенген фарфор тигельге орналастырылды. Содан кейін тигель ақырын қыздырылды, алдымен заттың ең төменгі температурада жануына мүмкіндік берді. Температура біртіндеп арттырылды. Жану тұрақты масса алынғанға дейін 500°C температурада жүргізілді. Кальцилеудің соңында тигель эксикаторда салқындалды. *Centaurea diffusa Lam.* (0,1084 г) күлі қыздырылған кезде 10 мл 40% тұз қышқылында ерітілді. Осыдан кейін тұздар алу үшін алынған ерітінді қыздырылды. Әрі қарай, 15 мл 1 нормальды тұз қышқылы ерітіндісінде ерітіліп, талдауға арналған 25 мл көлемді ыдысқа ауыстырылды (Грудзинская, 2012).

Өсімдік құрамындағы биологиялық белсенді заттардың (органикалық қышқылдар, сапонин, кумарин, флавоноид, тері илегіш заттар, алкалоид) сандық мөлшері анықталды.

Зерттеу нәтижелері. Өсімдіктің сандық талдау қатарына шикізат ылғалдылығын, күлділігін анықтау және сонымен қатар құрамындағы экстрактивті заттар мөлшерінің сандық көрсеткіштері жатады. Аталмыш талдау нәтижелері 1-кестеде бейнеленген.

Кесте 1 — *Centaurea diffusa Lam.* сапалылығын анықтау нәтижелері

Өсімдік аты	Абсолютті құрғақ шикізатқа санағандағы %-тік үлесі		
	Ылғалдылығы	Жалпы күлділік	Экстрактивті заттар
Шашыңқы гүлкекіре (<i>Centaurea diffusa Lam.</i>)	14.7	6.35	30.48

Кесте 2 — *Centaurea diffusa Lam.* өсімдігі құрамындағы биологиялық белсенді заттар көрсеткіші

Өсімдік құрамындағы биологиялық белсенді заттар	Пайыздық мөлшері (%)
Флавоноид	0,8
Органикалық қышқылдар	2,1
Алкалоид	0,38
Кумарин	1,58
Сапонин	0,97
Тері илегіш заттар	0,53
Көмірсулар	1,02

Centaurea diffusa Lam. өсімдігі құрамынан минералды заттарды анықтау атом – абсорбционды спектрометр жShimadzu 6200 series арқылы жүзеге асырылды. Олар

ферменттердің белсенділігін арттырады, биохимиялық процестерді катализдейді, көмірсулар, ақуыздар және дәрумендер синтезіне септігін тигізеді әрі заттардың алмасуына қатысады. Сонымен қатар микроэлементтер өсімдік препараттарының құрамына кіріп, олардың белсенділігіне әсерін тигізетіні белгілі. (Қазақстан мемлекеттік фармакопеясы, 2008). Зерттеу нәтижелері 3-кестеде келтірілген.

Кесте 3 — *Centaurea diffusa Lam.* өсімдігі қалдығындағы макро-микро элементтер

Макро және микроэлементтер	Золдағы концентрациясы ,мкг/мл
Мыс	1,6190
Мырыш	0,4263
Қорғасын	0,3499
Кадмий	0,0479
Темір	17,1929
Никель	0,1579
Марганец	1,4019
Кальций	321,92
Магний	78,010
Калий	885,680
Натрий	31,4450

Украина мемлекетіндегі Запорожье мемлекеттік медицина университеті ғылымдары *Centaurea diffusa lam* өсімдігінің құрамын зерттеді. З е р т т е у нәтижелері *Centaurea diffusa Lam.* өсімдігі шикізатында биологиялық белсенді қосылыстардың әртүрлі топтарына жататын 55 заттың бар екендігін көрсетеді: 9 фенол, 9 спирт, 8 карбон қышқылы (қаныққан және қанықпаған), 7 эфир, 5 алкан, 4 гетероциклді қосылыс, 4 кетон, 3 терпен, 2 альдегид, 1 алкен, 2 моносахарид, 1 гидразид. Алайда, пайыздық тұрғыдан алғанда, бұл мәліметтер қосылыстардың жалпы мазмұнымен ерекшеленеді. Ең үлкен үлестер фенолдарға – 21,45 %, карбон қышқылдарына – 19,71 %, спирттер мен эфирлерге – сәйкесінше 17,63% және 12,43% тиесілі. Сапалық және сандық құрамды анықтау үшін Agilent 5977 BGC / MSD (Agilent, Santa Clara, CA, USA) масс-спектрометриялық детекторы бар Agilent 7890B GC system (Agilent, Santa Clara, CA, USA) құралында газ хроматографиясы әдісі қолданылды.

Кесте 4 — *Centaurea diffusa Lam.* өсімдігі құрамындағы зерттеуден кейінгі биологиялық белсенді заттар көрсеткіші

Биологиялық белсенді қосылыстар	Пайыздық көрсеткіш (%)
Фенолдар	21,45
Спирттер	17,63
Карбон қышқылдары	19,71
Эфирлер	12,43
Алкандар	3,29
Гетероциклді қосылыстар	4,86

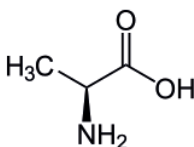
Кетондар	2,44
Терпендер	4,74
Альдегидтер	3,08
Алкендер	3,06
Моносахарид	1,06
Гидразид	0,46

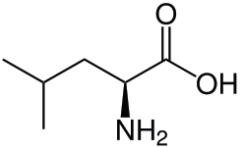
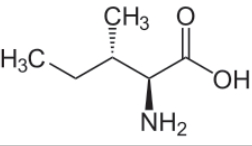
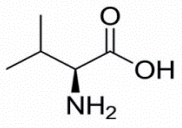
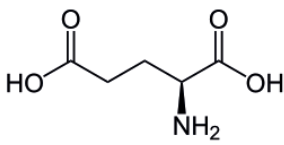
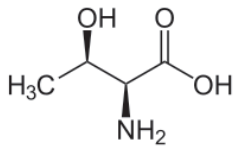
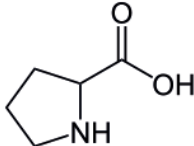
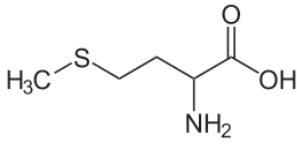
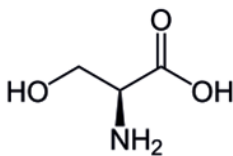
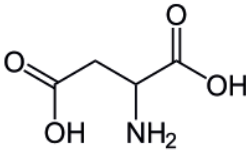
Барлық компоненттердің жалпы құрамынан: редуксин (15,53%), 4-гексадекан (пальмитин) қышқылы (12,25%), 2-этил-2- (гидроксиметил) - 1,3-пропандиол (8,17%), гексадекан қышқылының 2-гидрокси-1 - (гидроксиметил) этил эфирі (4,30%). 4-гексадекан қышқылы (пальмитин қышқылы) - табиғатта май қышқылы, жануар, өсімдік майларының және балауыздың глицеридтерінің құрамына кіреді. Ол TLR4 рецепторлары арқылы адамның иммундық жасушаларында қабынуға қарсы реакцияларды ынталандыратыны белгілі, оған ісікке қарсы және диабетке қарсы белсенділік тән (Sudha, 2013).

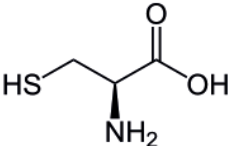
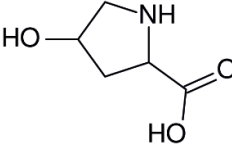
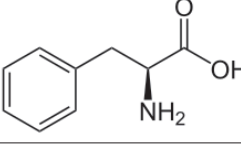
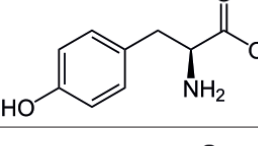
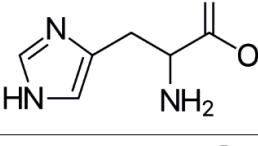
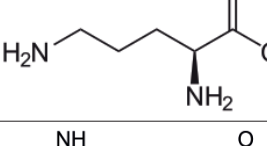
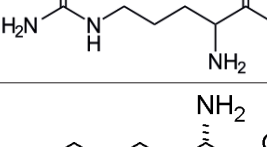
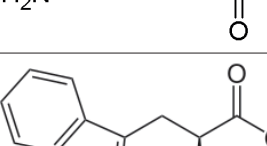
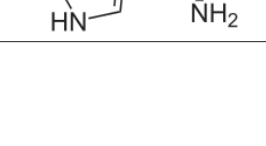
Демек, *Centaurea diffusa Lam.* өсімдігі антиоксидантты, ісікке қарсы, диабетке қарсы және гипохолестеринемиялық әрекеттерге қарсы зерттеулер үшін ұсынылуы мүмкін.

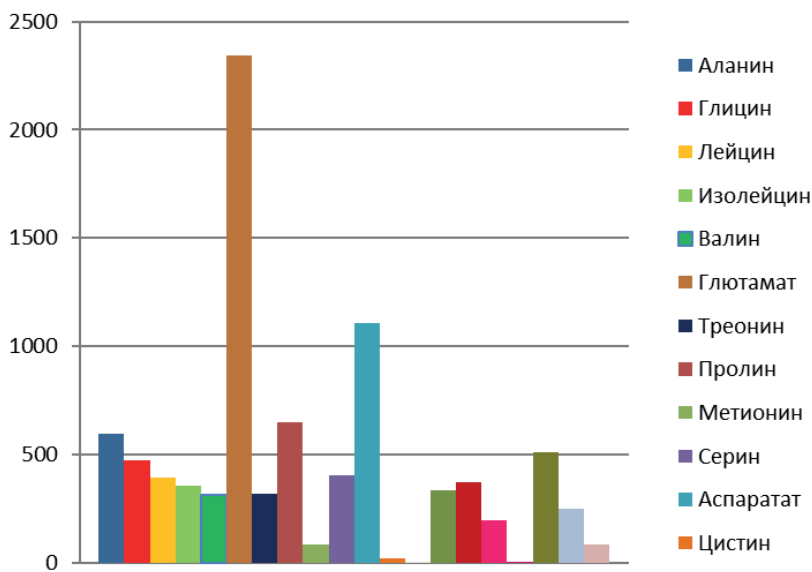
Аминқышқылдардың құрамын анықтау үшін GC-MS әдісі қолданылды. GC-MS анализі: *F. pallidiflora* өсімдігінің тамыр бөлігін масс-спектрмен байланысқан газды хроматография арқылы 0,31% полярлы қоспа 20 м-лік карбовара, 0,28% 5 CP силар және WA-W-120-140 меш, бағанасы (400 x 3 мм) болатын хромосорбтағы 0,06% лександы пайдалану арқылы анализдейді. Колонканың температурасы 110°C-тан (20 минут бойы ұстап тұрады), 6°C/ минутта 110°C-тан 180°C-қа дейін, 32°C/минутта 185°C-ден 290°C-қа дейін температурада бағдарлайды. 250°C-қа жеткенде, барлық аминқышқылдар шыққанға дейін тұрақты болу керек. Хроматограмма сыртқы стандарттарға сәйкес есептеледі. *Centaurea diffusa lam.* құрамындағы аминқышқылдары 5-кестеде және 1-суретте көрсетілген.

Кесте 5 - *Centaurea Diffusa lam.* құрамындағы амин қышқылдары

№	Амин қышқылдары	Жалпы формуласы	Құрылымдық формуласы	М, г/моль	Өсімдіктегі үлесі, mg/100g
1	Аланин	$C_3H_7NO_2$		89	594
2	Глицин	$C_2H_5NO_2$		75	471

3	Лейцин	$C_6H_{13}NO_2$		131	393
4	Изолейцин	$C_6H_{13}NO_2$		131	355
5	Валин	$C_5H_{11}NO_2$		117	312
6	Глютамат	$C_5H_9NO_4$		147	2346
7	Треонин	$C_4H_9NO_3$		119	320
8	Пролин	$C_5H_9NO_2$		115	648
9	Метионин	$C_5H_{11}NO_2S$		149	85
10	Серин	$C_3H_7NO_3$		105	403
11	Аспаратат	$C_4H_7NO_4$		133	1107

12	Цистин	$C_3H_7NO_2S$		121	21
13	Оксипролин	$C_5H_9NO_3$		131	1
14	Фенилаланин	$C_9H_{11}NO_2$		165	336
15	Тирозин	$C_9H_{11}NO_3$		181	370
16	Гистидин	$C_6H_9N_3O_2$		155	197
17	Орнитин	$C_5H_{12}N_2O_2$		132	1
18	Аргинин	$C_6H_{14}N_4O_2$		174	511
19	Лизин	$C_6H_{14}N_2O_2$		146	246
20	Триптофан	$C_{11}H_{12}N_2O_2$		204	83



Сурет 1 - *Centaurea Diffusa lam.* құрамындағы амин қышқылдары

Талқылау. Қазіргі уақытта 200-ге жуық табиғи аминқышқылдары белгілі, олардың тек 20-сы ақуыздың құрамына кіреді (Нельсон, 2022). Адам ағзасында аминқышқылдары ақуыз молекулаларының құрылысынан басқа, әртүрлі табиғи қосылыстардың - коферменттердің, антибиотиктердің құрамына кіреді. Гормондардың, медиаторлардың және нейротрансмиттерлердің түзілуіне қатысады. Метаболизмге қатысатын метаболиттердің көзі болып табылады (Кольман, 2000). Аминқышқылдардың құрамында негізінен глутамат (2346 мг / 100 г), аспаратат (1107 мг / 100 г), пролин (648 мг / 100 г және аланин (594 мг / 100 г,) болды. Глутамат метаболизмде маңызды рөл атқарады, метаболиттік процестерге және дененің физиологиялық жағдайына айтарлықтай әсер етеді. (Stacey, 2013). Аспаратат көмірсулардың бұлшықет энергиясына айналуын қамтамасыз етеді, спортшылар үшін қоспалар ретінде кеңінен қолданылады, жүктеменің жоғарылауы кезінде иммундық жүйенің белсенділігін арттырады, шаршауға төзімділікті арттырады, жұмыс істеу қабілетін сақтайды, төзімділік, гепатопротектор ретінде әрекет етеді (Торо, 2009).

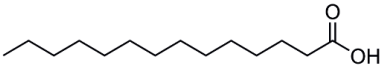
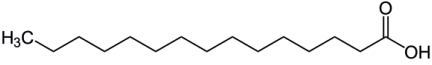
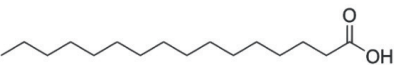
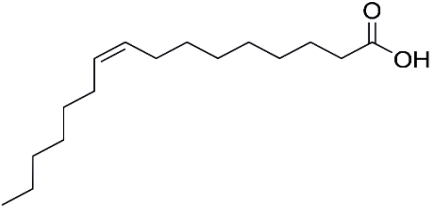
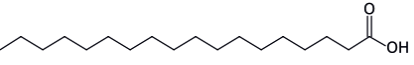
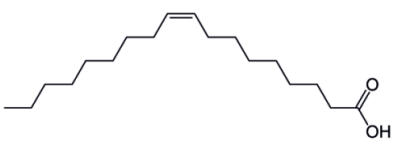
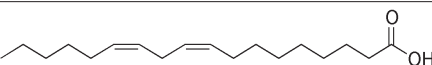
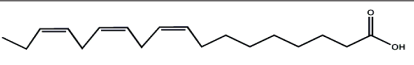
Пролин - ағза коллаген өндіру үшін пайдаланатын, жараларды, күйіктерді, жараларды емдеуге ықпал ететін негізгі аминқышқылдарының бірі; коллагеннің негізгі құрамдас бөлігі болып табылады; буындардың жақсы жұмыс істеуіне ықпал етеді; тамыр қабырғаларын қорғайды; сіңірлерді, байламдарды және жүрек бұлшықеттерін нығайтады; маңызды пептидтердің (адреналин және т. б.) түзілуіне қатысады. Пролин антиоксидантты, антиденатурациялық, осморегуляторлық және мембраналық протекторлық қасиеттерге ие. (Сыровая, 2014). Аланин бұлшықет тіндері, ми және орталық жүйке жүйесі үшін маңызды энергия көзі болып табылады, антиденелер шығару арқылы иммундық жүйені нығайтады.

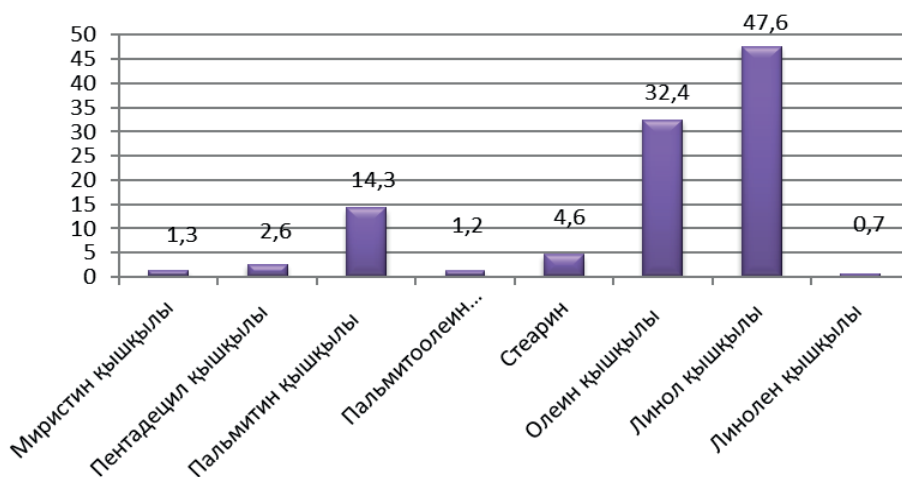
Қант пен органикалық қышқылдардың метаболизміне белсенді қатысады. Аланин көмірсулардың метаболизмін қалыпқа келтіреді (Северина, 2004).

Жайылған гүлкекіре (*Centaurea diffusa lam.*) өсімдігі құрамындағы май қышқылдары

5 минут ішінде хлороформ-метанол қоспасы (2: 1) экстрагирленген сығындысы қағаз фильтрі арқылы сүзіліп, құрғақ массаға дейін концентрлейді. Содан кейін алынатын сығындыға 10 мл метанолды және 2-3 тамшы ацетилхлоридті қосып, 60-70 ° C температурада 30 минут бойы метилдейді. Метанол роторлы буландырғыш арқылы айдалады және үлгілер 5 мл гексанмен экстрагирленеді және Қазақ тамақтану Академиясында 1 сағат ішінде «CARLO-ERBA-420» газ хроматографы арқылы талданады. Нәтижелері 6-кестеде және 2-суретте көрсетілген.

Кесте 6 - *Centaurea diffusa lam.* құрамындағы май қышқылдары

№	Май қышқылдары	Жалпы формуласы	Құрылымдық формуласы	М, г/моль	Өсімдіктегі үлесі, %
1	Миристин қышқылы	$C_{14}H_{28}O_2$		228	1.3
2	Пентадецил қышқылы	$C_{15}H_{30}O_2$		242	2.6
3	Пальмитин қышқылы	$C_{16}H_{32}O_2$		256	14.3
4	Пальмитоолеин қышқылы	$C_{16}H_{30}O_2$		254	1.2
5	Стеарин қышқылы	$C_{18}H_{36}O_2$		284	4.6
6	Олеин қышқылы	$C_{18}H_{34}O_2$		282	32.4
7	Линол қышқылы	$C_{18}H_{32}O_2$		280	47.6
8	Линолен қышқылы	$C_{18}H_{30}O_2$	 Linolenic acid	278	0.7



Сурет 2. *Centaurea diffusa lam.* құрамындағы май қышқылдары

Centaurea diffusa lam. ішіндегі негізгі май қышқылдары линол қышқылы (47,6%), олеин қышқылы (32,4%) және пальмитин қышқылы (14,3%) болды. Линол қышқылы тамырлардағы атеросклеротикалық өзгерістердің дамуына жол бермейді, қандағы холестерин деңгейін төмендетуге көмектеседі. Олеин қышқылы тамақтануда маңызды рөл атқарады, холестеринмен, инсулинге төзімділікпен күресуге ықпал етеді, иммунитетті нығайтады және соңғы зерттеулерге сәйкес, тіпті әйелдерге сүт безі қатерлі ісігінің дамуын болдырмауға көмектеседі, ми мен бүйрек үсті безіне әсер ететін аурулардың дамуына кедергі жасай алады, сондай-ақ есте сақтауды жақсартады.

Қорытынды. Қазақстанның Алматы өңірінен жиналған Астралылар тұқымдасына жататын шашыңқы гүлкекіре *Centaurea diffusa lam.* өсімдігінің сандық және сапалық сараптау нәтижесінде құрамынан биологиялық белсенді кешендер бөлінді. Зерттеу нәтижесінде өсімдіктің шынайылық көрсеткіштері: ылғалдылығы – 14,7%, күлділігі – 6,59%, экстрактивті заттар – 31,6% екендігі анықталды. *Centaurea diffusa lam.* өсімдігінің құрамында флавоноидтар (0,8%), органикалық қышқылдар (2,1%), тері илегіш заттар (0,53%), алкалоидтар (0,38%), кумарин (1,58%), сапонин (0,97%), көмірсулар (1,02%) анықталды. *Centaurea diffusa lam.* өсімдік күлінің құрамынан минералды заттар атомды-абсорбционды спектрометр көмегімен анықталды, соның ішінде көп мөлшерде: кальций, калий, магний кездеседі.

Әдебиеттер

Әдекенов С.М. (2012) Қазақстан мен Сібір өсімдіктерін биологиялық белсенді қосылыстардың құрамы бойынша зерттеу нәтижелері. С.М. Әдекенов. Өнеркәсіптік дамыған аймақтардың өнеркәсіптік ботаника мәселелері: Халықаралық конф., Кемерово. — 15. — 18 б.

Грудзинская Л.М., Гемежиева Н.Г., Қаржаубекова Ж.Ж. Жетекші отбасылар көлеміндегі қазақстандық дәрілік флораны зерттеу. Қарағанды университеті хабаршысы. Ботаника және фитопродукция институты, Алматы. «Биология. Медицина. География» сериясы, 2020 ж., 4(100). — Р. 39-51; <https://doi.org/10.31489/2020bmg4/39-51>

Грудзинская Л.М. (2012) Қазақстанның дәрілік өсімдіктерінің тізімі. Л.М.Грудзинская, Н.Г. Ескеджиева, Алматы. — 140 б.

Ескалиева Б.К. (2013) Фитопрепараттар және табиғи биологиялық белсенді заттардың химиясы, Алматы: Қазақ университеті. <https://dokumen.pub/9786012479959.html>

Кольман Я., Рем К.-Г. (2000) Наглядная биохимия, М.: Мир. — 469 с.

Қазақстан мемлекеттік фармакопеясы, Алматы, 2008. SBN 9965-759-97-9.

Д. Нельсон, М. Кокс (2022) Основы биохимии Ленинджера: Основы биохимии, строение и катализ. — 704 с.

Петровска Б.Б. (2012) Дәрілік өсімдіктердің қолданылуына тарихи шолу. Фармакогнозияға шолулар, 6 (11), 1-5. DOI: 10.4103/0973-7847.95849

Табиғи қосылыстардың химиясы мен технологиясы: оқу құралы. Г.Ш. Бурашева, Б.Қ. Ескалиева, А.К. Кипчакбаева. — Алматы: «Қазақ университеті», 2016. — 14 б. <https://dokumen.pub/9786010424623.html>

Северина Е.С. (2004) Биохимия: Учебник для вузов, под ред. — М.: ГЭОТАР- Медиа. — 779 с.

Сырова А.О., Шаповал Л.Г., Макаров В.А., Петюнина В.Н., Грабовецкая Е.Р., Андреева С.В., Наконечная С.А., Бачинский Р.О., Лукьянова Л.В., Козуб С.Н., Левашова О.Л. (2014) Аминокислоты глазами химиков, фармацевтов, биологов: в 2-х т. Том 1 — X. «Щедра садиба плюс». — 228 с.

Kelly K. (2009) History of medicine, New York: Facts on file. — P. 29–50. https://kupdf.net/download/the-history-of-medicine-2009_5af98606e2b6f51b389016b7_pdf

Topo E., Soricelli A., D'Aniello A., Ronsini S., D'Aniello G. The role and molecular mechanism of D-aspartic acid in the release and synthesis of LH. and testosterone in humans and rats. *Reprod. Biol. Endocrinol.* 2009 Oct 27; 7:120.

Stacey S. Willard, Shahriar Koochekpour. Glutamate, Glutamate Receptors, and Downstream Signaling Pathways. *International Journal of Biological Sciences*, 2013. — P.948-959.

Sudha T., Chidambarampillai S., Mohan V. R. GC-MS analysis of bioactive components of aerial parts of *Fluggea leucopyrus* Willd. (Euphorbiaceae). *Journal of Applied Pharmaceutical Science*. 2013 Tom 3. Issue 5. — P. 126-130 https://www.japsonline.com/admin/php/uploads/912_pdf.pdf

WHO кең таралған дәрілік өсімдіктер туралы ДДҰ монографиялары. — Дүниежүзілік денсаулық сақтау ұйымы, Женева, 2010, 455 б. ISBN 978 92 4 459772 9

References

Adekenov S.M. (2012) Қазақстан мен Сибир өсімдіктерін биологиялық белсенді қосылыстардың құрамы бойынша зерттеу нәтижелері [Results of the study of the content of biologically active compounds in plants of Kazakhstan and Siberia]. S.M. Adekenov. Problems of industrial botany of industrially developed regions: Proc. III International Conf. Kemerovo. — P. 15-18 (in Russian).

Табиғи қосылыстардың химиясы мен технологиясы: оқу құралы [Chemistry and technology of natural compounds: a textbook] G.Sh. Burasheva, B.K. Eskalieva, A.K. Kipchakbayeva, Алматы: «Kazakh University», 2016. — 14 p. <https://dokumen.pub/9786010424623.html> (in Kazakh).

Eskalieva B.K. (2013) Фитопрепараттар және табиғи биологиялық белсенді заттардың химиясы [Phytopreparations and chemistry of natural biologically active substances], Алматы: Kazakh University. <https://dokumen.pub/9786012479959.html> (in Kazakh).

Grudzinskaya, L.M.; Gemejiyeva, N.G.; Karzhaubekova Zh.Zh. ZHetekshi otbasylar kölemindegi қазақстандық дәрілік флораны зерттеу [The Kazakhstan medicinal flora survey in a leading families volume]. Bulletin of Karaganda University/ Institute of Botany and Phytointroduction, Almaty. Series "Biology. Medicine. Geography". 2020, 4(100), 39-51: <https://doi.org/10.31489/2020bmg4/39-51> (in Russian).

Grudzinskaya L.M. (2012) Қазақстанның дәрілік өсімдіктерінің тізімі [List of medicinal plants of Kazakhstan] L.M. Grudzinskaya, N.G. Gemedzhieva, Алматы. — 140 p.

Қазақстан мемлекеттік фармакопеясы [Kazakhstan State Pharmacopeia], Алматы, 2008. SBN 9965-759-97-9 (in Russian).

Kelly K. History of medicine, New York: Facts on file; 2009. —P. 29–50. https://kupdf.net/download/the-history-of-medicine-2009_5af98606e2b6f51b389016b7_pdf (in English).

Nelson D., Cox M. (2022) Osnovy biohimii Lenindzhera: Osnovy biohimii, stroenie i kataliz

[Lehninger's Essentials of Biochemistry: Fundamentals of Biochemistry, Structure, and Catalysis]. — 704 p. 50. (in Russian).

Petrovska B.B. Dərlik ösümdikterdiñ qoldanylyna tarihi sholu [Historical review of medicinal plants' usage], *Pharmacognosy reviews*, 2012, 6(11). — P. 1-5. DOI: 10.4103/0973-7847.95849 (in Russian).

Severina E.S. (2004) *Biohimiya* [Biochemistry: Textbook for Universities], ed., Moscow: GEOTAR-Media. — 779 p (in Russian).

Stacey S. Willard, Shahriar Koochekpour. Glutamate, Glutamate Receptors, and Downstream Signaling Pathways *International Journal of Biological Sciences*, 2013. — P. 948-959. (in English).

Sudha T., Chidambarampillai S., Mohan V. R. GC-MS analysis of bioactive components of aerial parts of *Fluggea leucopyrus* Willd. (Euphorbiaceae) *Journal of Applied Pharmaceutical Science*, 2013, Tom 3, Issue 5. — P. 126-130 https://www.japsonline.com/admin/php/uploads/912_pdf.pdf (in English).

Syrovaya A.O., Shapoval L.G., Makarov V.A., Petyunina V.N., Grabovetskaya E.R., Andreeva S.V., Nakonechnaya S.A., Bachinsky R.O., Lukyanova L.V., Kozub S.N., Levashova O.L. (2014) *Aminokisloty glazami himikov, farmacevtov, biologov* [Amino Acids through the Eyes of Chemists, Pharmacists, and Biologists: in 2 volumes]. Vol. 1 – H. "Shchedra Sadyba Plus". — 228 p. (in Russian).

Topo E., Soricelli A., D'Aniello A., Ronsini S., D'Aniello G. The role and molecular mechanism of D-aspartic acid in the release and synthesis of LH and testosterone in humans and rats. *Reprod. Biol. Endocrinol*, 2009. (in English).

WHO keñ taralğan dərlik ösümdikter turaly DDY monografiyalary [WHO Monographs on Medicinal Plants Widespread in CGM (NHH)], World Health Organization Geneva, 2010. — P. 455. ISBN 978 92 4 459772 9; <https://doi.org/10.31489/2020bmg4/39-51> (in English).

© N.N. Berikbol¹, Zh.S. Kassymova^{1*}, L.K. Orazzhanova¹, A.N. Klivenko¹,
N.N. Nurgaliyev^{1,2}, 2025.

¹Shakarim University, Semey, Kazakhstan;

²Humboldt University of Berlin, Berlin, Germany.

E-mail: kasymova-z@mail.ru

SYNTHESIS OF INTERPOLYELECTROLYTE COMPLEXES FROM FLUORESCENTLY LABELED BIOPOLYMERS

Berikbol Nazira Nurlykyzy — Master of Natural Sciences, Researcher «Shakarim Lab», Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: nazira428@bk.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-4472-082X>;

Kassymova Zhanar Sailaubekovna — Candidate of Biological Sciences, Associate Professor of the Department of Chemistry and Ecology, Research School of Physical and Chemical Sciences, Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: kasymova-z@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4971-6638>;

Orazzhanova Lazzyat Kametaevna — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Chemistry and Ecology, Research School of Physical and Chemical Sciences, Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: lazzyat.orazzhanova.70@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7881-0589>;

Klivenko Alexey Nikolaevich — PhD, Associate professor, Director «Shakarim Lab», Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: alexeyklivenko@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-8971-686>;

Nurgaliyev Nurzhan Nurlybekuly — PhD, Humboldt University of Berlin, Berlin, Germany; Associate Professor of the Department of Chemistry and Ecology, Research School of Physical and Chemical Sciences, Shakarim University, Semey, Kazakhstan,

E-mail: n.nurgaliyev@shakarim.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1216-7150>.

Abstract. Relevance. Fluorescently labeled polymers and interpolyelectrolyte complex (IPEC) were obtained from commercial samples of biopolymers - sodium alginate and chitosan. Methods. We used for synthesis fluorescein isothiocyanate and fluoresceinamine. Formation of fluorescently labeled polymers and IPEC was confirmed by FTIR spectrometry. We studied rheological properties of polymers for evaluate the interaction of polymers with the soil. Soil penetration and water resistance tests were conducted to assess erosion control potential. The formation of a coating on the soil surface was confirmed by SEM micrographs. Main conclusions. Fluorescent chitosan was obtained via thiourea bond between amino groups ($-\text{NH}_2$) and isothiocyanate groups ($=\text{N}=\text{C}=\text{S}$). In sodium alginate, carboxyl groups ($-\text{COO}-$) reacted with

amino groups of fluoresceinamine to form covalent amide bonds (–CO–NH–). The optimal IPEC composition was established at [2:8] molar ratio. Rheological analysis showed that chitosan, sodium alginate, and IPECs ([1:9], [2:8], [3:7], [4:6]) exhibited pseudoplastic, non-Newtonian behavior. Fluorescently labeled polymers penetrated to 21–23 mm and were gradually leached by water. IPEC formed a stable, 2 mm-thick surface coating resistant to leaching. The mechanical strength of polymer–soil layer was 19 times greater than that of untreated soil. Application of IPEC to forest soil increased resistance to water erosion by 72% and to wind erosion by 77%. Practical value. IPEC [Chitosan:sodium alginate] = [2:8] is proposed as an anti-erosion agent to improve structure of forest soils.

Keywords: Interpolyelectrolyte complex, biopolymers, chitosan, sodium alginate, fluorescently labeled chitosan, fluorescently labeled sodium alginate, *soil water erosion*

Funding: *This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP19579443).*

© Н.Н. Берікбол¹, Ж.С. Касымова^{1*}, Л.К. Оразжанова¹, А.Н. Кливенко¹,
Н.Н. Нурғалиев^{1,2}, 2025.

¹«Шәкәрім университеті» КеАҚ, Семей, Қазақстан;

²Гумбольдт атындағы университет, Берлин, Германия.

E-mail: kasymova-z@mail.ru

ФЛУОРЕСЦЕНТТІ ТАҢБАЛАНҒАН БИОПОЛИМЕРЛЕРДЕН ИНТЕРПОЛИЭЛЕКТРОЛИТТІК КОМПЛЕКСТІ СИНТЕЗДЕУ

Берікбол Нәзира Нұрлықызы — жаратылыстану ғылымдарының магистрі, Шәкәрім университетінің «Shakarim Lab» ғылыми қызметкері, Семей, Қазақстан,
E-mail: nazira428@bk.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-4472-082X>;

Касымова Жанар Сайлаубековна — биология ғылымдарының кандидаты, Шәкәрім университетінің Физика және химия ғылымдары зерттеу мектебінің Химия және экология кафедрасының доценті, Семей, Қазақстан,

E-mail: kasymova-z@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4971-6638>;

Оразжанова Ляззат Каметаевна — химия ғылымдарының кандидаты, Шәкәрім университетінің Физика және химия ғылымдары зерттеу мектебінің Химия және экология кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Семей, Қазақстан,

Email: lazzyat.orazzhanova.70@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7881-0589>;

Кливенко Алексей Николаевич — PhD, қауымдастырылған профессор, Шәкәрім университетінің «Shakarim Lab» директоры, Семей, Қазақстан,

E-mail: alexeyklivenko@mail.ru, ORCID ID: 0000-0002-8971-686;

Нұрғалиев Нұржан Нұрлыбекұлы — PhD, Гумбольдт атындағы университет, Берлин, Германия; Физика және химия ғылымдары зерттеу мектебінің Химия және экология кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Шәкәрім университеті, Семей, Қазақстан,

E-mail: n.nurgaliyev@shakarim.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1216-7150>.

Аннотация. Өзектілігі. Зерттеу жұмысында табиғи полимерлер натрий альгинаты мен хитозан коммерциялық үлгілерінен флуоресцентті таңбаланған полимерлер және интерполиэлектрлітті комплекс (ИПЭК) алынды. Әдістер.



Синтез барысында флуоресцеин изотиоцианаты және флуоресцеинамин бояғыштары қолданылды. Флуоресцентті таңбаланған полимерлердің және ИПЭК-тің түзілгендігі ИҚ-спектрометрия әдісі арқылы расталды. Полимерлердің топырақ қабатымен әрекеттесуін бағалау үшін реологиялық қасиеттері зерттелді. Флуоресцентті таңбаланған полимерлер мен ИПЭК-ті топырақ эрозиясына қарсы қолдану үшін олардың топыраққа еңу тереңдігімен сумен шайылу деңгейі зерттелді. Топырақтың беткі қабатында жабын түзілгендігі СЭМ микросуреттерімен дәлелденді. Негізгі тұжырымдар. Хитозанның амин тобы ($-NH_2$) мен флуоресцеин изотиоцианатының изотиоцианат тобы ($=N=C=S$) арасында тиомочевина-байланысы арқылы флуоресцентті таңбаланған хитозан түзілді. Ал, натрий альгинатының карбоксил топтары ($-COO^-$) флуоресцеинаминнің амин топтарымен әрекеттесіп ковалентті амидтік байланыс ($-CO-NH-$) пайда болды. Флуоресцентті таңбаланған полимерлерден синтезделген ИПЭК-тің оңтайлы құрамы [2:8] мольдік қатынасты құрады. Хитозан, натрий альгинаты үлгілері және олардың негізінде синтезделіп алынған [1:9], [2:8], [3:7], [4:6] ИПЭК-тер псевдопластикалық ағысқа сәйкес ньютондық емес сұйықтықтарға жататындығы анықталды. Флуоресцентті таңбаланған полимерлердің топыраққа еңу тереңдігі 21-23 мм құрады, және судың әсерінен топыраққа тереңірек өтіп, біртіндеп шайылатындығы байқалды. Керсінше флуоресцентті таңбаланған ИПЭК 2 мм қалыңдығымен топырақ жабының қалыптастырып сумен шайылмайтындығы байқалды. Топырақ полимерлі жабының механикалық беріктігі бақылау нұсқасынан 19 есе жоғары болды. ИПЭК-пен өңдеу кезінде орман топырағының су эрозиясына төзімділігі 72%-ға, ал жел эрозиясына төзімділігі тиісінше 77%-ға жоғарылады. Практикалық құндылық. [Хитозан:натрий альгинаты] = [2:8] мольдік қатынасындағы ИПЭК-ті орманды топырақтың құрылымын жақсартуға арналған эрозияға қарсы құрылымдаушы ретінде ұсынуға болады.

Түйін сөздер: Интерполиэлектролиттік комплекс, биополимерлер, хитозан, натрий альгинаты, флуоресцентті таңбаланған хитозан, флуоресцентті таңбаланған натрий альгинаты, топырақтың су эрозиясы

Қаржыландыру: Бұл жұмыс Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитетінің қаржылық қолдауымен АР19579443 «Полиэлектролиттік кешендер негізінде қарағайды жедел өсіру технологиясын әзірлеу» грант жобасы аясында орындалды.

© Н.Н. Берікбол¹, Ж.С. Касымова^{1*}, Л.К. Оразжанова¹, А.Н. Кливенко¹,
Н.Н. Нурғалиев^{1,2}, 2025.

¹НАО «Шәкәрім университет», Семей, Казахстан;

²Университет имени Гумбольдта, Берлин, Германия.

E-mail: kasymova-z@mail.ru

СИНТЕЗ ИНТЕРПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНО-МЕЧЕННЫХ БИОПОЛИМЕРОВ

Берікбол Назира Нурлықызы — магистр естественных наук, научный сотрудник «Shakarim Lab», Шәкәрім университет, Семей, Қазақстан,

E-mail: nazira428@bk.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-4472-082X>;

Касымова Жанар Сайлаубековна — кандидат биологических наук, доцент кафедры Химии и экологии исследовательской школы физических и химических наук, Шәкәрім университет, Семей, Қазақстан,

E-mail: kasymova-z@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-4971-6638>;

Оразжанова Лазыят Каметаевна — кандидат химических наук, ассоциированный профессор кафедры Химии и экологии исследовательской школы физических и химических наук, Шәкәрім университет, Семей, Қазақстан,

E-mail: lazzyat.ozazhanova.70@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0001-7881-0589>;

Кливенко Алексей Николаевич — PhD, ассоциированный профессор, Директор «Shakarim Lab», Шәкәрім университет, Семей, Қазақстан,

E-mail: alexeyklivenko@mail.ru ORCID ID, ORCID ID:0000-0002-8971-686;

Нурғалиев Нуржан Нурлыбекович — PhD, Университет имени Гумбольдта, Берлин, Германия; ассоциированный профессор химии и экологии Исследовательской школы изических и химических наук, Шәкәрім университет, Семей, Қазақстан,

E-mail: n.nurgaliyev@shakarim.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1216-7150>.

Аннотация. Актуальность. В работе из коммерческих образцов биополимеров - натрия альгината и хитозана получены флуоресцентно-меченые полимеры и интерполиэлектrolитный комплекс (ИПЭК). Методы. Для синтеза использовали красители флуоресцеин-изотиоцианат и флуоресцеинамин. Образование флуоресцентно-меченых полимеров и ИПЭК было подтверждено ИК-спектрометрией. Для оценки взаимодействия полимеров с почвенным слоем исследованы их реологические свойства. Для применения флуоресцентно-меченых полимеров и ИПЭК против почвенной эрозии изучены глубина проникновения в почву и степень вымывания водой. Образование покрытия на поверхности почвы было подтверждено СЭМ микрофотографиями. Основные выводы. Флуоресцентно-меченый хитозан образовывался за счет тиомочевинной связи между аминogруппой ($-NH_2$) хитозана и изотиоцианатной группой ($=N=C=S$) флуоресцеин-изотиоцианата. В альгинате натрия карбоксильные группы ($-COO^-$) взаимодействовали с аминogруппами флуоресцеинамина с образованием ковалентной амидной связи ($-CO-NH-$). Оптимальный состав ИПЭК из флуоресцентно-меченых полимеров составил мольное соотношение [2:8]. Образцы хитозана, альгината натрия и синтезированные на их основе в мольных соотношениях [1:9], [2:8], [3:7], [4:6] ИПЭК, продемонстрировали псевдопластическое течение неньютоновских жидкостей. Глубина проникновения



флуоресцентно-меченых полимеров в почву составила 21–23 мм и под действием воды они вымывались. А флуоресцентно-меченый ИПЭК формировал почвенное покрытие толщиной 2 мм, не вымываемое водой. Механическая прочность полимерно-почвенного покрытия оказалась в 19 раз выше по сравнению с контролем. При обработке лесной почвы ИПЭК устойчивость к водной эрозии повысилась на 72%, а к ветровой эрозии — на 77%. Практическая значимость ИПЭК [Хитозан:альгинат натрия] = [2:8] предлагается в качестве противоэрозионного средства для улучшения структуры лесных почв.

Ключевые слова: интерполиэлектrolитный комплекс, биополимеры, хитозан, альгинат натрия, флуоресцентно-меченый хитозан, флуоресцентно-меченый альгинат натрия, водная эрозия почвы, ветровая эрозия почвы

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан, грант AP19579443 «Разработка технологии ускоренного выращивания сосны на основе полиэлектrolитных комплексов».

Кіріспе. Қазіргі таңда кең ауқымды ғылыми және практикалық қолдану мүмкіндіктеріне ие жаңа функционалды полимерлі материалдарды әзірлеу заманауи ғылымның басым бағыттарының бірі болып табылады. 1970-жылдардың басында (Kabanov et al., 1980) зерттеушілер жаңа ғылыми бағыттың – интерполимерлік комплекстердің (ИПК) негізін қалады. ИПК кез-келген полимерлерден сутектік байланыстар, гидрофобтық және донорлық-акцепторлық әрекеттесулер, иондық өзара байланыстар арқылы түзіледі. Екі полимер ерітіндісін араластырғаннан кейін электростатикалық байланыс нәтижесінде қарама-қарсы зарядталған полииондардың ассоциациясы жаңа полимерлік матрица қалыптасады (Komoto et al., 2019).

Қазіргі кезде қарама-қарсы зарядталған жоғары молекулалы қосылыстардан интерполиэлектrolиттік комплекстерді (ИПЭК) топырақ эрозиясына қарсы топырақ құрылымдаушысы ретінде қолдану оңтайлы әдістердің бірі. Топырақты эрозиядан қорғау мақсатында полимерлерді қолдану ХХ ғасырдың 50-жылдарынан басталды. Алғашқы кезеңде негізгі жұмыстар топырақтың органикалық заттарына туыстас құрылымы бар табиғи полимерлер – полисахаридтердің қатысуымен жүргізілді. Полисахаридтер мен олардың туындылары — хитозан, натрийкарбосиметилцеллюлоза, альгинат - табиғи полимерлерге жатады, олар қоршаған ортада кең таралған және қайта қалпына келтірілетіндіктен медицинада, фармацевтикада, тамақ және ауылшаруашылығы өнеркәсібінде кеңінен қолданылады (Mussabayeva et al., 2022; Izumrudov et al., 2019). Табиғи полимерлердің ішінде хитозан мен натрий альгинатынан ИПЭК алу бірқатар артықшылықтарға ие. Атап айтқанда бұл биополимерлер ерекше химиялық құрлымымен сипатталады.

Хитозан хитиннен сілтілік ортада N-деацетилденуі нәтижесінде алынады. Оның құрылымы деацетилденген [$\beta(1\rightarrow4)$ -D-глюкозамин] және ацетилденген

(N-ацетил-D-глюкозамин) буындарынан тұрады (da Rocha et al., 2024). Егерде хитозанның деацетилдену дәрежесі 70-85% болса ол қышқылдарда (сірке, лимон, құмырсқа) ерігіштік қасиетке ие болады. Молекулалық массасы 50,000 до 1,000,000 г/моль аралығында кездеседі. Бұл биополимерде реакцияға қабілетті үш түрлі функционалдық топтар қамтылған: $-NH_2$ аминді топ, $-NH-CO-CH_3$ ацетамидті топ, сондай-ақ C-2, C-3 және C-6 орындарында орналасқан біріншілік және екіншілік $-OH$ гидроксил топтары. Хитозанның катионды полимер болуын $-NH_2$ аминді топ қамтамасыз етеді.

Натрий альгинаты - теңіз қоңыр балдырларының жасуша қабырғасынан алынатын табиғи полисахарид (Costa et al., 2015). Ол (1→4)-байланысқан β -D-маннурон қышқылы мен α -L-гулулон қышқылының қалдықтарынан тұратын сызықтық бинарлы сополимер болып табылады. Өз құрылымында $-COONa$ карбоксилдік топтардың болуына байланысты натрий альгинаты аниондық полиэлектролит болып есептеледі. Натрий альгинатының молекулалық массасы 32 000-нан 400 000 г/моль-ге дейін және ол суда ериді. Табиғи шығу тегі бойынша биоыдырайтын, уытсыз, экологиялық зиянсыз және биоүйлесімді қасиеттерге ие полимер болып табылады (Kassymova et al., 2019).

Хитозан және натрий альгинаты топырақтың су (Adamczuk et al., 2021) және жел эрозиясын төмендетуде тиімді құрал ретінде қолданылады.

Авторлардың (Román-Doval et al., 2023) зерттеу жұмыстарында хитозанды топыраққа еңгізген кезде, топырақ бөлшектерінің арасындағы когезияны және құрылымдық беріктігін арттыру, механикалық қасиеттерін жақсарту, сондай-ақ азот пен кальций сияқты қоректік элементтердің мөлшерін жоғарлатқаны көрсетілген. Сонымен қатар, хитозан негізінде жасалған композиттік және сополимерлік жүйелер топырақтың су ұстау қабілетін жоғарылатып, оның тұрақтылығын арттырады. Хитозанның тағы бір артықшылығы – топырақтағы әртүрлі ластаушы заттарды тиімді жоюға қабілетті (Adamczuk et al., 2021). Аэродинамикалық құбырда жүргізілген сынақтар хитозанның топырақтың жел эрозиясын тиімді түрде болдырмайтынын көрсетті (Berikbol et al., 2024). Су тамшысымен жүргізілген су эрозиясын зерттейтін сынақтар хитозанның төмен концентрациялы ерітінділерін жабын ретінде және су эрозиясынан қорғау үшін басқа материалдармен бірге қолдануға болатынын дәлелдеді. Сондай-ақ ластанған жерасты суларын тазартуға арналған сүзгілерде хитозанмен қапталған құмның практикалық маңызы бар екендігі және құмды топырақтардың гидравликалық өткізгіштігін төмендету әсерін тудыруы мүмкін екендігі хабарланады (Nader Hataf et al., 2018).

Өсімдіктер үшін де хитозанның маңызы зор. Ол вирустарға, бактериялар мен саңырауқұлақтарға қарсы қасиеттерге ие тұқымдардың қолайсыз орта факторларына төзімділігін арттырады, өңгіштігін жақсартады және тыңайтқыштардың су сіңіру қабілетін жоғарылатады

Натрий альгинаты да, хитозан сияқты, деградацияға ұшыраған жерлерді қалпына келтірудің оңтайлы құралы ретінде қарастырылады. Оның құмды топырақ бетінде жұқа қабат түзе алатыны және топырақтың төзімділік қасиеттерін арттыру

арқылы рекультивация үдерісін жеделдетеді. Сонымен қатар, авторлардың зерттеуінде (Fatehi et al., 2023) натрий альгинаты ірі түйіршікті де, ұсақ түйіршікті де топырақтың қасиеттерін айтарлықтай жақсартып, олардың жылжу беріктігін және жел эрозиясына төзімділігін жоғарлататыны көрсетілген.

Бірақ, зерттеу жұмысында (Chang et al., 2016) жеке полимерлер ұзақ мерзімді қорғаныс әсерімен қамтамасыз етпейтіндігі және жаңбыр суымен топырақтан аз уақыт ішінде жойылатындығы, кейбірі тіпті жеңіл жауын-шашын кезінде де тұрақтандырушы әсердің жоғалуына әкелетіндігі сипатталған. Себебі, гидрофобты байланыстырғыштар топырақта біркелкі тарала алмайды, топырақ бетіне тез шоғырланып, сынғыш жабын түзеді. Көптеген зерттеу деректерінде (Izumrudov et al., 2019) топырақ эрозиясынан қорғаудың оңтайлы жолы полимерлі байланыстырғыштың құрамында гидрофильді және гидрофобты да бөліктері болған жағдайда ғана қол жеткізілетіні сипатталған. Мұның нәтижесінде, біріншіден, байланыстырғыштың тиімділігі айтарлықтай артып, оның шығыны азаяды, екіншіден, байланыстырғыш топырақта біркелкі таралады және судағы ерігіштігі төмендейді. Сол себепті полимерлер комплексін қолдану өзекті мәселе. Төменгі №1-кестеде натрий альгинаты, хитозан биополимерлері негізінде синтезделген ИПЭК-тің топыраққа әсері көрсетілген. Полимерлердің диссоциацияланған функционалды топтарының электростатикалық өзара әрекеттесуі нәтижесінде, яғни натрий альгинатының анионды карбоксил тобы мен хитозанның катионды амин тобы арасында, және бұрыннан қалыптасқан альгинат–хитозан бөлшектерінің агрегаттары арасында жүретін ішкі және тізбеаралық сутектік байланыстар есебінен ИПЭК түзіледі.

№1-кесте – Биополимерлердің топыраққа әсері

№	Полимер	Әсері	Әдебиет
1	Ксантан сағызы және натрий альгинаты. Хитозан мен натрий альгинаты.	Топырақ құрылымдарының механикалық беріктігін арттырды.	(Temurayak et al., 2023) (Klivenko., 2020)
2	Натрий альгинаты мен кватирленген гидроксэтилцеллюлозды этоксилат	Полимерлермен топырақ бөлшектерінің арасында берік, суға төзімді композиттік жабындарды түзді.	(Novoskoltseva., 2022)
3	Натрий альгинаты мен натрий лигносульфонатынан жасалған гидрогельдер	Топырақтың максималды ылғалды ұстау қабілетін ұлғайтты (77,6 г/кг-ден 108,83 г/кг-ге дейін).	(Zhang et al., 2024)

Көптеген зерттеулерде (Izumrudov et al., 2019) және өзіміздің (Berikbol et al., 2024; Klivenko et al., 2020; Mussabayeva et al., 2022) алдынгы зерттеу жұмыстарында биополимерлерден ИПЭК алу әдісі, ИПЭК-тің құрылымдық физико-химиялық қасиеттері, топырақ эрозиясына төзімділігі толық зерттелді. Бірақ полимерлермен ИПЭК-тің топыраққа ену тереңдігін және сумен шайылуға төзімділігін дәлелдеуге флуоресцентті таңбаланған материалдарды қолдану туралы деректер кертiрiлмеген. Флуоресцентті таңбаланған полимерлерді алу үшін экологиялық зиянсыз, биоүйлесімді, фототұрақты, суда ерімейтін және арзан бояғыштарды

қолдану тиімді болып табылады. Аталған қасиеттерге флуоресцеин-изотиоцианат және флуоресцеинамин ие. Сондықтан осы зерттеу жұмысының мақсаты флуоресцентті таңбаланған хитозан мен натрий альгинаты биополимерлерінен ИПЭК алу, және оларды орманды құмды топырақтың құрлымдаушысы ретінде қолдану.

Зерттеу материалдары мен әдістері. *Зерттеу жұмысына коммерциялық үлгілер қолданылды:* биополимерлер хитозан (*Sigma-Aldrich*, АҚШ), натрий альгинаты (*Sigma-Aldrich*, АҚШ), 1-этил-3-(3-диметиламинопропил) карбодимид (EDC) (*Meryer*, Қытай), 5-флуоресцеинамин (*Meryer*, Қытай) және флуоресцеин изотиоцианаты изомер I (*Meryer*, Қытай). Тәжірибелерге арналған құмды топырақ үлгілері Қазақстан Республикасының Семей қаласы маңындағы қарағайлы орманнан алынды. Үлгілер 2022–2024 жылдар аралығындағы күзгі кезеңде топырақтың үстінгі қабатынан (0–25 см) алынды.

Флуоресцентті таңбаланған хитозанды алу үшін екі ерітінді дайындаймыз: 1) 0,2 г хитозанды 250 мл көлемді колбада 20 мл 0,1 М сірке қышқылында ерітілді; 2) 0,02 г флуоресцеин изотиоцианаты 20 мл ацетонда ерітілді, содан кейін дайындалған ерітіндінің 10 мл көлемі бірінші ерітіндіге қосылды. Алынған қоспаға қосымша 20 мл ацетон құйылды. Реакциялық колба күн сәулесінен қорғау мақсатында алюминий фольгамен оратылды және магнитті араластырғышқа 24 сағат бойы араластыру процесі жүргізілді (Hermanson et al., 2008).

Флуоресцентті таңбаланған натрий альгинатын алу үшін екі ерітінді дайындаймыз: 1) 40 мл дистилденген суда 0,792 г натрий альгинаты биополимерін ерітеміз, одан кейін 0,077 г EDC қосамыз; 2) 0,022 г флюоесцеинаминді 5мл ацетон ерітіндісінде ерітеміз, одан кейін оны бірінші ерітіндіге қосып араластырамыз, содан кейін колбадағы қоспаға 60 мл дистилденген су қосамыз, сыртын толық фольгамен орап, магниттік араластырғышта 2 сағатқа қалдырамыз (Hermanson et al., 2008).

Алынған флуоресцентті таңбаланған хитозан мен натрий альгинатын жеке-жеке 400 мл ацетон ерітіндісі бар бөлек химиялық стақандарға құямыз, сол кезде сары түсті тығыз гель тәрізді тұнба пайда болды, пайда болған тұнбаны супернаттантан механикалық жолмен бөліп алып, тұнбаны MWCO 8 kD диализдік мембранаға құямыз. Диализдік мембранадағы флуоресцентті таңбаланған полимерлерді 5 л дистилденген суда 5 тәулік бойы ұстаймыз, әр 8–10 сағат сайын дистилденген су ауыстырамыз. Алынған флуоресцентті таңбаланған полимер ерітінділері –40 °C температурада сублимациялық кептіргіштен Freeze dryer Scientz-12 (Қытай) өтеді, нәтижесінде сары түсті талшықты флуоресцентті таңбаланған полимерлер алынады.

Табиғи полимерлерден және флуоресцентті таңбаланған полимерлерден ИПЭК синтездеу үшін алдымен полимерлер ерітінділері дайындалды, ол үшін еңбектерінде (Berikbol et al., 2024; Klivenko et al., 2020) сипатталған әдістеме қолданылды. Алдымен жеке 0,01 моль/л концентрацияда биополимер ерітінділері дайындалды: 1,98 г натрий альгинаты биополимерін дистилденген суда, ал 1,61 г хитозан полимері 3% лимон қышқылында ерітілді. Полимер ерітінділері

магниттік араластырғышта 24 сағат бойы араластырылып, көлемі 1 литрге жеткізілді (Klivenko et al., 2020; Mussabayeva et al., 2022).

ИПЭК полимерлер ерітінділерін тікелей араластыру әдісімен алынды: полианион натрий альгинаты ерітіндісіне поликатион хитозан ерітіндісі қосылды. Қарама-қарсы зарядталған полиэлектролиттердің эквимольарлы ерітінділері [хитозан]:[натрий альгинаты] мольдік қатынастарда қосылды: [0:10], [1:9], [2:8], [3:7], [4:6], [5:5], [6:4], [7:3], [8:2], [9:1] және [10:0]. Эквимольарлы полимер ерітінділері шейкерде (Stegler NS, Қытай) 25°C температурасында 2 сағат бойы араластырылды. Содан кейін ИПЭК тұнбалары 3500 айн/мин жылдамдықта 15 минут бойы лабораториялық центрифугада (СМ-6М Elmi, Латвия) айналды. Супернатант алынып тасталғаннан кейін, ылғал тұнбалар аналитикалық таразыда (Mettler Toledo ML 204, Швейцария) $\pm 0,0001$ г дәлдікпен өлшенді. Алынған тұнбаларды сублимациялық кептіргіште -41 °С температурасында 5 тәулік бойы тұрақты массаға дейін жеткізіліп кептірілді. Құрғақ үлгілердің массасы аналитикалық таразыда өлшенді. Жиналған деректер негізінде тұнба массасының ИПЭК мольдік құрамына тәуелділік графигі тұрғызылды.

Полимерлер мен ИПЭК-ті ИҚ-спектроскопия әдісімен зерттеу. Флуоресцентті таңбаланған полимер туындыларының химиялық модификациясы мен комплекс түзілуін растау мақсатында құрғақ ИПЭК тұнбаларының, полимерлердің және флуоресцеинамин мен флуоресцеин изотиоцианатының ИҚ-спектрлері өлшенді. Өлшеулер АTR-қосымшасы бар ФТ-801 ИҚ-Фурье спектрометрінде (Ресей, Simex analytical equipment) 400–4000 см^{-1} диапазон аралығында орындалды (Berikbol et al., 2024; Kassymova et al., 2019).

Коммерциялық полимерлер үлгілері мен олардың негізінде алынған ИПЭК-тің реологиялық қасиеттері ротациялық вискозиметрімен (НААКЕ VT550, Thermo Scientific, АҚШ) зерттелді (Berikbol et al., 2024).

Топыраққа полимерлердің еңу тереңдігін және олардың сумен шайылуға төзімділігін анықтау төмендегі тәжірибиеге сәйкес жүргізілді.

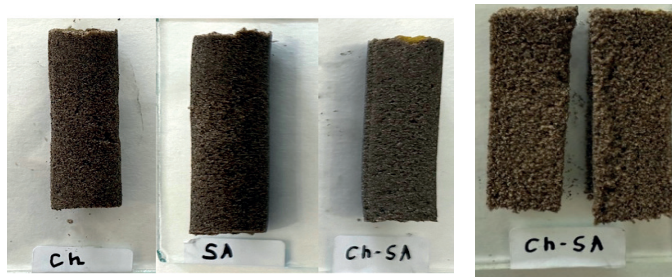
Тәжірибе үшін биіктігі 9 см және диаметрі 2 см мөлдір пластикалық түтікше пайдаланылды. Ыдысқа 4 см биіктікте топырақ салынды, түбі су өтетін тесігі бар парафинді қабықпен жабылды. Тәжірибе 3 нұсқада, әрқайсысы үш қайталыммен орындалды:

1. 1 мл 10^{-2} моль/л флуоресцентті таңбаланған хитозанмен өңделген топырақ;
2. 1 мл 10^{-2} моль/л флуоресцентті таңбаланған натрий альгинатымен өңделген топырақ;
3. 0,2 мл 10^{-2} моль/л флуоресцентті-таңбаланған хитозанмен топырақтың беткі қабатын өңдеу, және оның үстіне 0,8 мл 10^{-2} моль/л флуоресцентті таңбаланған натрий альгинатымен өңделген топырақ. Бұл [2:8] мольдік қатынасындағы [хитозан : натрий альгинаты] ИПЭК-ке сәйкес келді.

Осыдан кейін ылғал топырақ үлгілері 12 сағат бойы ауада бөлме температурасында (25 °С) кептірілді. Кептірілген топырақ үлгілері шыны пластинкаларға орналастырылып, ортасынан түзу екі бөлікке бөлінді (1-сурет). Флуоресцентті-таңбаланған полимерлермен және ИПЭК-пен өңделген топырақ

бөліктері ультракүлгін шаммен (Ресей, Дозор-УФ-365) қараңғыда сәулелендіріліп, топыраққа еңу терендігі анықталды.

1-сурет. Флуоресцентті таңбаланған полимерлер және ИПЭК-пен өңделген топырақ бөліктері



Полимерлер мен ИПЭК-тің топырақтан шайылуын зерттеу үшін флуоресцентті-таңбаланған полимерлермен және ИПЭК-пен өңделіп кептірілген топырақ үлгілері 50 мл дистилденген сумен өңделді. Сумен шайылғаннан кейін топырақ үлгілері қайтадан кептіріліп, екі бөлікке бөлінді, содан кейін үлгілерді қараңғыда ультракүлгін жарықпен сәулелендіріп, топырақта қалған полимер терендігі өлшенді.

Полимермен және ИПЭК-пен өңделген топырақтың беткі қабатының фотосуреттері төмен вакуумды талдамалық сканирлеуші электрондық микроскоптың (SEM JSM-6390LV, Jeol, Токио, Жапония) көмегімен түсірілді.

Зертханалық жағдайда полимерлермен және ИПЭК-пен өңделген топырақ агрегаттарының жел және су эрозиясына тұрақтылығын зерттеу.

Зертханалық жағдайда топырақтың жел және су эрозиясына төзімділігін анықтау үшін диаметрі 10 см Петри табақшалары 160 г (0,25–0,5 мм) құмды топырақпен толтырылды. Сынақ тәжірибелері үш нұсқада жүргізілді: 1) дистилденген сумен өңделген топырақ (бақылау нұсқасы), 2) хитозанмен өңделген топырақ нұсқасы (ауада кептірілген топырақ массасына шаққанда 0,02% полимер), 3) натрий альгинаты биополимерімен өңделген топырақ (ауада кептірілген топырақ массасына шаққанда 0,02% полимер), 3) ИПЭК-пен өңделген топырақ (ауада кептірілген топырақ массасына шаққанда 0,004% хитозан және 0,02% натрий альгинаты, мольдік қатынасы [хитозан]:[натрий альгинаты] = 2:8. Бұл мольдік қатынас біздің алдыңғы зерттеулерімізде ИПЭК-тің оңтайлы құрамы ретінде анықталған. ИПЭК-пен топырақты өңдеу екі ерітінділі әдіс арқылы жүргізілді (Berikbol et al., 2024; Izumrudov et al., 2019; Klivenko et al., 2020; Mussabayeva et al., 2022). Ол үшін, алдымен топырақ беті 4 мл 10^{-2} моль/л хитозан ерітіндісімен біркелкі өңделді. Бірінші полимер толық сіңгеннен кейін, екінші полимер 16 мл 10^{-2} моль/л натрий альгинатының ерітіндісі себілді. Су және жел эрозиясын модельдеу үшін зертханалық қондырғылар жасалды (Berikbol et al., 2024). Зертханалық жағдайда полимерлермен және ИПЭК-пен өңделген топырақтың су эрозиясына төзімділігін зерттеу үшін бес күн бойы кептірілген

Петри табақшаларындағы топырақ нұсқалары 15° бұрышпен орналастырылып, үстінен 500 мл ағынды дистилденген сумен өңделді. Топырақтың бетіне жауын-шашынның әсерін беру үшін BT100 перистальтикалық дозатор-сорғысы (ADS-Lab, Иркутск, Ресей) арқылы жүзеге асырылды. Ағынды су химиялық стакандарға жиналып, лайлылығы бойынша салыстырылды. Ары қарай Петри табақшаларында қалған топырақ үлгілері кептіру шкафында (58/350 LPF AB UMEGA, SnolTherm, Утена, Литва) 100 °C температурада тұрақты массаға дейін кептірілді. Кептірілген топырақ үлгілері қайтадан өлшеніп, су ағынымен жоғалған топырақ массасының мөлшері анықталды. Полимер және ИПЭК-пен өңделген топырақ қабатының жел эрозиясына төзімділігін зерттеу үшін Петри табақшаларындағы бес күн кептірілген топырақ-полимерлі қабықшаларын горизонтальді аэродинамикалық құбырға орналастырылып, 1 минут бойы 12 м/с жылдамдығымен жел үрлегіш құрылғымен (VKK-200, «Тепломаш», Санкт-Петербург, Ресей) әсер еткізілді. Петри табақшасында қалған топырақ қалдықтарының жел және су эрозиясына төзімділігі анықталды.

Топырақ үлгілерін TAXT анализаторы құрылғысына (Stable Micro Systems, Ұлыбритания) орналастырылып, 0,01 мм/сек жылдамдықпен қысу режимінде сыналды. Сынақ үшін құрылғы ұшында орналасқан диаметрі 5 мм шарлы ине P/5S зонды қолданылды. Топырақ-полимерлі қабықшалардың механикалық беріктігін зерттеу (Berikbol et al., 2024; Kassymova et al., 2019) авторлар сипаттаған әдістеме бойынша орындалды. Алынған деректер негізінде үлгінің деформация дәрежесінің қолданылған кернеуге тәуелділік графигі тұрғызылды. Серпімділік модулі алынған қисықтың бастапқы түзу сызықты учаскесіне жүргізілген жанаманың еңкею бұрышының тангенсі бойынша анықталды.

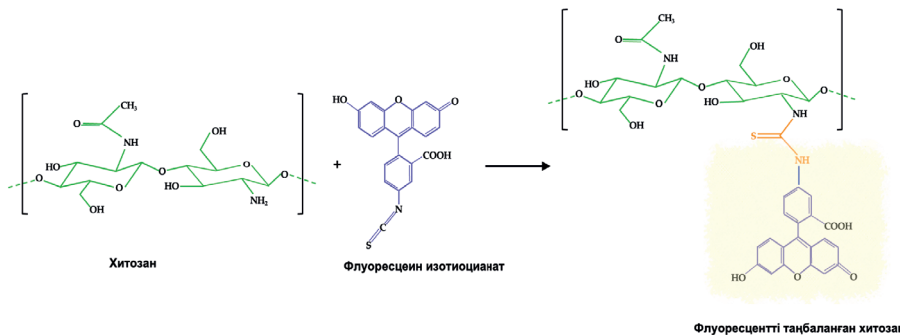
Нәтижелер мен талқылаулар. Алынған флуоресцентті таңбаланған хитозан мен натрий альгинаты полимер ерітінділері визуальді түрде сары түсті және қаранғыда ультра күлгін шамның әсерінен жарқырайтын қасиетке ие болды (2-сурет). Өнімнің шығымы флуоресцентті таңбаланған хитозан үшін 95%, ал флуоресцентті таңбаланған натрий альгинаты үшін 96% болды.

2-сурет. Флуоресцентті таңбаланған полимер ерітіндісі



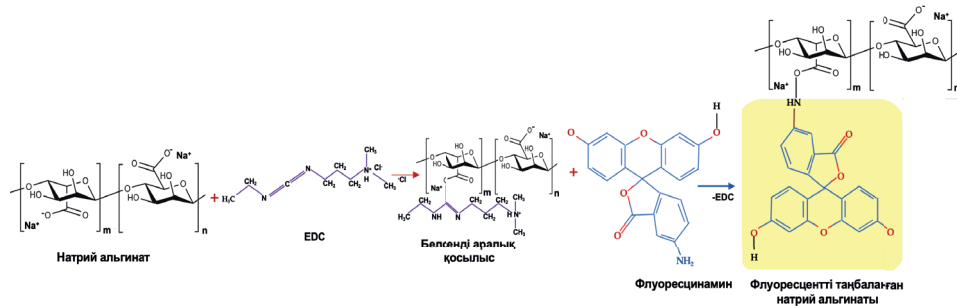
Хитозанның амин тобы ($-\text{NH}_2$) мен флуоресцеин изотиоцианатының изотиоцианат тобы ($=\text{N}=\text{C}=\text{S}$) арасында тиомочевина-байланысы арқылы флуоресцентті таңбаланған хитозанның түзілуі 3-суретте көрсетілді (Carrićo et al., 2020).

3-сурет. Флуоресцентті таңбаланған хитозанды алудың химиялық реакциясы.



Флуоресцентті таңбаланған натрий альгинатын синтездеу кезінде EDC натрий альгинатының карбоксил топтарын ($-\text{COO}^-$) белсендетіп, оларды флуоресцеинаминнің амин топтарымен әрекеттесуге қабілеттілігін жоғарлатады, яғни флуоресцеинамин мен натрий альгинатының арасында **ковалентті амидтік байланыс** ($-\text{CO}-\text{NH}-$) түзіледі (4-сурет).

4-сурет. Флуоресцентті таңбаланған натрий альгинаттың алудың химиялық реакциясы



Ары қарай флуоресцентті таңбаланған полимерлердің түзілгендігі ИҚ-спектрометрия әдісі арқылы расталды (5-сурет). Флуоресцеинаминнің ИҚ-спектрінде $-\text{NH}_2$ және $-\text{OH}$ топтарының 3352 см^{-1} және 3203 см^{-1} сіңіру жолақтары, 2851 см^{-1} шамасында $\text{C}-\text{H}$ топтарының шыңы және 1742 см^{-1} аймағында карбонил тобының ($\text{C}=\text{O}$) айқын шыңы байқалды. Сонымен қатар, 1593 см^{-1} , 1373 см^{-1} және 1109 см^{-1} толқын сандарында ароматтық сақина мен $\text{C}-\text{N}$ байланыстарына сәйкес шыңдар тіркелді.

Натрий альгинатының спектрінде 2920 см^{-1} аймағында $\text{C}-\text{H}$ топтарының тербелістері, ал 1601 см^{-1} және 1450 см^{-1} аймақтарында COO^- топтарының

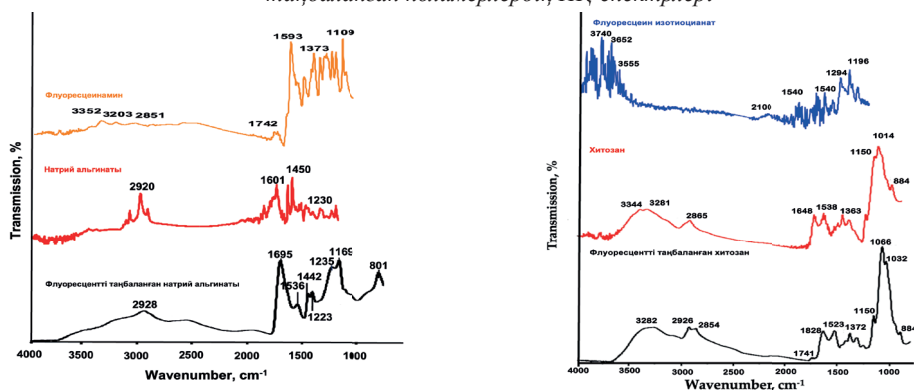
асимметриялық және симметриялық тербелістері анықталды, бұл оның карбоксилат тұзы күйінде екенін көрсетті.

Флуоресцентті таңбаланған натрий альгинаттың спектрінде келесі өзгерістер байқалады: флуоресцеинаминнің 3352 см^{-1} , 3203 см^{-1} NH_2 тобының жолақтары жоғалады және натрий альгинатының 1601 см^{-1} , 1450 см^{-1} шыңдары 1695 см^{-1} , 1442 см^{-1} жолақтарына ауысады. Бұл натрий альгинатының $-\text{COOH}$ топтарымен флуоресцеинаминнің $-\text{NH}_2$ топтарының электростатикалық өзара әрекеттесуін дәлелдейді.

Флуоресцеин изотиоцианатының ИҚ-спектрінде 2100 см^{-1} аймағында изотиоцианат тобының ($=\text{N}=\text{C}=\text{S}$) тербелістеріне сәйкес келетін жұтылу шыңы анықталды. Сонымен қатар, 3555 см^{-1} аймағында гидроксил тобының ($-\text{OH}$), 1725 см^{-1} аймағында карбонил тобының ($\text{C}=\text{O}$) және 1540 см^{-1} аймағында бензол сақинасының валенттік тербелістеріне тән шыңдар байқалды.

Ал, флуоресцентті таңбаланған хитозанның ИҚ-спектрінде бастапқы полимермен салыстырғанда $-\text{NH}_2$ тобының жұтылу жолағы 1648 см^{-1} -ден 1628 см^{-1} -ге ығысқаны, сондай-ақ флуоресцеин изотиоцианатына тән изотиоцианат тобының шыңының жоғалғаны байқалады. Бұл флуоресцеин изотиоцианатының тобы мен хитозанның амин топтары арасында химиялық әрекеттесу жүргенінің тағы бір дәлелі (5-сурет).

5-сурет. Полимерлер, флуоресцеин изотиоцианаты, флуоресцеинамин және флуоресцентті таңбаланған полимерлердің ИҚ-спектрлері



Флуоресцентті таңбаланған ИПЭК-тің оңтайлы құрамын таңдау мақсатында әртүрлі эквимольарлы мольдік қатынастардағы флуоресцентті таңбаланған полимер ерітінділерін араластыру нәтижесінде лайлануы және тұнба түзілуі байқалды. Алынған тұнбалар сары түсті, жанасқанда тығыз және ылғал гелтәрізді, иіссіз, ультра күлгін шам әсерінен жарқырау қасиетіне ие болды. Сублимациялық кептіруден кейінгі ИПЭК медициналық мақтаға ұқсас құрылыммен сипатталды (6-сурет).

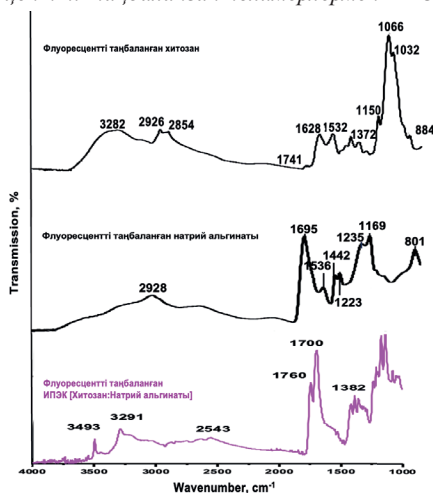
6-сурет. Синтезделген флуоресцентті таңбаланған ИПЭК



Гравиметриялық әдіспен әртүрлі мольдік қатынастардағы ИПЭК шығымы анықталды: ылғалды тұнба массасы центрифугада бөлуден кейін, ал құрғақ тұнба массасы сублимациялық кептіруден кейін өлшенді. Флуоресцентті таңбаланған ИПЭК-тің ең жоғары шығымы [2:8] мольдік қатынасында тіркелді: ылғалды өнім – 1,1914 г, ал құрғақ өнім – 0,7814 г. Осыған байланысты бұл оңтайлы қатынас алдыңғы зерттеу нәтижелеріне (Mussabayeva et al., 2022) сәйкес келеді және алынған ИПЭК зертханалық тәжірибеде топырақты өңдеуде қолданылды.

Флуоресцентті таңбаланған полимерлерден алынған ИПЭК-тің ИҚ-спектрі зерттелді (7-сурет).

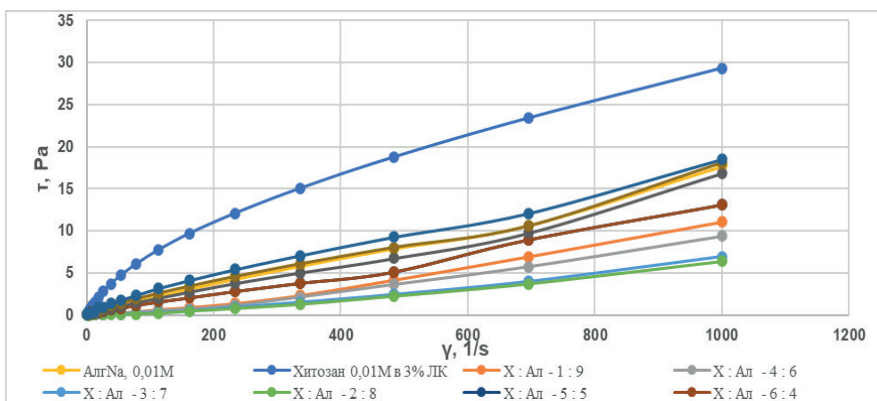
7-сурет. Флуоресцентті таңбаланған полимерлермен ИПЭК-тің ИҚ-спектрлері



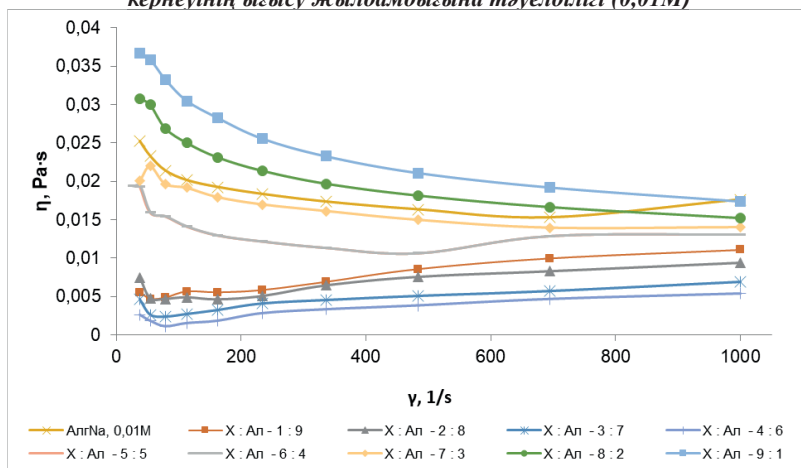
Флуоресцентті таңбаланған ИПЭК-тің ИҚ-спектрінде карбоксильді топтарының жолақтары және аминотоптарының тербелістері жойылғаны байқалады, яғни полимерлердің функциональды топтарының арасында электростатикалық өзара әрекеттесуінің дәлелі.

Хитозан, натрий альгинаты және ИПЭК-ті топырақ эрозиясына қарсы тиімді қолдану үшін олардың реологиялық қасиеттері зерттелді (8,9-суреттер).

8-сурет. Полимер ерітінділері мен ИПЭК-тің әртүрлі мольдік қатынастарындағы ығысу кернеуінің ығысу жылдамдығына тәуелділігі (0,01M)



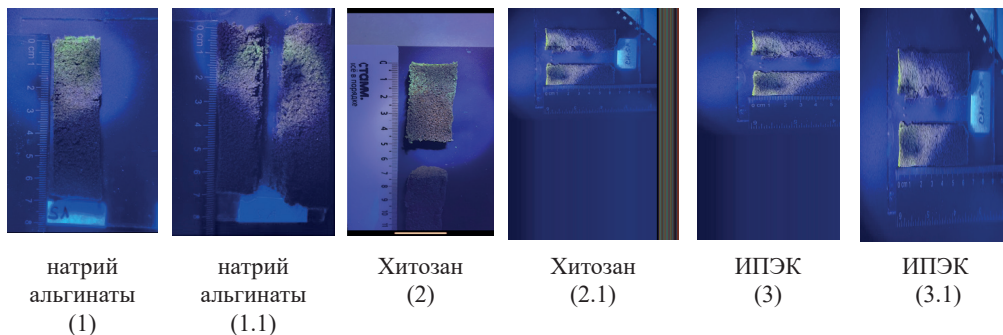
9-сурет. Полимер ерітінділері мен ИПЭК-тің әртүрлі мольдік қатынастарындағы ығысу кернеуінің ығысу жылдамдығына тәуелділігі (0,01M)



Хитозан, натрий альгинаты ерітінділерінің және осы полимерлердің [1:9], [2:8], [3:7], [4:6] ИПЭК-і ағыс қисықтары ньютондық емес сұйықтықтарға тән псевдопластикалық ағысқа сәйкес келеді. Басқа (Belalia et al., 2014) зерттеу жұмыстарында полимерлермен ИПЭК сұйықтықтары псевдопластикалық ағысқа сәйкес келетіндігі сипатталған, яғни кернеу жылдамдығымен ығысуы өскен сайын тұтқырлығы төмендейді. Псевдопластикалық ағыспен сипатталатын сұйықтықтар топырақтың беткі қабатына жақсырақ енеді, су, ауа өткізу режимін оңтайландырады, топырақтың кіші бөлшектерін байланыстырады, механикалық құрлымын жақсартып, эрозияға қарсы қабілетін ұлғайтады.

Полимерлердің және ИПЭК-тің топыраққа ену тереңдігін анықтау және шайылуға төзімділігін бағалау үшін флуоресцентті таңбаланған модификациялары пайдаланылды (10-сурет).

10-сурет. Флуоресцентті таңбаланған полимерлермен өңделген топырақ үлгілері (1; 2; 3) және сумен шайылғаннан кейінгі жағдайы (1.1; 2.1; 3.1)

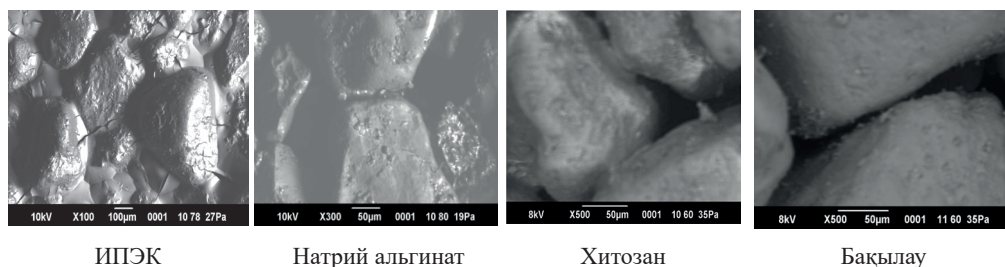


10-суретте көрсетілгендей, флуоресцентті таңбаланған натрий альгинатымен хитозанның топырақа еңу тереңдігі 21-23 мм құрады (10-сурет (1,2)). Бұл полимерлердің топырақтың беткі қабатында жабын түзбейтінің және топыраққа тереңірек енетіндігін көрсетті. Биополимерлердің судың әсерінен топыраққа тереңірек өтіп, біртіндеп шайылатындығы байқалды (10-сурет (1.1, 2.1)).

Ал флуоресцентті таңбаланған ИПЭК топырақ қабатына 16 мм ге дейін еңіп, беткі қабатында 2 мм тереңдікке дейін топырақ жабының қалыптастырды (10-сурет (3)) және сумен шайылғаннан кейін сол қалпында сақталғаны байқалды (10-сурет (3.1)).

Сонымен қатар, ИПЭК-пен топырақ бөлшектерінің (0,50–0,25) өзара байланысуын және полимерлі-топырақ жабының қалыптасуын СЭМ сканирлеуші электрондық микроскоптың көмегімен түсірілген микрофотосуреттер дәлелдеді (**11-сурет**). Зерттеулер (Berikbol N et al., 2024; Klivenko A et al., 2020) бойынша мұндай жабынның топырақтың беткі қабатын бітемей, ылғал мен ауаның терең қабаттарға өтуін сақтайтыны расталды.

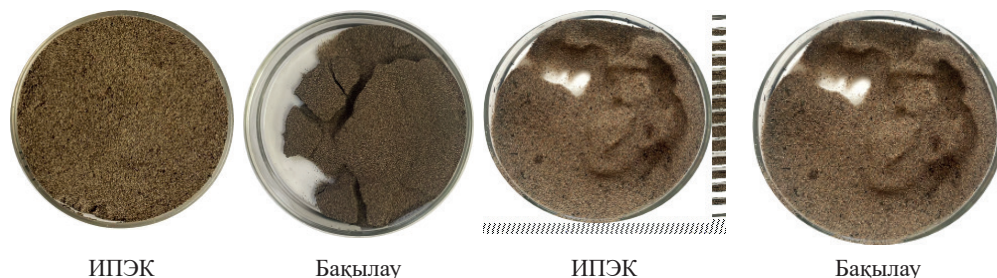
11-сурет. Топырақ агрегаттарының микроскопиялық фотосуреттер



Осы қасиеттер биоыдырайтын полимерлер мен ИПЭК-ті топырақ құрылымын жақсарту және оның агрегаттарының тұрақтылығын арттыру үшін тиімді құрал етеді.

12-13 суреттерде модельдік зертханалық тәжірибе жағдайында су мен желдің әсерінен полимерлермен және ИПЭК-пен өңделген топырақ эрозиясының нәтижелері көрсетілген.

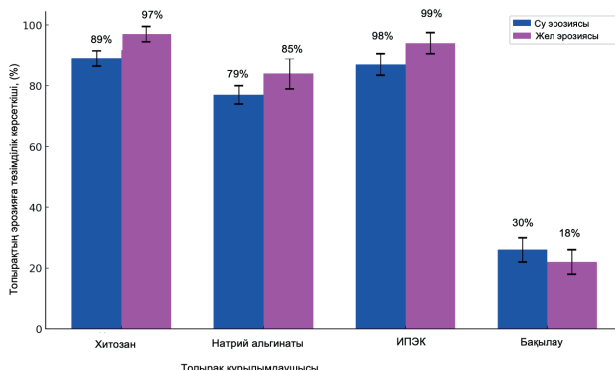
12-сурет. Жел эрозиясы тәжірбиесінен кейінгі топырақ үлгілерінің беткі қабаты



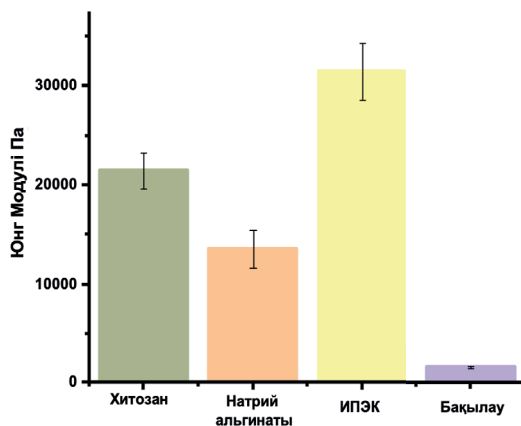
13-сурет. Су эрозиясы тәжірбиесінен кейінгі топырақ үлгілерінің беткі қабаты

ИПЭК-пен өңдеу топырақтың беткі қабатын су және жел эрозиясынан қорғаудың ең жоғары бекітуші әсер көрсетті. ИПЭК-пен өндегеннен кейін топырақтың су эрозиясына төзімділігі 68%-ға, ал жел эрозиясына төзімділігі тиісінше 81%-ға жоғарылады (14-сурет). ИПЭК құрамындағы гидрофильді (анионды) және гидрофобты (катион) фрагменттердің болуы топырақ бөлшектерінің зарядталған бетімен электростатикалық әрекеттесуі нәтижесінде микроагрегаттардың үстінде қорғаныштық полимерлі қабықтың қалыптасуын жеңілдетеді.

14-сурет. Топырақ бөлшектерінің су жел эрозиясына төзімділігі



Топырақтың эрозиясына қарсы хитозан, натрий альгинаты және ИПЭК-тің әсерін зерттеу үшін топырақ-полимерлі композиттердің механикалық сынақтары жүргізілді (15-сурет).

15-сурет. Полимерлі жабынмен қапталған топырақтың механикалық қасиеттері

Топырақ бетінде түзілген топырақ–полимерлі жабындардың Юнг модулі айтарлықтай айырмашылықтарды көрсетті. 15-суреттен көріп отырғандай, Юнг модулінің ең жоғары мәні ИПЭК-пен өңделген топырақ үлгісінде тіркелді және ол 31631 Па құрады. Хитозан және натрий альгинаты негізіндегі топырақ–полимерлі жабындардың көрсеткіші төмен болды (21031 Па және 13280 Па). Дистилденген сумен өңделген бақылау үлгілерінде 1619 Па байқалды. Жеке полимерлермен және сумен модификацияланған үлгілерге қарағанда ИПЭК бар композиттердің механикалық беріктігінің жоғары болуы тұқымның өнуіне және өсімдіктердің дамуына кедергі келтірмейді, себебі Юнг модулінің анықталған мәндері өсімдік жасушаларындағы тургорлық қысымнан аспайды (Berikbol et al., 2024; Klivenko et al., 2020). Алынған мәліметтер ИПЭК-тің эрозияға бейім орманды құмды топырақтардың құрылымдық тұрақтылығын арттыруда тиімділігін көрсетеді.

Қорытынды. Алғаш рет коммерциялық полимер үлгілерінен флуоресцентті таңбаланған хитозан және натрий альгинаты синтезделді, олардың шығымы тиісінше 95% және 96% құрады. Бұл синтезделіп алынған полимерлер мен ИПЭК-ті құмды топыраққа еңу тереңдігі мен шайылу дәрежесін зерттеу мақсатында қолданылды. Синтез барысында хитозанның амин тобы флуоресцеин изотиоцианатының изотиоцианат тобымен әрекеттесіп, тиомочевина байланысын түзді, ал натрий альгинатының карбоксил тобы флуоресцинаминнің амин тобымен қосылысы амидтік байланыс арқылы жүзеге асты. ИҚ-спектроскопия нәтижелері бойынша флуоресцентті таңбаланған полимерлермен ИПЭК-тің химиялық құрылымы дәлелденді. Реологиялық қасиеттерін зерттеу нәтижесінде полимерлер мен [1:9], [2:8], [3:7], [4:6] мольдік қатынастағы ИПЭК-дің ньютондық емес псевдопластикалық қасиетке ие ағысы анықталды. Флуоресцентті таңбаланған полимерлердің топыраққа еңу тереңдігі 21-23 мм құрады. Ал, флуоресцентті таңбаланған ИПЭК-тің еңу тереңдігі 16 мм және топырақтың беткі қабатында 2мм қалыңдықта топырақ жабының қалыптастырды. Су әсерінен кейін полимерлермен

салыстырғанда ИПЭК-тің сумен шайылмайтындығы байқалды. Сонымен қатар, ИПЭК топырақтың механикалық беріктігін 19 есе арттырды. ИПЭК пен өңделген топырақтың эрозияға төзімділігі 98–99% құрады, бақылау нұсқасынан 68–81% жоғары. [Хитозан:натрий альгинаты] = [2:8] мольдік қатынасындағы ИПЭК-ті орманды топырақтың құрылымын жақсартуға арналған эрозияға қарсы құрылымдаушы ретінде ұсынуға болады.

Әдебиеттер

Панова И.Г., Ильясов Л.А., Ярославов А.Б. (2021) Поликомплексные рецептуры для защиты почв от деградации. Высокомолекулярные соединения. Серия С, 63(2). — С. 148–155. DOI:10.31857/S0514142921020106

Adamczuk A., Kercheva M., Hristova M., Jozefaciuk G. (2021) Impact of chitosan on water stability and wettability of soils. *Materials*, 14(24). — Article 7676. DOI:10.3390/ma14247676

Belalia F., Djelali N. (2014) Rheological properties of sodium alginate solutions. *Revue Roumaine de Chimie*, 59(2). — P. 81–86.

Berikbol N., Klivenko A., Markin V., Orazzhanova L., Yelemessova G., Kassymova Z. (2024) Development of interpolyelectrolyte complex based on chitosan and carboxymethylcellulose for stabilizing sandy soil and stimulating vegetation of Scots pine (*Pinus sylvestris* L.). *Polymers*, 16(16). — Article 2373. DOI:10.3390/polym16162373

Caprifico A., Polycarpou E., Foot P.J.S., Calabrese G. (2020) Biomedical and pharmacological—applications of chitosan—based nanocarriers incorporating fluorescein isothiocyanate. *Macromolecular Bioscience*, 21(1). — Article ID 2000312. — P. 2—27. DOI: 10.1002/mabi.202000312.1

Chang I., Im J., Cho G.—C. (2016) Introduction of microbial biopolymers in soil treatment for future environmentally friendly and sustainable geotechnical engineering. *Sustainability*, 8(3). — Article 251. DOI:10.3390/su8030251

Fatehi H., Ong D., Yu J., Chang I. (2023) The effects of particle size distribution and moisture variation on mechanical strength of biopolymer—treated soil. *Polymers*, 15(6). — Article 1427. DOI:10.3390/polym15061427

Hataf N., Ghadir P., Ranjbar N. (2018) Investigation of soil stabilization using chitosan biopolymer. *Journal of Cleaner Production*, 170. — P. 1493–1500. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.09.266

Hermanson G.T. (2008) *Bioconjugate Techniques*. — 2nd ed. Burlington, MA, USA: Academic Press. — 1041 p.

Izumrudov V.A., Mussabayeva B.Kh., Kassymova Zh.S., Klivenko A.N., Orazzhanova L.K. (2019) Interpolyelectrolyte complexes: advances and prospects of application. *Russian Chemical Reviews*, 88(10). — С. 1046–1062. DOI:10.1070/RCR4877

Kabanov V.A., Zezin A.B. (1984) Soluble interpolymeric complexes as a new class of synthetic polyelectrolytes. *Pure and Applied Chemistry*, 56(3). — P. 343–354. <https://doi.org/10.1351/pac198456030343>

Kassymova Zh.S., Orazzhanova L.K., Bayakhmetova B.B., Gaisina B.S., Kassenova N.B., Yelemessova G.T. (2019) Preparation of interpolymer complexes of chitosan and sodium alginate. *Bulletin of the Karaganda University. Chemistry Series*, 93(1). — P. 17–24. DOI:10.31489/2019Ch1/17-24

Klivenko A., Orazzhanova L., Mussabayeva B., Yelemessova G., Kassymova Z. (2020) Soil structuring using interpolyelectrolyte complexes of water—soluble polysaccharides. *Polymers for Advanced Technologies*, 31. — P. 3292–3301. DOI:10.1002/pat.5029

Komoto D., Furuike T., Tamura H. (2019) Preparation of polyelectrolyte complex gel of sodium alginate with chitosan using basic solution of chitosan. *International Journal of Biological Macromolecules*, 126. — P. 54–59. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2018.12.195

Mussabayeva B.Kh., Kassymova Zh.S., Orazzhanova L.K., Klivenko A.N., Sabitova A.N., Bayakhmetova B.B. (2022) Interpolyelectrolyte complex chitosan—alginate for soil structuring. *Bulletin of the Karaganda University. Chemistry Series*, 107(3). — P. 102–114. DOI:10.31489/2022Ch3/3-22-11

Novoskoltseva O.A., Belov A.A., Loiko N.G., Nikolaev Y.A., Panova I.G., and Yaroslavov A.A..

(2022) Biodegradable Interpolycomplexes for Anti-Erosion Stabilization of Soil and Sand. *Polymers*, 14. <https://doi.org/10.3390/polym14245383>

Rocha R.F.P., Costa M.P.M., da Costa A.C.A., Ferreira I.L.M. (2024) Study of the degradation in an ultisol of alginate-chitosan complex and its stability and applicability as a soil conditioner. *International Journal of Biological Macromolecules*, 264(1). — Article 130384. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2024.130384

Román-Doval R., Torres-Arellanes S.P., Tenorio-Barajas A.Y., Gómez-Sánchez A., Valencia-Lazcano A.A. (2023) Chitosan: Properties and its application in agriculture in context of molecular weight. *Polymers*, 15(13). — Article 2867. DOI:10.3390/polym15132867

Temurayak A., Eskisar T., Eskisar T. (2023) Clay Soil Stabilization Using Xanthan Gum and Sodium Alginate as Biopolymers. In: 5th International Conference on New Developments in Soil Mechanics and Geotechnical Engineering.

Zhang, X. et al. Sodium alginate/sodium lignosulfonate hydrogel based on inert Ca²⁺ activation for water conservation and growth promotion (2024) *Environ. Res.*, 246, 118144.

References

Panova I.G., Il'yasov L.A., Yaroslavov A.B. (2021) Polikompleksnyye receptury dlya zashchity pochv ot degradatsii [Polycomplex Formulations for the Protection of Soils Against Degradation]. *Vysokomolekulyarnye soedineniya. Seriya C*, 63(2). — P. 148–155. (in Russian)

Adamczuk A., Kercheva M., Hristova M., Jozefaciuk G. (2021) Impact of chitosan on water stability and wettability of soils. *Materials*, 14(24). — Article 7676. DOI:10.3390/ma14247676 (in English)

Belalia F., Djelali N. (2014) Rheological properties of sodium alginate solutions. *Revue Roumaine de Chimie*, 59(2). — P. 81–86. (in English)

Berikbol N., Klivenko A., Markin V., Orazzhanova L., Yelemessova G., Kassymova Z. (2024) Development of interpolyelectrolyte complex based on chitosan and carboxymethylcellulose for stabilizing sandy soil and stimulating vegetation of Scots pine (*Pinus sylvestris* L.). *Polymers*, 16(16). — Article 2373. DOI:10.3390/polym16162373 (in English)

Chang I., Im J., Cho G.—C. (2016) Introduction of microbial biopolymers in soil treatment for future environmentally friendly and sustainable geotechnical engineering. *Sustainability*, 8(3). — Article 251. DOI:10.3390/su8030251 (in English)

Caprifico A., Polycarpou E., Foot P.J.S., Calabrese G. (2020) Biomedical and pharmacological—applications of chitosan—based nanocarriers incorporating fluorescein isothiocyanate. *Macromolecular Bioscience*, 21(1). — Article ID 2000312. — P. 2-27. DOI: 10.1002/mabi.202000312.1 (in English)

Fatehi H., Ong D., Yu J., Chang I. (2023) The effects of particle size distribution and moisture variation on mechanical strength of biopolymer-treated soil. *Polymers*, 15(6). — Article 1427. DOI:10.3390/polym15061427 (in English)

Hataf N., Ghadir P., Ranjbar N. (2018) Investigation of soil stabilization using chitosan biopolymer. *Journal of Cleaner Production*, 170. — P. 1493-1500. DOI: 10.1016/j.jclepro.2017.09.266 (in English)

Hermanson G.T. (2008) *Bioconjugate Techniques*. — 2nd ed. Burlington, MA, USA: Academic Press. — 1041 p. (in English)

Izumrudov V.A., Mussabayeva B.Kh., Kassymova Zh.S., Klivenko A.N., Orazzhanova L.K. (2019) Interpolyelectrolyte complexes: advances and prospects of application. *Russian Chemical Reviews*, 88(10). — P. 1046-1062. DOI:10.1070/RCR4877 (in English)

Kabanov V.A., Zezin A.B. (1984) Soluble interpolymeric complexes as a new class of synthetic polyelectrolytes. *Pure and Applied Chemistry*, 56(3). — P. 343-354. <https://doi.org/10.1351/pac198456030343> (in English)

Kassymova Zh.S., Orazzhanova L.K., Bayakhmetova B.B., Gaisina B.S., Kassenova N.B., Yelemessova G.T. (2019) Preparation of interpolymer complexes of chitosan and sodium alginate. *Bulletin of the Karaganda University. Chemistry Series*, 93(1). — P. 17-24. DOI:10.31489/2019Ch1/17—24 (in English)

Klivenko A., Orazzhanova L., Mussabayeva B., Yelemessova G., Kassymova Z. (2020) Soil structuring using interpolyelectrolyte complexes of water—soluble polysaccharides. *Polymers for Advanced Technologies*, 31. — P. 3292-3301. DOI:10.1002/pat.5029 (in English)

Komoto D., Furuike T., Tamura H. (2019) Preparation of polyelectrolyte complex gel of sodium alginate

with chitosan using basic solution of chitosan. *International Journal of Biological Macromolecules*, 126. —P. 54–59. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2018.12.195 (in English)

Mussabayeva B.Kh., Kassymova Zh.S., Orazzhanova L.K., Klivenko A.N., Sabitova A.N., Bayakhmetova B.B. (2022) Interpolyelectrolyte complex chitosan–alginate for soil structuring. *Bulletin of the Karaganda University. Chemistry Series*, 107(3). – P. 102-114. DOI:10.31489/2022Ch3/3-22-11 (in English)

Nurakhmetova Z., Tatykhanova G., Kudaibergenov S. (2020) Immobilized anticancer agents and metal nanoparticles in a matrix of gellan: achievements and prospects. *Chemical Bulletin of Kazakh National University*, 99(4). — P. 32-41. <https://doi.org/10.15328/cb1169> (in English)

Rocha R.F.P., Costa M.P.M., da Costa A.C.A., Ferreira I.L.M. (2024) Study of the degradation in an ultisol of alginate—chitosan complex and its stability and applicability as a soil conditioner. *International Journal of Biological Macromolecules*, 264(1). – Article 130384. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2024.130384 (in English)

Román-Doval R., Torres-Arellanes S.P., Tenorio-Barajas A.Y., Gómez-Sánchez A., Valencia-Lazcano A.A. (2023) Chitosan: Properties and its application in agriculture in context of molecular weight. *Polymers*, 15(13). — Article 2867. DOI:10.3390/polym15132867 (in English)

Temurayak A., Eskisar T., Eskisar T. (2023) Clay Soil Stabilization Using Xanthan Gum and Sodium Alginate as Biopolymers. In: *5th International Conference on New Developments in Soil Mechanics and Geotechnical Engineering*. (in English)

Zhang, X. (2024) Sodium alginate/sodium lignosulfonate hydrogel based on inert Ca²⁺ activation for water conservation and growth promotion. *Environ. Res.*, 246, 118144. (in English)

<https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.372>

FTMP

ΘΟΧ

© O.A. Yessimova, S.Sh. Kumargaliyeva, B.K. Musabekov,
A.K. Konysbek*, 2025.

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: konysbekasylyzat@gmail.com

COLLOIDAL - CHEMICAL PROPERTIES OF ALHAGI AND TANSY (*TANACETUM*) HYDROLATES

Yessimova Orynkul Arykbekovna — Associate Professor of the Department of Analytical and Colloid Chemistry and Technology of Rare Elements, Candidate of Chemical Sciences, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: orinkul.esimova@kaznu.edu.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0002-6483-9764>;

Kumargaliyeva Saltanat Shorakyzy — Associate Professor of the Department of Analytical and Colloid Chemistry and Technology of Rare Elements, Candidate of Chemical Sciences, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: saltanat.kumargaliyeva@kaznu.edu.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-3154-0849>;

Musabekov Kuanyshbek Bituovich — Doctor of Chemical Sciences, Academician of the National Academy of Natural Sciences of the Republic of Kazakhstan, Professor Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: kuanyshbek.musabekov@kaznu.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1114-1901>;

Konysbek Asylyzat Kairatkyzy — Master's student 2nd year Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: konysbekasylyzat@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0007-4220-7615>.

Abstract. The cosmetics industry is rapidly developing worldwide, and increasing attention is being paid to the quality and safety of products. Hydrolates are among the most popular cosmetic ingredients due to their natural origin and beneficial properties. The aim of this study was to investigate the colloidal-chemical properties of hydrolates derived from domestic plant materials such as tansy and camel thorn, and to assess their potential in cosmetic formulations. Both plants are native to our country and rich in biologically active compounds, including essential oils, flavonoids, tannins, and alkaloids. Hydrolates were chosen because they contain higher concentrations of extracted compounds compared to decoctions. Their colloidal-chemical properties were determined by measuring surface tension using the Du Nouy method and contact angle with a goniometer. To evaluate potential cosmetic applications, emulsifying properties were also examined. Surface tension isotherms demonstrated that tansy and camel thorn hydrolates contain surfactants capable of reducing water's surface tension. Contact angle analysis revealed their ability to hydrophilize hydrophobic surfaces, improving



wetting properties. Emulsification studies confirmed that these hydrolates stabilize oil/water emulsions, enabling the formulation of cosmetic products. As a result, gel-based cosmetic products were successfully developed using tansy and camel thorn hydrolates. The colloidal-chemical properties of plant hydrolates at the gas-liquid interface were investigated. The findings confirmed the presence of surfactants, good wetting and moisturizing abilities, and uniform emulsifying capacity. These results demonstrate the feasibility of incorporating hydrolates into cosmetic product formulations.

Keywords: hydrolates, surface tension, washing properties, emulsion stability, foaming properties, optical density, surfactants (SAS)

© О.А. Есимова, С.Ш. Құмарғалиева, К.Б. Мусабеков,
А.Қ. Қонысбек*, 2025.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: konysbekasylyzat@gmail.com

ЖАНТАҚ ЖӘНЕ ТҮЙМЕШЕТЕН ГИДРОЛАТТАРЫНЫҢ КОЛЛОИДТЫҚ-ХИМИЯЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

Есимова Орынкул Арыкбековна — Аналитикалық, коллоидтық химия және сирек элементтер технологиясы кафедрасының қауымдастырылған профессоры, химия ғылымдарының кандидаты, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: orinkul.esimova@kaznu.edu.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0002-6483-9764>;

Құмарғалиева Салтанат Шорақызы — химия ғылымдарының кандидаты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің қауымдастырылған профессоры, Алматы, Қазақстан,

E-mail: saltanat.kumargalieva@kaznu.edu.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-3154-0849>;

Мусабеков Қуанышбек Битуович — химия ғылымдарының докторы, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан Республикасы ұлттық жаратылыстану ғылымдары академиясының академигі, профессор, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kuanyshebek.musabekov@kaznu.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1114-1901>;

Қонысбек Асылзат Қайратқызы — 2-курс магистранты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: konysbekasylyzat@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0007-4220-7615>.

Аннотация: Қазіргі кезде әлемде косметика өнеркәсібінің аса қарқынды дамуы байқалуда және көптеген адамдар косметиканың сапасы мен қауіпсіздігіне ерекше назар аударады. Гидролаттар пайдалы қасиеттері мен табиғи шығу тегіне байланысты косметиканың ең танымал ингредиенттерінің бірі болып табылады. Жұмыстың мақсаты Отандық шикізат түймешетен мен жантақ өсімдіктерінен гидролаттардың коллоидтық-химиялық қасиеттерін зерттеу және косметикалық өнімдер алу мүмкіндігін қарастыру. Зерттеу нысаны ретінде эфир майлары, флавоноидтар, таниндер мен алкалоидтар және т.б. биологиялық белсенді заттарға бай отандық түймешетен мен жантақ гидролаттары алынды. Гидролаттарды алу себебі олардағы экстракцияланған заттардың концентрациясы қайнатпаларға қарағанда жоғары болады. Жантақ пен түймешетен гидролаттарының коллоидтық-химиялық қасиеттерін анықтау үшін олардың Дю Нуи әдісімен беттік керілуі мен

гониометрмен жуғу бұрышы өлшенді және косметикалық дисперсті жүйе алу мақсатында эмульсиялағыш қабілеттілігі анықталды. Беттік керілу изотермалары бойынша жантақ пен түймешетен гидролаттарында судың беттік керілуін төмендететін беттік-белсенді заттардың бар екені және жуғу изотермалары бойынша олар гидрофобты бетті гидрофильдейтіні анықталды. Эмульсиялағыш қасиеттерін зерттеу нәтижесінде гидролаттар май/су эмульсияларын тұрақтандыратыны, яғни олардың негізінде косметикалық өнімдер алуға болатыны көрсетілді. Осылай, жантақ пен түймешетен гидролаттары негізінде бетке арналған гель түріндегі косметикалық өнімдер алынды. Өсімдік гидролаттарының газ-сұйық фазалық шекарадағы коллоидтық-химиялық қасиеттері зерттелді. Гидролаттардың құрамында беттік-активті заттардың бар екенін, жақсы жуғу қабілеті, яғни ылғалдандырғыш қасиеті анықталды. Гидролаттардың бәрінің эмульгирлеу қабілеті бірдей. Анықталған нәтижелер гидролаттарды косметикалық өнімдер құрамына қолдануға мүмкіндік бар екенін көрсетті.

Түйін сөздер: гидролаттар, беттік керілу, жуғу құбылысы, эмульсия тұрақтылығы, көбіктүзгіштік қасиеті, оптикалық тығыздық, беттік активті заттар (БАЗ)

Қаржыландыру: Зерттеу жұмысы Қазақстан Республикасы білім және ғылым Министрлігі ғылым Комитеті бағдарламалық нысаналы қаржыландыру ЖТН BR24993113 "Полифункционалды мақсаттағы дифильді суда еритін полимерлер негізінде композиттер жасау" бағдарламасы негізінде орындалды.

© О.А. Есимова, С.Ш. Кумарғалиева, К.Б. Мусабеков,
А.К. Конысбек*, 2025.

Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан.
E-mail: konysbekasylzat@gmail.com

КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИДРОЛАТОВ ВЕРБЛЮЖЬЕЙ КОЛЮЧКИ И ПИЖМЫ

О.А. Есимова — ассоциированный профессор кафедры Аналитической, коллоидной химии и технологии редких элементов, кандидат химических наук, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: orinkul.esimova@kaznu.edu.kz , ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0002-6483-9764>;

С.Ш.Кумарғалиева — ассоциированный профессор кафедры аналитической, коллоидной химии и технологии редких элементов, кандидат химических наук, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: saltanat.kumargalieva@kaznu.edu.kz , ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-3154-0849>;

К. Б.Мусабеков — доктор химических наук, академик Национальной академии естественных наук Республики Казахстан, профессор Казахского национального университета имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: kuanyshebek.musabekov@kaznu.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0003-1114-1901>;

А.К. Конысбек — магистрант, 2-й курс, КазНУ имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: konysbekasylzat@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0007-4220-7615>.



Аннотация. В настоящее время в мире наблюдается интенсивное развитие косметической индустрии, и многие люди уделяют особое внимание качеству и безопасности косметики. Гидролаты являются одним из самых популярных ингредиентов в косметике благодаря своим полезным свойствам и природному происхождению. Цель работы заключалась в исследовании коллоидно-химических свойств гидролатов на основе отечественного растительного сырья – пижмы и верблюжьей колючки, и рассмотрении возможности применения их для получения косметических продуктов. В качестве объектов исследования использованы произрастающие в нашей стране пижма и верблюжья колючка, богатые на биологически-активные соединения, такие как эфирные масла, флавоноиды, танины и алкалоиды. Выбор гидролатов в качестве объектов исследования основан на том, что концентрация экстрагированных в них веществ выше, чем в отварах. Для определения коллоидно-химических свойств гидролатов пижмы и верблюжьей колючки измерены поверхностное натяжение методом Дю Нуи и краевого угол смачивания гониометром. Для выявления возможности использования гидролатов для получения косметических продуктов изучены их эмульгирующие свойства. По изотермам поверхностного натяжения показано, что гидролаты пижмы и верблюжьей колючки содержат поверхностно-активные вещества, снижающие поверхностное натяжение воды. Изотермы краевого угла смачивания показывают, что гидролаты гидрофилизуют гидрофобные поверхности. В результате изучения эмульгирующих свойств определено, что гидролаты стабилизируют эмульсии масло/вода, что дает возможность получения косметических продуктов на их основе. Таким образом, на основе гидролатов пижмы и верблюжьей колючки получены косметические продукты в форме геля. Вывод: были исследованы коллоидно-химические свойства растительных гидролатов на границе газо-жидкой фазы. Было выявлено, что гидролаты содержат поверхностно-активные вещества, обладают хорошей смачиваемостью, то есть увлажняющими свойствами. Все гидролаты имеют одинаковую эмульгирующую способность. Полученные результаты подтверждают возможность применения гидролатов в составе косметических продуктов.

Ключевые слова: гидролаты, поверхностное натяжение, явления смачивания, стабильность эмульсии, пенообразовательные свойства, оптическая плотность, поверхностно-активные вещества (ПАВ)

Кіріспе. Өсімдік шикізаты фармацевтика, косметика, тағам өнеркәсібінің негізгі шикізаты болып, өнімдердің басты компонентіне айналады. Минералдар мен органикалық заттарға бай дәрілік өсімдіктерден алынған құрғақ шөптер мен дәмдеуіштер әлем халқының шамамен 85%-ы үшін денсаулықты сақтаудың негізі болып табылады (Luengo et al., 2021). Бұл шикізаттың құрамындағы табиғи биологиялық белсенді заттар адам ағзасына пайдалы әсер ететін қасиеттері оларды әртүрлі салаларда кеңінен қолдануға мүмкіндік береді (Milivojević et al., 2019; Narhaun et al., 2020). Осындай табиғи шикізат қатарына жататын гидролаттар косметикалық өнімдердің танымал ингредиенттерінің бірі болып табылады

(Aćimović et al, 2020; Milivojević et al., 2019). Халықаралық стандарттарға сәйкес гидролат немесе хош иісті су (aromatic water, hydrolate) - эфир майы шикізаты мен эфир майы бөлінгеннен кейін пайда болатын дистилляциялық су болып табылады (Burtseva et al., 2023). Гидролаттар жақсы емдік қасиет көрсетіп, косметикалық тері күтімін қамтамасыз ете алады (Yu et al., 2020). Гидролаттар эфир майлары сияқты тұрақты әсер көрсеткенімен, эфир майларына қарағанда олардың әсері әлдеқайда нәзік әрі жұмсақ болады. Сондықтан гидролаттарды қорықпай қолдануға болады, себебі оларды күйген жағдайда немесе қандай да бір жолмен жарақат алған сәтте тікелей теріге жағуға болады (Dragicevich et al., 2024).

Отандық дәрілік өсімдіктерден алынған гидролаттарды пайдалану косметикалық заттар өндірісінде үлкен қызығушылық тудырады. Косметикалық өнімдерді алу үшін ғылыми негізделген технологияларды әзірлеу мақсатында олардың коллоидтық-химиялық қасиеттерін зерттеу қажет, себебі косметикалық өнімдер дисперсті жүйелерге жатады. Осыған байланысты зерттеудің басты мақсаты – елімізде өсетін жантақ мен түймешетен гидролаттарының коллоидтық-химиялық қасиеттерін зерттеп, олардың косметикалық өнімдерде қолданылу мүмкіндігін анықтау.

Материалдар мен әдістер. Оңтүстік Қазақстанда өсетін жантақ (*Alhagi Kirghisorum Schrenk*), Түймешетен-II және Алматы облысында түймешетен-I дәрілік өсімдіктер қолданылды. Өсімдіктердің гидролаттары су буымен дистилляциялау арқылы алынды.

Беттік керілу Дю Нуи әдісі бойынша Тензиометр қондырғысында өлшенді. Бұл сұйықтықтардың беттік керілуін анықтаудың кең таралған әдістерінің бірі. Беттік керілудің сұйықтықпен жақсы жұққан R радиусының жұқа сақинасының сұйықтық бетінен шығуы үшін қажетті F күшімен байланысы арқылы сипатталады (Определение поверхностного натяжения растворов ПАВ на границе газ–жидкость на Тензиометре К6 (метод Дюуи Нуи, 2013). Жұғу құбылысы беттік қабаттармен бөлінген үш көлемдік фазаның (сұйықтық, қатты дене және ауа) өзара әрекеттесуі арқылы жүзеге асырылады. Ерітінділердің қатты беттерге жұғу қабілетін анықтау үшін жұғудың шеткі бұрышы Гониометр қондырғысында анықталды (Yessimova et al, 2020). Алынған гидролаттардың эмульсиялану және көбіктену қасиеттері белгілі әдістемелер бойынша зерттелді Фазалардың әртүрлі көлемдік қатынасында май/су эмульсияларын алынып және олардың тұрақтылығын анықталды (Yargaeva et al., 2003)..

Гидрогель алу үшін карбоксиметилцеллюлозаның натрий тұзы, полиакрил қышқылы, глицерин (сорбитол), тазартылған су, өсімдік сығындысы, этил спирті қолданылды. 100 г дайын өнімді, яғни гельді алу үшін қажетті компоненттер әдістеде келтірілген тапсырма нұсқасына сәйкес алынады («Poverkhnostnye yavleniya i dispersnyye sistemy» 2013).

Нәтижелер мен талқылаулар. Гидролаттар – бумен дистилляция әдісі арқылы өндірілетін өсімдік экстрактысы. Су буы өсімдік материалынан өткен кезде оның құрамындағы суда еритін компоненттерге (эфир майлары, қышқылдар, флавоноидтар, дәрумендерге) қанығады. Қайнатпалармен салыстырғанда,

гидролаттарда экстракцияланған заттардың концентрациясы жоғары болады, сонымен қатар оларда тұзбен пигменттер болмайды (Yessimova et al., 2022).

Қазіргі кездегі косметика өнеркәсібінің қарқынды дамуы тұтынушылардың косметика сапасы мен қауіпсіздігіне деген талабын арттыруда. Бұл жағдайда гидролаттардың пайдалы қасиеттері мен табиғи болуы оларды косметиканың ең танымал ингредиенттерінің бірі етеді. Алайда, косметика саласында гидролаттарға деген үлкен қызығушылыққа қарамастан, олардың коллоидтық-химиялық қасиеттері мен косметиканың тұрақтылығына және тиімділігіне әсері жеткілікті зерттелмеген. Бұл гидролаттардың косметикалық өнімдерде қолданылуы туралы арнайы зерттеулер жүргізудің өзектілігін көрсетеді. Осыған орай отандық дәрілік өсімдіктер гидролаттарын косметикалық өнімдерде қолдану мүмкіндігін анықтау мақсатында жұмыста елімізде өсетін түймешетен мен жантақ гидролаттарының коллоидтық-химиялық қасиеттері зерттеліп, алғаш рет косметикалық гелдер алынды.

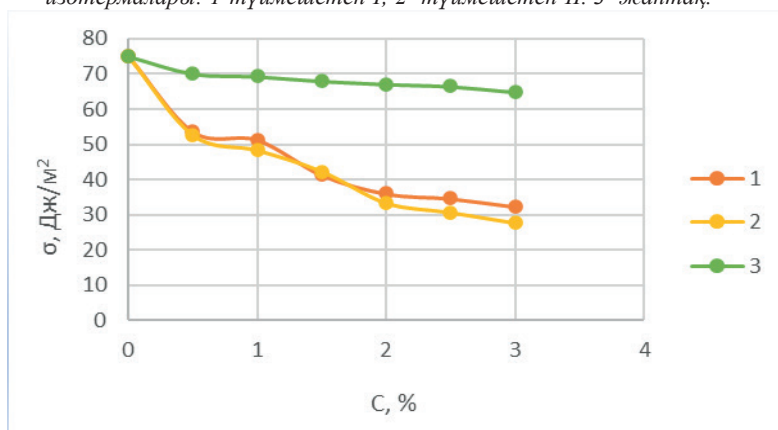
Жұмыста емдік қасиеттерге ие Оңтүстік Қазақстанда өсетін жантақ (*Alhagi Kirghisorum Schrenk*) гидролаты және түймешетен (*Tanacetum*) гидролаттарының екі түрі: түймешетен-I (Алматы обл.); Түймешетен-II (Оңтүстік Қазақстан обл.) зерттелді.

Түймешетен (*Tanacetum*) күрделі гүлділер (*Asteraceae*) тұқымдасына жататын көпжылдық шөптесін өсімдік. Түймешетеннің кең таралған түрі – кәдімгі түймешетен (*Tanacetum vulgare*). Оның құрамына биологиялық белсенді заттар, соның ішінде эфир майлары, флавоноидтар, таниндер мен алкалоидтар кездеседі (Burasheva 1981). Түймешетен сулы ерітіндісі қабынуға қарсы және терінің сезімталдығын төмендетуге жақсы әсер етеді.

Жантақ, қырғыз жантағы (*Alhagi Kirghisorum Schrenk*) – әртүрлі биологиялық-белсенді заттарға бай перспективті дәрілік өсімдік. Жантақ қарапайым және арзан табиғи шикізатқа жатады. Жантақ судағы ерітіндісінің (ВК фитопрепаратының) сандық және сапалық құрамы белгілі (ылғалдылық 13%): гетерополисахаридтер – 43%, микро- және макроэлементтер – 21%, амин қышқылдары – 18%, флавоноидтер – 3%, полифлавандар – 2%. Жантақ гидролаты теріні табиғи жолмен ылғалдандыруға көмектеседі. Терінің құрғауын басып, теріге жұмсақтық қасиет береді (Yessimova 2020).

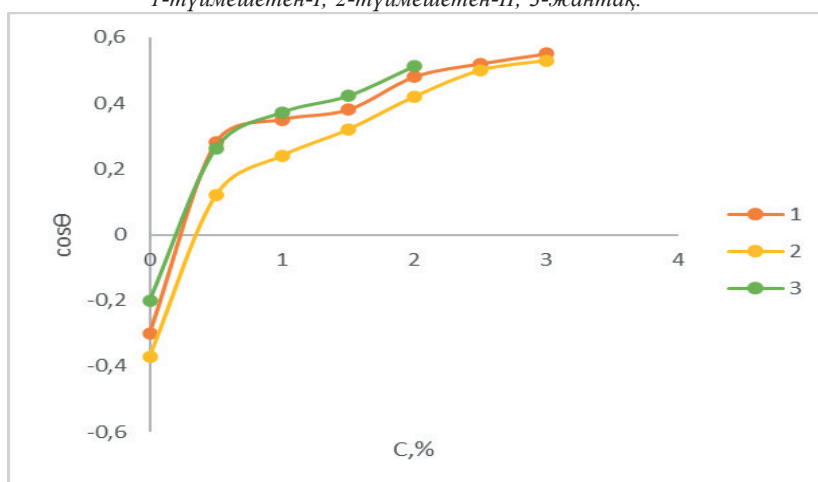
Гидролаттарды косметикалық өнімдерде қолдану мүмкіндігін анықтау үшін олардың коллоидтық-химиялық қасиеттері зерттелді. Гидролаттар компоненттерінің беттік-активті қасиеттерін олардың сұйықтық-газ фазааралық шекарадағы беттік керілуін анықтау арқылы бағалауға болады. Жантақ пен түймешетен гидролаттарының 0,5; 1,0; 1,5; 2,0; 2,5; 3,0%-дық сулы ерітінділері алынып, тензиометрде Дю-Нуи әдісімен беттік керілулері өлшенді. Беттік керілу изотермаларынан (1-сурет) гидролаттардың құрамында беттік-активті компоненттер болатынын көруге болады, себебі $(d\sigma/dc) < 0$ шартына сәйкес концентрацияның артуымен беттік керілу азаяды. Зерттеу нәтижелері көрсеткендей, жантаққа қарағанда түймешетен гидролаттарының беттік активтілігі жоғары – сұйықтық-ауа шекарасындағы беттік керілу ~ 30 мДж/м² шамасына дейін кемиді.

1-сурет. Жантақ және түймешетен гидролаттары сулы ерітінділерінің беттік керілу изотермалары: 1-түймешетен-I; 2- түймешетен-II; 3- жантақ.



Гидролаттарды косметикалық өнімдерде қолдану мүмкінділігін анықтайтын тағы бір коллоидты-химиялық қасиет – ерітінділердің гидрофобты беттерге жұғу қабілеттілігі. Адам терісі гидрофобты беттерге жататын болғандықтан жұмыста терінің бетін модельдейтін бейполяры гидрофобты бет ретінде тефлон алынып, гидролаттардың жұғу, яғни гидрофилдегіш қабілеті зерттелді. Ерітінділердің жұғу қабілеті жұғудың шеткі бұрышының косинусымен $\cos \theta$ сипатталады. Жұғу изотермаларынан (2-сурет) алынған гидролат ерітінділері үшін $C < 0,5\%$ концентрацияларында жұғу инверсиясы ($\cos \theta = 0$) байқалып, жұғу бұрышының 0,6-ға дейін өсетіні, яғни тефлон беті гидрофилденетіні көрінеді. Мұндай нәтиже гидролат ерітінділерінің гидрофобты беттерге жақсы жұғып, гидрофилдегіш ықпал ететінін анықтайды.

2-сурет. Түймешетен мен жантақ гидролаттары сулы ерітінділерінің жұғу изотермалары: 1-түймешетен-I; 2-түймешетен-II; 3-жантақ.

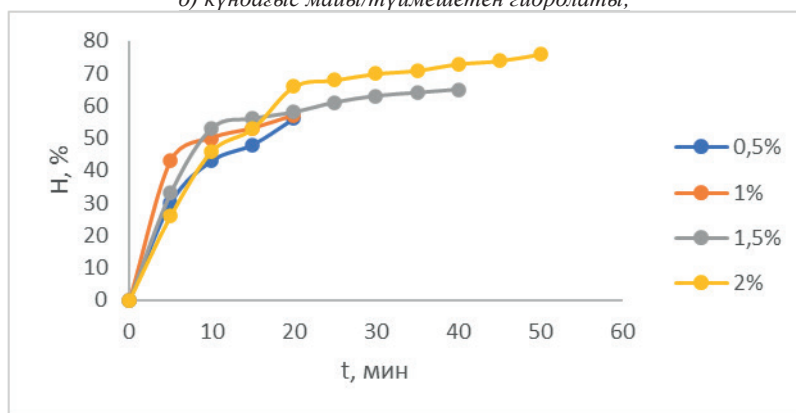


Косметикалық өнімдердің бір түрі эмульсиялық дисперсті жүйелер болғандықтан жантақ пен түймешетен гидролаттарының эмульсиялағыш қасиеттері зерттелді. Тұрақты әрі тиімді эмульсиялар алу үшін алдымен май/су фазаларының оңтайлы қатынасы анықталып, соған орай, фазалардың 3:7, 4:6, 5:5, 6:4, 7:3 көлемдік қатынасында күнбағыс майы/су эмульсияларының тұрақтылығы зерттеліп, ең тұрақты эмульсиялар 6:4 қатынасында түзілетіні анықталды. Ары қарай зерттеу үшін осы қатынаста күнбағыс майы/гидролат ерітіндісі эмульсиялар алынып, олардың бұзылу кинетикалық қисықтарынан (3-сурет) «өмір сүру» уақыты анықталды. Нәтижелер бойынша ең тұрақты күнбағыс майы/гидролат эмульсияларын (6:4) жантақтың 2%-дық және түймешетеннің 3%-дық гидролат ерітінділері түзеді, олардың «өмір сүру» уақыты 35-50 минутты құрады. Бұл нәтижелер осы гидролаттарды эмульсиялық косметикалық өнімдер құрамында қолдануға болатынын көрсетеді.

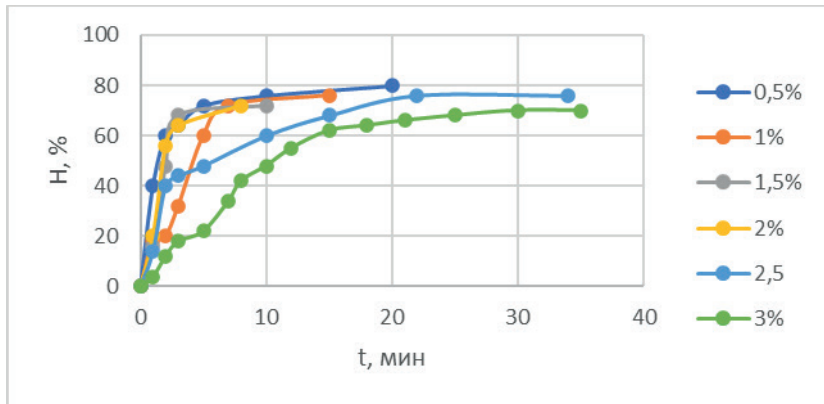
Қазіргі таңда косметикалық өнімдердің заманға сай талабы күн сайын артуда. Косметикалық өндірістегі таптырмайтын химиялық құбылыстың бірі – табиғи шикізат негізінде косметикалық өнім алу. Гидролаттар, яғни емдік қасиеті бар өсімдіктердің сулы экстракцияларын қолдану ерекше орын алады. Отандық дәрілік өсімдіктердің сулы ерітінділерінің коллоидтық-химиялық қасиеттерін зерттеу нәтижесінде олардың құрамында беттік-активті заттар бар, ылғалдандыратын қасиеттерге ие; гидролаттардың ерітінділері аздап қышқыл және бейтарап ортаға ие екенін анықталып, оларды косметикалық өнімдерде қолдануға болатыны көрсетілді.

3-сурет. Күнбағыс майы/гидролат эмульсиялары бұзылуының кинетикалық қисықтары:

- а) күнбағыс майы/жантақ гидролаты;
б) күнбағыс майы/түймешетен гидролаты;



а)



б)

Алынған нәтижелерге сүйене отырып, жантақ пен түймешетен гидролаттар негізінде гель дисперсті жүйесі түрінде косметикалық өнім алу мүмкіндігі қарастырылды, бетке арналған арналған гель мен қолға арналған гидрогель алынды (4, 5-суреттер).

4-сурет. Түймешетен (а) мен жантақ (б) гидролаттар негізіндегі бетке арналған гельдер.



а)



б)

5-сурет. Түймешетен гидролаты негізіндегі гидрогель.



Қорытынды

Гидролаттардың газ-сұйық фазалық шекарадағы коллоидты-химиялық қасиеттері – беттік керілу, жұғу, эмульсиялағыштық зерттелді. Гидролаттардың құрамына беттік-активті заттар кіретіні және олар жақсы гидрофилдегіш, яғни ылғалдандырғыш қасиетке ие екені анықталды. Алынған гидролаттардың эмульсиялағыш қасиеттері бірдей деуге болады, дегенмен ең тұрақты кунбағыс майы/гидролат ерітіндісі эмульсиялары 6:4 көлемдік қатынаста алынып, жантақтың 2%-дық және түймешетеннің 3%-дық гидролат ерітінділері ең тұрақты, яғни «өмір сүру» уақыты 35-50 минутты құрайтын эмульсиялар түзетіні анықталды. Алынған гидролаттар негізінде косметикалық өнім алынды (бетке арналған крем, гель және гидрогель). Бірінші рет жантақ (*Alhagi Kirghisorum Schrenk*), түймешетен өсімдіктерінен гидролаттар алынып, олардың коллоидтық химиялық қасиеттері зерттеліп, зерттеу нәтижесінде косметика саласында қолдануға болатыны анықталды.

Әдебиеттер

Бурашева Г.Ш. (1981) Полифенолы верблюжьей колючки: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук [Polyphenols of camel thorn: Author's abstract of the PhD thesis], Алматы. — 34 с.

Бурцева Е.В., Кулдыраева Е.В., Мехоношина И.С., Тимашева Л.А., Пехова О.А., Кацев А.М. (2023) Изучение химического состава и биологического действия гидролата *Hyssopus officinalis* L. [Study of the chemical composition and biological activity of *Hyssopus officinalis* L. hydrolate]. *Medical & Pharmaceutical Journal «Pulse»*, 25(3).

Яргаева В.А., Сеничева Л.В. (2003) Дисперсные системы [Disperse systems: Textbook], Хабаровск: Изд-во Хабар. гос. техн. ун-та, 135 с.

Есимова О.А. (2020) Коллоидно-химические свойства композиционных ПАВ с фитоператором: взаимодействие фитопрепарата ВК с метацидом и додецилсульфатом натрия, Алматы.

Методы определения поверхностного натяжения: методические указания к лабораторному практикуму по курсу «Поверхностные явления и дисперсные системы» (2013). Москва: РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина, 48 с. (на русском)

Определение поверхностного натяжения растворов ПАВ на границе газ–жидкость на Тензиометре К6 (метод Дю Нуи). (2013). Москва: РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина, 27 с.

Ćimović M.G., Tešević V.V., Smiljanić K.T., Cvetković M.T., Stanković J.M., Kiprovski B.M., Sikora V.S. (2020) Hydrolates – by-products of essential oil distillation: Chemical composition, biological activity and potential uses. *Advances in Technology*, 9(2). — P. 54–70.

Dragicevich A., Kitich D., Stanojevich L., Nesich I., Pavlovich D. (2024) Antioxidant activity of hydrolate obtained from the aerial part of sweet basil *Ocimum basilicum* L. *Acta Medica Medianae*, 4.

Harhaun R., Kunik O., Saribekova D., Lazzara G. (2020) Biologically active properties of plant extracts in cosmetic emulsions. *Microchemical Journal*, 154. — P. 104543.

Luengo G.S., Fameau A.L., Léonforte F., Greaves A.J. (2021) Surface science of cosmetic substrates, cleansing actives and formulations. *Colloid Interface Science*, 290.

Milivojević A.D., Ćorović M.M., Simović M.B., Banjanac K.M., Blagojević S.N., Pjanović R.V., Bezbradica D.I. (2019) Novel approach for flavonoid esters production: Statistically optimized enzymatic synthesis using natural oils and application in cosmetics. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58. — P. 40–49.

Yessimova O., Kumargaliyeva S., Kerimkulova M.Zh., Mussabekov K., Toktarbay Z. (2020) Wetting ability of a phytopreparation and their associates with polyelectrolytes. *Rasayan Journal of Chemistry*, 13. — P. 481–487.

Yessimova O., Rakhymbay A., Kumargaliyeva S., Yessimbekova R., Toktarbay Z. (2022) Preparation and research of cosmetic products based on domestic raw materials. *Materials Today: Proceedings*.

Yu J., Wang G., Jiang N. (2020) Study on the repairing effect of cosmetics containing *Artemisia annua* on sensitive skin. *Journal of Cosmetics, Dermatological Sciences and Applications*, 10. — P. 8–19.

References

Burasheva G.Sh. (1981) Polifenoly verblyuzhey kolyuchki: avtoreferat dissertatsii na soiskanie uchenoy stepeni kandidata khimicheskikh nauk [Polyphenols of camel thorn: Author's abstract of the PhD thesis]. Almaty. — P. 34 (in Russian)

Burtseva E.V., Kuldyrkaeva E.V., Mekhonoshina I.S., Timasheva L.A., Pekhova O.A., Katsev A.M. (2023) Izuchenie khimicheskogo sostava i biologicheskogo deystviya gidrolata *Hyssopus officinalis* L. [Study of the chemical composition and biological activity of *Hyssopus officinalis* L. hydrolate]. *Medical & Pharmaceutical Journal «Pulse»*, 25(3). (in Russian)

Yargaeva V.A., Senicheva L.V. (2003). *Dispersnye sistemy: uchebnoe posobie* [Disperse systems: Textbook]. Khabarovsk: Izd-vo Khabar. gos. tekhn. un-ta, 135 s. (in Russian)

Yesimova O.A. (2020). *Kolloidno-khimicheskie svoystva kompozitsionnykh PAV s fitoperatorom: vzaimodeystvie fitopreparata VK s metatsidom i dodecilsulfatom natriya* [Colloid-chemical properties of composite surfactants with phytocomponent]. — Almaty. (in Russian)

Metody opredeleniya poverkhnostnogo natyazheniya: metodicheskie ukazaniya k laboratornomu praktikumu po kursu «Poverkhnostnye yavleniya i dispersnye sistemy» (2013). Moskva: RGU nefti i gaza im. I.M. Gubkina. — 48 p. (in Russian)

Opreделение poverkhnostnogo natyazheniya rastvorov PAV na granitse gaz–zhidkost' na Tenziometre K6 (metod Dyui Nui) (2013). Moskva: RGU nefti i gaza im. I.M. Gubkina. — 27 p. (in Russian)

Aćimović M.G., Tešević V.V., Smiljanić K.T., Cvetković M.T., Stanković J.M., Kiprović B.M., Sikora V.S. (2020). Hydrolates – by-products of essential oil distillation: Chemical composition, biological activity and potential uses. *Advances in Technology*, 9(2). — P. 54–70 (in English)

Dragicevich A., Kitich D., Stanojevich L., Nesich I., Pavlovich D. (2024). Antioxidant activity of hydrolate obtained from the aerial part of sweet basil *Ocimum basilicum* L. *Acta Medica Medianae*, 4. (in English)

Harhaun R., Kunik O., Saribekova D., Lazzara G. (2020). Biologically active properties of plant extracts in cosmetic emulsions. *Microchemical Journal*, 154. — P. 104543. (in English)

Luengo G.S., Fameau A.L., Léonforte F., Greaves A.J. (2021). Surface science of cosmetic substrates, cleansing actives and formulations. *Colloid Interface Science*, 290. (in English)

Milivojević A.D., Ćorović M.M., Simović M.B., Banjanac K.M., Blagojević S.N., Pjanović R.V., Bezbradica D.I. (2019). Novel approach for flavonoid esters production: Statistically optimized enzymatic synthesis using natural oils and application in cosmetics. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58. — P. 40–49. (in English)

Yessimova O., Kumargaliyeva S., Kerimkulova M.Zh., Mussabekov K., Toktarbay Z. (2020). Wetting ability of a phytopreparation and their associates with polyelectrolytes. *Rasayan Journal of Chemistry*, 13. — P. 481–487. (in English)

Yessimova O., Rakhymbay A., Kumargaliyeva S., Yessimbekova R., Toktarbay Z. (2022). Preparation and research of cosmetic products based on domestic raw materials. *Materials Today: Proceedings*. (in English)

Yu J., Wang G., Jiang N. (2020). Study on the repairing effect of cosmetics containing *Artemisia annua* on sensitive skin. *Journal of Cosmetics, Dermatological Sciences and Applications*, 10. — P. 8–19. (in English)

© R.N. Zhanaliyeva¹, B. Imangaliyeva^{2*}, B. Torsykbaeva³, R. Kozykeyeva⁴,
R. Khojanazarov⁵, 2025.

¹Central Asian Innovation University, Shymkent, Kazakhstan;

²Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan;

³Astana Medical University, Astana, Kazakhstan;

⁴Zh.Tashenov University, Shymkent, Kazakhstan;

⁵"Secondary school 68", Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: nur_b_70@mail.ru

CATALYTIC HYDROGENATION OF CARBONYL-CONTAINING COMPOUNDS: MECHANISM, CATALYSTS AND APPLICATION

R.N. Zhanaliyeva — Central Asian Innovation University, Candidate of Chemical Sciences, Professor, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: rashida_zhanalie@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2171-2707>;

Bazarkhan Imangaliyeva — K.Zhubanov Aktobe Regional State University, Candidate of Pedagogical Sciences, Professor, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: nur_70_@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Torsykbaeva Bigamila — Associate Professor of Astana Medical University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: maha-1505@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-6999-3900>

R. Kozykeyeva — Zh.Tashenov University, Candidate of Technical Science, docent, Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: kozykeeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5409-3754>;

R. Khojanazarov — "Secondary school 68", teacher of chemistry, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: rashid_khodzhanazarov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-9132-4504>.

Abstract. These include aldehydes, ketones, carboxylic acids and their derivatives. The chemical properties are determined by the electronic structure of the group ($>C=O$), which increases its reactivity and allows for a variety of transformations. Catalytic hydrogenation converts carbonyl-containing compounds into alcohols or derivatives by reduction with hydrogen in the presence of catalysts. Their activity and selectivity determine the reaction rate, product yield, and cost-effectiveness of the process. This reaction is widely used in chemistry and industry. The study of the mechanism and the creation of new catalysts are relevant areas of modern research. The work is devoted to the consideration of the mechanism of catalytic hydrogenation of carbonyl compounds, the catalysts used and practical applications. The catalytic reduction of carbonyls with molecular hydrogen plays a key role in organic synthesis. The results of a study of

the hydrogenation of aldehydes and ketones using transition metals as catalysts are presented. The influence of temperature, pressure, and the nature of the catalyst on the reaction rate and selectivity is considered. A comparative analysis of the activity of Ni, Pd, and Re-catalysts has been performed. Experiments have confirmed the possibility of effective conversion of the carbonyl group into the corresponding alcohols under mild conditions.

Keywords: hydrogenation, hydrogen, carbonyl compounds, aldehydes, ketones, catalysts, alcohols

© Р.Н. Жаналиева¹, Б. Имангалиева^{2*}, Б.Б. Торсыкбаева³, Р. Козыкеева⁴,
Р.Э. Ходжаназаров⁵, 2025.

¹Орталық Азия инновациялық университеті, Шымкент, Қазақстан;

²Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан;

³Астана медициналық университеті, Астана, Қазақстан;

⁴Ж.Тәшенов атындағы университеті, Шымкент, Қазақстан;

⁵«№68 жалпы орта білім беретін мектебі», Шымкент, Қазақстан.

E-mail: nur_b_70@mail.ru

ҚҰРАМЫНДА КАРБОНИЛ БАР ҚОСЫЛЫСТАРДЫҢ КАТАЛИТИКАЛЫҚ ГИДРОГЕНИЗАЦИЯСЫ: МЕХАНИЗМІ, КАТАЛИЗАТОРЛАРЫ ЖӘНЕ ҚОЛДАНЫЛУЫ

Р.Н. Жаналиева — химия ғылымдарының кандидаты, профессор, Орталық Азия инновациялық университеті, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: rashida_zhanalie@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2171-2707>;

Базархан Имангалиева — педагогика ғылымдарының кандидаты, профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: nur_b_70@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Торсыкбаева Бигамила — доцент, Астана медициналық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: maha-1505@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-6999-3900>;

Р. Козыкеева — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, Ж.Тәшенов атындағы университет, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: kozykeeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5409-3754>;

Р.Э. Ходжаназаров — химия пәні мұғалімі, «№68 жалпы орта білім беретін мектебі», Шымкент, Қазақстан,

E-mail: rashid_khodzhanazarov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-9132-4504>.

Аннотация. Құрамында карбонил тобы бар қосылыстар органикалық химиядағы ең көп таралған және маңызды топтардың бірі болып табылады. Бұл қосылыстарға альдегидтер, кетондар, карбон қышқылдары, күрделі эфирлер және олардың туындылары жатады. Олардың химиялық қасиеттері карбонил тобының электронды құрылымына негізделген ($>C=O$), бұл топтың реакцияға сезімталдығын арттырады және әртүрлі химиялық түрлендірулерге мүмкіндік береді. Каталитикалық гидрогенизация процесі құрамында карбонил бар қосылыстарды сутегімен тотықсыздану арқылы сәйкесінше спирттерге немесе басқа туындыларға айналдыруға мүмкіндік береді. Каталитикалық процесс



арнайы катализаторлардың қатысуымен жүреді және олардың тиімділігі мен селективтілігі реакция жылдамдығына, өнімнің шығуына және экономикалық тиімділігіне тікелей әсер етеді. Қазіргі уақытта каталитикалық гидрлеу процесі заманауи химия мен өнеркәсіпте кеңінен қолданыс табады. Бұл реакцияның механизмін терең түсіну және жаңа тиімді катализаторларды әзірлеу қазіргі заманғы зерттеулер мен әзірлемелердің негізгі бағыттарының бірі болып табылады. Бұл жұмыс карбонил қосылыстарының каталитикалық гидрлеу процесінің жалпы механизмін, қолданылатын катализаторлардың түрлерін және осы реакцияның практикалық қолдану саласын қарастыруға арналған. Мақалада катализатор ретінде ауыспалы металдарды қолдана отырып, альдегидтер мен кетондар сияқты құрамында карбонил тобы бар қосылыстардың каталитикалық гидрленуін зерттеу нәтижелері келтірілген. Пайдаланған катализатордың температурасының, қысымының және табиғатының реакция жылдамдығы мен селективтілігіне әсері зерттелді. Никель Ni, палладий Pd және рений Re-катализаторлардың белсенділігіне жұмыс барысында салыстырмалы талдау жүргізілді. Алынған эксперименттік деректер органикалық қосылыстардағы карбонил тобын жұмсақ жағдайда тиісті спирттерге тиімді түрлендіру мүмкіндігін растайды.

Түйін сөздер: гидрогенизация, сутегі, карбонил қосылыстары, альдегидтер, кетондар, катализаторлар, спирттер

© Р.Н. Жаналиева¹, Б. Имангалиева^{2*}, Б.Б. Торсыкбаева³, Р. Козыкеева⁴, Р.Э. Ходжаназаров⁵, 2025.

¹Центрально-Азиатский инновационный университет, Шымкент, Казахстан;

² Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актөбе, Казахстан;

³Медицинский университет Астана, Астана, Казахстан;

⁴Университет имени Ж. Тәшенова, Шымкент, Казахстан;

⁵Средняя школа №68, Шымкент, Казахстан.

E-mail: nur_b_70@mail.ru

КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ГИДРИРОВАНИЕ КАРБОНИЛСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ: МЕХАНИЗМ, КАТАЛИЗАТОРЫ И ПРИМЕНЕНИЕ

Р.Н. Жаналиева — кандидат химических наук, профессор, Центрально-Азиатский инновационный университет Шымкент, Казахстан,

E-mail: rashida_zhanalie@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2171-2707>;

Базархан Имангалиева — кандидат педагогических наук, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актөбе, Казахстан,

E-mail: nur_b_70@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Торсыкбаева Бигамла — ассоциированный профессор Астанинского медицинского университета, Астана, Казахстан,

E-mail: maha-1505@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-6999-3900>;

Р. Козыкеева — Университет имени Ж.Тәшенова, Казахстан, кандидат технических наук, доцент, Шымкент, Казахстан,

E-mail: kozykeeva@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5409-3754>;

Р.Э.Ходжаназаров — учитель химии, Средняя школа № 68 «Жибек Жолы» города Шымкента, Шымкент, Казахстан,
E-mail: rashid_khodzhanazarov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-9132-4504>.

Аннотация. Соединения, содержащие карбонильную группу, являются одной из наиболее распространенных и важных групп в органической химии. Эти соединения включают альдегиды, кетоны, карбоновые кислоты и их производные. Их химические свойства основаны на электронной структуре карбонильной группы ($>C=O$), которая увеличивает восприимчивость группы к реакции и позволяет проводить различные химические преобразования. Процесс каталитического гидрирования позволяет превращать карбонилсодержащие соединения в спирты или другие производные соответственно путем восстановления водородом. Процесс происходит в присутствии специальных катализаторов, эффективность и избирательность которых напрямую влияют на скорость протекания реакции, выход продукта и экономическую эффективность. Каталитическое гидрирование широко используется в современной химии и промышленности. Глубокое понимание механизма этой реакции и разработка новых эффективных катализаторов является одним из основных направлений современных исследований и разработок. Настоящая работа посвящена рассмотрению общего механизма каталитического гидрирования карбонильных соединений, типов используемых катализаторов и области практического применения этой реакции. Каталитическое восстановление карбонильных соединений с использованием молекулярного водорода — важная реакция в органическом синтезе. В статье представлены результаты исследования каталитического гидрирования карбонилсодержащих соединений, таких как альдегиды и кетоны, с использованием переходных металлов в качестве катализаторов. Изучено влияние температуры, давления и природы катализатора на скорость и селективность реакции. Проведён сравнительный анализ активности Ni, Pd и Re-катализаторов. Экспериментальные данные подтверждают возможность эффективного преобразования карбонильной группы в соответствующие спирты в мягких условиях.

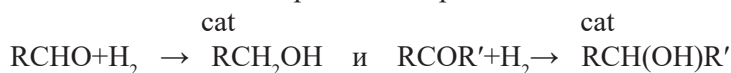
Ключевые слова: гидрирование, водород, карбонильные соединения, альдегиды, кетоны, катализаторы, спирты

Введение. Карбонилсодержащие соединения, такие как альдегиды и кетоны, представляют собой важный класс органических веществ, широко используемых в органическом синтезе, фармацевтике, производстве ароматических соединений и полимеров. Одним из наиболее эффективных и экологически безопасных методов их превращения является каталитическое гидрирование — восстановление до соответствующих спиртов в присутствии водорода и катализатора (Bond, 1987). Каталитическое гидрирование — это один из ключевых методов восстановления органических соединений, при котором атомы водорода присоединяются к карбонильной группе $>C=O$ альдегидов и кетонов с образованием соответствующих спиртов. Благодаря простоте, высокой атомной эффективности и возможности масштабирования, каталитическое восстановление занимает центральное место в органическом синтезе. Использование молекулярного водорода в присутствии

катализаторов позволяет осуществлять мягкие и направленные превращения альдегидов и кетонов в соответствующие первичные и вторичные спирты.

Цель работы - изучение каталитического гидрирования карбонилсодержащих соединений: механизмов реакций, типов катализаторов и их эффективности.

Процесс каталитического гидрирования карбонилсодержащих соединений термодинамически выгоден. Альдегиды и кетоны обладают высокой реакционной способностью по отношению к водороду в присутствии катализатора (Hollmann et al, 2010). Реакция протекает в присутствии гетерогенных или гомогенных катализаторов и используется как в лабораторной практике, так и в промышленном синтезе. Наиболее широко применяется гидрирование альдегидов в спирты первого порядка и кетонов — во вторичные спирты:



Гидрирование карбонильных групп протекает по механизму адсорбции молекул на поверхности металлического катализатора, активации водорода и его последовательной передачи на карбонильный атом кислорода и углерода. Гидрирование карбонильных соединений может осуществляться с участием как гомогенных, так и гетерогенных катализаторов. Типичные металлы-катализаторы включают Ni, Pd, Pt, Cu, а также сплавы на их основе. Наиболее распространёнными гетерогенными катализаторами являются Ni (никель Ренея), обладающий высокой активностью, особенно в водной среде. Для более мягких условий используются палладий и платина на носителях Pd/C, Pt/C, таких как активированный уголь или алюминий оксид, а также медные и кобальтовые катализаторы. Например, никель Ренея эффективен при низких давлениях водорода и температурах до 100 °С (Kadyrov et al, 2003).

Катализаторы:

1. Реней-никель (Raney Ni) — активный гетерогенный катализатор, особенно для альдегидов;
2. Палладий на угле (Pd/C) — эффективен при мягких условиях;
3. Платина (Pt/C или PtO₂) — высокоселективна, применяется для сложных ароматических соединений;
4. Медь-хромовые катализаторы (Cu-Cr₂O₄) — применяются в промышленности;
5. Наноструктурированные материалы и металлы на оксидных носителях — используются в современных исследованиях.

В таблице 1 приведены виды катализаторов и их свойства

Таблица 1-Катализаторы и их свойства

Катализатор	Температура (°С)	Давление (атм)	Особенности
Raney-Ni	50–120	10–30	Высокая активность, дешёвый
Pd/C	25–80	1–10	Мягкие условия, высокая селективность
PtO ₂	20–100	1–20	Ароматические соединения
Cu-Cr ₂ O ₄	150–200	10–50	Промышленное применение

Материалы и методы. Катализаторы на основе благородных металлов обеспечивают высокую селективность, но значительно дороже никелевых аналогов. В свою очередь, никель активен в условиях повышенного давления и температуры, часто используется для восстановления карбонильных групп в биомассе и синтезе растворителей. В последние десятилетия активное развитие получили модифицированные и наноструктурированные катализаторы, например: Cu-Zn-Al, Pd/CeO₂ и Ru/TiO₂, обеспечивающие высокую селективность при сниженных температурах и давлениях (Kim et al, 2020).

Гомогенные комплексы переходных металлов, таких как Ru, Rh, Ir и Os, также демонстрируют высокую активность в гидрировании карбонилсодержащих соединений. Например, комплекс RuHCl(PPh₃)₃ (катализатор Вилькинсона) часто используется в мягких условиях (Lichen et al, 2018). Преимуществами каталитического гидрирования являются высокая атомная экономичность, экологичность (используется водород, не оставляющий побочных продуктов), а также возможность масштабирования процесса. Однако метод требует строгого контроля условий: давления, температуры, времени реакции и выбора катализатора. Кроме того, кетоны в целом менее реакционноспособны, чем альдегиды, что требует использования более активных катализаторов (March et al, 2014).

Современные исследования направлены на:

1-использование гетерогенных катализаторов в условиях низких температур (March et al, 2014);

2-гидрирование в поточных микрореакторах (Nishimura et al, 2001);

3-использование водородных доноров (формиата, спиртов) в условиях так называемого «переносного» гидрирования (Smith et al, 2020). Интерес также вызывают биокаталитические методы, в частности, использование ферментов алкогольдегидрогеназ в мягких условиях (Takanabe, 2017).

Скорость и селективность гидрирования существенно зависят от следующих факторов: pH среды (в случае водных растворов); температуры и давления водорода; наличия растворителей или промоторов (например, кислот или оснований); природы заместителей при карбонильной группе. Например, гидрирование в присутствии изопропанола как растворителя способствует улучшению растворимости водорода и, соответственно, увеличению скорости реакции (Charushin et al, 2020).

Современные тенденции. Современные исследования направлены на разработку устойчивых и недорогих катализаторов, особенно на основе дешёвых металлов, таких как Fe, Co и Mn (Saginayev et al, 2022). Пример — каталитическая система Mn-PNN, продемонстрировавшая высокую эффективность при гидрировании ароматических кетонов (Wilkinson, 1965). В таблице 2 приведены условия реакции

Таблица 2 - Условия проведения реакции

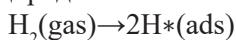
№	Параметр	Диапазон значений
1	Температура	25–150 °С
2	Давление водорода	1–100 атм

3	Растворитель	Вода, этанол, метанол и др.
4	Время реакции	От 30 минут до 4 часов
5	Атмосфера	Инертная или H_2 (газовая фаза)

Каталитическое гидрирование карбонильных соединений (альдегидов и кетонов) представляет собой важную реакцию в органическом синтезе, ведущую к образованию соответствующих спиртов. Процесс протекает в присутствии гетерогенного катализатора (чаще всего металлы VIII группы: Ni, Pt, Pd, Ru и др.) и включает несколько стадий:

Процесс гидрирования включает несколько стадий:

1. Диссоциация молекулы водорода на поверхности катализатора. Молекула H_2 адсорбируется на активном центре катализатора и диссоциирует на два атомарных водорода:



Данный процесс возможен благодаря присутствию свободных d-орбиталей у переходных металлов, что обеспечивает активацию молекулы водорода. Например, никель и платина эффективно катализируют этот этап благодаря высокому сродству к водороду.

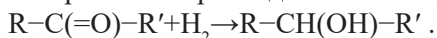
2. Адсорбция карбонильного соединения

Карбонильное соединение (альдегид или кетон) адсорбируется на поверхности катализатора посредством π -связывания с карбонильной группой. Карбонильный кислород взаимодействует с поверхностью, при этом частично ослабляется связь $C=O$.



3. Передача атомов водорода. Атомы водорода, образовавшиеся при диссоциации H_2 , мигрируют по поверхности и передаются к атому углерода и кислорода карбонильной группы: -Первый атом водорода восстанавливает карбонильный кислород до гидроксильной группы.

-Второй атом присоединяется к карбонильному углероду, образуя спирт:

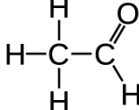
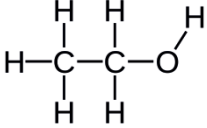
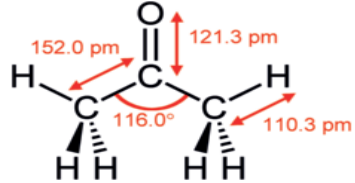
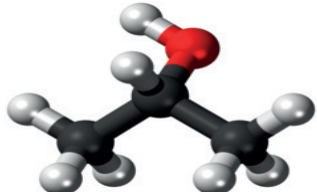
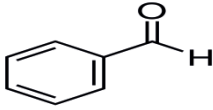
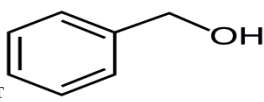
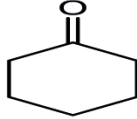
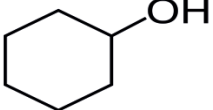


4. Десорбция продукта После восстановления, полученный спирт теряет связь с поверхностью катализатора и десорбируется в реакционную среду:



Дальнейшее накопление продукта способствует вытеснению вновь образовавшегося спирта из активной зоны, освобождая катализатор для следующего цикла. Таким образом, реакция протекает по принципу поверхностной каталитической активации. В таблице 3 приведены примеры реакций гидрирования

Таблица 3-Примеры гидрирования

№	Исходное соединение	Продукт восстановления
1	Ацетальдегид 	Этанол 
2	Ацетон (CH_3COCH_3) 	Изопропанол ($\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$) 
3	Бензальдегид 	Бензиловый спирт 
4	Циклогексанон 	Циклогексанол 

Для проведения экспериментов использовались следующие химические реагенты:

1. Субстраты: бензальдегид ($\text{C}_6\text{H}_5\text{CHO}$), ацетофенон ($\text{C}_6\text{H}_5\text{COCH}_3$)

2. Катализаторы: Ni/SiO_2 ; Pd/C (5%); $\text{Cu-Zn}/\text{Al}_2\text{O}_3$; $\text{Re}/\text{Al}_2\text{O}_3$.

3. Растворитель: этанол

4. Оборудование: автоклав Рагг, рН-метр, ИК-спектрометр, УФ-спектрофотометр

Каталитическое гидрирование проводилось в герметичном стеклянном автоклаве объёмом 100 мл, снабжённом магнитной мешалкой и термометром. Автоклав был установлен в термостатируемую систему, обеспечивающую поддержание постоянной температуры с точностью $\pm 0,5$ °С.

Подготовка реакционной смеси. В реактор загружали 100 мл этанольного раствора субстрата (0,5 моль/л). В качестве субстратов использовались бензальдегид и ацетофенон.

Внесение катализатора. В реакционную смесь добавляли навес катализатора (например, 0,1 г 5% Pd/C или другой катализатор согласно эксперименту).

Герметизация и удаление воздуха. Автоклав герметизировали и продували азотом в течение 5 минут для полного удаления кислорода и предотвращения побочных реакций.

Насыщение водородом. После продувки систему насыщали водородом при заданном давлении (1–5 атм).

Проведение реакции. Реакционную смесь перемешивали при температуре 25–60 °С в течение 10–180 минут (в зависимости от условий конкретного опыта).

По окончании процесса автоклав охлаждали до комнатной температуры, смесь фильтровали через бумажный фильтр для отделения катализатора и анализировали методами физико-химического контроля:

Газо-жидкостная хроматография (ГЖХ) — для определения степени превращения и выхода спиртов;

pH-метр — для контроля кислотности/щелочности реакционной среды в процессе гидрирования;

ИК-спектрометрия — для подтверждения исчезновения полосы валентного колебания карбонильной группы (C=O) и появления полос, характерных для спиртов (O–H);

УФ-спектрофотометрия — для регистрации изменения электронных переходов в ароматических субстратах (снижение интенсивности полосы поглощения, связанной с карбонильной группой).

Таким образом, совокупность методов позволила как количественно определить степень превращения, так и подтвердить образование целевых продуктов (бензилового спирта и изопропанола).

Определяли степень превращения (%) по убыли исходного соединения и накоплению спирта.

Расчёт степени превращения

Степень превращения (α , %) рассчитывали по формуле:

$$\alpha = ((C_0 - C_t) / C_0) \times 100\%$$

где:

- C_0 — начальная концентрация карбонилсодержащего соединения, моль/л;

- C_t — концентрация карбонилсодержащего соединения в момент времени t , моль/л.

Анализ концентраций проводился с помощью калибровочной кривой, построенной по стандартным растворам исследуемого вещества. Повторность измерений обеспечивалась трехкратным повторением каждой серии опыта. Погрешность не превышала 3%.

Результаты и обсуждение. В ходе экспериментов была исследована каталитическая активность различных катализаторов при гидрировании карбонилсодержащих соединений (в частности, альдегидов и кетонов). Изучалась зависимость степени превращения от времени и сравнивалась активность катализаторов. Экспериментальные данные показали, что при температуре 60 °С и давлении водорода 1,5 атм наибольшая скорость гидрирования наблюдалась на катализаторе Pd/C — уже через 15 минут степень превращения достигала 98%, тогда как Ni/SiO₂ демонстрировал эффективность 96 % лишь через 45 минут. Катализаторы на основе меди и рения проявили среднюю активность, но более высокую селективность к первичным спиртам (таблица 4).

Таблица 4-Зависимость степени превращения от времени

Катализатор	Время 50% превращения (мин)	Конверсия за 90 мин (%)	Селективность к спирту (%)
Pd/C	15	98	92
Ni/SiO ₂	45	96	85
Cu-Zn/Al ₂ O ₃	35	88	94
Re/Al ₂ O ₃	30	90	95

При исследовании гидрирования бензальдегида установлено, что основным продуктом во всех случаях является бензиловый спирт (таблица 5).

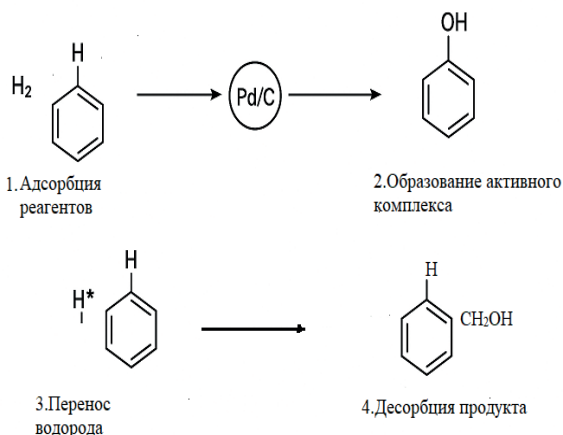
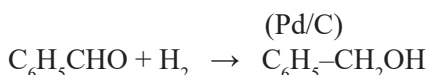
Таблица 5- Конечная степень превращения бензальдегида при разных катализаторах (через 45 мин)

Катализатор	Степень превращения, %	Основной продукт реакции
Ni/SiO ₂	96	Бензиловый спирт
Pd/C	98	Бензиловый спирт
Re/Al ₂ O ₃	90	Бензиловый спирт

Механизм гидрирования на Pd/C

Каталитическое восстановление бензальдегида на Pd/C протекает по классическому пути: диссоциация молекулярного водорода на поверхности палладия, адсорбция карбонильного соединения, последовательный перенос атомов водорода на кислород и углерод, десорбция продукта. Образовавшийся бензиловый спирт (C₆H₅-CH₂OH) десорбируется с поверхности катализатора

Итого:



Механизм гидрирования бензальдегида на Pd/C

Катализатор Pd/C обладает хорошей активностью, обеспечивая быструю и глубокую степень гидрирования.

Преимущества метода.

1. Высокая селективность по отношению к функциональным группам;
2. Экологичность — используется водород вместо токсичных реагентов;
3. Минимизация побочных продуктов;
4. Подходит для массового производства спиртов, ароматических соединений, фарм субстанций.

Зависимость степени превращения от времени — показывает, как увеличивается степень превращения карбонилсодержащих соединений по мере увеличения времени реакции. Сравнение активности катализаторов — визуализирует эффективность различных катализаторов при гидрировании карбонильных соединений. Данные (таблица 6) показывают, что Pd/C обеспечивает практически полное превращение ацетона уже за 40 минут. Катализатор Ni/SiO₂ проявляет высокую активность, но требует большего времени для достижения сопоставимых результатов. Re/Al₂O₃ демонстрирует наименьшую скорость реакции, но отличается высокой селективностью.

Таблица 6-Зависимость степени превращения ацетона от времени при использовании различных катализаторов

№	Время, мин	Ni/SiO ₂ , %	Pd/C, %	Re/Al ₂ O ₃ , %
	10	28	35	22
	20	51	67	44
	30	73	91	66
	40	85	97	78
	60	90	99	85

Сравнение активности катализаторов — визуализирует эффективность различных катализаторов при гидрировании карбонильных соединений.

Из приведённых данных видно, что наибольшей каталитической активностью обладает палладиевый катализатор (Pd/C), достигающий практически полной степени превращения за 40 минут. Никельсодержащий катализатор показывает чуть меньшую активность, а ренийсодержащий катализатор — наименьшую среди исследованных.

Высокая активность Pd/C объясняется высокой дисперсностью палладия и его способностью эффективно активировать молекулы водорода. Ni/SiO₂ демонстрирует высокую активность при более длительном времени реакции, что связано с постепенной диссоциацией H₂ на поверхности никеля. Продукты реакции проанализированы методом газовой хроматографии. Основным продуктом во всех случаях был соответствующий спирт (из ацетона – изопропанол, из бензальдегида – бензиловый спирт), что подтверждает протекание полного восстановления карбонильной группы. В нижеследующем рисунке показана зависимость степени превращения ацетона от времени при каталитическом гидрировании на различных катализаторах.

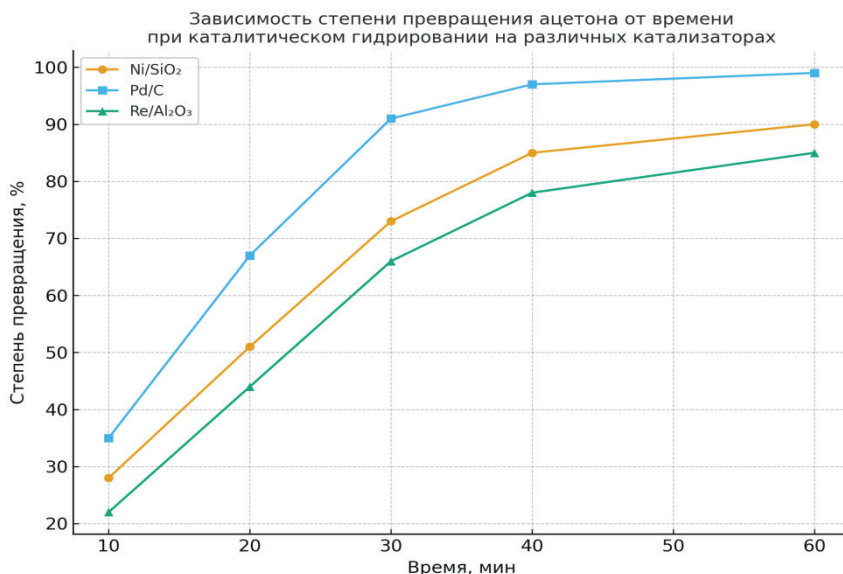


Рисунок 1. Зависимость степени превращения ацетона от времени при каталитическом гидрировании на различных катализаторах (Ni/SiO₂, Pd/C, Re/Al₂O₃)

Выводы. Каталитическое гидрирование карбонилсодержащих соединений охватывает широкий спектр фундаментальных и прикладных направлений в химии, фармацевтике промышленности и экологии. Основные направления практического использования можно выделить следующим образом:

1. Органический синтез: Селективное восстановление альдегидов и кетонов до соответствующих спиртов — важный этап в синтезе различных органических соединений.

2. Фармацевтическая промышленность: в производстве лекарственных препаратов (анальгетики, антибиотики, антидепрессанты), где требуется восстановление функциональных групп без нарушения других чувствительных участков молекулы.

3. Производство ароматических и алифатических спиртов: Массовое производство бензилового спирта, изопропанола, этанола и других спиртов, применяемых в качестве растворителей, антисептиков и промежуточных продуктов.

4. Нефтехимическая и нефтеперерабатывающая промышленность: Обезвреживание карбонильных примесей для повышения стабильности топлива.

5. Ароматизация и пищевая промышленность: Синтез ароматизаторов и вкусовых добавок путём селективного восстановления карбонильных групп.

6. Производство полимеров и мономеров: восстановление формальдегида и ацетона до спиртов для получения поликонденсационных полимеров.

7. Экологическая химия и "зелёные" технологии: для обезвреживания карбонилсодержащих загрязнителей (например, формальдегид, ацетон) в промышленных выбросах.

8. Фундаментальные исследования: Изучение механизмов каталитического гидрирования позволяет разрабатывать новые высокоселективные, многофункциональные катализаторы (гомогенные, гетерогенные, биокатализаторы).

Заключение. Каталитическое гидрирование карбонилсодержащих соединений остаётся одним из ключевых процессов в органическом синтезе. Каталитическое гидрирование является эффективным методом восстановления карбонильных соединений. Процесс каталитического гидрирования карбонильных соединений — это многостадийная поверхностная реакция, чувствительная к природе катализатора, температуре, давлению и растворителю.

Проведённые исследования показали, что эффективность каталитического гидрирования карбонилсодержащих соединений существенно зависит от природы катализатора. Среди изученных систем наибольшую активность продемонстрировал палладиевый катализатор Pd/C, обеспечивающий практически полное превращение субстрата за короткое время. Катализаторы на основе никеля и рения проявили меньшую активность, однако отличались высокой селективностью.

Таким образом, палладиевый катализатор Pd/C является наиболее перспективным для применения в процессах каталитического восстановления карбонильных соединений благодаря сочетанию высокой активности, селективности и экологичности метода.

Литература

- Коротченко В.Н., Ненайденко В.Г., Баленкова Е.С., Шастин А.В. (2004) Олефинирование карбонильных соединений. Новейшие классические методы. Успехи химии, 73(10).
- Кузнецов В.И. (2017) Гетерогенный катализ в органическом синтезе, М.: Наука. — 296 с.
- Чарушин В.Н., Трифионов Р.Е. (2020) Гомогенный катализ: руководство для студентов. Екатеринбург: УрО РАН. — 152 с.
- Bond G.C. (1987) Heterogeneous catalysis: principles and applications. Oxford University Press.
- Elangovan S., et al. (2016) Efficient and selective hydrogenation of ketones catalyzed by manganese pincer complexes. Science, 354. — P. 102–106.
- Gunanathan C., Milstein D. (2013) Science, 341, 1229712.
- Hartman R.L., McMullen J.P. (2011) Angew. Chem. Int. Ed., 50. — P. 7502–7519.
- Hollmann F., Arends I.W.C.E., et al. (2010) Green Chem., 12. — P. 228–232.
- Kadyrov R., Riermeier T.H. (2003) Highly active ruthenium catalysts for asymmetric hydrogenation. Angew. Chem. Int. Ed., 42. — P. 5472–5474.
- Kim J., Lee H. (2020) Catal. Today, 355. — P. 305–316.
- Liu L., Corma A. (2018) Metal catalysts for heterogeneous catalysis: from single atoms to nanoclusters and nanoparticles. Chem. Rev., 118. — P. 4981–5079.
- Liu S., Chen M., et al. (2022) Green Chem., 24. — P. 1150–1161.
- March J. (2014) Advanced organic chemistry. Wiley.
- Nishimura S. (2001) Handbook of heterogeneous catalytic hydrogenation for organic synthesis. Wiley.
- Rylander P.N. (1979) Catalytic hydrogenation in organic syntheses. Academic Press.
- Rylander P.N. (1985) Hydrogenation methods. Academic Press.
- Saginayev A., Dosmurzina E., Apendina A., Dossanova B., Imangaliyeva B. (2022) Development of individual approaches to the use of the gasoline fraction as a raw material for the process of hydrocatalytic isomerization. Materials Science for Energy Technologies, 6. — P. 158–165. <https://doi.org/10.1016/j.mset.2022.12.008>
- Smith M. B., March J. (2020) March's advanced organic chemistry. 8th ed. Wiley.

Takanabe K. (2017) *Catalysis Surveys from Asia*, 21. — P. 1–12.

Wilkinson G. (1965) Homogeneous hydrogenation using rhodium complexes. *J. Chem. Soc.*

Wang X.-G., Ajisafe M.P., Fayad E., Katouah H.A., Qin H.-L. (2024) A protocol for hydrogenation of aldehydes and ketones to alcohols in aqueous media at room temperature in high yields and purity. *Organic & Biomolecular Chemistry*. The Royal Society of Chemistry.

References

Charushin, V. N., & Trifonov, R. E. (2020) *Gomogennyj kataliz: rukovodstvo dlja studentov* [Homogeneous catalysis: A guide for students], Ekaterinburg: UrO RAN. — 152 p. (in Russian)

Korotchenko V.N., Nenajdenko V.G., Balenkova E.S., & Shastin A.V. (2004) Olefinirovanie karbonilnyh soedinenij. Novejšhie klassicheskie metody [Olefination of carbonyl compounds. The newest classical methods]. *Uspehi Khimii*, 73(10) (in Russian)

Kuznetsov V. I. (2017) *Geterogennyj kataliz v organicheskom sinteze* [Heterogeneous catalysis in organic synthesis], Moscow: Nauka. — 296 p. (in Russian)

Bond G.C. (1987) *Heterogeneous catalysis: principles and applications*. Oxford University Press. (in English)

Elangovan S., et al. (2016) Efficient and selective hydrogenation of ketones catalyzed by manganese pincer complexes. *Science*, 354. — P. 102–106. (in English)

Gunanathan C., & Milstein D. (2013) *Science*, 341, 1229712. (in English)

Hartman R.L., & McMullen J.P. (2011) *Angew. Chem. Int. Ed.*, 50. — P. 7502–7519. (in English)

Hollmann F., Arends I.W.C.E., et al. (2010) *Green Chem.*, 12. — P. 228–232. (in English)

Kadyrov R., & Riermeier T.H. (2003) Highly active ruthenium catalysts for asymmetric hydrogenation. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 42. — P. 5472–5474. (in English)

Kim J., & Lee H. (2020) *Catal. Today*, 355. — P. 305–316. (in English)

Liu L., & Corma A. (2018) Metal catalysts for heterogeneous catalysis: from single atoms to nanoclusters and nanoparticles. *Chem. Rev.*, 118. — P. 4981–5079. (in English)

Liu, S., Chen, M., et al. (2022) *Green Chem.*, 24. — P. 1150–1161 (in English)

March J. (2014) *Advanced organic chemistry*. Wiley (in English)

Nishimura S. (2001) *Handbook of heterogeneous catalytic hydrogenation for organic synthesis*. Wiley (in English)

Rylander P.N. (1979) *Catalytic hydrogenation in organic syntheses*. Academic Press. (in English)

Rylander P.N. (1985) *Hydrogenation methods*. Academic Press. (in English)

Saginayev A., Dosmurzina E., Apendina A., Dossanova B., & Imangaliyeva B. (2022) Development of individual approaches to the use of the gasoline fraction as a raw material for the process of hydrocatalytic isomerization. *Materials Science for Energy Technologies*, 6. — P. 158–165. <https://doi.org/10.1016/j.mset.2022.12.008> (in English)

Smith M.B., & March J. (2020) *March's advanced organic chemistry*. 8th ed. Wiley (in English)

Takanabe K. (2017) *Catalysis Surveys from Asia*, 21. — P. 1–12. (in English)

Wilkinson G. (1965) Homogeneous hydrogenation using rhodium complexes. *J. Chem. Soc.* (in English)

Wang X.-G., Ajisafe M.P., Fayad E., Katouah H.A., & Qin H.-L. (2024) A protocol for hydrogenation of aldehydes and ketones to alcohols in aqueous media at room temperature in high yields and purity. *Organic & Biomolecular Chemistry*. The Royal Society of Chemistry (in English)

© M.A. Zhumash¹, K. Tilegen^{1,2}, Y.A. Boleubayev¹, S.S. Itkulova^{1,2*}, 2025.

¹D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis, and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan;

²Kazakh-British Technical University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: s.itkulova@ifce.kz

DRY REFORMING OF METHANE OVER THE HIGH ACTIVE Co-Fe-Ir-CONTAINING ALUMINA SUPPORTED CATALYST

Zhumash Makpal Armankyzy — Senior Engineer, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis, and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: makpal.zhumash@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4647-8451>;

Tilegen Kuralay Tilegenkyzy — PhD student of Kazakh-British Technical University, Junior Research Fellow, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis, and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: k.tilegen@outlook.com, <https://orcid.org/0009-0000-8731-4325>;

Boleubayev Yerzhan Askarbekovich — Master of Chemical Technology of Organic Substances, Research Fellow, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis, and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: Yerzhanboleubai@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5323-3623>;

Itkulova Sholpan Sembayevna — Candidate of Chemical Sciences, PhD in Chemistry, Full Professor in Chemical Sciences, Head of the Sector of Gas Chemical Technologies, D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis, and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: s.itkulova@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0001-7159-5249>.

Abstract. Dry reforming of methane (DRM) is an efficient method for utilizing the main greenhouse gases – carbon dioxide and methane, where methane has even a stronger greenhouse impact than carbon dioxide. The reaction results in the formation of syngas – a mixture of hydrogen (H₂) and carbon monoxide (CO), which is an important building block for the chemical industry. Although this process is sufficiently well studied, searches for the effective catalysts continue. In this study, a new Co-Fe containing catalyst supported on alumina and modified with a small amount of Ir (0.2 mas.%) was synthesized, characterized by some physico-chemical studies such as TEM, SEM, BET, XRD, and H₂-TPR, and tested in dry reforming of methane. It was observed that the catalyst demonstrated high activity and stability in syngas production by carbon dioxide conversion of methane. The extents of conversion both of methane and carbon dioxide over the 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ were approximately the same ~ 95-96%, while syngas with a ratio of H₂:CO=1:1 was formed under the following reaction conditions: CH₄:CO₂=1:1, t=800°C, P=1 atm, GHSV – 1000 h⁻¹. No deactivation was observed for this catalyst over a period of 10 hours on stream. No sintering of highly

dispersed metal particles after reaction was shown by XRD and TEM. The catalyst with a composition of Co-Fe-Ir can be considered as a prospective way to design a highly stable and active catalyst for the CO_2 - CH_4 conversion.

Keywords: Dry Reforming of Methane, Syngas, Supported Catalyst, Cobalt, Iron, Iridium

Funding: *This research was supported by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (grant # BR24992995).*

© М.А. Жұмаш¹, К.Т. Тілеген^{1,2}, Е.А. Болеубаев¹, Ш.С. Итқулова^{1,2*}, 2025.

¹Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан;

²Қазақстан-Британ техникалық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: s.itkulova@ifce.kz

АЛЮМИНИЙ ТОТЫҒЫНА ҚОНДЫРЫЛҒАН ЖОҒАРЫ БЕЛСЕНДІ Co-Fe-Ir ҚҰРАЙТЫН КАТАЛИЗАТОРДАҒЫ МЕТАННЫҢ ҚҰРҒАҚ РИФОРМИНГІ

Жұмаш Мақпал Арманқызы — жетекші инженер, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: makpal.zhumash@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4647-8451>;

Тілеген Құралай Тілегенқызы — Қазақстан-Британ техникалық университеті PhD студенті, кіші ғылыми қызметкер, Д.В.Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: k.tilegen@outlook.com, <https://orcid.org/0009-0000-8731-4325>;

Болеубаев Ержан Аскарбекович — органикалық заттардың химиялық инженериясы магистрі, ғылыми қызметкер, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: Yerzhanboleubai@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5323-3623>;

Итқулова Шолпан Сембаевна — химия ғылымдарының кандидаты (PhD), химия ғылымдарының профессоры, газ-химия технологиялары секторының меңгерушісі, Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: s.itkulova@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0001-7159-5249>.

Аннотация. Метанның құрғақ риформингі (МҚР) негізгі парниктік газдарды – яғни көмірқышқыл газы мен метанды жоюдың тиімді әдісі болып табылады, және де метан көмірқышқыл газына қарағанда одан да күшті әсер етеді. Реакция химия өнеркәсібі үшін маңызды құрылыс материалы болып табылатын сутегі (H_2) мен көміртегі оксидінің (CO) қоспасы, синтез-газ түзілуіне әкеледі. Бұл процесс жақсы зерттелгенімен, тиімдірек катализаторларды іздеу әлі де жалғасуда. Бұл жұмыста бірқатар физикалық-химиялық әдістермен сипатталған трансмиссиялық электронды микроскопия (ТЕМ), сканерлеуші электронды микроскопия (СЭМ), БЭТ, рентгендік құрылымды талдау (XRD) және термиялық қалпына келтіру бағдарламасы (H_2 -ТҚКБ), және метанның құрғақ риформинг процесінде сыналған алюминий оксидіне қондырылған және аз мөлшерде Ir (0,2 мас.%) мен



модификацияланған Со-Fe бар жаңа катализатор синтезделді. Катализатордың синтез-газ өндіруде жоғары белсенді және тұрақтылық танытатыны анықталды. Метан мен көмірқышқыл газының 10%Co-Fe-Ir(4,9-4,9-0,2)/Al₂O₃ катализаторындағы конверсия дәрежесі шамамен бірдей болып, 95–96% құрады, бұл реакция келесі жағдайларда жүргізіліп: CH₄:CO₂=1:1, t=800°C, P=1 атм, GHSV–1000 сағ⁻¹ сутегі мен көміртек тотығынан тұратын H₂:CO=1:1 қатынасында синтез-газ түзді. Бұл катализатордың 10 сағаттық жұмыс істеу барысында қатерсіздендіруі байқалмады. Рентгендік құрылымды талдау және трансмиссиялық электронды микроскопия әдістерімен жоғары дисперсті металл бөлшектерінің жентектелуі табылған жоқ. Со-Fe-Ir құрамды катализаторды CO₂-CH₄ парниктік газдарды түрлендіру үшін жоғары тұрақты және белсенді катализаторды әзірлеудің перспективті нұсқасы ретінде қарастыруға болады.

Түйін сөздер: метанның құрғақ риформингі, синтез-газ, қондырылған катализатор, кобальт, темір, иридий

Қаржыландыру: Бұл жұмыс Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі Ғылым комитетінің қаржылық қолдауымен орындалды (грант No BR24992995).

© М.А. Жұмаш¹, К.Т. Тілеген^{1,2}, Е.А. Болеубаев¹, Ш.С. Иткулова^{1,2*}, 2025.

¹Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан;

²Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Казахстан.
E-mail: s.itkulova@ifce.kz

СУХОЙ РИФОРМИНГ МЕТАНА НА ВЫСОКОАКТИВНОМ Со-Fe-Ir СОДЕРЖАЩЕМ НАНЕСЕННОМ НА ОКСИД АЛЮМИНИЯ КАТАЛИЗАТОРЕ

Жұмаш Макпал Арманқызы — ведущий инженер института топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,

E-mail: makpal.zhumash@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4647-8451>,

Тілеген Құралай Тілегенқызы — PhD студент Казахстанско-Британского технического университета, младший научный сотрудник института топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,

E-mail: k.tilegen@outlook.com, <https://orcid.org/0009-0000-8731-4325>,

Болеубаев Ержан Аскарбекович — магистр химической технологии органических веществ, научный сотрудник института топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,

E-mail: Yerzhanboleubai@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5323-3623>,

Иткулова Шолпан Сембаевна — кандидат химических наук (PhD in Chemistry), профессор (химические науки), заведующий сектором газохимических технологий института топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан,

E-mail: s.itkulova@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0001-7159-5249>.

Аннотация. Сухой риформинг метана (УКМ) является эффективным методом утилизации основных парниковых газов – диоксида углерода и метана, при

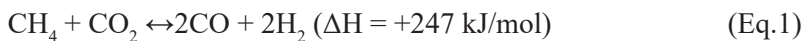
этом метан оказывает даже более сильное парниковое воздействие, чем диоксид углерода. Реакция приводит к образованию синтез-газа – смеси водорода (H_2) и оксида углерода (CO), который является важным строительным блоком для химической промышленности. Хотя этот процесс достаточно хорошо изучен, поиски более эффективных катализаторов до сих пор продолжаются. В данной работе был синтезирован новый катализатор, содержащий Co-Fe, нанесенный на оксид алюминия и модифицированный небольшим количеством Ir (0,2 мас.%), охарактеризованный рядом физико-химических методов, таких как просвечивающая электронная микроскопия (ТЕМ), сканирующая электронная микроскопия (SEM), БЭТ, рентгеноструктурный анализ (XRD) и термопрограммированное восстановление (H_2 -ТПВ), и испытанный в процессе сухого риформинга метана. Было обнаружено, что катализатор имеет высокую активность и стабильность в производстве синтез-газа. Степень превращения метана и диоксида углерода на катализаторе $10\%Co-Fe-Ir(4,9-4,9-0,2)/Al_2O_3$ была примерно одинаковой и составила 95-96%, при этом образовывался синтез-газ с соотношением $H_2:CO=1:1$ при следующих условиях реакции: $CH_4:CO_2=1:1$, $t=800\text{ }^\circ C$, $P=1\text{ атм}$, $GHSV - 1000\text{ ч}^{-1}$. Дезактивации этого катализатора за 10 часов работы не наблюдалось. Методами рентгеновской дифракции и просвечивающей электронной микроскопии не было обнаружено спекания высокодисперсных металлических частиц. Катализатор состава Co-Fe-Ir можно рассматривать как перспективный вариант для разработки высокостабильного и активного катализатора для конверсии парниковых газов CO_2-CH_4 .

Ключевые слова: сухой риформинг метана, синтез-газ, нанесенный катализатор, кобальт, железо, иридий

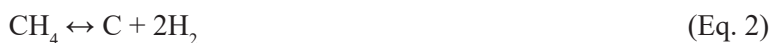
Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке по программе целевого финансирования МОН РК ИРН BR24992995.

Introduction. The increasing global energy demand due to population growth and the use of fossil fuels has led to environmental problems such as greenhouse gas emissions. This has ultimately led to many problems including climate change and global warming, which will affect people's living standards (Jeffrey et al., 2021; Styring et al., 2023). Many strategies have been proposed to further reduce excessive greenhouse gas emissions (Su et al., 2022; Yang et al., 2025). Among the most promising methods to combat global warming, the process of the carbon dioxide conversion of methane, also called dry reforming of methane (DRM) has attracted considerable attention from both academia and industry. Carbon dioxide conversion of methane into syngas (a mixture of H_2 and CO) is a key initial reaction in a chemical technology production line that has dual functionality: a highly efficient method for producing intermediate fuel products and a method for capturing and neutralizing greenhouse gases (Eq.1) (Nguyen et al., 2024; Sharifnattaj et al., 2025). Dry reforming shows 74.8% lower net CO_2 emissions than industrially used steam reforming of methane (SMR). With the increasing carbon tax, dry reforming becomes the most cost-competitive route (Lee J. et al., 2025).





The main obstacle in the implementation of the DRM process is the high endothermicity of the reaction (Eq. 1) due to the exceptional stability of CH_4 and CO_2 molecules. To achieve the desired conversion degrees in the DRM process, elevated temperatures ranging from 700 to 1200°C are required (Olowoyo et al., 2024). DRM is a complex catalytic process with different reaction mechanisms depending on the catalyst and reaction conditions. The key step of the reforming process is believed to be the adsorption and decomposition of methane on the catalyst surface. At low temperatures, methane decomposition occurs gradually, and at high temperatures, it is completely decomposed to form carbon. Various experiments confirm that most of the carbon is formed through the methane decomposition reaction (Eq. 2). Carbon is easily deposited on the catalyst surface in the dry methane reforming reaction (Chen S. et al., 2020; Sun et al., 2024). This is the main cause of catalyst deactivation.



To realize the full potential of the DRM process, significant limitations need to be overcome, such as the strong endothermic properties and high activation energy of DRM, as well as coke formation. Suitable catalysts need to be developed to accelerate the reaction (Escalante et al., 2024). The most active and selective catalysts for DRM usually contain noble metals: Ir, Pt, Ru, Pd, and Rh, but their high cost makes them impractical for widespread use (Anil et al., 2020). However, high resistance to coke formation or the absence of carbonization of noble metals allows them to be used in small quantities as modifiers to accelerate the DRM (Boleubayev et al., 2023).

Materials and methods such as Co and Ni, with abundant reserves and low prices, exhibit excellent performance and are widely used as active metals in DRM. However, nickel has a strong tendency to form coke. At the same time, Co is characterized by sintering of metal particles, which is one of the main causes of its deactivation (Zafarnak S. et al., 2024). The coke resistance of catalysts depends on a number of factors, including the interaction between metals and between metal and support, the acid-base properties of the support, and the reducing and oxidizing properties of additives. Therefore, numerous studies are focused on the design of catalysts with high temperature stability and good thermal conductivity. Attention should be paid to controlling the particle size of the active metal during the preparation of the catalysts and their changes during the reaction.

The performance of catalysts used for the dry reforming of methane strongly depends on the selection of active metals, supports, and promoters. Support plays an important role in the adsorption and activation of carbon dioxide. Designing an economically viable catalyst that maintains high catalytic activity and stability can be achieved by exploiting the synergic effects of combining noble and/or non-noble metals to form highly active and stable bi- and tri-metallic catalysts (Aramouni et al., 2018; Yentekakis I., 2021). The secondary metals can modify the electronic and surface properties, thereby enhancing

catalytic performance and improving coke resistance. By fine-tuning the relationship between the structural characteristics and the catalytic activity of various metal centers, a pronounced synergistic effect can be achieved in a multifunctional catalyst system. This approach can significantly suppress coke formation on the surface and ensure prolonged catalytic stability (Ma et al., 2024).

The focus is now on more affordable materials as well as improving their properties through additives and new synthesis methods. Among metals, iron is less studied in DRM due to its lower activity. However, Fe catalysts have several advantages: they are resistant to coke formation at high temperatures, are cheaper than others, operate over a wide temperature range, and are well-suited for Fischer-Tropsch synthesis. Additionally, the redox properties of Fe species can contribute to improved reducibility, further enhancing the overall performance of the catalyst (Su et al., 2022).

In this research, the performance of Co-Fe-based catalysts with a mass ratio of Co: Fe = 1:1, modified with small amounts of iridium (0.2 mass%) and supported on alumina, was studied in DRM.

Experimental. A polymetallic catalyst containing Co-Fe-Ir was prepared by co-impregnation of alumina with the corresponding metal salts. The total amount of metals was 10 mas.%. The Co:Fe ratio was 1:1 and Ir was added to Co-Fe in an amount of 2 mas.%. That corresponds to the composition of 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃. The synthesized catalyst was tested in the carbon dioxide conversion of methane (DRM). The DRM process was carried out in a quartz flow reactor under atmospheric pressure, a CH₄/CO₂ ratio was 1:1, a gas hourly space velocity (GHSV) was 1000 h⁻¹, and varying temperatures within a range of 400-800°C. The initial and final reaction products were online analyzed using gas chromatography (GC). The catalyst was characterized by using transmission electron microscopy (TEM), scanning electron microscopy (SEM), BET, X-ray diffraction (XRD), and H₂-TPR methods.

Results and discussion. The 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ catalyst was found to exhibit high activity in the CO₂ reforming of methane to produce synthesis gas. Figure 1 demonstrates the effect of temperature on the conversion of CH₄ and CO₂ (X_{CH₄} and X_{CO₂}, respectively) and the yield of H₂ and CO (Y_{H₂} and Y_{CO}, respectively) under the following conditions: atmospheric pressure, CH₄-CO₂ ratio – 1:1, gas hourly space velocity (GHSV) – 1000 h⁻¹. In the range of 400-800 °C, methane and carbon dioxide conversion gradually rises from 1.5 to 95.9% and from 2.9 to 95.3%, respectively, and the yield of products increases from 0.15 to 13.37 and 0.66 to 13.28 micromoles per 1 gram of catalyst per second (μmol/g×s), respectively. In the range of 400-650°C, the conversion of CO₂ is slightly higher than the conversion of CH₄; however, a further increase in temperature to 700–800 °C leads to a nonsignificant predominance of CH₄ conversion.

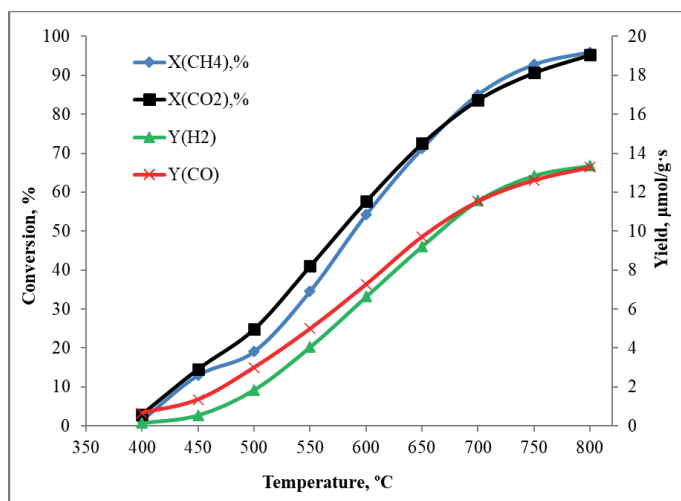


Figure 1 – Effect of temperature on CH₄ and CO₂ conversion and the yield of H₂, CO over 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ catalyst in DRM (CH₄:CO₂= 1:1, P = 0.1 MPa, GHSV = 1000 h⁻¹)

A similar pattern is shown for the yields of H₂ and CO, which increase symbatically with temperature growth. Thus, at a temperature of 600°C, the yields of H₂ and CO are 6.64 and 7.27 μmol/(g×s), respectively. At 800°C, the yields of H₂ and CO are 13.37 and 13.28 μmol/(g×s), respectively. At lower temperatures, the resulting syngas has a H₂/CO ratio less than one, whereas with increasing temperature it exceeds one (Table 1).

Table 1 – DRM over 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ (CH₄:CO₂=1:1, P=0.1 MPa, GHSV=1000h⁻¹)

t, °C	Conversion degree, %		Product yield, μmol/g×s		H ₂ /CO
	CH ₄	CO ₂	H ₂	CO	
600	54.2	57.6	6.64	7.27	0.91
700	85.1	83.7	11.56	11.54	1.00
800	95.9	95.3	13.37	13.28	1.01

X-ray diffraction (XRD) analysis was performed for fresh (before reaction) and spent (after DRM) samples of 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃. Both samples are X-ray amorphous. Reflexes attributed to the aluminum oxide phase (10-425, ASTM) are presented in both samples. In the fresh sample, the Co, Fe, and Ir phases are not detected (Fig. 2). The metallic Co phase appears after operation in DRM (ASTM 15-806). This can be caused by reductive effect of CO-H₂ medium, which is formed during the CO₂-CH₄ reaction. That indicates high-dispersed state of metals. TEM analysis confirmed a high-dispersed state of metals.

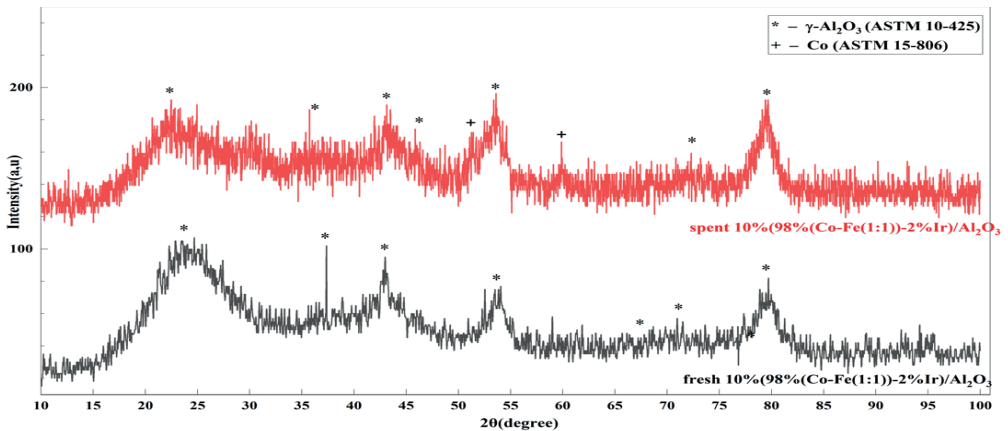


Figure 2 – XRD analysis of fresh and spent samples of 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ catalyst

Elemental analysis and morphology of fresh and spent 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ catalyst samples were studied using SEM/EDS (scanning electron microscopy and energy-dispersive X-ray spectroscopy) (Fig.3). The chemical composition of the catalyst surface was determined using three spectra; the values were normalized and presented as mass percent. Average elemental composition values for fresh and spent samples is presented in Table 2.

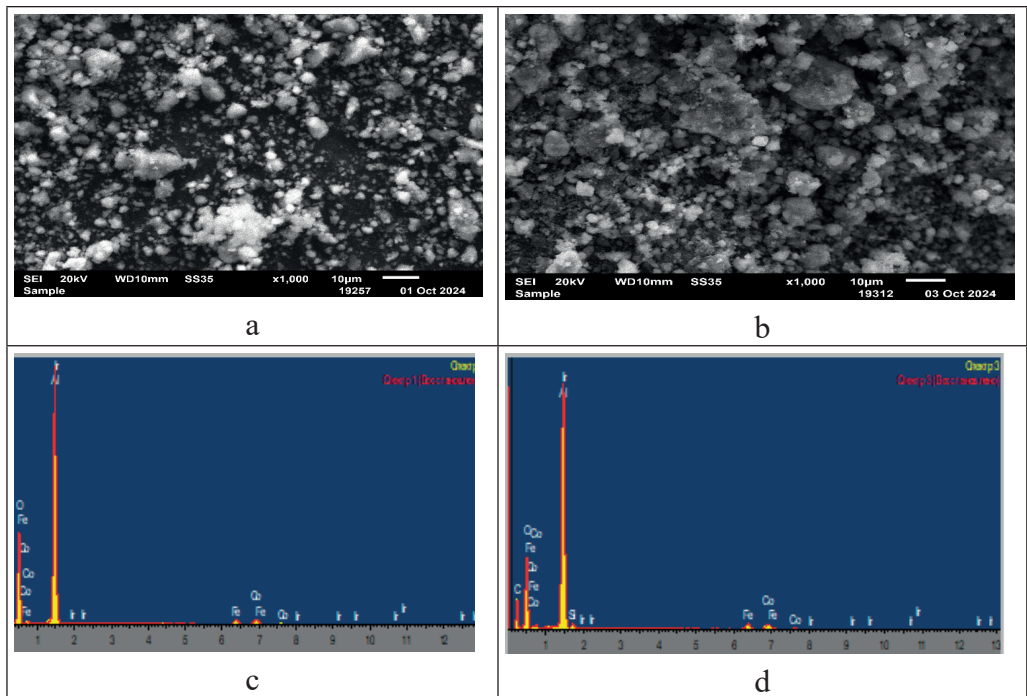


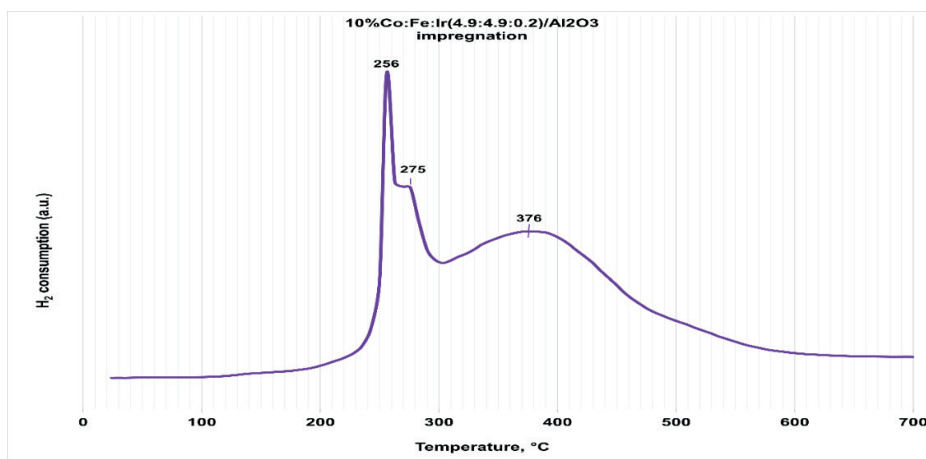
Figure 3 – SEM/EDS images of 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ catalyst

Table 2 –EDS analysis data of 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃

Sample	Composition, mas. %						
	O	Al	Si	Fe	Co	Ir	Total
fresh	43.58	46.76	0	4.16	5.50	0.00	100
spent	39.12	49.54	0.48	4.80	6.06	0.00	100

Figure 3 shows the SEM images of the catalyst surface of the fresh and spent samples (3^a and 3^b, respectively) and results of elemental analysis of the fresh and spent samples (3^c and 3^d, respectively) of the catalyst. After operation of the 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ catalyst in DRM, an increase in iron and cobalt content was observed in the DRM, which may indicate the surface saturation with the active phase due to exposure to the reaction medium. This, in turn, causes a decrease in oxygen and aluminum content due to partial replacement of the oxide matrix by active components. Ir was not detected in the spectra of both fresh and spent samples, likely due to its low content. The appearance of silicon in the spent sample can be explained by contamination with quartz, which is used as an inert catalyst diluent to prevent localized overheating of the catalyst grains.

H₂-TPR analysis of the 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ catalyst demonstrate the presence of three peaks at 256, 275, and 376°C (Fig.4). They can be related with the stepwise reduction of iron (Jabbour et al., 2022) and cobalt (Nguen et al., 2004; Nurmakanov et al., 2016) oxides (Eqs. 3 and 4).

Figure 4 – H₂-TPR spectra of 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/Al₂O₃ catalyst

The highest temperature most likely corresponds to the reduction of iron oxide. Determining precisely which metal oxides are reduced at given temperatures is difficult due to possible peak overlap and the identical temperature regions for the reduction of

cobalt and iron oxides. It is known that incomplete reduction of $\text{Fe}_2\text{O}_{3(s)}$ iron oxide into metallic $\text{Fe}_{(s)}$ under hydrogen, is a challenge for iron-based catalysts limiting their industrialization for methane reforming or decomposition (Jabbour et al., 2022). The reduction temperatures of metal oxides in the studied polymetallic 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/ Al_2O_3 catalyst is quite lower than for individual metals. That is an evidence of synergetic effect because of Co-Fe-Ir interaction.

Conclusion. A new Co-Fe-Ir containing catalyst supported on alumina exhibits high activity in the process of carbon dioxide conversion of methane to synthesis gas. The degree of conversion of methane and carbon dioxide reaches ~ 95% at 800°C over the 10%Co-Fe-Ir(4.9-4.9-0.2)/ Al_2O_3 . Such particularly outstanding performance of Fe-Co catalysts modified with a small amount of Ir in DRM is due to their synergistic effects on activity and stability. Further studies of catalyst are planned in order to scale the synthesis gas production process using the DRM process.

References

- Anil C., Modak J., Madras G. (2020) Syngas production via CO_2 reforming of methane over noble metal (Ru, Pt, and Pd) doped LaAlO_3 perovskite catalyst. *Molecular Catalysis*, 484:110805. <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2020.110805>. (in Eng.)
- Aramouni N.A.K., Touma J.G., Tarboush B.A., Zeaiter J., Ahmad M.N. (2018) Catalyst design for dry reforming of methane: Analysis review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82: 3:2570, <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.09.076> (in Eng.)
- Boleubayev Y., Komekbayeva P., Zhumash M., Itkulova S. (2023) Poluchenie sintez-gaza putem uglekislotnogo i parougleslotnogo riforminga metana na bimetallicheskih Co-Rh/ Al_2O_3 , prigotovlennykh zol'-gel' metodom. *Neft' i gaz [Syngas production by dry reforming and bi-reforming of methane over sol-gel made Co-Rh/ Al_2O_3 bimetallic catalysts. Oil and Gas*, 6 (138): 168-178. <https://doi.org/10.37878/2708-0080/2023-6.15> (in Russian).
- Chen S., Zaffran J., Yang B. (2020) Dry reforming of methane over the cobalt catalyst: Theoretical insights into the reaction kinetics and mechanism for catalyst deactivation. *Applied Catalysis B: Environmental*, 270:118859. <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2020.118859>. (in Eng.)
- Escalante Y., Barroso N.M., Tarditi A.M., Múnera J. (2024) Exploring the potential of cobalt-based catalysts in the methane dry reforming for sustainable energy applications. *Molecular Catalysis*, 569:114575. <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2024.114575>. (in Eng.)
- Jabbour K., El Hassan N. Optimized conditions for reduction of iron (III) oxide into metallic form under hydrogen atmosphere: A thermodynamic approach (2022), *Chemical Engineering Science*, 252:117297. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.117297> (in Eng.)
- Jeffrey L., Ong M.Y., Nomanbhay S., Mofijur M., Mubashir M., Show P.L. (2021) Greenhouse gases utilization: A review. *Fuel*, 301:121017. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121017>. (in Eng.)
- Lee J., Lee M., Shin Y., Kim D., Lee J.W. (2025) Techno-economic and environmental impact assessment of feasible alternatives to steam methane reforming for hydrogen production: dry and chemical looping reforming routes. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 82:104512. <https://doi.org/10.1016/j.seta.2025.104512>. (in Eng.)
- Lin H-Y., Yu-Wen Chen Y-W. (2004) The mechanism of reduction of cobalt by hydrogen, *Materials Chemistry and Physics*, 85:1:171-175, <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2003.12.028>. (in Eng.)
- Ma X., Yang W-W., Tang X-Y., He Y-L. (2024) Efficient catalysis and products regulation of methane dry reforming under mild temperature conditions using novel high-entropy catalyst. *Fuel*, 372: 132263. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.132263>. (in Eng.)
- Nguyen D.L.T., Tran A.V., Vo D-V. N., Nguyen H.T., Rajamohan N., Trinh T.H., Nguyen T.L., Le Q.V., Nguyen T.M. (2004) Methane dry reforming: A catalyst challenge awaits. *J. of Ind. and Engin. Chem.*, 140:169-189. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2024.06.017>. (in Eng.)
- Nurmakanov Y.Y., McCue, A.J., Anderson J.A., Itkulova S.S., Kussanova S.K. Methane reforming



by CO₂ or CO₂-H₂O over Co-containing supported catalysts (2016). News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Series Chemistry and Technology. 5:419: 5. (in Eng.)

Olowoyo J.O., Sharifvaghefi S., Zheng Y. (2024) Syngas production via microwave-assisted Dry Reforming of Methane over NiFe/MgAl₂O₄ alloy catalyst. Chemical Engineering and Processing - Process Intensification, 203:109899. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2024.109899>. (in Eng.)

Sharifnattaj A., Ghaziasgar S., Bahadori Y., Saidi M. (2025) Recent progress in catalysts development of dry reforming of methane process: Review of active phases and supports of catalyst. Molecular Catalysis, 582:115060. <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2025.115060>. (in Eng.)

Styring P., McCord S., Rackley S. (2023) Carbon dioxide utilization. Negative Emissions Technologies for Climate Changes Mitigation, 391-413. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819663-2.00005-8>. (in Eng.)

Su B-Sh., Wang Y-l., Xu Z., Han W., Jin H., Wang H. (2022) Novel ways for hydrogen production based on methane steam and dry reforming integrated with carbon capture. Energy Conversion and Management, 270:116199. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.116199>. (in Eng.)

Sun Y., Zhang Y., Yin X., Zhang C., Li Y., Bai J. (2024) Recent advances in the design of high-performance cobalt-based catalysts for dry reforming of methane, Green Chemistry, 26:9:5103. <https://doi.org/10.1039/d3gc05136f>. (in Eng.)

Yang T., Xin Y., Zhang J., Liu T., Liu M., Zhang R., Pan Y., Jin H. (2025) Enhanced high-purity syngas production and sustainable chemicals synthesis via chemical looping dry reforming of methane. International Journal of Hydrogen Energy, 129:265-278. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.04.271>. (in Eng.)

Yentekakis I., Panagiotopoulou P., Artemakis G. (2021) A review of recent efforts to promote dry reforming of methane (DRM) to syngas production via bimetallic catalyst formulations. Applied Catalysis B Environmental, 296(3):120210. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apcatb.2021.120210>. (in Eng.)

Zafarnak S., Rahimpour M.R. (2025) Dry reforming of methane for CO₂ conversion using sintering-resistant halloysite-supported Ni catalysts enhanced by alkaline-earth metal oxide promoters. Fuel, 395:135168. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2025.135168>. (in Eng.)

© M. Ibrayeva^{1*}, N. Sagdollina², Zh. Mukazhanova², Sh. Sanyazova²,
M. Ozturk³, 2025.

¹Yessenov University, Aktau, Kazakhstan;

²S. Amanzholov University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan;

³Sitki Kochman Mugla University, Mugla, Turkey.

E-mail: ibrayevamanshuk@mail.ru

OPTIMIZATION OF FLAVONOID EXTRACTION CONDITIONS FROM A PLANT OF THE GENUS SYMPHYOTRICHUM NOVI-BELGII

Ibrayeva Manshuk — PhD, acting associate professor of Yessenov University, Aktau, Kazakhstan,

E-mail: ibrayevamanshuk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4074-5499>;

Sagdollina Nazerke — PhD student, S. Amanzholov East Kazakhstan University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan,

E-mail: nazerke-sagdollina@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0961-9662>;

Mukazhanova Zhazira — PhD, acting associate professor of S. Amanzholov East Kazakhstan University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan,

E-mail: mukazhanovazhb@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0003-4635-8000>;

Sanyazova Shynar — MSc, senior of S. Amanzholov East Kazakhstan University, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan,

E-mail: shynarsanyazov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0741-9268>;

Ozturk Mehmet — PhD, professor, Sitki Kochman Mugla University, Mugla, Turkey,

E-mail: mehmetozturk@mu.edu.tr, <https://orcid.org/0000-0001-8932-4535>.

Abstract. The article presents the results of extraction of butanol extract from the aboveground part of the family *Asteraceae* of genus *Symphotrichum novi-belgii*, growing in the East Kazakhstan region (Altai region) in September 2021, using silica gel as an effective sorbent in column chromatography and separation of quercetin from the flavonoid fraction. The purpose of the work is to study the chemical composition of the plant of the genus *Symphotrichum novi-belgii*, to develop a method for obtaining biologically active substances and to establish the structure of individual substances by using modern physical and chemical methods. The study revealed the quantitative content of biologically active substances in the composition of a plant of the genus *Symphotrichum novi-belgii*, as a result of which flavonoids amounted to 1.45±0.03 %, tannins 1.30±0.03%, organic acids 1.43±0.02%, saponins 1.05±0.04%. Extraction of the flavonoid complex from the plant *Symphotrichum novi-belgii* It was carried out with effective extraction modes (maceration with 80% ethanol, 72 hours, hydromodule 1:8). 47 mg fractions 17-19 were selected from of the flavonoid complex by column



chromatography on silica gel and qualitative analysis was performed using cerium (IV) sulfate $Ce(SO_4)_2$ as an eluent in thin-layer chromatography. As a result, the structure of the isolated individual compound was confirmed by modern methods of 1H -NMR, ^{13}C -NMR and mass spectrometry (EI-MS). As a result, the individual substance was found to be quercetin (2.1 mg).

Keywords: *Asteraceae*, *Symphotrichum novi-belgii*, maceration method, biologically active substances, chromatography, NMR, flavonoids, quercetin

Acknowledgements: The authors would like to thank Yu.A. Kotukhov, a research associate at the Altai Botanical Garden, for identifying the plant species.

© М. Ибраева^{1*}, Н. Сағдоллина², Ж. Мукажанова², Ш. Саньязова²,
М. Ozturk³, 2025.

^{1*} Yessenov University, Ақтау, Қазақстан;

² Сәрсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті,
Өскемен, Қазақстан;

³ Мугла Сытқи Кочман университеті, Мугла, Түркия.

E-mail: ibrayevamanshuk@mail.ru

***SYMPHYOTRICHUM NOVI-BELGII* ТҰҚЫМДАС ӨСІМДІКТЕН ФЛАВОНОИДТАРДЫ АЛУ ЖАҒДАЙЛАРЫН ОҢТАЙЛАНДЫРУ**

М. Ибраева — PhD, Yessenov University қауымдастырылған профессор м.а., Ақтау, Қазақстан,
E-mail: ibrayevamanshuk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4074-5499>;

Н. Сағдоллина — PhD докторант, Сәрсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті,
Өскемен, Қазақстан,

E-mail: nazerke-sagdollina@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0961-9662>;

Ж. Мукажанова — PhD, Сәрсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университетінің
қауымдастырылған профессоры, Өскемен, Қазақстан,

E-mail: mukazhanovazhb@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4635-8000>;

Ш. Саньязова — магистр, Сәрсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университетінің сениор
- лекторы, Өскемен, Қазақстан,

E-mail: shynarsanyazov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0741-9268>;

М. Озтурк — PhD, Мугла Сытқи Кочман университетінің профессоры, Мугла, Түркия,

E-mail: mehmetozturk@mu.edu.tr, <https://orcid.org/0000-0001-8932-4535>.

Аннотация. Мақалада Шығыс Қазақстан облысында (Алтай өңірі) өсетін 2021 жылдың қыркүйек айында жиналған *Asteraceae* тұқымдасы *Symphotrichum novi-belgii* текті өсімдіктің жер үсті бөліктерінен қарапайым мацерация әдісі арқылы бутанолды экстракт алып, бағаналы хроматографияда тиімді сорбент ретінде силикагель қолданылып, флавоноидты кешеннен фракция алып, одан кверцетинді бөлу нәтижелері келтірілген. Ғылыми жұмыстың мақсаты *Symphotrichum novi-belgii* текті өсімдігінің химиялық құрамын зерттеу, биологиялық белсенді заттарды арудың оңтайлы жолдарын ұсыну және жеке таза заттардың құрылысын заманауи физика-химиялық әдістермен, оның ішінде ЯМР, ИҚ, УК секілді әдістермен дәлелдеу болып табылады. Зерттеу жұмысы барысында *Symphotrichum novi-*

belgii текті өсімдіктің құрамынан биологиялық белсенді заттардың пайыздық мөлшері анықталды, алынған нәтиже бойынша флавоноидтар 1.45 ± 0.03 %, тері илегіш заттар 1.30 ± 0.03 %, органикалық қышқылдар 1.43 ± 0.02 %, сапониндер 1.05 ± 0.04 % мөлшерде болды. *Symphytotrichum novi-belgii* өсімдігінен флавоноидты кешен алу барысы экстракциялаудың тиімді параметрлерінде (оның ішінде, мацерация 80 % этанолмен, 72 сағ, гидромодуль (шикізат пен еріткіштің қатынасы) 1:8) жасалды. Силикагельді бағаналы хроматографияда флавоноидты кешеннен 47 мг 17 - 19 фракциялар алынып, жұқа қабатты хроматографияда айқындағыш ретінде церий (IV) сульфаты $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$ пайдаланып, сапалық талдау жүргізілді. Нәтижесінде окшауланған жеке таза қосылыстың құрылысы заманауи физика-химиялық әдістермен ^1H - ЯМР, ^{13}C - ЯМР және масс-спектрометрия (EI - MS) арқылы дәлелденді. Нәтижесінде жеке таза зат кверцетин (2.1 мг) екендігі анықталды.

Түйін сөздер: *Asteraceae*, *Symphytotrichum novi-belgii*, мацерация әдісі, биологиялық белсенді заттар, хроматография, ЯМР, флавоноидтар, кверцетин

© М. Ибраева^{1*}, Н. Сағдоллина², Ж. Мукажанова², Ш. Санъязова²,
М. Ozturk³, 2025.

^{1*} Yessenov University, Актау, Казахстан;

²Восточно-Казахстанский университет имени Сарсена Аманжолова,
Усть-Каменогорск, Казахстан;

³Университет Мугла Сьтки Кочман, Мугла, Турция.
E-mail: ibrayevamanshuk@mail.ru

ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ ЭКСТРАКЦИИ ФЛАВОНОИДОВ ИЗ РАСТЕНИЯ РОДА *SYMPHYOTRICHUM NOVI-BELGII*

М. Ибраева — PhD, и.о. ассоциированного профессора Yessenov University, Актау, Казахстан,
E-mail: ibrayevamanshuk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4074-5499>;

Н. Сағдоллина — PhD докторант Восточно-Казахстанского университета имени Сарсена Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан;

E-mail: nazerke-sagdollina@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0961-9662>;

Ж. Мукажанова — PhD, ассоциированный профессор Восточно-Казахстанского университета имени Сарсена Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан,

E-mail: mukazhanovazhb@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4635-8000>;

Ш. Санъязова — магистр, сениор-лектор Восточно-Казахстанского университета имени Сарсена Аманжолова, Усть-Каменогорск, Казахстан,

E-mail: shynarsanyazov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0007-0741-9268>;

М. Озтурк — PhD, профессор, Университет Мугла Сьтки Кочман, Мугла, Турция,

E-mail: mehmetozturk@mu.edu.tr, <https://orcid.org/0000-0001-8932-4535>.

Аннотация. В статье представлены результаты получения бутанольного экстракта из надземной части растения семейства *Asteraceae* рода *Symphytotrichum novi-belgii*, произрастающего в Восточно-Казахстанской области (Алтайский край) собранных в сентябре 2021 года, методом простой мацерации с использованием

силикагеля в качестве эффективного сорбента в колоночной хроматографии и разделения кверцетина из флавоноидной фракции. Целью научной работы является изучение химического состава растения рода *Symphytotrichum novi-belgii*, разработка способа получения биологически активных веществ и установление строения отдельных веществ современными физико-химическими методами, таки как ЯМР, ИК, УФ. В ходе исследования было выявлено количественное содержание биологически активных веществ в составе растения рода *Symphytotrichum novi-belgii*, в результате чего флавоноиды составляли 1.45 ± 0.03 %, дубильные вещества - 1.30 ± 0.03 %, органические кислоты - 1.43 ± 0.02 %, сапонины - 1.05 ± 0.04 %. Экстракцию флавоноидного комплекса из растения *Symphytotrichum novi-belgii* проводили при эффективных параметрах экстракции (мацерация 80 % этанолом, 72 ч, гидромодуль 1:8). 47 мг 17-19 фракции разделен из флавоноидного комплекса методом колоночной хроматографии на силикагеле и качественный анализ проводили с использованием сульфата церия (IV) $Ce(SO_4)_2$ в качестве элюента в тонкослойной хроматографии. В результате структура выделенного индивидуального соединения подтверждена современными методами 1H - ЯМР, ^{13}C - ЯМР и масс-спектрометрии (EI - MS). В результате было установлено, что индивидуальное вещество представляет собой кверцетин (2.1 мг).

Ключевые слова: *Asteraceae*, *Symphytotrichum novi-belgii*, метод мацерации, биологически активные вещества, хроматография, ЯМР, флавоноиды, кверцетин

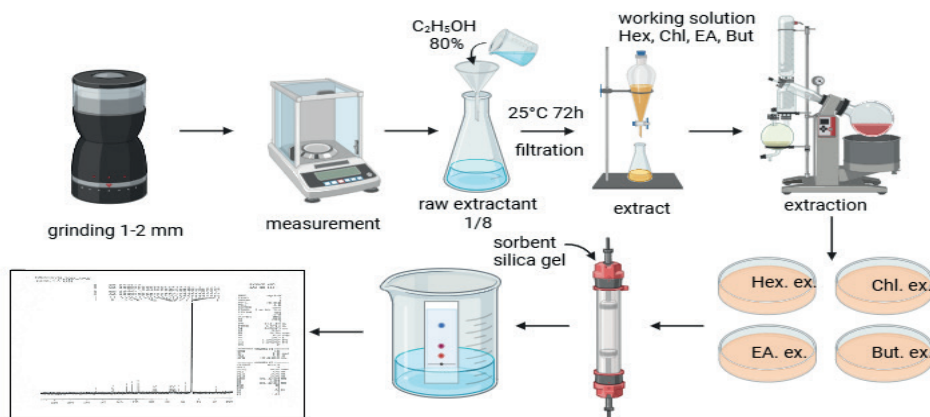
Introduction. One of the least studied and widespread plants in the East Kazakhstan region is *Symphytotrichum novi-belgii*, a member of the *Asteraceae* family. Plants of the *Symphytotrichum* genus are diverse, differing in the color of their inflorescences and the structure of the bush. There are more than 100 species of *Symphytotrichum* in the world. The flower is native to eastern North America. In Kazakhstan, it grows from home yards to forest areas. The advantages of the plant are its long flowering period, high decorativeness, ease of care, and diversity. Due to these properties, the plant is widely used as a garden culture. The *Symphytotrichum novi-belgii* plant of the *Asteraceae* family is a unique plant that plays an important role in the ecosystem and is of great importance to humans. The plant is used in medicine, the food industry, and agriculture (Mohamed et al., 2017).

In addition, the plant has high pharmacological biological activity, and is known to have antimicrobial, antiviral, and antioxidant effects due to the high content of polyphenols. It has been shown that the maximum amount of flavonoid aglycones in the plant is observed at the beginning of the growing season and during the budding period, and their glycosides - during the flowering period. Thus, in order to obtain plant material with the maximum amount of flavonoid aglycones (quercetin, 3-methylquercetin, luteolin), the vegetative mass should be harvested at the beginning of the growing season, and their glycosides - during the flowering period (Li et al., 2014).

Preparations made from *Symphytotrichum novi-belgii* are used in folk medicine as a medicinal herb for the treatment of various diseases such as arthritis, cancer, and inflammation. *Symphytotrichum novi-belgii* is also used as a flavoring for various foods,

salads, and dried foods, as a coloring agent for oils and various liquids (Sagdollina et al., 2023).

Materials and basic methods. To isolate flavonoids, the above-ground parts (leaves, stems, inflorescences) of the plant *Symphotrichum novi-belgii*, belonging to the *Asteraceae* family, growing in the Eastern region of Kazakhstan, were used. Drying was carried out at room temperature at the Department of Chemistry of Amanzholov University to create a plant herbarium. The dried leaves, stems, and inflorescences of the plant *Symphotrichum novi-belgii* were crushed to a particle size of 1-2 mm.



Created in BioRender.com bio

Figure 1 - Separation of biologically active substances from *Symphotrichum novi-belgii* fruit by the classical maceration method

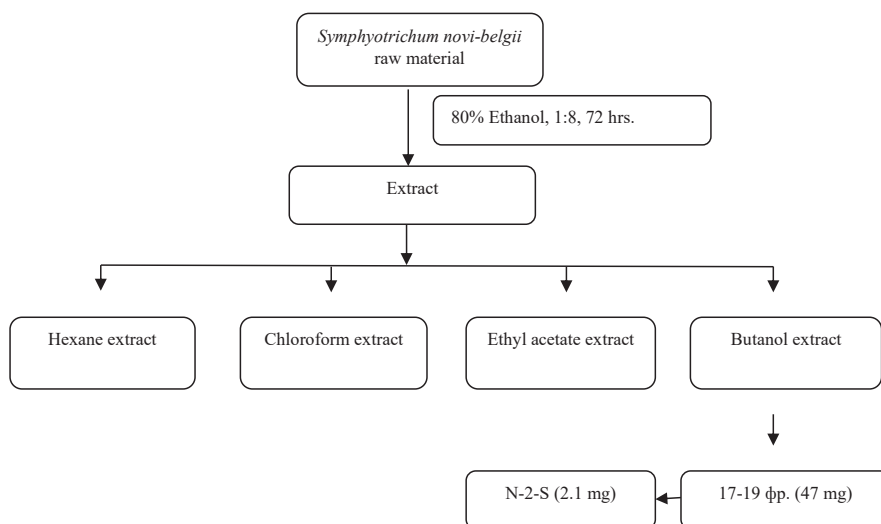


Figure 2 - An efficient block diagram for obtaining biologically active complexes

The authenticity of the raw material and the amount of biologically active substances in its composition were determined according to the 1st edition of the State Pharmacopoeia of the Republic of Kazakhstan. 100 g of crushed *Symphotrichum novi-belgii* plant raw material was treated with 80% aqueous alcohol in a ratio of 1:8, 3 times, and an aqueous-alcoholic extract was obtained. During aqueous-alcoholic maceration, the active biologically active substances contained in the plant passed into the macerate. The resulting extract mixture was concentrated in a rotary evaporator at 40°C. Depending on the polarity, it was first treated with hexane, then with chloroform, ethyl acetate and butanol. The working extracts were concentrated in a rotary evaporator at a temperature of 50-55°C. Lipophilic substances were determined from the composition of the separated hexane extract. It is known that the chloroform extract contains steroids, terpenes, chlorophylls, while the ethyl acetate extract contains carotenoids, terpenoids, and the butanol extract contains saponins and flavonoids. In order to obtain the flavonoid complex, the butanol extract was fractionated using silica gel column chromatography. As a result, 37 fractions were obtained from the butanol extract, and their qualitative characteristics were determined using thin layer chromatography (TLC) using special detectors (UV light, $Ce(SO_4)_2$) (Hassan, et al., 2011).

Results and Discussion. The purity of plant raw materials (moisture content, ash content, extractives content) and the amount of biologically active substances in the raw materials (repeated at least 3 times) were determined according to the methodology given in the 1st edition of the State Pharmacopoeia of the Republic of Kazakhstan. The results are shown in Table 1.

Table 1 - Raw material purity and content of biologically active substances, %

Authenticity of raw materials and names of biologically active substances	<i>Symphotrichum novi-belgii</i> content, %
Laughter	10.41±0.02
Humidity	15.13 ±0.03
Extractive substances	28.76±0.03
Saponins	1.05 ±0.04
Flavonoids	1.45 ±0.03
Tanins	1.30 ±0.03
Coumarins	0.67±0.02
Organic acids	1.43 ±0.02
Alkaloids	0.55 ±0.04

During the analysis of the results of the studied *Symphotrichum novi-belgii* plant, it was determined that flavonoids were 1.45±0.03%, tanins were 1.30±0.03%, organic acids were 1.43±0.02%, and saponins were 1.05±0.04%.

A total of 37 fractions were collected by silica gel column chromatography, and each fraction was concentrated under mild conditions using a rotary evaporator. Fractions with the same R_f values were combined in the HPLC, resulting in the isolation of the N-2-S compound.

Qualitative analysis using Silica gel DC- Alugram 60 UV 254 plates from the

company МЕРСК art. 7739, the presence of a flavonoid complex was determined by yellow spots when spraying the reagent $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$ (Тараховский et al., 2013).

The R_f values were compared and identified with the literature data. According to the analysis results, the R_f value was equal to -0.89, which corresponds to quercetin. Quercetin was qualitatively confirmed by the fact that it gave a rich green color with a solution of ferric chloride, and turned yellow with concentrated sulfuric acid (Demydiak, et al., 2023; Дмитриенко, et al., 2012).

The structure was confirmed by physicochemical analysis methods $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ and mass spectrometry (EI-MS) (Feng et al., 2017).

Yellow crystalline substance, molecular formula $\text{C}_{15}\text{H}_{10}\text{O}_7$, EI-MS, m/z : 303 $[\text{M}]^+$, $t_{\text{melting point}} = 310\text{-}315^\circ\text{C}$, soluble in ethanol, insoluble in water. The analyzed compound turned green in an aqueous solution of FeCl_3 , and yellow in an AlCl_3 solution, which is due to the presence of a free hydroxyl group at positions 3 and 5, indicating that it is a flavone. The presence of a free hydroxyl group was accompanied by absorption maxima in the ultraviolet region at short wavelengths of 260 nm, 269 nm and long wavelengths of 380 nm. In the presence of sodium acetate, a hypsochromic shift occurred, and the presence of a free OH group at position 3 and a maximum band indicated the presence of a 3',4'-orthodioxo group in the B ring. During alkaline destruction, phloroglucin and protocatechuic acid are formed. The absorption bands at 3420 cm^{-1} ($-\text{OH}$), $2930\text{-}2880\text{ cm}^{-1}$ (CH_3- , $\text{CH}_2=$, $\text{CH}\equiv$), 1607 cm^{-1} ($-\text{C}=\text{O}$), and 1508 cm^{-1} (aromatic ring) in the IR spectrum regions identify the functional groups present in the compound (Taniguchi et al., 2023).

The qualitative reaction of quercetin polymerization (dimers, trimers, etc.) is their interaction with vanillin (vanillin) in an acidic environment, resulting in a color from slightly pink to dark red due to the formation of conjugated bonds in the structure (Zhusupova, et al., 2019, Demydiak, et al., 2023, Pyrzynska, et al., 2019, Karak, et al., 2019).

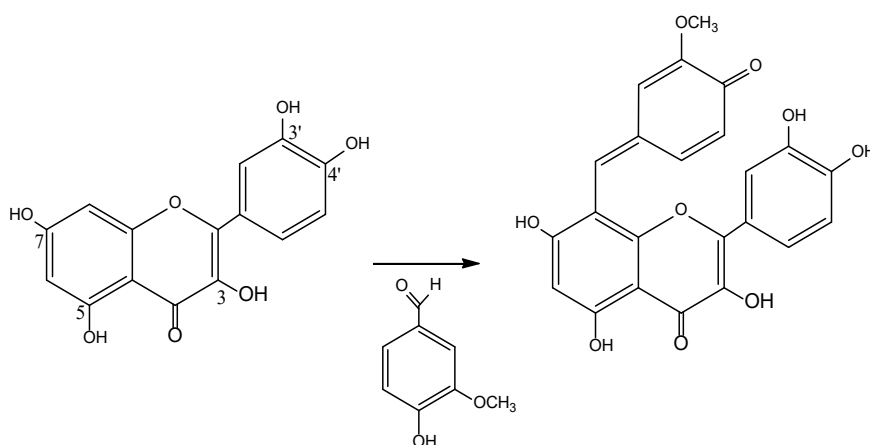


Figure 3 - Reaction of quercetin with vanillin aldehyde

¹H NMR (400 MHz, DMSO-d₆): δ 6.18 (d, 1H, J=1.9 Hz, H-6), 6.38 (d, 1H, J=2.1 Hz, H-8), 12.24 (s, 1H, H-5), 10.91 (s, 1H, H-7), 7.68 (d, 1H, J=2.2 Hz, H-2'), 9.48 (s, 1H, H-3'), 9.30 (c, 1H, H-4'), 6.80 (d, 1H, J=8.5 Hz, H-5'), 7.56 (dd, 1H, J=8.5; 2.2, Hz, H-6')

¹³C NMR (100 MHz, Py-d₃): δ 157.2 (C-2), 134.7 (C-3), 176.9 (C-4), 161.3 (C-5), 99.2 (C-6), 162.9 (C-7), 92.4 (C-8), 156.1 (C-9), 104.0 (C-10), 122.1 (C-1'), 116.5 (C-2'), 146.6 (C-3'), 116.1 (C-4'), 116.8 (C-5'), 121.5 (C-6')

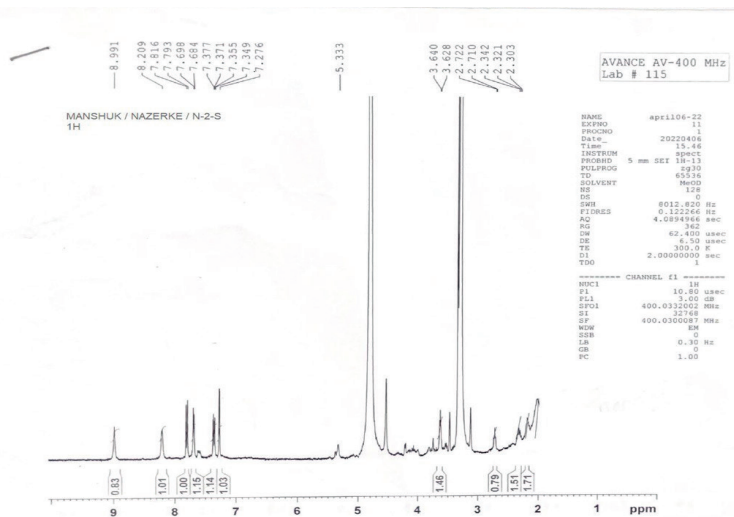


Figure 4 - ¹H-NMR spectrum of quercetin (N-2-S)

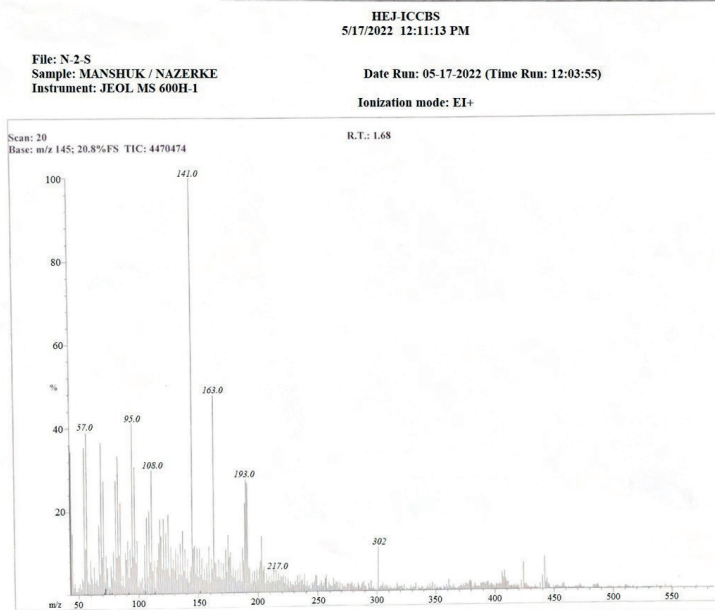


Figure 5 - EI-MS mass spectrum of quercetin (N-2-S)

Conclusion. In conclusion, a phytochemical analysis of the composition of the plant *Symphytotrichum novi-belgii* of the *Asteraceae* family growing in the East Kazakhstan region was carried out, and the quantitative amount of biologically active substances was determined. In addition, a butanol extract was obtained by a simple maceration method, and a flavonoid complex was isolated by silica gel column chromatography. The structure of the individual substance isolated from the flavonoid fraction was analyzed using modern $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$ and EI-MS mass spectrometry. As a result, it was proven that the individual substance is quercetin.

Әдебиеттер

Mohamed Y. (2017) Effect of Some Growth Stimulants on Growth, Flowering and Postharvest Quality of Aster (*Symphytotrichum novi-belgii* L.) cv. Purple Monarch. Middle East J. Agric. Res., 6, No. 2. — P. 264-273. ISSN: 2077-4605

Li A.-N., Li S., Zhang Y.-J., Xu X.-R., Chen Y.-M., Li H.-B. (2014) Resources and Biological activities of Natural Polyphenols. *Nutrients*, No. 6. — P. 6020-6047. <https://doi.org/10.3390/nu6126020>

Sagdollina N., Ibrayeva, M., Mukazhanova Zh., Ozturk M. (2023) Comparative acidic combination analysis of selected Asteraceae family species. Reports of the Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, 347, No. 3. — P. 181–190. <https://doi.org/10.32014/2023.2518-1483.235>

Государственная фармакопея РК, (2008) Алматы: Жибек жолы, 591 с. <https://gmpua.com/Pharmacopeia/Kazakhstan/Kazakhstan1.htm>

Hassan E. M. et al. (2011) Phytochemical and biological studies on Aster Novi-Belgii. Int. J. Acad. Res., 3, No. 2, 1105-1112. DOI: 10.1055/s-0031-1282487

Тараховский Ю.С., Ким Ю.А., Абдрасилов Б.С., Музафаров Е.Н. (2013) Флавоноиды: биохимия, биофизика, медицина. Пушино: Synchronbook, 310 с. ISBN 978-5-91874-043-9 <http://biophenols.ru/wp/wp-content/uploads/2013/11/Tarahovsky.pdf>

Demydiak D. et al. (2023) HPLC-DAD analysis of flavonoids and hydroxycinnamic acids in Aster novi-belgii L. *Pharmacia*. 70, No. 3. — P. 745-750. DOI: 10.3897/pharmacia.70.e94344

Дмитриенко С. Г., Кудринская В. А., Аляри В. В. (2012) Методы выделения, концентрирования и определения кверцетина. Журнал аналитической химии, 67, №4. — P. 340-353 ISSN 0044-4502 <https://elibrary.ru/item.asp?id=17679919>

Feng W., Hao Z., Li M. (2017) Isolation and structure identification of flavonoids. Flavonoids-Ffrom biosynthesis to human health. — P. 17-43 DOI: 10.5772/67810

Taniguchi M., LaRocca C. A., Bernat J.D., Lindsey J.S. (2023) Digital Database of Absorption Spectra of Diverse Flavonoids Enables Structural Comparisons and Quantitative Evaluations. J. Nat. Prod., 86, No. 4. — P. 1087–1119 <https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.2c00720>

Zhusupova A.I., Zhusupova G.E., Litvinenko Y.A. (2019) Methodology Of Processing Medical Plant Raw Materials. Алматы: Kazakh National university, 56 p. <https://pps.kaznu.kz/en/Main/FileShow2/207243/1/19/0/>

Demydiak D., Slobodianuk L., Gerush O., Budniak L., Sydor V., Skrynchuk O., Demydiak O., Panasenko N., Ratynskiy V. (2023) HPLC-DAD analysis of flavonoids and hydroxycinnamic acids in Aster novi-belgii L. *Pharmacia*, 70, No. 3. — P. 745–750. <https://doi.org/10.3897/pharmacia.70.e94344>

Pyrzyńska K., Sentkowska A. (2019) Chromatographic Analysis of Polyphenols. Polyphenols in Plants, 2nd edn., Academic Press, 353–364 p. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813768-0.00021-9>

Karak P. (2019) Biological activities of flavonoids: An overview. Int. J. Pharm. Sci. Res., 10, No. 4. — P. 1567-1574. DOI:10.13040/IJPSR.0975-8232.10(4).1567-74

Kumar Sh., Pandey A. K. (2013) Chemistry and Biological Activities of Flavonoids: An Overview. The Scientific World Journal, Volume 2013, Issue 1 <https://doi.org/10.1155/2013/162750>

References

- Mohamed Y. (2017) Effect of Some Growth Stimulants on Growth, Flowering and Postharvest Quality of Aster (*Symphotrichum novi-belgii* L.) cv. Purple Monarch. *Middle East J. Agric. Res.*, 6, No. 2. — P. 264-273. ISSN: 2077-4605 (in English).
- Li A.-N., Li S., Zhang Y.-J., Xu X.-R., Chen Y.-M., Li H.-B. (2014) Resources and Biological activities of Natural Polyphenols. *Nutrients*, No. 6. — P. 6020-6047. <https://doi.org/10.3390/nu6126020> (in English).
- Sagdollina N., Ibrayeva, M., Mukazhanova Zh., Ozturk M. (2023) Comparative acidic combination analysis of selected Asteraceae family species. *Reports of the Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan*, 347, No. 3. — P. 181–190. <https://doi.org/10.32014/2023.2518-1483.235> (in English).
- Gosudarstvennaya farmakopeya RK (2008) [State Pharmacopoeia of the Republic of Kazakhstan], Almaty: Zhibek zholy, 591 p. <https://gmpua.com/Pharmacopoeia/Kazakhstan/Kazakhstan1.htm> (in Russian).
- Hassan E. M. et al. (2011) Phytochemical and biological studies on Aster Novi-Belgii. *Int. J. Acad. Res.*, 3, No. 2. — P. 1105-1112. DOI: 10.1055/s-0031-1282487 (in English).
- Tarakhovskiy Yu.S., Kim Yu.A., Abdrasilov B.S., Muzafarov Ye.N. (2013) Flavonoidy: biokhimiya, biofizika, meditsina [Flavonoids: biochemistry, biophysics, medicine]. Pushchino: Sunchrobook, 310 s. ISBN 978-5-91874-043-9 <http://biophenols.ru/wp/wp-content/uploads/2013/11/Tarahovsky.pdf> (in Russian).
- Demydiak D. et al. (2023) HPLC-DAD analysis of flavonoids and hydroxycinnamic acids in Aster novi-belgii L. *Pharmacia*. 70, No. 3. — P. 745-750. DOI: 10.3897/pharmacia.70.e94344 (in English).
- Dmitriyenko S.G., Kudrinskaya V.A., Apyari V.V. (2012) Metody vydeleniya, kontsentrirvaniya i opredeleniya kvvertsetina [Methods of isolation, concentration and determination of quercetin]. *Zhurnal analiticheskoy khimii*, 67, №4. — P. 340-353 ISSN 0044-4502 <https://elibrary.ru/item.asp?id=17679919> (in Russian).
- Feng W., Hao Z., Li M. (2017) Isolation and structure identification of flavonoids. *Flavonoids-Ffrom biosynthesis to human health*. — P. 17-43 p. DOI: 10.5772/67810 (in English).
- Taniguchi M., LaRocca C. A., Bernat J.D., Lindsey J.S. (2023) Digital Database of Absorption Spectra of Diverse Flavonoids Enables Structural Comparisons and Quantitative Evaluations. *J. Nat. Prod.*, 86, No. 4. — P. 1087–1119 <https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.2c00720> (in English).
- Zhusupova A.I., Zhusupova G.E., Litvinenko Y.A. (2019) Methodology Of Processing Medical Plant Raw Materials. Алматы: Kazakh National university, 56 p. <https://pps.kaznu.kz/en/Main/FileShow2/207243/1/19/0/> (in English).
- Demydiak D., Slobodianuk L., Gerush O., Budniak L., Sydor V., Skrynchuk O., Demydiak O., Panasenko N., Ratynskiy V. (2023) HPLC-DAD analysis of flavonoids and hydroxycinnamic acids in Aster novi-belgii L. *Pharmacia*, 70, No. 3. — P. 745–750. <https://doi.org/10.3897/pharmacia.70.e94344> (in English).
- Pyrzynska K., Sentkowska A. (2019) Chromatographic Analysis of Polyphenols. *Polyphenols in Plants*, 2nd edn., Academic Press, 353–364 p. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-813768-0.00021-9> (in English).
- Karak P. (2019) Biological activities of flavonoids: An overview. *Int. J. Pharm. Sci. Res*, 10, No. 4. — P. 1567-1574. DOI:10.13040/IJPSR.0975-8232.10(4).1567-74 (in English).
- Kumar Sh., Pandey A. K. (2013) Chemistry and Biological Activities of Flavonoids: An Overview. *The Scientific World Journal*, Volume 2013, Issue 1 <https://doi.org/10.1155/2013/162750> (in English).

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

ISSN 2224-5227

Volume 3.

Number 355 (2025), 228–237

<https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.376>

UDC (УДК) 541.183.24

IRSTI 31.21.25

© M.K. Kurmanaliev, Zh.E. Shaikhova*, S.O. Abilkasova, 2025.

Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: Zh.shaikhova1965@gmail.com

SUPRAMOLECULAR POLYMERIC RECEPTORS FOR BINDING ALKALI METAL IONS

Kurmanaliev Musrepbek Kurmanalievich — Doctor of Chemical Sciences, Almaty Technological University, Professor of the Department of «Chemistry, Chemical Technology and Ecology», Almaty, Kazakhstan,

E-mail: mkk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8561-4332>;

Shaikhova Zhanat Erezhinovna — Master of Technical sciences, Almaty Technological University, senior-lecturer of the Department of «Chemistry, Chemical Technology and Ecology», Almaty, Kazakhstan, E-mail: Zh.shaikhova1965@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5909-4182>;

Abilkasova Sandugash Orynbaevna — Candidate of technical science, Almaty Technological University Associate Professor of the Department of «Chemistry, Chemical Technology and Ecology», Almaty, Kazakhstan,

E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8322-4592>.

Abstract. Polymeric derivatives of crown ethers attract significant research interest due to their high specificity in complex formation and broad potential applications in various technological processes. Compared to their low-molecular-weight analogs, these polymeric macroligands offer advantages such as reusability, ease of separation from solutions, enhanced sorption and complexation properties. They are used in sorption, ultrafiltration, sensing, chromatography, and other processes requiring selective interaction with metal ions. This study investigates the synthesis and properties of new polysulfones containing crown ether fragments (DB12K4, DB18K6, DB24K8, DB30K10), obtained by polycondensation of bis (chlorosulfonyl) derivatives of crown ethers using Friedel–Crafts catalysts (FeCl_3 , AlCl_3 , SnCl_4). The influence of catalyst type and concentration, temperature, and solvent on the yield and viscosity of the resulting polymers was examined. The highest yield was achieved using catalytic amounts of FeCl_3 at 120°C . IR spectroscopy and thermogravimetric analysis confirmed the high thermal stability of the synthesized polymers (up to 600°C). Sorption studies demonstrated that the selectivity and efficiency of alkali metal ion extraction depend on the size of the crown ether cavity, the nature of the solvent, and the macrocycle structure. It was shown that polymeric crown ethers exhibit higher complexation ability than their low-molecular counterparts. Thus, new thermally stable polycrownsulfones



with high selectivity toward alkali metal ions were successfully synthesized for the first time, indicating their promising applications in analytical chemistry and separation technologies.

Keywords: polymeric crown ethers, dibenzocrown ethers, polycondensation, sorbents, selectivity

© М.Қ. Құрманалиев, Ж.Е. Шаихова*, С.О. Әбілқасова, 2025.

Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: zh.shaikhova1965@gmail.com

СІЛТІЛІК МЕТАЛЛ ИОНДАРЫН БАЙЛАНЫСТЫРУҒА АРНАЛҒАН СУПРАМОЛЕКУЛАЛЫҚ ПОЛИМЕРЛІК РЕЦЕПТОРЛАР

Құрманалиев Мүсірепбек Құрманәліұлы — Алматы технологиялық университеті, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының профессоры, химия ғылымдарының докторы, Алматы, Қазақстан,

E-mail: mkk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8561-4332>;

Шаихова Жанат Ережиновна — Алматы технологиялық университеті, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының сениор-лекторы, техника ғылымдарының магистрі, Алматы, Қазақстан,

E-mail: Zh.shaikhova1965@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5909-4182>;

Әбілқасова Сандугаш Орынбайқызы — Алматы технологиялық университеті, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының қауымдастырылған профессоры, техника ғылымының кандидаты, Алматы, Қазақстан,

E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8322-4592>.

Аннотация. Краун эфирлердің полимерлік туындылары күрделі түзілудегі жоғары ерекшелігімен және әртүрлі технологиялық процестерде қолдану мүмкіндігімен зерттеушілердің назарын аударады. Төмен молекулалы аналогтармен салыстырғанда олардың артықшылығына қайталап қолдану мүмкіндігі, ерітінділерден оңай бөлу, сорбциялық және кешен түзу қасиеттерінің жақсаруы жатады. Мұндай макролиганды құрылымдар сорбцияда, ультрафилтрацияда, сенсорларда, хроматографияда және металл иондарымен таңдамалы әсерлесуді қажет ететін басқа да процестерде қолданылады. Жұмыста Фридель–Крафтс катализаторлары (FeCl_3 , AlCl_3 , SnCl_4) көмегімен краун эфирлердің бисхлорсульфонил туындыларын поликонденсациялау әдісімен алынған краун эфир фрагменттері (ДБ12К4, ДБ18К6, ДБ24К8, ДБ30К10) бар жаңа полисульфондардың синтезі мен қасиеттері зерттеледі. Полимерлердің шығымы мен тұтқырлығына катализатордың табиғаты мен мөлшерінің, температура мен еріткіштің әсері анықталды. FeCl_3 -ды каталитикалық мөлшерде және 120°C температурада қолданғанда ең жоғары өнімділікке қол жеткізілетіні анықталды. ИҚ-спектроскопия және термогравиметриялық талдау көмегімен синтезделген полимерлердің жоғары термиялық тұрақтылығы (600°C дейін) расталды. Сорбциялық қабілеттілікті зерттеу сілтілі металдар иондарын экстракциялаудың таңдамалылығы мен тиімділігі краун эфир сақинасының қуысының мөлшеріне,

еріткіштің табиғатына және макроцикл құрылымына байланысты екенін көрсетті. Төмен молекулалық аналогтармен салыстырғанда полимерлі краунды эфирлердің кешен түзу қабілеті жоғары екендігі анықталды. Осылайша, сілтілік металл иондарына жоғары таңдамалы, жаңа ыстыққа төзімді поликраун сульфондары алынды, бұл оларды аналитикалық химияда және бөлу технологияларында қолдану перспективаларын ашады.

Түйін сөздер: полимерлі краун эфирлер, дибензокроунды эфирлер, поликонденсация, сорбенттер, таңдамалылық

© М.К. Курманалиев, Ж.Е. Шаихова*, С.О. Абилкасова, 2025.

Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан.

*E-mail: zh.shaikhova1965@gmail.com

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПОЛИМЕРНЫЕ РЕЦЕПТОРЫ ДЛЯ СВЯЗЫВАНИЯ ИОНОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

Курманалиев Мусрепбек Курманалиевич — Алматинский технологический университет, профессор кафедры «Химия, химическая технология и экология», доктор химических наук, Алматы, Қазақстан,

E-mail: mkk@mail.ru, <https://orcid.org/ORCID ID 0000-0001-8561-4332>;

Шаихова Жанат Ережиновна — Алматинский технологический университет, сениор-лектор кафедры «Химия, химическая технология и экология», магистр технических наук, Алматы, Қазақстан,

E-mail: Zh.shaikhova1965@gmail.com, <https://orcid.org/ORCID ID 0000-0002-5909-4182>;

Абилкасова Сандугаш Орынбаевна — Алматинский технологический университет, ассоциированный профессор кафедры «Химия, химическая технология и экология», кандидат технических наук, Алматы, Қазақстан,

E-mail: sandugash.abilkasovaa@gmail.com, <https://orcid.org/ORCID ID 0000-0001-8322-4592>.

Аннотация. Полимерные производные краун-эфиров привлекают внимание исследователей благодаря их высокой специфичности в комплексообразовании и перспективам применения в различных технологических процессах. Их преимущества по сравнению с низкомолекулярными аналогами включают возможность многократного использования, удобство разделения из растворов, улучшенные сорбционные и комплексообразующие свойства. Такие макролигандные структуры находят применение в сорбции, ультрафильтрации, сенсорики, хроматографии и других процессах, требующих селективного взаимодействия с ионами металлов. В работе исследованы синтез и свойства новых полисульфонов, содержащих краун-эфирные фрагменты (ДБ12К4, ДБ18К6, ДБ24К8, ДБ30К10), полученных методом поликонденсации бисхлорсульфонильных производных краун-эфиров с использованием катализаторов Фриделя-Крафтса (FeCl_3 , AlCl_3 , SnCl_4). Выявлено влияние природы и количества катализатора, температуры и растворителя на выход и вязкость полимеров. Установлено, что наибольший выход достигается при использовании FeCl_3 в катализаторных количествах и температуре 120°C . С помощью ИК-спектроскопии и термогравиметрического анализа подтверждена высокая термическая стабильность синтезированных полимеров (до 600°C). Иссле-



дования сорбционной способности показали, что селективность и эффективность извлечения ионов щелочных металлов зависят от размера полости краун-эфирного кольца, природы растворителя и структуры макроцикла. Установлено, что полимерные краун-эфиры обладают повышенной комплексообразующей способностью по сравнению с низкомолекулярными аналогами. Таким образом, получены новые теплостойкие поликраунсульфоны с высокой селективностью к ионам щелочных металлов, что открывает перспективы их применения в аналитической химии и технологиях разделения.

Ключевые слова: полимерные краун-эфиры, дибензокраун-эфиры, поликонденсация, сорбенты, селективность

Introduction. Polymeric crown compounds attract the attention of researchers due to the wide possibilities of their practical use as effective highly specific complexing agents. Such polymeric ligands, while retaining all the advantages of their low-molecular-weight analogs, should have additional advantages associated with their macromolecular nature: ease of separation from solution, the possibility of multiple use, higher efficiency and speed of complexation (Duan, 2022; Jonathan, 2022; Borisov et.al., 2023; Huang, 2012). Polymeric macrocycles allow to create reagents of a new type for ultrafiltration, flotation, reverse osmosis, flocculation, sorption, highly sensitive sensors for metal ions, where the use of low molecular weight crown ethers is impossible (Fical et.al., 2010; Bezhin, 2015; Liu, 2012). With their help such practically important processes as selective separation of metal ions, concentration of microelements, ligand chromatography, interfacial catalysis, etc. are carried out.

The state and prospects of research development in the field of synthesis and application of polymeric crown ethers are first summarized in monograph (Yergozhin et.al., 1994; Kurmanaliev et.al., 1997). Special attention is paid to the regularities of their formation and mechanisms of complexation of macroligands with metal ions and molecules of some compounds.

There are three main ways to obtain such polymers: polymerization, polycondensation and polymeranalogous transformations of ready-made molecules, using which a variety of polymeric crown ethers have been created (Yergozhin et.al., 1995; Gargol et.al., 2022; Dong, 2013). However, the range of polymeric crown ethers is small. In addition, many of them have a number of disadvantages that limit the possibilities and spheres of their application: it is the complexity and multistage of initial monomers, low thermal and chemical stability, low kinetic and sorption characteristics.

Therefore, we are developing methods for the synthesis of new polymeric macrocycles based on available compounds with improved physicochemical and complexation properties. This paper analyzes the results of research on the synthesis and application of new supramolecular sorbents based on crown ethers. It should be noted that there are no data on the application of sulfochlorinated derivatives of crown ethers for these purposes.

Materials and methods. Dibenzo-12-crown-4 (DB12K4), dibenzo-18-crown-6 (DB18K6), dibenzo-24-crown-8 (DB24K8), dibenzo-30-crown-10 (DB30K10) esters

produced (Cherkassy, Ukraine).

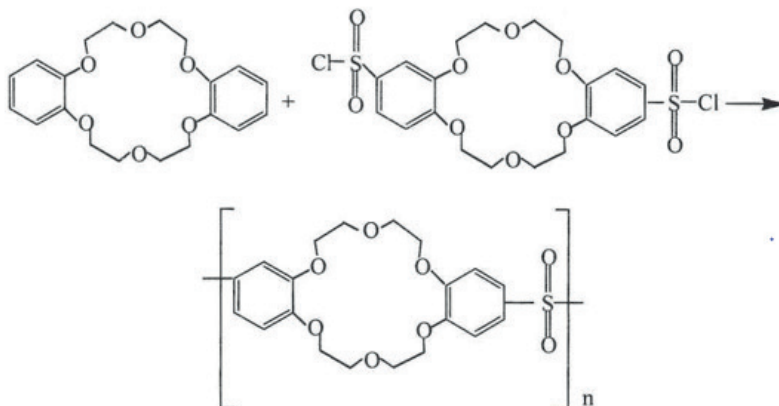
Bischlorosulfonyl derivatives of crown ethers were prepared according to the procedure (Yergozhin, et.al. 1991, Abramov, 2000).

Method of polymer synthesis. Polysulfones based on bischlorosulphonyldibenzo-18-crown-6 and dibenzo-18-crown-6. 0.90 g (0,01 mol) DB18C6 dissolved in nitrobenzene was charged into three-necked reactor equipped with mechanical agitator, refrigerator, thermometer, the 0,01 mol of catalyst (AlCl_3 , SnCl_4 , FeCl_3) was added. Then 1,39 g (0,01 mol) of BCISDBI8C6 were added during few minutes. The reaction mixture was heated from 25° to 140° C. The reaction was carried out 5 h. The product was precipitated in methyl alcohol, washed by 10 % solution of hydrochloric acid to remove the catalyst then it was washed by chlorophorm, distilled by water up to the neutral reaction of washing water, then it was dried un high vacuum. Yield of polymer was equal to 85 %.

The polycondensation of BChSDB24C8 with DADB24C8 was carried out according to the same method. The complexation properties were investigated by the limited solution volume method (Yergozhin et.al. 2020, Voloshina, 2014). Sorption of ions of alkali metals from aqueous and methanol solutions was studied according to the following method: weighed polymer (1,0 g) was placed into the flask of 200 ml, then it was poured by 0,1 M alcohol or aqueous solution of metal salt pf 100ml. The sorbents were separated for 24h. The concentration of metal ions in the filtrate was determined by flame spectrophotometry.

The content of metal ions in solution was determined by atomic adsorption method on a Shimadzu AAC-6650 flame atomization spectrophotometer. Nuclear magnetic resonance spectroscopy (NMR) spectra were recorded on a Mercury-300 spectrometer (300 and 100 MHz). Polymer structure studies were carried out by IR spectroscopy on a «Spectrum Two» IR spectrometer (Perkin Elmer) in the range from 4000 to 450 cm^{-1} . Thermogravimetric analysis of synthesized polymers was carried out on a Perkin Elmer TGA 4000 derivatograph in air. The temperature rise rate was 10°C/min.

Results and their discussion. It is known that in the presence of Friedel-Crafts catalysts sulfochlorides easily interact with aromatic hydrocarbons and some of their derivatives to form compounds containing sulfone bridges and possessing resistance to thermal and thermo-oxidative degradation (Borisov et.al., 2023). Chemical resistance of polysulfones is also high: they are resistant to mineral acids, alkalis, salt solutions, carbon oils. Their features are relatively low moisture absorption and dimensional stability of products in humid atmosphere (Gargol et.al., 2022). This whole spectrum of properties should be inherent in kraun-containing polysulfones as well. Therefore, we obtained such polymers for the first time by polycondensation of bischlorosulfonyl-dibenzo-18-crown-6 with dibenzo-18-crown-6 in the presence of Friedel-Crafts catalysts (FeCl_3 , AlCl_3 , SnCl_4):

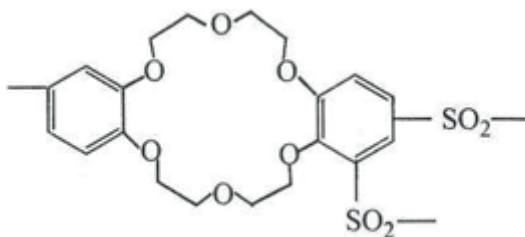


The reaction was carried out in equimolar amounts of the initial monomers, since the yield of soluble polymer decreased in the presence of excess bis(chlorosulfonyl) derivatives, possibly due to side processes. The application of large amounts of catalyst led to the same result.

Table 1 - Effect of the amount of catalysts on the yield and viscosity of crown-containing polysulfones

Catalysts	$\frac{C_{cat}}{C_{rat}}$ C_{SO_2Cl}	T, C°	Time, hour	$\frac{C_{HCl}}{C_{SO_2Cl}}$	Yield, %	Viscosity, pr dl/g
AlCl ₃	1,00	50	20	1,50	13	0,06
SnCl ₄	1,00	50	20	1,40	30	0,09
FeCl ₃	1,00	50	20	1,22	34	0,12
FeCl ₃	1,00	120	20	1,21	32	0,28
FeCl ₃	1,00	120	5	1,19	28	0,26
FeCl ₃	0,1	120	5	1,10	72	0,33
FeCl ₃	0,01	120	5	1,00	85	0,58

As can be seen from table 1, the polymer yield depends significantly on the amount of catalyst used. In its excess, side reactions occur, which create structural irregularities in the macromolecule:



The formation of such structures is evidenced by Proton magnetic resonance (PMR) spectra of the obtained polymers. The character and intensity of signals resonating in the region of protons of the aromatic ring change, which confirms not trisubstitution, but more. The duration of syntheses longer than 5 hour does not affect the yield and viscosity of the resulting polycrownsulfones. Using catalytic amounts of FeCl_3 and a temperature of 120°C , the release of hydrogen chloride ceases and its amount reaches the calculated amount within 5 hour.

The influence of temperature and nature of the catalyst on the polymer yield was studied. It was found that the highest degree of transformation was achieved at a temperature of $100\text{--}120^\circ\text{C}$, duration of synthesis 5 hour in the presence of solvents with proton-donor function. Comparison of the completeness of the polycondensation reaction in the presence of Friedel-Crafts catalysts allows us to place them by activity in the following series: $\text{FeCl}_3 > \text{SnCl}_4 > \text{AlCl}_3$. This change in the activity of the catalysts in this process can be explained by the stability and activity of the intermediate catalyst-sulfochloride group complex formed during the reaction. The strength of the catalyst-sulfochloride group complex increases with increasing shift of the electron cloud from the donor atom to the acceptor atom, i.e., with increasing polarity of the coordination bond, which depends on the chemical properties of the catalyst.

The introduction of a strong electron acceptor group SO_2 promotes the pulling of electrons from the aromatic ring and leads to a decrease in its sensitivity to electrophilic attack, so the entry of a second sulfonyl group into the benzene core of the crown ether becomes unlikely. Apparently, the presence of proton-donating crown rings also plays an important role. All these factors contribute to the synthesis of linear soluble polycrownsulfones.

As the temperature of the mixture increases during polycondensation, the polymer yield increases from 25% at 25°C to 86% at 100°C . At a sufficiently high temperature of 140°C the yield of the target product does not change significantly, and at 250°C crosslinked polymers are formed. It is known (Ergozhin, et.al. 1995) that at temperatures above 250°C sulfochlorides decompose with the formation of radicals, which non-selectively attacking the benzene ring, contribute to the appearance of first branched and then cross-linked structures. Therefore, we did not use the method of synthesis in the melt, which requires high temperatures. Solvents used in the preparation of polysulfones should dissolve the catalyst and not react with it, be resistant to electrophilic attack of sulfonyl cations, dissolve the resulting macromolecule. Such solvents include some chlorinated hydrocarbons (dichloromethane, dichloroethane, chlorinated biphenyl), nitro compounds (nitrobenzene, nitroethane, chloronitrobenzene) and various sulfones (dimethylsulfone, sulfolane, 4,4-dimethyldiphenylsulfone).

Dichloroethane and nitrobenzene turned out to be the most suitable medium in our case. As expected, the reaction of bichlorosulfonyl dibenzo-18-crown-6 with dibenzo-18-crown-b in DMFA gives worse results, the viscosity of the obtained polymers is lower. In the IR spectra of polycrown sulfones, the absorption bands (cm^{-1}) characteristic of the crown ether groups at 1130 (C-O-C bonds of the aliphatic series) and duplet frequencies at 1230, 1250 (C-O bonds at the aromatic ring) are retained. Absorption bands appear in

the region of 1125, 1340 cm^{-1} relating to symmetric and asymmetric valence vibrations of SO_2 groups in sulfones.

Thermogravimetric analysis of polycrownsulfones indicates their high thermal stability. Loss of polymer mass when heated to 200 °C is 3%, complete decomposition of samples occurs at 600 °C. Thus, the insertion of macrocycles into the polymer chain leads to the production of polycrownsulfones, which

can be classified as heat-resistant ones. The selectivity of polymeric crown ethers in the separation of alkali metal ions depends on the size of the crown-ring cavity. The results of investigation of complexation properties of synthesized polycrownsulfones towards alkali metal ions under static conditions from standard solutions show that regardless of the nature of anions the following sequence of extraction of cations with DB12K4, DB18K6 and DB24K8 groups $\text{Li}^+ > \text{Na}^+ > \text{K}^+ > \text{Rb}^+$, $\text{K}^+ > \text{Rb}^+ > \text{Na}^+ > \text{Cs}^+ > \text{Li}^+$ и $\text{Cs}^+ > \text{Rb}^+ > \text{K}^+ > \text{Na}^+ > \text{Li}^+$, respectively. Polysulfone with DB30K10 groups does not show selectivity for K^+ , Na^+ и Cs^+ ions (Table 2). Conducting complexation in alcoholic solutions contributes to an increase in the degree of extraction, which is associated with less hydration of metal salts in these media. The higher complexation ability of polycraunsulfone compared to low-molecular analogs is due to the effect of the polymer chain.

The selectivity of the complexation ability of crown ethers, and consequently, the efficiency of extraction of a particular metal from solution depend to a large extent on the correspondence between the size of the cavity diameter of the polyether cycle and the cation of the extracted alkali metal, the nature of the substituent in the macrocycle, and the type of donor atoms.

Table 2 - Results of investigation of complexation properties of synthesized polycrownsulfones

Crown ether group	Crown ether group content, mmol/g	Exchange capacity, mmol/g				
		Li ⁺	Na ⁺	K ⁺	Rb ⁺	Cs ⁺
DB12K4	2,98	0,62	0,54	0,38	0,19	trace amount
DB 18K6	2,36	0,12	0,80	1,93	1,18	0,62
DB 18K8	1,95	0,08	0,54	1,00	2,30	1,68
DB 30K10	1,66	0,20	0,48	1,25	1,27	1,30

Thus, for the first time, the optimal conditions for the preparation of kraun-containing polysulfones with high thermal stability capable of selectively separating alkali metal ions were established.

Conclusions. In this study, novel crown ether-containing polysulfones were successfully synthesized through the polycondensation of bis(chlorosulfonyl) derivatives of dibenzo-crown ethers in the presence of Friedel–Crafts catalysts. The influence of various synthesis parameters, including catalyst type and concentration, temperature, and solvent nature, on the polymer yield and properties was thoroughly investigated. Optimal reaction conditions were identified, providing high yields and favorable viscosities of the resulting polymers.

Spectroscopic (IR, NMR) and thermal analyses confirmed the formation of the target polycrownsulfones and demonstrated their high thermal stability, with decomposition

temperatures reaching up to 600°C. The synthesized polymers exhibited selective complexation capabilities towards alkali metal ions, with extraction efficiency depending on the size of the crown ether cavity and the solvent medium. The use of alcoholic solutions significantly enhanced metal ion sorption due to reduced hydration effects.

The obtained polycrownsulfones not only maintain the advantageous complexation characteristics of their low-molecular-weight counterparts but also offer improved physicochemical stability, reusability, and enhanced extraction efficiency. These properties make them promising candidates for application in selective ion separation, analytical chemistry, sensor development, and other advanced separation technologies.

Литература

D. Ficai, A. Ficai, G. Voicu, B. Vasile, C. Guran, E. Andronescu (2010) Polysulfone based Membranes with Desired Pores Characteristics. *Materiale Plastice*. — Vol. 47. — № 1. — P. 24-27.

Dong S., Gao L., Chen J., Yu G., Zheng B., & Huang F. (2013) A supramolecular polymer formed by the combination of crown ether-based and charge-transfer molecular recognition. *Polymer Chemistry*, 4(4). — P. 882-886.

Duan Z., Xu F., Huang X., Qian Y., Li H., & Tian W. (2022) Crown Ether-Based Supramolecular Polymers: From Synthesis to Self-Assembly. *Macromolecular Rapid Communications*, 43(14), 2100775.

Gargol M., Podkoscielna B. (2022) Synthesis and Characterization of Polymeric Blends Containing Polysulfone Based on Cyclic Bisphenol. *Polymers*, 14. — P. 3148-68

Huang F., & Scherman O.A. (2012) Supramolecular polymers. *Chemical Society Reviews*, 41(18). — P. 5879-5880.

Jonathan W. Steed, Jerry L. Atwood. *Supramolecular Chemistry*, 3rd Edition. John Wiley&Sons (2022). — 1216 p.

Liu Y., Wang Z., & Zhang X. (2012). Characterization of supramolecular polymers. *Chemical Society Reviews*, 41(18). — P. 5922-5932.

Yakshin V.V., Vilkova O.M., Tsarenko N.A., Tsivadze A.Yu. (2010) Metal extraction from nitric acid solutions by the macrocyclic endoreceptor dicyclohexyl-18-crown-6 immobilized in a polymer matrix. *Doklady Chemistry*. 430(2). — P. 54–57.

Абрамов А.А. (2000) Экстракция катионов краун-эфирами. *Вест., Моск.ун-та. Сер.химия.* т.41.№1. — P. 3-15.

Бежин Н.А., Довгий И.И. (2015) Сорбенты на основе краун-эфиров: получение и применение для извлечения стронция, *Усп. хим.*, 84:12 (2015). — P. 1279–1293; *Russian Chem. Reviews*, 84:12, 1279–1293

Борисов В.Л., Матвеев Д.Н., Анохина Т.С., Шахмурзов К.Т. и др. (2023) Синтез и свойства полисульфонов. *Мембраны и мембранные технологии.*, том 13, № 3. — С. 248–256

Волошина Н.С., Камалов Г.С. (2014) Краун-эферы, иммобилизованные на поверхности полимерных материалов и кремнезема. *Физикохимия поверхности и защита материалов.* Том 50, № 5. — С. 483-495

Ергожин Е.Е., Курманалиев М.К. (1994) Полимеры на основе краун-соединений, Алматы: Гылым. — 272 с.

Ергожин Е.Е., Курманалиев М.К. (2010) Основы ионного обмена, Алматы, Алманахъ. — 274 с.

Ергожин Е.Е., Курманалиев М.К. (1995) Поликраун эфиры, проблемы и перспективы. *Изв. НАН РК. Серия химич.* -№1. — С. 4-257

Ергожин Е.Е., Курманалиев М.К., Идрисова К.С. (1991) Синтез и исследование свойств краунсодержащих полисульфонамидов. *Докл. АН СССР.* Т.320, №6. — С.1389-1391

References

Abramov A.A. (2000) Ekstrakciya kationov kraun-efirami. [Extraction of cations with crown ethers]. *Vest., Mosk. Univ. Ser. chemistry.* v. 41. №1. — P. 3-15. (in Russian)

Bezhin N.A., Dovgy I.I. (2015) Sorbenty na osnove kraun-efirov: poluchenie i primenenie dlya



izvlecheniya stronciya [Sorbents based on crown ethers: production and application for strontium extraction], *Usp. chem.*, 84:12 (2015). — P. 1279–1293; *Russ. Chem. Reviews*, 84:12, 1279–1293/ (in Russian)

Borisov V.L., Matveev D.N., Anokhina T.S., Shakhmurzov K.T. et al. (2023) Sintez i svojstva polisul'fonov [Synthesis and properties of polysulfones]. *Membranes and membrane technologies.*, v.13, no.3. — P. 248–256. (in Russian)

D. Ficai, A. Ficai, G. Voicu, B. Vasile, C. Guran, E. Andronescu (2010) Polysulfone based Membranes with Desired Pores Characteristics. *Materiale Plastice.* — Vol. 47. — № 1. — P. 24–27. (in Eng.)

Dong S., Gao L., Chen J., Yu G., Zheng B., & Huang F. (2013) A supramolecular polymer formed by the combination of crown ether-based and charge-transfer molecular recognition. *Polymer Chemistry*, 4(4). — P. 882–886. (in Eng.)

Duan Z., Xu F., Huang X., Qian Y., Li H., & Tian W. (2022) Crown Ether-Based Supramolecular Polymers: From Synthesis to Self-Assembly. *Macromolecular Rapid Communications*, 43(14), 2100775. (in Eng.)

Ergozhin E.E., Kurmanaliev M.K. (1994) Polimery na osnove kraun-soedinenij [Polymers based on crown compounds], *Almaty: Gylm.* — P. 272 (in Russian)

Ergozhin E.E., Kurmanaliev M.K. (1995) Polikraunefiry, problemy i perspektivy [Polycrown ethers, problems and prospects]. *Izvestiya NAS RK. Series of chemical.* — №1. — P. 4–257. (in Russian)

Ergozhin E.E., Kurmanaliev M.K. (2010). *Osnovy ionnogo obmena [Fundamentals of ion exchange]*, *Almaty, Almanac.* — 274 p. (in Russian)

Ergozhin E.E., Kurmanaliev M.K., Idrisova K.S. (1991) Sintez i issledovanie svojstv kraunsoderzhashchih polisul'fonamidov [Synthesis and study of the properties of crown-containing polysulfonamides]. *Reports of the USSR Academy of Sciences.* Vol.320, No.6. — P.1389–1391. (in Russian)

Gargol M., Podkoscielna B. (2022) Synthesis and Characterization of Polymeric Blends Containing Polysulfone Based on Cyclic Bisphenol. *Polymers*, 14. — P. 3148–68 (in Eng.)

Huang, F., & Scherman, O. A. (2012). *Supramolecular polymers.* *Chemical Society Reviews*, 41(18). — P. 5879–5880.

Jonathan W. Steed, Jerry L. Atwood. *Supramolecular Chemistry*, 3rd Edition. John Wiley&Sons. (2022). — 1216 p. (in Eng.)

Liu, Y., Wang, Z., & Zhang, X. (2012). Characterization of supramolecular polymers. *Chemical Society Reviews*, 41(18). — P. 5922–5932. (in Eng.)

Voloshina N.S., Kamalov G.S. (2014) Kraun-efiry, immobilizovannye na poverhnosti polimernyh materialov i kremnezema [Crown ethers immobilized on the surface of polymeric materials and silica]. *Surface physicochemistry and material protection.* Vol. 50, No. 5. — P. 483–495/ (in Russian)

Yakshin V.V., Vilkova O.M., Tsarenko N.A., Tsivadze A.Yu. (2010) Metal extraction from nitric acid solutions by the macrocyclic endoreceptor dicyclohexyl-18-crown-6 immobilized in a polymer matrix. *Doklady Chemistry.* 430(2). — P. 54–57. (in Eng.)

<https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.377>

MPHTI 61.43.39

УДК 661.183.2

© Y.A. Mussatay*, M.I. Tulepov, 2025.

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: esenshon104@mail.ru

CARBON FILTERS FROM RICE HUSK FOR AIR PURIFICATION IN CONFINED SPACES

Mussatay Yessengeldi — 2nd year doctoral student, Al-Farabi Kazakh National University, Department of Chemical Physics and Materials Science, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: esenshon104@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-3735-0886>;

Tulepov Marat — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Chemical Physics and Materials Science, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: marat.tulepov@kaznu.kz, ORCID ID : <https://orcid.org/0000-0002-6449-9571>.

Abstract. The high protective efficiency of filters used in the ventilation systems of vehicles, underground mining workings, industrial facilities, and enclosed airtight spaces (armored vehicles, submarines, spacecraft) is a crucial factor in ensuring the safety of personnel and crew. This study presents the results of an investigation into the composition, textural, and sorption properties of a multichannel carbon-based filtering material developed for air purification from biological (infectious) contaminants. The filter is a cylindrical multichannel block fabricated via extrusion of a pliable mixture of rice husk char and binders, followed by firing, activation, and demineralization. The operating principle is based on air disinfection through contact with a porous material impregnated with broad-spectrum agents active against bacteria, bacilli, protozoa, and fungi. The high sorption capacity of the material and the large contact surface area of the filter enhance its purification efficiency. X-ray diffraction analysis revealed the presence of amorphous carbon with a turbostratic structure, predominantly containing sp- and sp²-hybridized carbon atoms not incorporated into regular graphene lattices. The operational efficiency of the filter-ventilation system is evaluated based on the reduction in airborne dust concentration, taking into account its particle size distribution. The results confirm the potential of the proposed material for application in air purification and disinfection systems under conditions of elevated biological risk. Future research should focus on optimizing synthesis conditions and investigating the adsorption kinetics of pollutants, which will enable broader application in water purification systems and environmental protection.

Keywords: Sorbent, filter, air purification, carboxymethyl cellulose, rice husk, ventilation system



© Е.А. Мұсатай*, М.И. Тулепов, 2025.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: esenshon104@mail.ru

ШАҒЫН КЕҢІСТІКТЕГІ АУАНЫ ТАЗАРТУҒА АРНАЛҒАН КҮРІШ ҚАУЫЗЫ НЕГІЗІНДЕГІ КӨМІРТЕК ҚҰРАМДЫ СҮЗГІЛЕР

Мұсатай Есенгелді Амангелдіұлы — 2-курс докторанты, Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Химиялық физика және материалтану кафедрасы, Алматы, Қазақстан,

E-mail: esenshon104@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-3735-0886>;

Тулепов Марат Изтлеуович — химия ғылымдарының кандидаты, Химиялық физика және материалтану кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Химия және химиялық технология факультеті, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: marat.tulepov@kaznu.kz, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6449-9571>.

Аннотация. Көлік құралдарының желдету жүйелерінде, жер астындағы кен өндіру орындарында, өнеркәсіптік нысандарда және жабық герметикалық кеңістіктерде (бронетехника, сүңгуір қайықтар, ғарыш аппараттары) қолданылатын сүзгілердің жоғары қорғаныш тиімділігі персонал мен жеке құрамның қауіпсіздігін қамтамасыз етудің маңызды шарты болып табылады. Бұл зерттеу ауаны зиянды газдармен ластанудан тазартуға арналған көп арналы көміртекті сүзгі материалының құрамын, құрылымын және сорбциялық қасиеттерін зерттеу нәтижелерін ұсынады. Сүзгі-цилиндрлік көп арналы блок, ол күріш қабығының карбонизатының пластикалық қоспасын байланыстырғыш заттармен экструзиялау арқылы жасалады, содан кейін күйдіру, белсендіру және минералдандыру жүреді. Сүзгінің жұмыс принципі кең спектрлі және бактерияларға, бациллаларға, қарапайымдыларға, саңырауқұлақтарға қарсы белсенді заттармен импрегнацияланған кеуекті материалдың бетімен байланыста болған кезде ауа ағынын дезинфекциялауға негізделген. Материалдың жоғары сорбциялық қабілеті және сүзгінің үлкен жанасу беті ауаны тазарту тиімділігіне ықпал етеді. Рентгендік дифракциялық талдау тұрақты графен торларына ендірілмеген sp^2 - және sp^2 -будандастырылған көміртектің болуы анықталды. Сүзгі желдету жүйесінің жұмыс тиімділігі оның дисперсті құрамын ескере отырып, ауа ортасындағы шаң концентрациясының төмендеу дәрежесі бойынша анықталады. Нәтижелер жоғары биологиялық қауіп жағдайында ауаны тазарту және дезинфекциялау жүйелерінде пайдалану үшін ұсынылған материалдың әлеуетін растайды. Болашақ зерттеулерді синтез жағдайларын оңтайландыруға және ластаушы заттардың адсорбция кинетикасын зерттеуге бағыттау орынды, бұл олардың су тазарту жүйелерінде және қоршаған ортаны қорғау технологияларында қолданылу аясын кеңейтуге мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: сорбент, сүзгі, ауаны тазарту, карбоксиметилцеллюлоза, күріш қауызы, желдету жүйесі

© Е.А. Мұсатай*, М.И. Тулепов,

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан.

E-mail: esenshon104@mail.ru

УГЛЕРОДНЫЕ ФИЛЬТРЫ ИЗ РИСОВОЙ ШЕЛУХИ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОЗДУХА В СТЕСНЕННЫХ ПОМЕЩЕНИЯХ

Мұсатай Есенгелді Амангелдіұлы — докторант 2-го курса, КазНУ им. аль-Фараби, кафедра Химической физики и материаловедения, Алматы, Қазақстан,

E-mail: esenshon104@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-3735-0886>;

Тулепов Марат Изтлеуович — кандидат химических наук, ассоциированный профессор кафедры Химической физики и материаловедения, факультет Химии и химической технологии, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: marat.tulepov@kaznu.kz, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-6449-9571>.

Аннотация: Высокая защитная эффективность фильтров, применяемых в системах вентиляции транспортных средств, подземных горных выработок, промышленных объектов и замкнутых герметичных пространств (бронетехника, подводные лодки, космические аппараты), является важным условием обеспечения безопасности персонала и личного состава. В данном исследовании представлены результаты изучения состава, текстурных и сорбционных свойств многоканального углеродного фильтрующего материала, разработанного для очистки воздуха от биологических (инфекционных) загрязнений. Фильтр представляет собой цилиндрический многоканальный блок, изготавливаемый экструзией пластичной смеси карбонизата рисовой шелухи со связующими веществами, с последующим обжигом, активацией и деминерализацией. Принцип работы фильтра основан на дезинфекции потока воздуха при контакте с поверхностью пористого материала импрегнированного веществами обладающими широким спектром действия и активных в отношении бактерий, бацилл, простейших, грибов. Высокая сорбционная способность материала и большая контактная поверхность фильтра способствуют эффективности очистки воздуха. Рентгеновский дифракционный анализ выявил наличие аморфного углерода в турбостратической структуре с преобладанием sp - и sp^2 - гибридованных атомов углерода, не встроенных в регулярные графеновые решетки. Рабочая эффективность фильтровентиляционной системы определяется по степени снижения концентрации пыли в воздушной среде с учётом её дисперсного состава. Полученные результаты подтверждают потенциал предлагаемого материала для использования в системах очистки и дезинфекции, воздуха в условиях повышенного биологического риска. Будущие исследования целесообразно сосредоточить на оптимизации условий синтеза и изучении кинетики адсорбции загрязняющих веществ, что позволит расширить потенциал их применения в системах очистки воды и технологиях охраны окружающей среды.

Ключевые слова: сорбент, фильтр, очистка воздуха, карбоксиметилцеллюлоза, рисовая шелуха, вентиляционная система



Введение. В воздухе атмосферы всегда присутствуют различные примеси, которые классифицируются как физические, механические и биологические загрязнители воздуха. Механические загрязнения включают твёрдые частицы различного размера и состава, обладающие абразивными свойствами (пыль, частицы металлов, минеральные примеси). Они могут образовываться в результате процессов горения органического топлива, строительных и горнодобывающих работ, а также при подземных операциях (Родионов, 1989). Физические факторы загрязнения атмосферы связаны с воздействием искусственных источников, также к физическим факторам можно отнести тепловые, шумовые, электромагнитные и радиоактивные излучения. К биологическим загрязнениям относятся размножения микроорганизмов в результате антропогенной деятельности. Разные загрязнения отличаются воздействием и свойствами. К токсичным веществам в атмосферном воздухе являются: CO (оксид углерода), NO_x (оксиды азота), SO₂ (диоксид серы), пылевые частицы, различные углеводороды (Буренин, 2004).

С учетом токсичности, распространенности, а также опасности загрязнители классифицируются на группы: основные (критериальные) вещества, загрязняющие атмосферу – это фотохимические оксиданты, углеводороды, диоксид серы, оксиды азота, оксид углерода, твердые частицы; ароматические полициклические углеводороды, пестициды; постоянные газы (фторхлорметаны, диоксид углерода и пр.); загрязнители, оказывающие разностороннее воздействие на живой организм (альдегиды, озон, полихлорированные бифенилы (ПХБ), нитраты, нитрозамины, сульфаты и пр.) (Попова, 2021).

С ростом технологических линий промышленных объектов, развитие стройиндустрии и производства, углубления в объектах добычи полезных ископаемых значительно повысились требования к санитарной и технологической чистоте воздуха, что явилось результатом разработки обновленных стандартов и других документов (Mutushev, 2025; Атаманов, 2017). Существуют новые стандарты оценки качества воздушных фильтров в Европе EN 779-93 и EN 1822-98, который является стандартом для фильтров очистки воздуха, устанавливаемых в системах кондиционирования и вентиляции зданий и сооружений. В условиях подземной добычи в горнодобывающем секторе, метро и туннелестроении в условиях ограниченной проветриваемости помещения появляются возбудители опасных и особо опасных инфекционных заболеваний, и защита работающего персонала остается весьма актуальной проблемой. Она требует постоянного совершенствования существующих, а также разработки новых средств и методов обеспечения биологической безопасности.

Решением этих проблем остается вентиляция и поиск эффективных фильтрующих материалов с целью изготовления на их основе новых высокоэффективных антибактериальных фильтров очистки воздуха. Для высокоэффективной очистки воздуха наибольшее применение находят фильтры на основе тонковолокнистых материалов из ультратонких стеклянных и синтетических волокон, металлокерамики, а также базальтового супертонкого (0,1–0,4 мкм) волокна (Chiang, 2001).

Подбор и оптимизация свойств фильтрующих материалов основаны на экспериментальной оценке их защитной эффективности с помощью физико-химических и биологических индикаторов. В микробиологической практике обычно используются фильтры, изготовленные на основе волокнистых фильтрующих материалов, имеющие значительную поверхность фильтрации. Отечественной промышленностью серийно выпускаются высокоэффективные фильтры на основе фильтрующего материала из полиакрилнитрилового волокна для очистки технологического воздуха.

Загрязнение атмосферного воздуха - одна из наиболее актуальных экологических и социальных проблем современности. Загрязнённый воздух содержит различные твёрдые частицы, вредные химические газы, а также бактерии, вирусы и другие вредные примеси. Влияние этих загрязняющих веществ на организм человека и экосистемы тщательно изучено, и доказано, что они способствуют развитию многочисленных заболеваний и увеличению показателей преждевременной смертности. Атмосферный воздух может содержать широкий спектр вредных газообразных примесей, включая соединения серы и азота (такие как диоксид серы - SO_2 , сульфат-анионы - SO_4^{2-} , нитрат-анионы - NO_3^-), оксиды углерода (например, угарный газ - CO), формальдегид (HCHO), а также различные летучие органические соединения. В последние годы серьёзную обеспокоенность вызывает также распространение бактерий и вирусов, передающихся воздушно-капельным путём. В связи с этим возрастает необходимость в разработке эффективных и безопасных воздушных фильтров (Сульга, 2001; Дроздов, 2007).

Современные воздушные фильтры, используемые в системах жизнеобеспечения, как правило, основаны на механических и адсорбционных механизмах очистки. Однако в условиях замкнутых пространств бронетехники их эффективность по инаktivации биологических загрязнителей, включая бактерии и вирусы, остаётся недостаточной. Это создаёт риск распространения инфекционных агентов среди экипажа, особенно при длительном пребывании в герметичной среде. В связи с этим актуальной задачей является разработка фильтрующих материалов с выраженными антибактериальными свойствами, способных не только улавливать патогенные микроорганизмы, но и эффективно подавлять их жизнедеятельность, при этом оставаясь экономически целесообразными. (Cuadros-Lugo, 2022; Jahan, 2024)

На сегодняшний день угольные фильтры находят широкое применение как в бытовых, так и в промышленных условиях - включая удаление табачного дыма, паров лакокрасочных материалов и химических растворителей. Они также используются в автомобильных системах вентиляции и кондиционирования воздуха. Степень эффективности таких фильтров напрямую зависит от морфологии структуры, взаимодействия между фильтрующими компонентами и качества связующего материала. Использование волокнистых или наноструктурированных связующих позволяет усилить прочность фильтрующих слоёв и повысить степень улавливания загрязняющих веществ.

Методы и материалы. В ходе экспериментов использовались химические

реактивы аналитической чистоты без дополнительной очистки. Углеродные фильтрующие материалы были получены путем термической карбонизации рисовой шелухи в смеси пропана и бутана при температурах от 300 до 800°C. Температурный режим в трубчатом реакторе контролировался с помощью программируемой линейной системы нагрева от комнатной температуры до 800°C с выдержкой при максимальной температуре до 120 минут.

В качестве основного сырья была выбрана рисовая шелуха благодаря высокому содержанию органических и минеральных компонентов - а именно целлюлозы, лигнина, пентозанов и золы, последняя из которых состоит на 92–97% из диоксида кремния. Этот материал классифицируется как быстро возобновляемый и экологически чистый источник биомассы. Химический состав сырья, представленный в таблице 1, был определён методами классического («мокрого») химического анализа: содержание жиров - методом эфирной экстракции, белков - по содержанию азота с последующим пересчётом по методу Кьельдаля, зольность - по остатку после прокаливания, влажность - по величине сухого остатка.

Таблица 1 - Химический состав рисовой шелухи (% мас.):

Компонент	Содержание, % (масс)
Вода	3,75 – 24,08
Зола	11,86 – 31,78
Пентозан	4,52 – 37,0
Целлюлоза	34,32 – 43,12
Лигнин	19,2 – 46,97
Протеин	1,21 – 8,75
Жиры	0,38 – 6,62

Выбор рисовой шелухи обусловлен тем, что в состав данного сырья входит целлюлоза, лигнин и минеральная зола, состоящая на 92–97% из диоксида кремния. Сырье из рисовой шелухи относится к быстро возобновляемым источникам и является экологически чистым.

В работе также использовались: Водород (марка А ГОСТ 3022-80) H_2 - 99,92% (O_2 , CH_4 , CO_2 , CO) - 0,08 %, H_2O - 0,004%; Пропан; . Аргон (особой чистоты ГОСТ 10157-79) Ar - 99,992 %, O_2 - 0,0007 %, N_2 - 0,006 %; Азот N_2 - 96,30 %, O_2 - 3,70 %, хлоргексидин биглюконат, дубильная кислота. Йод с концентрациями 50–340 мг/л, растворы тиосульфата натрия $Na_2S_2O_3$ с концентрацией 0.01 М, крахмал ($C_6H_{10}O_5)_n$ в качестве связующего компонента для карбонизатов углерода была применена карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ [$C_6H_7O_2(OH)_3 - x(OCH_2COOH)_x$]). Для установления сорбционных равновесии использовали конические колбы на 250 мл.

Золу, полученную после сжигания рисовой шелухи, целесообразно дополнительно исследовать методом рентгенофлуоресцентного анализа (XRF) для определения содержания кремния, кальция и других минеральных компонентов. Такой подход позволяет проследить динамику удаления кремния при обработке щелочью и оценить эффективность процесса модификации минеральной части сырья.

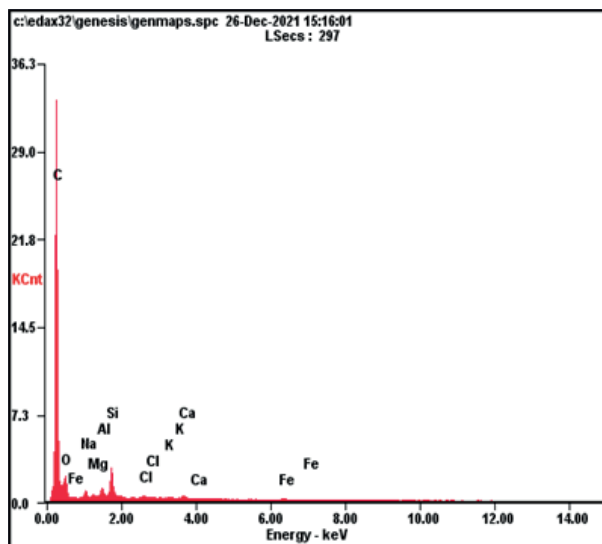


Рисунок 1 - Рентгено-флуоресцентный анализ материала блока.

Element	Wt%	At%
C	86.57	91.06
O	8.92	7.04
Na	0.64	0.35
Mg	0.13	0.07
Al	0.65	0.30
Si	1.75	0.79
Cl	0.29	0.10
K	0.22	0.07
Ca	0.34	0.11
Fe	0.49	0.11
Matrix	Correction	ZAF

Как видно из результатов анализа материал состоит основном из углерода и оксида кремния. В небольшом количестве присутствуют карбонаты щелочных и щелочноземельных металлов.

Характеристики материалов. Для изготовления фильтра был выбран углеродно-кремниевый материал, полученный карбонизацией оболочки рисовой шелухи. Выбор определился пористостью с высокой удельной поверхностью и объемом пор материала, а также наличием в его составе тонко диспергированных частиц углерода и оксида кремния. Для формования материала в фильтрующие блоки с сотовой структурой выполнен подбор связующего компонента, в качестве которого была применена карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ). Варьируя соотношения карбонизата рисовой шелухи и КМЦ, была получена пластичная масса, пригодная для получения блоков с сотовой структурой методом

экструзии. Изделия после формования в экструдере высушивались и подвергались термообработке с целью полной карбонизации. Дальнейшая обработка в кипящем растворе гидроксида натрия проведена для частичной десиликации материала и увеличения объема пор. При последующей физической активации блоков в среде углекислого газа материал блоков приобрел развитую макро- и микроструктуру с большим объемом пор.

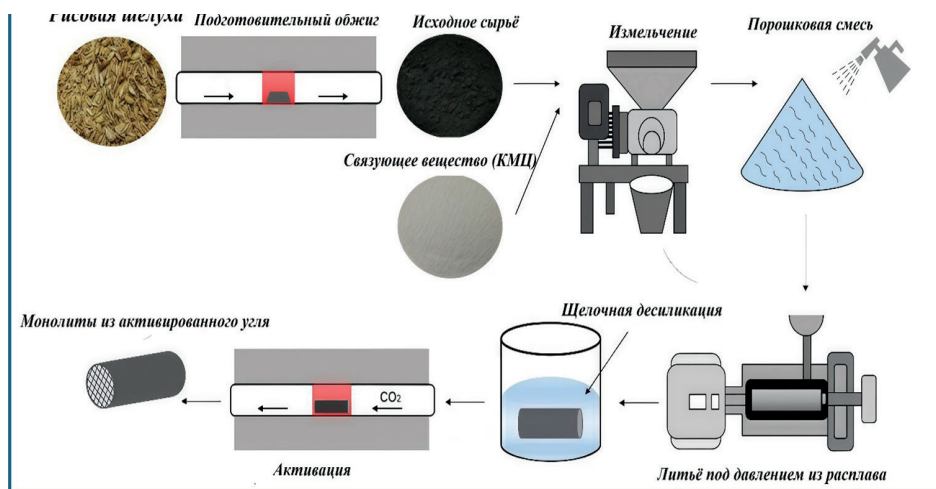


Рисунок 2 - Технологическая схема изготовления многоканального углеродного блока.

Проверку эффективности этих типов фильтрующих материалов можно осуществить на разработанной нами стендовой установке. Испытательная конструкция углеродно-кремниевых сорбентов (УКС) была собрана на двухкамерной емкости, крепленная из органического стекла, общим объемом $25 \times 21 \times 15 \text{ см}^3$. В качестве антибактериального компонента был взят хлоргексидин. Схема конструкции показана на рисунке 3. Передняя стенка изготовлена из листового полипропилена, где круглые образцы субстратов из углеродно-кремниевой подложки диаметром 44 мм и толщиной 1 см были закреплены в круглые отверстия передней стенки. Диаметр линейно-сквозных пор УКС составляет порядка 0,5-5,0 мкм. Всего таких подложек 9 штук.

Конструкция состоит из двух блоков, на первом блоке помещен блок питания для вентилятора. Вентилятор подключен к источнику постоянного тока, его мощность обеспечивается посредством переменного тока с напряжением 220 В, выходные напряжения и токи источника тока и вентилятора совпадают и составляют $U \sim 12 \text{ В}$, $I \sim 0.7 \text{ А}$, соответственно.

Первый блок обеспечивает активный поток воздушной атмосферы через воздуховод вентилятора ко 2 второму блоку. На втором блоке устанавливается раствор хлоргексидина, помещённый в специальную емкость, с помощью низкочастотного минигенератора, испускающий хлоргексидин в виде пара в объем 2-го блока. Далее, поток хлоргексидина под давлением воздуха поступает в образцы углеродно-кремниевых сорбентов. Здесь в сорбентах вирусы и бактериальные микробъекты импрегнируются в узких мембранах и клеточных стенках мезапористой структуры углеристо-кремниевых образцах.

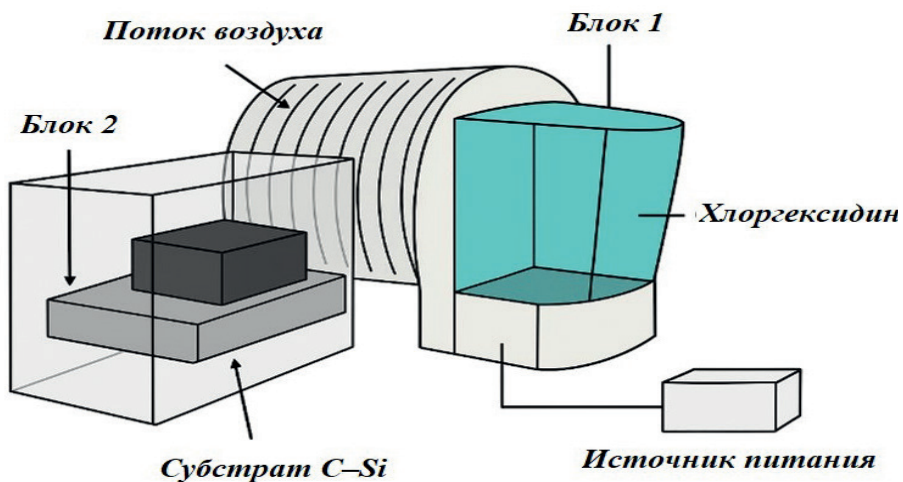


Рисунок 3 - Конструкция испытательного стенда воздушного потока углеродно-кремниевых сорбентов

На выходе, после прохождения из УКС импрегнированные воздушные массы раствора хлоргексидина распространяются в качестве спрея антивирусного и антибактерицидного вещества для защиты от инфекционных вирусов, микробов и бактерий. Таким образом, сорбенты с размерами 0,5-5,0 мкм предотвращают проникновение бактерий и вирусов наружу, что позволяет удалять вредные и опасные бактерии в воздухе. Данное устройство также можно использовать как дезинфицирующий прибор для домашних и бытовых целей, в этом случае во втором блоке вместо хлоргексидина можно заменить другим дезинфицирующим веществом.

Недостатком данной модели является то, что сравнительно большая часть очищаемого воздуха проходит через боковую поверхность фильтрующего элемента, для снижения этого эффекта была изготовлена модель миниатюрной конструкции углеродно-кремниевого сорбента для повседневного использования (рисунок 4), однако в этой конструкции отсутствует вентиляционная система в отличие от разработанного устройства на рисунке 3.

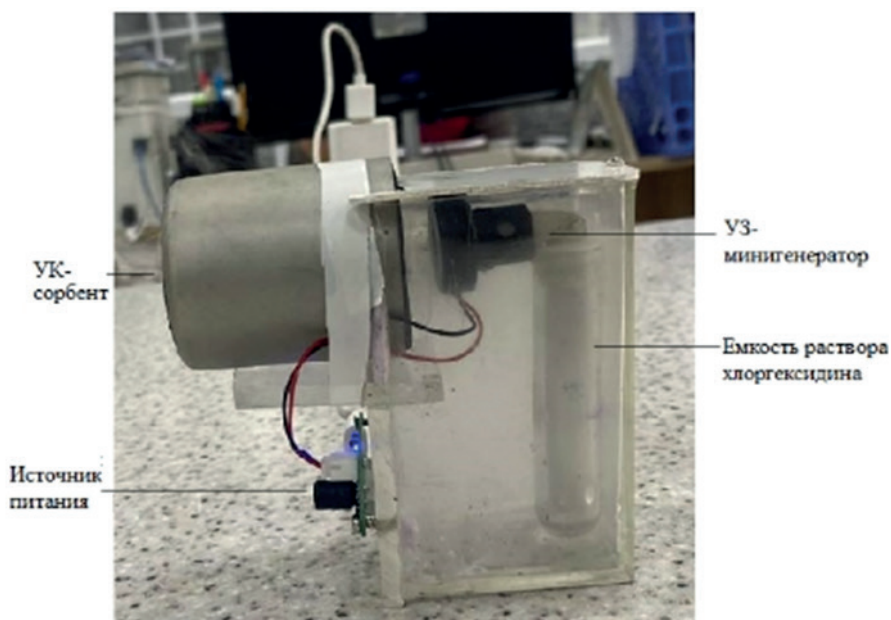


Рисунок 4 - Миниатюрной конструкции углеродно-кремниевого сорбента для повседневного использования

Как показано на рисунке 4, в конструкции углеродкремниевого сорбента включается система с низкочастотным минигенератором. Здесь ультразвуковой минигенератор используется в качестве источника распыления хлоргексидина и раствор распыляется через углеродно-кремниевый сорбент на окружающую среду. Время генерации распыления хлоргексидина зависит от количества содержания раствора в емкости. В частности, производительность рабочей смены составило от 4 до 10 часов.

Таким образом, время работы прибора за один раз достаточно для непрерывного функционирования в качестве детектора антивирусной и антибактерицидной спрей-защиты от инфекционных вирусов, бактерий и микробов для дезинфекции. В конце отметим, что изготовленные образцы углеродно-кремниевых сорбентов показали эффективную способность как импрегнирующий источник антибактерицидных и антивирусных спрей для окружающей воздушной среды.

Результаты и обсуждение.

Спектроскопические исследования параметров углеродных фильтров

Углеродные фильтры снимались в спектрах методом РФА, как и следовало ожидать полученные углеродные материалы подвержены разнообразным искажениям. Как показано на рисунке 4 наблюдается деформируемость углеродного каркаса, что связано с их высокой активностью и подвижностью графеновых стенок в углероде, в виду слабых ван-дер – вальсовского взаимодействия между атомами углерода.

Дифрактограммы от графитоподобных углей представляют совокупность

рефлексов 001 и hk , которые отвечают дифракционным эффектам от атомов, принадлежащих разным графеновым сеткам и расположенных в пределах одной и той же графеновой сетки, соответственно (Christopherson, 2020; Lim, 2018).

Как показано на рисунке 4 основными параметрами структуры углеродного каркаса являются средние размеры областей когерентного рассеяния (ОКР), которые ассоциируются с графитоподобными кристаллитами. На вышеприведенных дифрактограммах представлены близкорасположенные, для этих углеродных материалов интенсивные пики, они уширились из-за наличия искажений и малых размеров графитоподобных кристаллитов и слились настолько, что представлены одной линией, после одного интенсивного пика, последний графитовые рефлексы, которые приобрели диффузный характер. В целом дифрактограмма характеризуется наличием «аморфного» углерода, не входящего в состав графеновых сеток.

Дифракционный анализ показывает наличие значительного количества аморфного углерода, не входящего в регулярные графеновые структуры. Такая структура типична для активированных углеродных материалов, полученных при условиях, вызывающих частичное разрушение графеновых плоскостей и образование мезопористой аморфно-кристаллической фазы (Moseenkov, 2023).

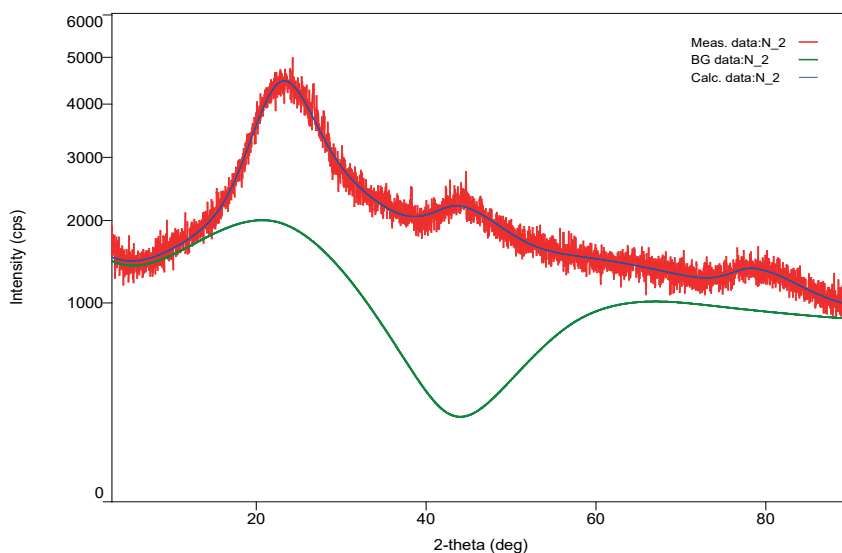


Рисунок 5 - Дифрактограммы от графитоподобных углеродных материалов

Полученный комбинированный углеродный материал на основе карбометилцеллюлозы и карбонизата рисовой шелухи был исследован методом Раман спектроскопии (рисунок 6).

Как видно из рисунка 6 карбонизат рисовой шелухи с КМЦ имеют 2 пика

характеризующие образования нового углеродного соединения, имеющего в своем составе комбинированную углеродную матрицу из карбонизата рисовой шелухи и КМЦ.

Образуемые два пика характеризуют присутствие морфологии углерода, но здесь следует учитывать один факт, что в процессе карбонизации углерод может появиться и из карбометилцеллюлозы, иными словами мы видим углеродные материалы изолированные в матрице с производными из метилцеллюлозы, из чего можно заключить, что появляются микрокристаллиты углерода. В карбонизатах природного и синтетического происхождения микрокристаллиты углерода расположены неупорядоченно и образуют турбостратную структуру (Gupta, 2020; Nuraly, 2024).

Атомы углерода в турбостратной структуре не занимают идеальных положений, а смещены относительно плоскости сетки в пределах 0,14-0,17 Å. Такое смещение объясняется тем, что в турбостратной структуре атомы углерода находятся в ином валентном состоянии, чем характерная для графита sp^2 -гибридизация. При этом часть атомов углерода, особенно периферийных, находится в sp -гибридном состоянии. Таким образом, можно сделать вывод, что углеродные материалы – это сложные объекты, различающиеся комплексом механических, физико-химических и иных свойств, зависящих от структуры исходного сырья и способов его получения. Для оценки наличия в полученных углеродных сорбентах реакционно-способных функциональных групп была проведена ИК-спектроскопические исследования с использованием ИК-Фурье спектрометр (рисунок 7).

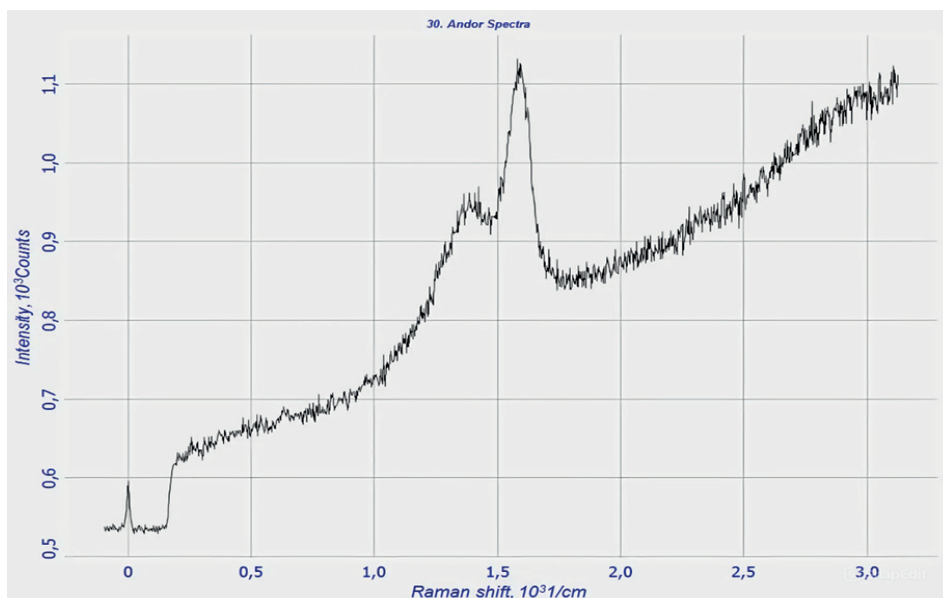


Рисунок 6 - Карбонизат рисовой шелухи с КМЦ после карбонизации

Из ИК измерений видно, что на линии 3445 см^{-1} показаны основные С-Н связи, присущие для углеродных пористых структур. На 1420 см^{-1} линии растяжения двуокиси углерода, далее линия 875 см^{-1} соответствует С-С связи, на линии $712,54\text{ см}^{-1}$ сосредоточены связи SiC. Таким образом, ИК линии поглощения показывают, что в пористой структуре содержатся в основном углеродные, кислородные и кремниевые связанные структуры.

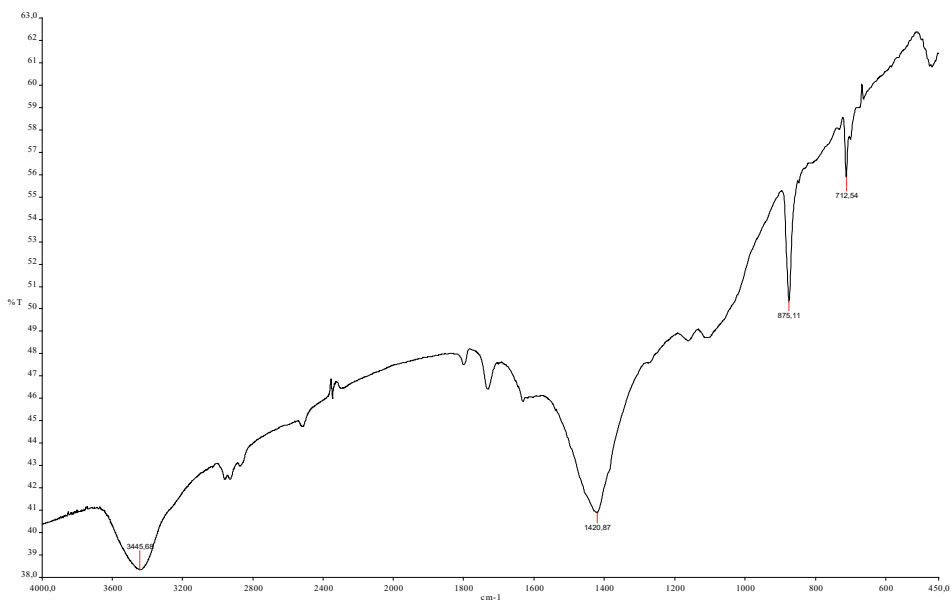


Рисунок 7 - ИК спектр углеродных материалов

Обнаружение полосы поглощения, соответствующей углерод-кремниевой (Si-C) связи в ИК-спектре карбонизированного материала после его контакта с бактериальной культурой, свидетельствует о химической модификации поверхности, вероятно за счёт взаимодействия с кремнийсодержащими компонентами среды. Наличие данной функциональной группы коррелирует с появлением зоны подавления роста микроорганизмов, что позволяет предположить её участие в формировании антибактериального эффекта. Полученные результаты указывают на то, что образование Si-C связей может опосредованно способствовать повышению биоцидных свойств углеродного материала за счёт изменения его поверхностных характеристик, влияющих на адгезию и жизнеспособность бактериальных клеток. Таким образом, степень инактивации функциональных групп, импрегнированных бактерицидами определяется получением углеродной структуры, обладающей развитой пористой структурой. Выщелачивание золы гидроксидом натрия позволяет частично удалить избыточный кремний, увеличить удельную поверхность и доступность активных центров, что способствует формированию более выраженных сорбционных и антибактериальных свойств материала.

Рабочая эффективность углеродминерального блока. Одним из опасных и вредных факторов труда является биологический, т.е. появление микроорганизмов, которые способны вызывать не только инфекционные заболевания, но и снижение общего иммунитета и, как следствие, рост предрасположенности к бытовым инфекциям. Однако, в настоящее время не в полной мере определена степень опасности, обусловленная контактом с микроорганизмами для различных производств. Недостаточно исследована микробная обсемененность и видовой состав микрофлоры помещений различных предприятий, которые обуславливают рост предрасположенности к заболеваниям, снижение производительности и результативности труда. Не в достаточной мере исследованы также вопросы санитарно-гигиенической обработки производственных помещений в зависимости от степени опасности микробного фактора.

Одним из наиболее эффективных методов анализа поверхностной структуры является сканирующая электронная микроскопия (СЭМ). Этот метод позволяет выполнять количественный морфологический анализ и проводить измерения линейных параметров микроструктуры поверхности твердых тел. Изучение формологии и структуры частиц проводилось методом электронной микроскопии. С помощью сканирующего электронного микроскопа (растровый электронный микроскоп (Quanta 3D 200i Dual system, FEI, КазНУ, ННЛОТ) была получена микрофотография частиц.

Грубые дисперсные системы (пыль из ковrolана или органическая пыль, и угольная пыль) исследовались с помощью СЭМ.

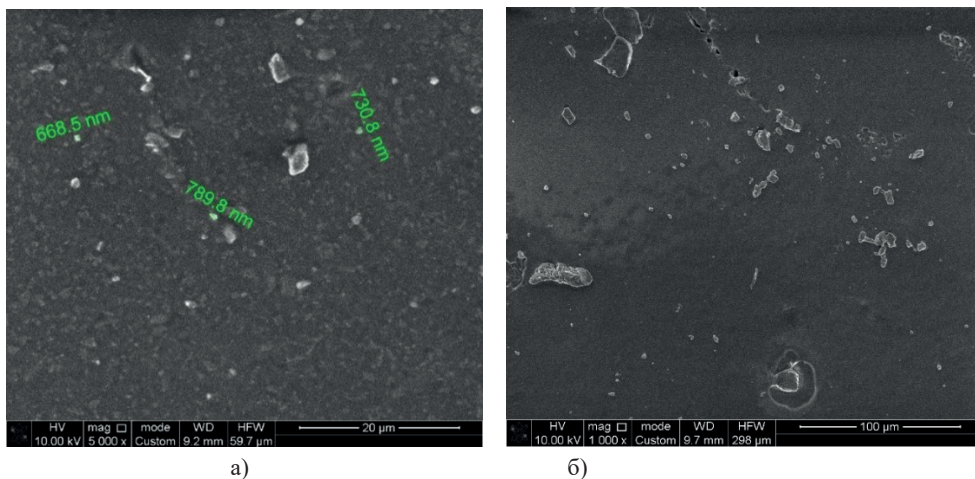


Рисунок 8 - Размер частиц угольной (а) и органической пыли (б) под микроскопом

Визуальными измерениями определялись фракции удельных агломератов пыли и процент их наибольшего содержания относительно других фракции.

Были проведены аналитические расчеты по определению функции распределения частиц пыли по размерам. Распределения частиц по размерам могут быть представлены следующей зависимостью.

Были проведены аналитические расчеты по определению функции распределения частиц пыли очищаемой фильтрами по размерам. Распределения частиц по размерам могут быть представлены следующей зависимостью.

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \lg \sigma_{\chi}} \cdot e^{-\frac{\lg^2(d_{\chi}/d_m)}{2 \lg^2 \sigma_{\chi}}} \quad (1)$$

Где σ_{χ} - удельное содержание агломератов с размерами d_{χ}

$\lg \sigma_{\chi}$ - средноквадратичное отклонение

$\lg(d_{\chi}/d_m)$ логарифм отношения частиц к среднему или медианному значению.

Интегральная кривая значений с распределением частиц может быть преобразована следующим выражением:

$$R(d_{\chi}) = \frac{100}{\sqrt{2\pi} \lg \sigma_{\chi}} \int_{+\infty}^{\lg d_{\chi}} e^{-\frac{\lg^2(d_{\chi}/d_m)}{2 \lg^2 \sigma_{\chi}}} d(\lg d_{\chi}) \quad (2)$$

Если выразить значения логарифмов через $t = \frac{\lg(d_{\chi}/d_m)}{\lg \sigma_{\chi}}$, то уравнение 2 преобразуется в вид

$$R(d_{\chi}) = \frac{100}{\sqrt{2\pi}} \int_{+\infty}^t e^{-\frac{t^2}{2}} d(t) \quad (3)$$

Проведя расчеты аналитических функции распределения частиц получаем математическую плату расчета систем очистки воздуха, что позволит автоматизировать и подбирать временные параметры смены фильтра в очистных фильтрах.

Принимая медианное значение частиц равным 5 мкм получаем распределение частиц по размерам, что приведено в таблице 2.

Таблица 2 - Распределение частиц по размерам

Пыль	ξ	$\lg \sigma$	$\lg(d_{\chi}/d_m)$	$R(d_{\chi})$, см
органическая	2,5	\pm	-0,301	70,5
зольная	5	\pm	0	60,4
угольная	10	\pm	0,301	40,5

Как видно из таблицы 2, органическая пыль размером 2,5 мкм распределена до 70,5 см удельного распределения в отдельно взятом пространстве -п, зольная и угольная обладая более массивными частицами могут иметь от 40,5 до 60,4 см удельного распределения соответственно.

Как показали данные рисунков 8 и таблицы 2 средний размер частиц пыли варьируется от 0,65 до 150 микрон. Следует отметить, что пыли со 100% содержанием частиц более 10 микрон это зольная и угольная пыль.

Загрязняющие воздух частицы в зависимости от влажности, температуры, разрежённости атмосферы могут различаться и по степени дисперсности, то есть по размеру частиц, этому фактору способствует агломерация примесей.

Пропускание пылей через стенд с тканевым фильтром показали 100% задерживаемость пылей размерности выше 15 микрон. Эффективность улавливания органических пылей варьируется от 74 до 98%, в зависимости от дисперсности частиц.

Таблица 3 - Очистка пылей различной природы и дисперсности через фильтр

D –дисперсность частиц пыли	Степень очистки пыли, %				
	Органическая пыль	Зольная пыль	Угольная пыль	Пыль от заточных станков	Пыль от пороховых газов энергоемких составов
5	74	80	90	90	90
15	80	82	100	100	100
20	90	100	100	100	100
25	98	100	100	100	100

Для выявления дисперсного состава твердых загрязнений производился анализ фракционного состава загрязнений воздуха в зависимости d -дисперсности частиц пылей от фракционного состава N. Фракцией принимали относительную долю частиц, размеры которых находились в определенном интервале значений, принятых в качестве нижнего и верхнего пределов.

Данные по определению дисперсностей пыли от фракционного распределения представлены на рисунке 9.

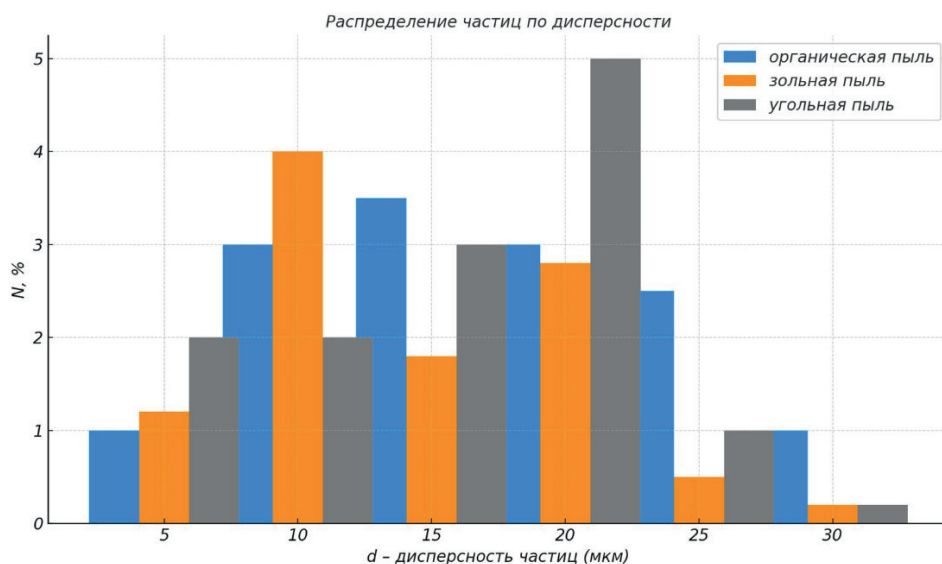


Рисунок 9 - Дисперсность частиц в зависимости от фракционного состава

Как видно из рисунка 9 в зависимости от условия, влажности, когезии и агломерации в отдельно взятом объеме до 1 литра частицы пыли могут иметь разную дисперсность частиц.

В частности, медианный зольная пыль с дисперсность 10 мкм может достигать 4 % фракции, в то же время угольная пыль в основном сосредоточена на дисперсности 20 мкм и составляет 5 % фракции. Органическая пыль в зависимости от природы происхождения имеют максимальный 3,5 % при дисперсности 15 мкм.

Различная дисперсность зольной и угольной пыли может также объясняться различной природой смачиваемости, угольная пыль практически не смачивается, в то время как зольная пыль полностью смачивается при концентрации влаги в воздухе от 0,2 до 1 % по объёму.

Одним из важных факторов при пылеулавливании и очистке воздуха является физико-химическая составляющая пыли, в частности дисперсионный состав напрямую определяет скорость усадки частиц пыли, а данные по осаждению пыли в частности скорость ее осаждения зависит от удельного веса пылеобразующего материала и формы частиц пыли.

Были проведены эксперименты по определению скорости осаждения пылей различной природы от органической до пыли от пороховых газов, и пыль с содержаниями окислов железа от заточных станков.

Данные по скорости осаждения пыли в зависимости от дисперсности частиц сведены в таблице 4.

Таблица 4 - Скорость осаждения органической пыли

D –дисперсность частиц пыли	Скорость осаждения, см/секунду					
	Органическая пыль	Зольная пыль	Угольная пыль	Пыль от заточных станков	Пыль от печей	Пыль от пороховых газов энергоёмких составов
5	0,05	0,03	0,04	0,12	0,14	0,13
15	0,23	0,04	0,15	0,24	0,32	0,42
20	0,42	0,07	0,24	0,51	0,45	0,52
25	0,53	0,12	0,35	0,62	0,70	0,62

Как показывают данные таблицы 4 во всех образцах наблюдается линейная зависимость между дисперсностью и скоростью осаждения. Чем выше дисперсность частиц пыли, тем выше и скорость осаждения частиц.

Таким образом, определение размеров частиц имеет важное значение для определения эффективности очистки, поскольку по физическим параметрам частицы размером до 1 мкм обычно могут быть улавливаться массой и инерционной силой, а частицы с размерами менее 1 микрон - электростатическими силами и силами межмолекулярного взаимодействия.

Заключение. В данном исследовании были изучены спектроскопические характеристики угольных фильтров на основе карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ) и карбонизата, полученного из рисовой шелухи. Рентгеновский

дифракционный анализ показал, что материалы обладают сложной структурой, характеризующейся графитоподобными нанокристаллитами размером от 2 до 5 нм, а также значительной долей аморфного содержания — до 60 %. Рамановская спектроскопия подтвердила образование комбинированной углеродной матрицы, содержащей микрокристаллиты в турбостратической структуре. Соотношение интенсивностей пиков D/G, равное 1,2, указывает на наличие структурных дефектов в материале. Образование Si–C связей на поверхности материала может играть ключевую роль в проявлении его антибактериальных свойств, опосредованно влияя на адгезию и инактивацию бактериальных клеток.

Установлено, что угольная пыль содержит наибольшую долю мелкодисперсных частиц: при размере 20 мкм доля составляет 5 %, а при 15 мкм - 3 %. Для сравнения, у органической и зольной пыли эти значения составляют 3-3,5 % и 1,8-2,8 % соответственно. Такие различия в распределении частиц по размеру указывают на более выраженную аэрозольную активность угольной фракции. Это требует применения высокоэффективных методов сепарации, способных улавливать частицы в диапазоне до 5 мкм, где доля угольной пыли также превышает значения для других образцов (2 % против 1-1,2 %).

Полученные результаты свидетельствуют о высокой сорбционной способности разработанных материалов, что делает их перспективными кандидатами для использования в качестве фильтрующих и адсорбирующих компонентов. Их уникальные структурные и физико-химические характеристики способствуют их эффективности в процессах сорбции.

Литература

- Родионов А.И., Клушин В.Н. Техника защиты окружающей среды, М.: Химия, 1989. — 512 с.
- Буренин В.В. Защита атмосферного воздуха от производственной пыли, токсичных паров и газов. Экология и промышленность России, 2004. — № 9. — С. 25-29.
- Попова А.С. Методы очистки и обеззараживания воздуха в системах вентиляции. Вестник магистратуры, 2021. — № 1-5 (112)
- Mutushev A., Kaya A., Tulepov M., Kudyarova Z., Baiseitov D., Mukhanov D. Design and Development of Carbon–Silicon-Based Air Purification Filters with Antibacterial Properties. Processes 2025, 13. — 662 p. <https://doi.org/10.3390/pr13030662>
- Атаманов М.К. Разработка и кинетический анализ углесодержащих энергоёмких материалов, Алматы, 2017. — С. 43-44.
- Chiang YC, Chiang PC, Huang CP. et al. Effect of pore structure and temperature on VOC adsorption on activated carbon. Carbon, 2001. — Vol. 39. — P. 523-534. [https://doi.org/10.1016/S0008-6223\(00\)00161-5](https://doi.org/10.1016/S0008-6223(00)00161-5)
- Сульга Е.О., Романков П.Г. и др. К математическому описанию кривых разделения. Теоретические основы химической технологии, 2001. — т. 5. — № 5.
- Дроздов С.Г., Гарин Н.С., Джиндоян Л.С. и др. Основы техники безопасности в микробиологических и вирусологических лабораториях, М: Медицина; 2007. — 265 с.
- Cuadros-Lugo E., Piñon-Espitia M., Martinez-Rodríguez H.A., Lardizabal-Gutierrez D., Estrada-Guel I., Herrera-Ramirez J.M., Carreño-Gallardo C. Turbostratic Carbon. Graphene Prepared via the Dry Ice in Flames Method and Its Purification Using Different Routes: A Comparative Study. Materials 2022, 15. — 2501 p. <https://doi.org/10.3390/ma1507250>
- Jahan I., Matpan Bekler F., Tunç A., & Güven K. (2024) The Effects of Silver Nanoparticles (AgNPs) on Thermophilic Bacteria: Antibacterial, Morphological, Physiological, and Biochemical Investigations. Microorganisms, 12(2). — 402 p. <https://doi.org/10.3390/microorganisms12020402>

Christopherson D.A., Yao W.C., Sedaghat A.R. (2020) High-efficiency particulate air filters in the era of COVID-19: Function and efficacy. *Otolaryngology - Head and Neck Surgery* 163(1):3–9. <https://doi.org/10.1177/0194599820941838>

Lim T.H., Yeo S.Y., Lee S.H. (2018) Multidirectional evaluations of a carbon air filter to verify their lifespan and various performances. *Journal of Aerosol Science* 123:38–45. <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2018.09.009>

Moseenkov S.I., Kuznetsov V.L., Zolotarev N.A., Kolesov B.A., Prosvirin I.P., Ishchenko, A.V., Zavorin A.V. Investigation of Amorphous Carbon in Nanostructured Carbon Materials (A Comparative Study by TEM, XPS, Raman Spectroscopy and XRD). *Materials* 2023, 16. — 1112 p. <https://doi.org/10.3390/ma16031112>

Gupta, S., & Gopal, A. (2020). Activated carbon-based air filters for virus removal: Mechanisms and efficiency. *Materials Today Proceedings*, 30, 953–958. DOI:10.1016/j.matpr, 2020.04. — 507 p.

Nuraly A., Mutushev A., Tuleibayeva A., Gonzalez-Leal J.M. Experimental research on optimizing carbon materials for filtration applications in medicine. *Carbon Trends* 2024, 15, — 100338 p. <https://doi.org/10.1016/j.cartre.2024.100338>

References

Rodionov A.I., Klushin V.N. *Tekhnika zashchity okruzhayushchej sredy* [Environmental protection engineering], Moscow: Khimiya, 1989. — 512 p. (in Russ.)

Zashchita atmosfernogo vozduha ot proizvodstvennoj pyli, toksichnyh parov i gazov [Protection of atmospheric air from industrial dust, toxic vapors and gases]. *Ecology and Industry of Russia*, 2004. — No. 9. — P. 25–29. (in Russ.)

Popova A.S. *Metody ochistki i obezrazhivaniya vozduha v sistemah ventilyacii* [Methods of air purification and disinfection in ventilation systems]. *Bulletin of Masters*, 2021. — No. 1-5 (112). (in Russ.)

Mutushev A., Kaya A., Tulepov M., Kudyarova Z., Baiseitov D., Mukhanov D. Design and Development of Carbon-Silicon-Based Air Purification Filters with Antibacterial Properties. *Processes* 2025, 13. — 662 p. <https://doi.org/10.3390/pr13030662> (in Eng.)

Atamanov M.K. *Razrabotka i kineticheskij analiz uglesoderzhashchih energoemkih materialov* [Development and kinetic analysis of carbon-containing energy-intensive materials], Almaty, 2017. — P. 43–44. (in Russ.)

Chiang YC, Chiang PC, Huang CP. et al. Effect of pore structure and temperature on VOC adsorption on activated carbon. *Carbon*, 2001. — Vol. 39. — P. 523-534. [https://doi.org/10.1016/S0008-6223\(00\)00161-5](https://doi.org/10.1016/S0008-6223(00)00161-5) (in Eng.)

Sulga E.O., Romankov P.G., et al. On the mathematical description of separation curves. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 1971. — Vol. 5. — No. 5. (in Eng.)

Drozov S.G., Garin N.S., Dzhindoyan L.S., et al. *Osnovy tekhniki bezopasnosti v mikrobiologicheskikh i virusologicheskikh laboratoriyah* [Fundamentals of safety techniques in microbiological and virological laboratories], Moscow: Meditsina, 1987. — 265 p. (in Russ.)

Cuadros-Lugo E., Piñon-Espitia M., Martínez-Rodríguez H.A., Lardizabal-Gutierrez D., Estrada-Guel I., Herrera-Ramirez J.M., Carreño-Gallardo C. Turbostratic Carbon. Graphene Prepared via the Dry Ice in Flames Method and Its Purification Using Different Routes: A Comparative Study. *Materials* 2022, 15. — 2501 p. <https://doi.org/10.3390/ma1507250> (in Eng.)

Jahan I., Matpan Bekler F., Tunç A., & Güven K. (2024) The Effects of Silver Nanoparticles (AgNPs) on Thermophilic Bacteria: Antibacterial, Morphological, Physiological, and Biochemical Investigations. *Microorganisms*, 12(2). — 402 p. <https://doi.org/10.3390/microorganisms12020402> (in Eng.)

Christopherson D.A., Yao W.C., Sedaghat A.R. (2020) High-efficiency particulate air filters in the era of COVID-19: Function and efficacy. *Otolaryngology - Head and Neck Surgery* 163(1):3–9. <https://doi.org/10.1177/0194599820941838> (in Eng.)

Lim T.H., Yeo S.Y., Lee S.H. (2018) Multidirectional evaluations of a carbon air filter to verify their lifespan and various performances. *Journal of Aerosol Science* 123:38–45. <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2018.09.009> (in Eng.)

Moseenkov S.I., Kuznetsov V.L., Zolotarev N.A., Kolesov B.A., Prosvirin I.P., Ishchenko, A.V., Zavorin



A.V. Investigation of Amorphous Carbon in Nanostructured Carbon Materials (A Comparative Study by TEM, XPS, Raman Spectroscopy and XRD). *Materials* 2023, 16. — 1112 p. <https://doi.org/10.3390/ma16031112> (in Eng.)

Gupta, S., & Gopal, A. (2020). Activated carbon-based air filters for virus removal: Mechanisms and efficiency. *Materials Today Proceedings*, 30, 953–958. DOI:10.1016/j.matpr.2020.04. — 507 p. (in Eng.)

Nuraly A., Mutushev A., Tuleibayeva A., Gonzalez-Leal J.M. Experimental research on optimizing carbon materials for filtration applications in medicine. *Carbon Trends* 2024, 15, — 100338 p. <https://doi.org/10.1016/j.cartre.2024.100338> (in Eng.)

<https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.378>

UDC 661.183.2:661.666.3:620.92

© **A.Zh. Mutushev***, **A.B. Seisenova**, **O.S. Kapizov**, **A.M. Nuraly**,
D.K. Mukhanov, 2025.

Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Almaty Technological University,
Almaty, Kazakhstan;

Center for Advanced Science and Technology, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: alibek_090@mail.ru

INTEGRATED PROCESS FOR THE SYNTHESIS OF CARBON–SILICON NANOCOMPOSITES FROM BIOWASTE AND METALLURGICAL SLUDGE

Mutushev Alibek Zhumabekovich — PhD, Principal Research Scientist, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Assistant Professor, Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: alibek_090@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-5047-5608>;

Seisenova Aknur Berdibayevna — PhD, Principal Investigator (PI), Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: z_aknura@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-8981-307X>;

Kapizov Omirzak Sembiuly — Master of Technics and Technology, Senior Research Scientist, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: ok-sir@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-1979-7625>;

Nuraly Assiya Mambetkyzy — PhD, Principal Research Scientist, Scientific Center for New Technologies, Center for Advanced Science and Technology, Assistant Professor, Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: assiya488@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-2323-0365>;

Mukhanov Dauren Kabdrakimovich — Senior Research Scientist, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: dd_511@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0002-1645-8625>.

Abstract. This study presents an integrated and sustainable technology for producing nanostructured carbon–silicon composite materials from renewable biomass feedstock (rice husk) combined with industrial waste residues. The proposed approach aims to address both waste valorization and the development of advanced functional materials for next-generation energy storage systems. The synthesis process involves consecutive stages of carbonization, activation, and demineralization, resulting in the formation of a highly porous structure with a well-developed specific surface area. Carbonization was carried out in an inert CO₂ atmosphere at temperatures ranging from 300 to 1000 °C, followed by physical activation in the range of 600 to 1200 °C. Subsequent removal of mineral impurities was achieved using a modified Soxhlet extraction technique, which

ensured effective purification of the final product. The obtained silicon dioxide was predominantly in an X-ray amorphous state, exhibiting a diffuse peak maximum at $2\theta = 24^\circ$, with a specific surface area of 120–150 m²/g and a pore volume of 0.5–0.8 cm³/g. XRF elemental analysis confirmed a SiO₂ purity level of up to 99.7%. SEM imaging revealed spherical particles with an average diameter of ~50 nm and a uniform distribution, while FTIR spectroscopy confirmed the preservation of characteristic siloxane (Si–O–Si) bonds. The developed approach demonstrates a promising route for converting low-cost biomass and waste resources into high-value carbon–silicon materials suitable for use in electrochemical energy storage and other advanced technological applications.

Keywords: carbon–silicon materials, rice husk, carbonization, activation, nanostructuring, amorphous silica, waste utilization, energy storage devices

Funding: *This research has been/was/is funded by the Committee of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR28713383)*

©А.Ж. Мутушев*, А.Б. Сейсенова, Ө.С. Капизов, Ә.М. Нұралы,
Д.К. Муханов, 2025.

Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Алматы технологиялық
университеті, Алматы, Қазақстан;

Center for Advanced Science and Technology, Алматы, Қазақстан.

E-mail: alibek_090@mail.ru

БИОҚАЛДЫҚТАР МЕН МЕТАЛЛУРГИЯЛЫҚ ШЛАМНАН КӨМІРТЕК–КРЕМНИЙ НАНОКОМПОЗИТТЕРІН СИНТЕЗДЕУДІҢ ИНТЕГРАЦИЯЛАНҒАН ӘДІСІ

Мутушев Алибек Жумабекович — PhD, Жетекші ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, ассистент-профессор, Химия, химиялық технология және экология кафедрасы, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: alibek_090@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-5047-5608>;

Сейсенова Ақнұр Бердибаевна — PhD, Жоба жетекшісі (PI), Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Алматы, Қазақстан,

E-mail: z_aknura@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-8981-307X>;

Капизов Өмірзақ Сембіұлы — техника және технология магистрі, аға ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Алматы, Қазақстан,

E-mail: ok-sir@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-1979-7625>;

Нұралы Әсия Мамбетқызы — PhD, жетекші ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies, Center for Advanced Science and Technology, ассистент-профессор, Химия, химиялық технология және экология кафедрасы, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: assiya488@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-2323-0365>;

Муханов Даурен Кабракимович — аға ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Алматы, Қазақстан,

E-mail: dd_511@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0002-1645-8625>.

Аннотация: Ұсынылған жұмыста жаңартылатын өсімдік тектес шикізаттан (күріш қауызынан) және өнеркәсіптік қалдықтардан нанокұрылымды көміртек-кремний композиттік материалдарын алудың интеграцияланған әрі экологиялық бағдарланған технологиясы сипатталады. Мұндай тәсіл биомассаны және қалдық түзуші шикізатты кешенді кәдеге жарату міндеттерін шешу тұрғысынан, сондай-ақ қазіргі заманғы энергетикалық және технологиялық қолданбаларда сұранысқа ие жаңа функционалдық материалдарды әзірлеу үшін өзекті болып табылады. Ұсынылған әдістеме карбонизация, активация және деминерализацияның бірізді сатыларын қамтиды, олар кеуектілігі дамыған құрылым мен жоғары меншікті беттің қалыптасуын қамтамасыз етеді. Карбонизация CO_2 инертті атмосферасында 300–1000 °C температурада жүргізілді, ал активация процесі 600–1200 °C диапазонында орындалды. Минералды қоспаларды тиімді жою үшін модификацияланған Сокслет аппараты қолданылды, бұл өнімнің тазарту дәрежесін едәуір арттыруға мүмкіндік берді. Алынған кремний диоксиді рентгеноаморфты күйде болды, оның $2\theta = 24^\circ$ мәнінде диффуздық шыңы байқалды, меншікті бетінің ауданы 120–150 м²/г, ал кеуек көлемі 0,5–0,8 см³/г құрады. РФА әдісімен элементтік талдау SiO_2 тазалығын 99,7%-ға дейін растады. СЭМ микроскопиясы орташа мөлшері шамамен 50 нм болатын бөлшектердің біркелкі таралуын көрсетті, ал ИҚ-спектроскопия силосандық байланыстардың (Si–O–Si) сақталуын дәлелдеді. Дамытылған технология арзан әрі қолжетімді ресурстарды жаңа материалдарына айналдырудың жоғары тиімділігін және өміршеңдігін көрсетеді, олар электрохимиялық энергия жинақтағыштарында, каталитикалық процестерде және басқа да озық технологиялық салаларда қолдануға жарамды. Осылайша, ұсынылған тәсіл экологиялық міндеттерді шешуді және жоғары қосылған құны бар функционалдық наноматериалдарды жасауды үйлестіреді, бұл оның қазіргі заманғы химия және энергетика өнеркәсібінің орнықты дамуы үшін маңыздылығын айқындайды.

Түйін сөздер: көміртек–кремний материалдары, күріш қауызы, көмірлендіру, белсендіру, нанокұрылымдандыру, аморфты кремний диоксиді, қалдықтарды кәдеге жарату, энергия сақтау құрылғылары

© А.Ж. Мутушев*, А.Б. Сейсенова, О.С. Капизов, А.М. Нуралы,
Д.К. Муханов, 2025.

Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан;

Center for Advanced Science and Technology, Алматы, Казахстан.

E-mail: alibek_090@mail.ru

ИНТЕГРИРОВАННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ УГЛЕРОДНО-КРЕМНИЕВЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ ИЗ БИООТХОДОВ И МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ШЛАМОВ

Мутушев Алибек Жумабекович — PhD, Ведущий научный сотрудник, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, ассистент-профессор, кафедра Химии, химической технологии и экологии, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,



E-mail: alibek_090@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-5047-5608>;

Сейсенова Акнур Бердибаевна — PhD, Руководитель проекта (PI), Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Алматы, Казахстан,

E-mail: z_aknura@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-8981-307X>;

Капизов Омирзак Сембиулы — магистр техники и технологии, старший научный сотрудник, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Алматы, Казахстан,

E-mail: ok-sir@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-1979-7625>;

Нуралы Асия Мамбеткызы — PhD, ведущий научный сотрудник, Scientific Center for New Technologies, Center for Advanced Science and Technology, ассистент-профессор, кафедра Химии, химической технологии и экологии, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан, E-mail: assiya488@gmail.com, ORCID ID: <https://orcid.org/0000-0002-2323-0365>;

Муханов Даурен Кабракимович — старший научный сотрудник, Scientific Center for New Technologies, AlAkSan, Алматы, Казахстан,

E-mail: dd_511@mail.ru, ORCID ID: <https://orcid.org/0009-0002-1645-8625>.

Аннотация: В представленной работе описана интегрированная и экологически ориентированная технология получения наноструктурированных углеродно-кремниевых композитных материалов из возобновляемого сырья растительно-го происхождения (шелуха риса) и промышленных отходов. Такой подход является актуальным с точки зрения решения задач комплексной утилизации биомассы и отходообразующего сырья, а также разработки новых функциональных материалов, востребованных в современных энергетических и технологических приложениях. Предлагаемая методика включает последовательные стадии карбонизации, активации и деминерализации, обеспечивающие формирование развитой пористой структуры и высоких значений удельной поверхности. Карбонизацию проводили в инертной атмосфере CO₂ при температурах 300–1000 °С, процесс активации осуществлялся в диапазоне 600–1200 °С. Для эффективного удаления минеральных примесей применялся модифицированный аппарат Сокслета, что позволило значительно повысить степень очистки продукта. Полученный диоксид кремния находился в рентгеноаморфном состоянии с максимумом диффузного пика при $2\theta = 24^\circ$, обладая удельной поверхностью 120–150 м²/г и поровым объёмом 0,5–0,8 см³/г. Элементный анализ методом РФА подтвердил чистоту SiO₂ до 99,7%. СЭМ-микроскопия показала равномерное распределение частиц со средним размером порядка 50 нм, а ИК-спектроскопия подтвердила наличие силоксановых связей (Si–O–Si). Разработанная технология демонстрирует высокую эффективность и перспективность преобразования дешёвых и доступных ресурсов в материалы, пригодные для применения в электрохимических накопителях энергии, каталитических процессах и других передовых технологических областях. Таким образом, представленный подход сочетает в себе решение экологических задач и создание функциональных наноматериалов с высокой добавленной стоимостью, что подчёркивает его значимость для устойчивого развития современной химической и энергетической промышленности.

Ключевые слова: углеродно-кремниевые материалы, рисовая шелуха, карбонизация, активация, наноструктурирование, аморфный кремнезем, утилизация отходов, накопители энергии

Introduction. In the 21st century, the problem of industrial and biological waste utilization has acquired strategic importance in the context of sustainable development. According to international analytical agencies, more than 700 million tons of metallurgical waste are generated annually worldwide, including blast furnace and steelmaking slags, sludges, and dust fractions containing significant amounts of silicon, aluminum, iron, and other elements. A large share of these materials is either inefficiently processed or stockpiled, forming technogenic landscapes that pose a threat of soil, water, and air pollution with heavy metals and fine particulate matter. Equally urgent is the issue of biomass processing — agricultural residues, wood waste, and organic by-products of the food industry. The global volume of biological waste exceeds 3 billion tons per year, and its uncontrolled burning or decomposition is accompanied by emissions of greenhouse gases, including methane and carbon dioxide, thereby exacerbating global climate change.

At the same time, there is a rapid increase in demand for energy storage systems (ESS), driven by the development of renewable energy, electric transport, portable electronics, and distributed power grids. According to BloombergNEF forecasts, by 2035 the global ESS market will grow more than 15-fold compared to 2020. This will require a substantial increase in the production of batteries with high specific capacity, long service life, and the availability of raw materials.

According to estimates, between 7 and 10 billion tons of waste are generated globally each year, of which approximately 2 billion tons account for municipal solid waste (MSW) (Bioenergy International). More recent data confirm that the global MSW volume in 2019 amounted to between 2.29 and 3.13 billion tons, which is 30–50% higher compared to 2004–2019 levels (PMC). Other projections suggest that by 2050 this volume could nearly double, reaching almost 4 billion tons if the trend continues (Statista).

Agricultural residues alone constitute a significant fraction of waste: over 80% of the biomass from cultivated crops remains unused. For example, about 998 million tons of agricultural waste are generated annually, including 709.2 million tons of straw and 673.3 million tons of rice straw.

For every ton of steel produced, about 0.15 tons of slag are generated — regardless of the production technology (Wikipedia). In China, the world's largest steel producer, the annual volume exceeds 120 million tons (ScienceDirect). In developed countries, slag recycling rates exceed 90%, whereas in China they are around 20%.

The United Nations Environment Programme (UNEP) projects that by 2050, waste-related costs — including biodiversity loss, greenhouse gas emissions, and mortality — will reach USD 640 billion annually, representing a 75% increase compared to 2020.

Relevance of Waste Recycling for Si–C Material Production

In recent years, increasing attention has been paid to the integrated recycling of biological and metallurgical waste for the production of carbon–silicon (Si–C) composites for energy storage systems (ESS). Biomass serves as a sustainable source of carbon matrices and SiO₂ precursors, while metallurgical slags and sludges act as concentrates of SiO₂ and associated metals. Studies have shown that controlled micro-

and mesoporosity, optimal interlayer spacing in carbon structures, and core-shell architectures (Si@C) can enhance reversible capacity, high-rate retention, and structural stability (Chen et al., 2025; Abe et al., 2022; Wang et al., 2022).

Classical and modern approaches include:

Conversion of $\text{SiO}_2 \rightarrow \text{Si}$ followed by the formation of C/SiO_x/Si composites;

Use of gradient structures and elastic binders to compensate for volumetric expansion;

Post-treatment and doping to optimize electrical conductivity and stabilize the solid-electrolyte interphase (SEI) (Wang et al., 2025; Jin et al., 2025).

Research Gaps and Challenges

Despite a significant number of studies dedicated to the processing of biomass and metallurgical waste separately, the integration of these technologies into a unified process chain remains underdeveloped. Treating the production of carbon and silicon-containing materials as independent processes limits the potential for the combined utilization of heterogeneous feedstocks and hinders the implementation of a closed-loop production concept.

Aim and Objectives of the Study

The aim of this work is to develop and scale up an integrated technology for processing biological and metallurgical waste to obtain high-performance carbon-silicon materials for energy storage systems, in accordance with international standards and sustainability principles.

The research objectives are to:

Analyze and select promising types of biological and metallurgical feedstocks with high carbon and silicon content.

Develop a laboratory-scale technological process for synthesizing Si-C materials, including preparation, modification, and composite formation.

Optimize synthesis parameters to achieve high electrochemical performance.

Scale up from laboratory setups to pilot production, assessing process scalability.

Evaluate the industrial potential and economic feasibility of implementing the technology, including environmental indicators and compliance with international standards.

Methods and materials.

2.1 Raw Materials

Various types of biowaste with significant potential for recycling and subsequent industrial application were used as raw materials.

Nut shells (hazelnut, walnut, and others) represent a hard fruit shell with a developed porous structure and high mechanical strength, making them promising feedstocks for the production of sorbents and activated carbons. According to research data, after low-temperature pyrolysis, hazelnut shells exhibit a specific surface area of approximately 19.3 m²/g with a bulk density of 0.40 g/cm³, while walnut shells have a specific surface area of 19.7 m²/g with a density of 0.47 g/cm³. The use of this type of raw material enables environmentally safe disposal of biodegradable components, reduces the strain on non-renewable natural resources, and yields effective adsorbent materials (https://apni.ru/article/1670-svojestva-produktov-retsiklinga-rastitelnikh?utm_source)

Rice husk is the hard outer shell of the rice grain and consists primarily of amorphous silica and lignin. The mass fraction of the husk is about 20% of the grain weight, and the annual global volume of rice husk generation amounts to hundreds of millions of tons. The high silica content leads to low biodegradability under natural conditions and renders thermal destruction ineffective, resulting in waste accumulation and environmental risks. At the same time, rice husk has high technological value: during processing, an amorphous silica-based nanoporous structure is formed, which can be used in the production of building materials, fertilizers, sorbents, composites, and activated carbons. Pyrolysis products include a solid silicon-carbon phase (~50–55% carbon, ~40–45% silicon dioxide) used as a filler, sorbent, and feed additive, as well as an organic condensate and a gaseous phase containing valuable chemical compounds suitable for further utilization.

Wood sawdust is a by-product of the woodworking industry, consisting of small particles of wood containing approximately 70% polysaccharides (cellulose and hemicellulose) and about 27% lignin. The elemental composition of sawdust includes approximately 50% carbon, 6% hydrogen, 44% oxygen, and about 0.1% nitrogen. Sawdust is a sought-after raw material for the production of biofuels (briquettes and pellets), serves as a substrate for mushroom cultivation, is used as mulch, animal bedding, organic fertilizer, and as a feedstock for the manufacture of pressed products.

Table 1- Comparison table

Type of biowaste	Main components	Key Features	Possible application
Nut shells	Organic matrix, carbon structure	Specific surface area ~19–20 m ² /g, density 0.4–0.5 g/cm ³	Sorbents, activated carbon, adsorption materials
Rice husk	Amorphous silicon dioxide, lignin	Nanoporous structure, high silicon content	Fillers, sorbents, composites, fertilizers, bioenergy
Wood waste	Cellulose, hemicellulose, lignin, carbon	Polymer composition, biodegradation, organic matrix	Fuel, fertilizers, mycelial substrates, pressed products

Metallurgical Waste

Metallurgical slag is a by-product of iron and steel production, representing a complex mixture of silicate and oxide compounds formed during metal smelting processes. The chemical composition of slag is determined by the production technology and the raw materials used.

Blast furnace slags are characterized by a calcium oxide (CaO) content of 29–47%, silicon dioxide (SiO₂) of 27–43%, aluminum oxide (Al₂O₃) of 4–14%, magnesium oxide (MgO) of 5–15%, iron oxide (FeO) of 0.2–0.6%, manganese oxide (MnO) of 0.1–9%, and sulfur of 0.6–2.2%.

Steelmaking (converter) slags contain approximately CaO ~40–55%, SiO₂ ~7–18%, Al₂O₃ ~2–6%, MgO ~6–10%, FeO/Fe₂O₃ ~12–28%, MnO ~13–14%, and sulfur ~1–1.9%.

The physical characteristics of slags include a true density of about 2900–3000 kg/m³ and bulk density of 2200–2800 kg/m³. They exhibit increased porosity and frost resistance. Slag is a multiphase silicate system with variable chemical and mineralogical composition, often containing metallic inclusions (up to 5%). Steelmaking slags have relatively low hydraulic activity.

Slags are classified according to their basicity based on the CaO/SiO₂ ratio: values below 1 indicate acidic slags, while values above 1 indicate basic slags.

Applications of metallurgical slags include:

Road and civil construction (crushed stone, base layers, and road surfacing);

Cement industry (granulated blast furnace slag as a component of slag Portland cement, with a share of up to 35% in standard Portland cement and up to 80% in special blends);

Production of dry building mixes, silicate concretes, and for soil stabilization;

Metallurgical processes (e.g., in open-hearth production) to reduce lime consumption and lower CO₂ emissions.

Table 2 - Comparison table

Waste	Composition	Main characteristics	Application
Metallurgical slag	CaO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ , MgO, Fe/Mn oxides, S	Density ~2200–3000 kg/m ³ ; porosity, complex composition	Roads, cement, building mixtures, soil stabilization
Quartz concentrates	Almost pure SiO ₂ , impurities ≤30 ppm	Size 100–300 μm, ultra-low impurities	Semiconductor, glass, crystal and quartz technology
Silicon-containing sludge	SiO ₂ + Fe ₂ O ₃ , Al ₂ O ₃ etc., sometimes >98% Si	High Si content, porous structure	Agglomerate-blast raw material component; moisture regulation; charge; valuable metals

2.2. Pretreatment Methods

The preliminary preparation of raw materials is an important stage of technological processes, ensuring uniform composition, improved physicochemical properties of the materials, and increased efficiency of their subsequent processing.

Mechanical preparation.

Drying reduces the moisture content of the raw materials to the target level, preventing caking, improving grinding efficiency, and facilitating material transport (<https://burondt.ru/files/TextEtk/EtkDocsFile2228.pdf>). Comminution (crushing and milling) is carried out in crushers, mills, and other equipment to increase the specific surface area and enhance reactivity (Wills et al., 2016). Screening is performed using sieve analysis or air classification to separate fractions with a specified particle size distribution (https://publications.rwth-aachen.de/record/444642/files/59_Innovative_approaches.pdf; https://en.wikipedia.org/wiki/Mineral_processing).

Removal of impurities and dechlorination (for metallurgical waste).

Dechlorination is a thermal treatment of the material in an inert or reducing atmosphere to remove chlorine-containing compounds, which may form during interactions with

fluxes and salts (https://chm.pops.int/Portals/0/docs/from_old_website/documents/meetings/cop_1/meetingdocs/langs/inf1_7/INF-7r.pdf; Höber et al., 2022). Removal of impurities (heavy metals, iron, aluminum, etc.) is achieved using magnetic separation, flotation, or hydrometallurgical processing, including reduction roasting followed by leaching (Binnemans et al., 2020; Faisal et al., 2025; Devi et al., 2021).

Table 3 – Main pretreatment methods for waste

Processing stage	Purpose and benefits
Drying	Reduction of moisture, improvement of grinding, prevention of caking and spoilage
Crushing (grinding)	Increase of specific surface area, increase of reaction activity
Sorting	Optimization of granulometric composition, improvement of homogeneity of the mixture
Dechlorination	Removal of chlorine-containing contaminants, reduction of toxicity
Removal of impurities	Purification from metals and undesirable components, improvement of the quality of the final raw materials

2.3 Methods for Synthesizing Carbon–Silicon Materials

The synthesis of carbon–silicon (C–Si) materials encompasses a variety of technologies aimed at producing composites and nanostructures with tailored properties, such as high porosity, specific functionality, and improved thermal conductivity.

Carbonization / Pyrolysis of Biomass

This method is based on the thermal treatment of organic feedstocks (biomass) in an oxygen-free environment to obtain a carbon matrix. The processes include pyrolysis, hydrothermal carbonization (HTC), and fast carbonization, enabling the production of carbon materials with controlled porosity and structure (https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrothermal_carbonization?ysclid=meqny1isfl175057245), (Simonenko et al., 2013). In particular, hydrothermal carbonization (HTC) is carried out under pressure at around 180 °C, allowing the processing of wet biomass without prior drying (https://en.wikipedia.org/wiki/Sol%E2%80%93gel_process?ysclid=meqo6ake2g520290754).

Reduction Reactions and Silicon Modification

C–Si composites can be obtained via carbothermal reduction, in which silica (SiO₂) is reduced with carbon to form silicon carbide (SiC) or silicon-containing structures. Hybrid approaches are particularly effective, combining preliminary sol–gel preparation of the initial SiO₂–C mixture with carbothermal synthesis at 1200–1500 °C in vacuum (Molkenova et al., 2015).

Nanostructuring (Sol–Gel, Mechanochemistry, Plasma Chemistry)

Sol–gel method — a wet-chemical technology in which hydrolysis and polycondensation of alkoxide precursors (e.g., TEOS) form a granular or network gel structure. Subsequent carbonization and heat treatment can yield nanocrystalline SiC structures (Bapat et al., 2004).

Mechanochemical activation — involves the use of high-energy ball milling, resulting in ultra-fine particle size reduction, enhanced chemical reactivity of mixtures, and further C–Si structure formation without the use of a liquid phase.

Plasma-chemical methods — enable the generation of silicon nanoparticles with controlled sizes (20–80 nm) and crystalline orientation through low-temperature plasma discharges.

Table 4 – Comparison of methods for synthesizing carbon–silicon materials

Method	Description
Carbonization / HTC	Production of carbon matrix from bio-raw materials. HTC allows working with wet biomass
Carbothermic reduction	Synthesis of SiC from SiO ₂ and carbon source at high temperatures
Sol-gel + carbothermy	Methods are combined: gel formation and carbonization to control the structure of the Si–C product
Mechanochemistry	High-energy milling accelerates reactions, reduces size and activates the material
Plasmachemistry	Generation of silicon nanoparticles with a narrow size distribution in plasma

2.4 Methods of Analysis and Testing

A comprehensive investigation of carbon–silicon materials requires elemental, structural, surface, and electrochemical analysis techniques. These methods enable the assessment of composition, morphology, texture, and functional properties of synthesized products.

Chemical Analysis

X-Ray Fluorescence (XRF) — a rapid, non-destructive technique for qualitative and quantitative determination of the elemental composition of samples. Particularly useful for the analysis of metals, glass, ceramics, and construction materials.

Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectroscopy (ICP-OES, ICP-AES) — a highly sensitive method with a broad dynamic range, applicable to various media (liquids, solids after dissolution), commonly used in mining, metallurgy, and materials science.

Structural Analysis

X-Ray Diffraction (XRD) — a key method for phase identification, crystallite size determination, and detection of structural changes in materials.

Scanning Electron Microscopy (SEM) and Transmission Electron Microscopy (TEM) — enable visualization of morphology, nanostructures, and, in the case of SEM–EDS, provide elemental composition at the microscale.

Surface Analysis

Brunauer–Emmett–Teller (BET) method — determines the specific surface area and porosity of a material based on gas adsorption isotherms.

Fourier-Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) and Raman Spectroscopy — sensitive to chemical bonds and functional groups, complementing each other in identifying structural and electronic characteristics.

Electrochemical Testing

Cyclic Voltammetry (CV) — used to study electrochemical activity, reaction kinetics, and determine material capacitance.

Charge–discharge tests, including those at specific currents and potentials, are employed to assess capacitance, cycling stability, and energy storage efficiency.

Electrochemical Impedance Spectroscopy (EIS) — analyzes system impedance to evaluate resistances, capacitance, and kinetics in electrode and interfacial processes.

Table 5 — Analytical Methods and Their Applications

Method	Application
XRF	Rapid elemental analysis, non-destructive, suitable for a wide range of samples
ICP-OES	High sensitivity, broad dynamic range, requires sample dissolution
XRD	Phase identification, crystalline structure determination
SEM / TEM	Morphology, nanostructure, elemental composition (SEM-EDS)
BET	Specific surface area and porosity measurements
FTIR / Raman	Identification of functional groups and chemical bonds
CV, charge–discharge, EIS	Electrochemical activity, capacitance, kinetics, and resistance

Results.

The synthesis process involves three treatment stages.

Carbonization is the first stage, during which carbon–silicon composites (CSCMs) are typically formed via pyrolysis of the raw material in the temperature range of 600–900 °C under an inert atmosphere (usually nitrogen). The main objective of carbonization is the removal of volatile components, maximization of the specific content of carbon and silicon, and the production of a material with sufficiently high specific surface area and porosity.

Activation is the second stage, involving the exposure of the carbon material to oxidizing gases such as CO₂ or steam in the temperature range of 600–1200 °C. This process removes the more disordered carbon fraction and leads to the formation of a well-developed porous structure.

To remove mineral impurities, demineralization is carried out using a modified Soxhlet extractor.

The combination of carbonization, activation, and demineralization processes ensures the formation of the required structural and physicochemical properties of the final products.

The synthesis was performed by carbonizing and activating plant-based materials in a custom-designed furnace at temperatures ranging from 300 to 1000 °C for 30–90 minutes under a CO₂ atmosphere, without air access. Figures 2 and 3 show the pilot unit for producing carbonized material from plant feedstock (5 kg h⁻¹).

The reactor is designed for the sequential execution of feedstock dehydration, accompanied by depolymerization and partial decomposition in the temperature range of 650–800 °C. This stage includes water removal (up to 280 °C) and decarboxylation with the formation of pyrolysis tars through concurrent dehydration processes.

X-Ray Diffraction (XRD) Analysis

The results of the sample study are presented in Figure 1. The obtained silica powder is in an X-ray amorphous state, as confirmed by XRD analysis. The X-ray diffraction patterns exhibit a single broad diffuse peak at $2\theta = 24^\circ$, characteristic of the amorphous structure of rice husk silica, whereas for amorphous silicon dioxide the maximum of the diffuse peak is typically observed at $2\theta = 30^\circ$. The observed broad curve (Fig. 1) with a maximum intensity at $24.0^\circ / 2\theta$ further confirms the amorphous structure of the obtained silica.

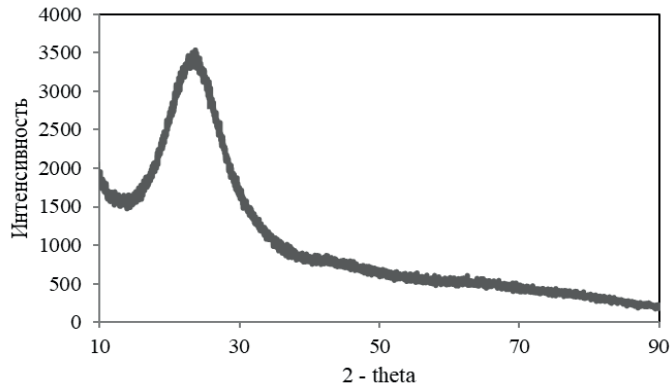


Figure 1 – XRD pattern of SiO₂ obtained from rice husk

Scanning Electron Microscopy with Energy Dispersive Spectroscopy (SEM-EDS)

The SEM-EDS results for SiO₂ derived from rice husk are presented in Figure 2.

The morphology of the silica obtained from pretreated rice husk, as shown in the SEM images, demonstrates complete transformation of the pretreated husk into an amorphous nanomaterial with an average particle size of approximately 50 nm. According to the EDS analysis, the silica contains 34.5 wt.% silicon and 65.2 wt.% oxygen.

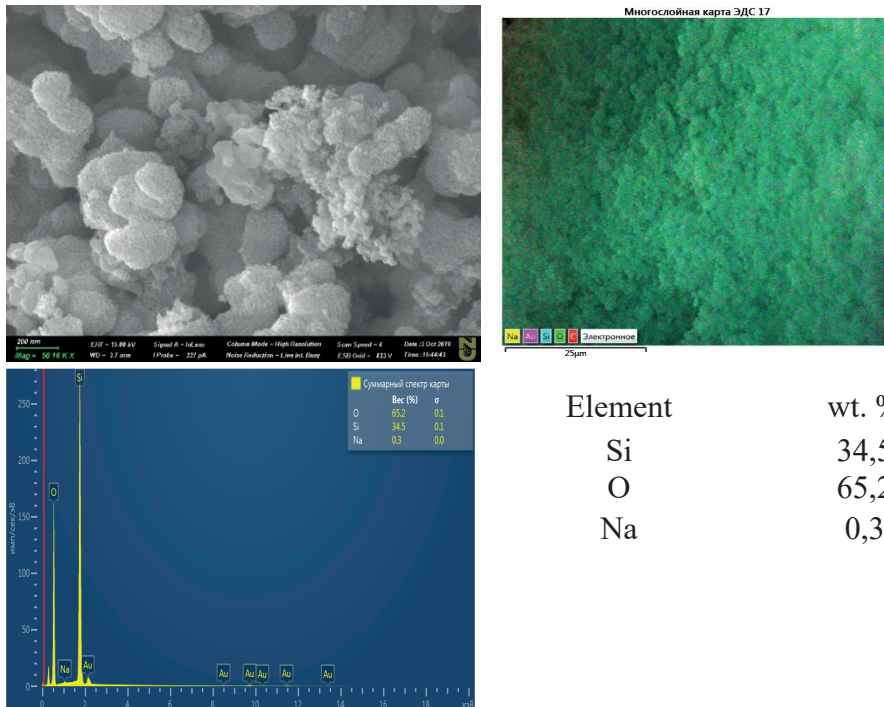


Figure 2 – SEM micrographs of SiO₂ and EDS elemental analysis

Low-temperature nitrogen adsorption

The synthesized SiO₂ from rice husk exhibited a high specific surface area and significant pore volume.

The results obtained via low-temperature nitrogen adsorption measurements revealed that the specific surface area of the silica samples was 120 and 150 m²/g, respectively.

The pore volume of the SiO₂-RH1 and SiO₂-RH3 samples increased from 0.5 cm³/g to 0.8 cm³/g, while the average pore diameter decreased from 26.4 nm to 18.4 nm.

The specific surface areas, pore diameters, and pore volumes of the silica samples are summarized in Table 6.

Table 6 – Surface area and pore characteristics of silica samples

Sample	Surface area S _{specific} , m ² /g	Pore characteristics (DFT method)	
		V _{pore} , cm ³ /g	Д _{пор} , nm
SiO ₂ RH 1	120	0.5	26.4
SiO ₂ RH 3	150	0.8	18.4

Results and Analysis of Samples by XRF

The elemental composition of the initial rice husk ash (RHA) and the purified SiO₂, determined by X-ray fluorescence (XRF), is presented in Table 7.

The content of all elements is given in weight percent (%).

Table 7 – X-ray fluorescence analysis results for rice husk ash and silica samples

Elemental composition	Rice husk ash			Pure SiO ₂ sample		
	RHA1	RHA2	RHA3	SiO ₂ 1	SiO ₂ 2	SiO ₂ 3
SiO ₂	83.8	73.9	84.4	98.2	99.1	99.7
Cl	–	3.1	–	1.8	0.8	–
K ₂ O	8.6	18.5	4.8	–	–	0.1
CaO	6.7	2.8	8.3	–	–	0.2
MnO	0.2	0.6	–	–	–	–
Fe ₂ O ₃	0.6	0.6	2.5	–	0.02	–
ZnO	0.2	0.5	–	–	0.1	0.04

Fourier-Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) Results

The functional groups in the sample were identified using a Thermo Scientific FTIR Nicolet 6700 equipped with an attenuated total reflectance (ATR) accessory. Spectra were recorded with a resolution of 4 cm⁻¹ over the range of 4000–400 cm⁻¹.

Changes in the functional groups of the samples were studied by analyzing the FTIR spectra (Figures 3). The absorption peaks located at 1055 cm⁻¹ and 1058 cm⁻¹ are attributed to the stretching vibrations of C–OH and siloxane (Si–O–Si) bands, which were observed in the FTIR spectra of untreated rice husk (RH) samples. The peak at 2921 cm⁻¹ corresponds to the symmetric and asymmetric stretching vibrations of aliphatic C–H bonds in –CH₃ and –CH₂ groups, originating from cellulose, hemicellulose, and lignin structures, respectively.

The FTIR spectra of the extracted silica after preliminary acid washing showed the same absorption peak at 1055 cm^{-1} as in the raw RH, indicating that the pretreatment method did not significantly alter the surface properties of the silica.

Discussion. Synthesis of Carbon–Silicon Materials from Biomass, Specifically Rice Husk

The synthesis of carbon–silicon materials from biomass, particularly rice husk, has demonstrated high efficiency when employing sequential stages of carbonization, activation, and demineralization.

In the first stage, carbonization at $600\text{--}900\text{ }^{\circ}\text{C}$ in a nitrogen atmosphere removed volatile components and concentrated carbon and silicon in the product, resulting in the formation of a developed porous structure. The second stage, activation at $600\text{--}1200\text{ }^{\circ}\text{C}$ in a CO_2 atmosphere, further enhanced porosity by removing amorphous carbon and generating a more ordered microporous architecture. The final stage, demineralization using a modified Soxhlet extractor, effectively removed mineral impurities, including potassium, calcium, iron, and manganese compounds, as confirmed by XRF analysis.

X-ray diffraction (XRD) revealed that the obtained silica is X-ray amorphous, as evidenced by a single broad diffuse peak at approximately $2\theta \approx 24^{\circ}$, characteristic of amorphous SiO_2 derived from plant-based raw materials. This result is consistent with literature reports indicating that silica from rice husk is predominantly amorphous in its native form.

Scanning electron microscopy (SEM-EDS) showed that the synthesized silica possesses a nanostructured morphology with particle sizes of about 50 nm . EDS analysis indicated a silicon content of $34.5\text{ wt}\%$ and an oxygen content of $65.2\text{ wt}\%$, corresponding to the stoichiometry of silicon dioxide. The presence of sodium and trace amounts of other elements is attributed to residual minerals not fully removed during demineralization.

BET surface area analysis demonstrated that the SiO_2 samples achieved a specific surface area of up to $150\text{ m}^2/\text{g}$, with a pore volume of $0.8\text{ cm}^3/\text{g}$ and an average pore diameter of about 18 nm . The reduction in average pore diameter compared with less-activated samples indicates the development of a more advanced mesoporous structure, beneficial for use as a matrix for silicon-containing composites in lithium-ion battery anodes.

XRF analysis confirmed that after acid purification, the silica purity reached 99.7% . The significant reduction in K_2O , CaO , and Fe_2O_3 contents compared with rice husk ash demonstrates the effectiveness of the pretreatment process.

FTIR spectroscopy identified the main functional groups. Absorption peaks in the range of $1055\text{--}1058\text{ cm}^{-1}$ correspond to the stretching vibrations of $\text{Si}\text{--}\text{O}\text{--}\text{Si}$ bonds typical for amorphous silica. The persistence of this peak after acid washing indicates that chemical purification does not disrupt the primary SiO_2 structure. The disappearance or attenuation of peaks associated with $\text{C}\text{--}\text{H}$ vibrations (2921 cm^{-1}) indicates the removal of organic components.

Overall, these results demonstrate that the proposed technological scheme enables the production of high-purity, nanostructured, amorphous silica with a developed porous structure, making it promising for the fabrication of carbon–silicon composites

in electrochemical energy storage devices, as well as in adsorption and catalytic applications.

Conclusion. In the course of the present study, a technological scheme for producing high-purity amorphous silica from rice husk was developed and implemented, employing sequential processes of carbonization, activation, and demineralization. The following findings were established:

Carbonization in the temperature range of 600–900 °C under an inert atmosphere effectively removed volatile components, increased the relative content of carbon and silicon, and facilitated the formation of a well-developed porous structure in the initial material. Activation with carbon dioxide at 600–1200 °C promoted the development of micro- and mesoporous structures through the removal of disordered carbon. Demineralization using a modified Soxhlet extractor ensured the removal of alkali and alkaline earth metal impurities, enabling an increase in silica purity to 99.7%.

X-ray diffraction confirmed the amorphous state of the obtained SiO₂, while SEM-EDS analysis revealed a nanoscale particle size (~50 nm) and a silicon content of 34.5 wt%.

Low-temperature nitrogen adsorption measurements indicated a specific surface area of 120–150 m²/g, a pore volume of 0.5–0.8 cm³/g, and an average pore diameter of 18.4–26.4 nm.

The practical significance of the developed technology lies in the potential for scaling up the processes to pilot-scale units (5 kg/h) and integrating them into industrial lines for agricultural waste processing. This opens the way for comprehensive waste utilization with the production of valuable nanostructured materials.

Future research prospects include:

- modification of the obtained silica to improve its electrochemical properties;
- integration of the material into hybrid electrodes for supercapacitors and lithium-ion batteries;
- optimization of the energy efficiency of the technological processes.

References

- Chen Y., Cui J., Wang S., Xu W., Guo R. (2025) Biomass-Derived Hard Carbon Materials for High-Performance Sodium-Ion Battery. *Coatings*, 15, 156. <https://doi.org/10.3390/coatings15020156> (in Eng.)
- Abe Y., Tomioka M., Kabir M. et al. (2022) Role of SiO_x in rice-husk-derived anodes for Li-ion batteries. *Sci Rep* 12, 975 <https://doi.org/10.1038/s41598-022-04979-5> (in Eng.)
- Wang L., Chen L., Liu W. et al. (2022) Recovery of titanium, aluminum, magnesium and separating silicon from titanium-bearing blast furnace slag by sulfuric acid curing—leaching. *Int J Miner Metall Mater* 29. — P.1705–1714 <https://doi.org/10.1007/s12613-021-2293-3> (in Eng.)
- Wang K., Zheng H., Li S. et al. (2025) Study on carbonation behavior and carbon footprint of steel slag-calcium carbide slag-desulfurization gypsum composite system. *Sci Rep* 15, 15199 <https://doi.org/10.1038/s41598-025-99803-1> (in Eng.)
- Jin B., Liao L., Shen X., Mei Z., Du Q., Liang L., Lei B., Du J. Advancement in Research on Silicon/Carbon Composite Anode Materials for Lithium-Ion Batteries. *Metals* 2025, 15, 386. <https://doi.org/10.3390/met15040386> (in Eng.)
- Svojstva produktov reciklinga rastitelnyh othodov, poluchennyh metodom nizkotemperaturnogo piroliza i gazifikacii [Elektronnyj resurs]. https://apni.ru/article/1670-svojstva-produktov-retsiklinga-rastitelnikh?utm_source (in Eng.)



«ITS 15-2021 utilizaciya i obezvrezhivanie othodov (krome termicheskikh sposobov)». [Elektronnyj resurs]. <https://burondt.ru/files/TextEtk/EtkDocsFile2228.pdf> (in Eng.)

Wills B.A., Finch J. Mineral Processing Technology. 8th ed., Elsevier, 2016. <https://shop.elsevier.com/books/wills-mineral-processing-technology/wills/978-0-08-097053-0> (in Eng.)

RWTH Aachen University. Innovative approaches for an optimized processing of metallurgical slags, 2014. [Elektronnyj resurs]. https://publications.rwth-aachen.de/record/444642/files/59_Innovative_approaches.pdf (in Eng.)

Wikipedia. “Mineral processing.” https://en.wikipedia.org/wiki/Mineral_processing (in Eng.)

Stockholm Convention. Technical Guidelines on the Environmentally Sound Management of Wastes with POPs, 2005. https://chm.pops.int/Portals/0/docs/from_old_website/documents/meetings/cop_1/meetingdocs/langs/inf1_7/INF-7r.pdf (in Eng.)

Höber L.; Witt K.; Steinlechner S. Selective Chlorination and Extraction of Valuable Metals from Iron Precipitation Residues. Appl. Sci. 2022, 12, 3590. <https://doi.org/10.3390/app12073590> (in Eng.)

Binnemans K., Jones P.T., Manjón Fernández, Á. et al. Hydrometallurgical Processes for the Recovery of Metals from Steel Industry By-Products: A Critical Review. J. Sustain. Metall. 6. — P. 505–540 (2020). <https://doi.org/10.1007/s40831-020-00306-2> (in Eng.)

Faisal Mahmoo, Mujahid Ali, Mustafa Khan, Christian Fabrice Magoua Mbeugang, Yusuf Makarfi Isa, Alexander Kozlov, Maxim Penzik, Xing Xie, Haiping Yang, Shihong Zhang, Bin Li, A review of biochar production and its employment in synthesizing carbon-based materials for supercapacitors, Industrial Crops and Products, Volume 227, 2025, 120830, ISSN 0926-6690, <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2025.120830> (in Eng.)

A Mamta Devi, Sachin Rawat, Swati Sharma, A comprehensive review of the pyrolysis process: from carbon nanomaterial synthesis to waste treatment, Oxford Open Materials Science, Volume 1, Issue 1, 2021, itab014, <https://doi.org/10.1093/oxfmat/itab014>

Hydrothermal carbonization. Wikipedia Википедия; https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrothermal_carbonization?ysclid=meqny1isfl175057245 (in Eng.)

Simonenko E.P., Simonenko N.P., Derbenev A.V. et al. Synthesis of nanocrystalline silicon carbide using the sol-gel technique. Russ. J. Inorg. Chem. 58, - P.1143–1151 (2013). <https://doi.org/10.1134/S0036023613100215> (in Eng.)

Sol-gel process Wikipedia, https://en.wikipedia.org/wiki/Sol%E2%80%93gel_process?ysclid=meqo6ake2g520290754

Anara Molkenova, Izumi Taniguchi, Preparation and characterization of SiO₂/C nanocomposites by a combination of mechanochemical-assisted sol-gel and dry ball milling processes, Advanced Powder Technology, Volume 26, Issue 2, 2015. — P. 377-384, ISSN 0921-8831, <https://doi.org/10.1016/j.apt.2014.11.013>. (in Eng.)

Ameya Bapat, Curtis Anderson, Christopher R Perrey, C Barry Carter, Stephen A. (2004) Campbell and Uwe Kortshagen. Plasma synthesis of single-crystal silicon nanoparticles for novel electronic device applications. Plasma Phys. Control. Fusion 46 B97. DOI 10.1088/0741-3335/46/12B/009. (in Eng.)

<https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.379>

УДК 66.095.81: 620.193

МФТИ 31.35.15, 31.15.17, 53.43.13

© **A.S. Sass***, **I.I. Torlopov**, **K.S. Rakhmetova**, **D.A. Zhumadullaev**,
M. Zhurinov, 2025.

JSC «D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry»,
Almaty, Kazakhstan,

E-mail: aleksandr-sass@mail.ru

INFLUENCE OF METAL SURFACE MECHANICAL PREPARATION ON THE PROPERTIES OF PHOSPHATE COATINGS

Sass Aleksandr Sergeevich — Candidate of Chemical Sciences, Leading Researcher, Sector of Design of Technological Processes, JSC «D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry», Almaty, Kazakhstan,

E-mail: aleksandr-sass@mail.ru, ORCID: 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, ORCID: 0000-0003-9660-6397;

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, ORCID: 0000-0002-2098-3169;

Zhumadullaev Daulet Akhmetovich — Researcher, Sector of Modeling of Technological Processes, JSC «D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry», Almaty, Kazakhstan,

E-mail: dauletmmm@mail.ru, ORCID: 0000-0003-4049-6314;

Zhurinov Murat — Doctor of Chemical Sciences, General Director JSC «D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry», Almaty, Kazakhstan,

E-mail: ifce@ifce.kz. <https://orcid.org/0000-0001-5314-1219>.

Abstract. The effect of technical surface preparation on the formation, morphology, and protective ability of zinc-phosphate coatings on low-carbon steel was studied. St20 samples were manually ground using 600, 800, and 1000 grit abrasive paper, and also processed on a grinding machine with 80 grit to simulate industrial roughening. The coatings were applied from zinc-phosphate solutions (70 °C, pH 3.0) under constant temperature and continuous stirring to ensure uniform deposition conditions. The dynamics of coating weight gain, surface morphology (studied by SEM), and anticorrosive performance (evaluated using the Akimov method) were thoroughly analyzed. As the abrasive grain size increased from 600 to 1000 grit, surface roughness decreased, and the final coating weight increased, indicating more complete surface coverage. However, the protective time according to Akimov was reduced, presumably due to the formation of a weak auxiliary microcapillary network within the denser

phosphate layer, which may facilitate faster electrolyte penetration. In contrast, rough belt grinding produced a mixed plate-needle morphology with more open pores, resulting in both the highest mass gain and the longest failure time (59 s). The data show that although overall protective performance variation is limited, the coating's pore structure and barrier effect can be deliberately influenced by selecting appropriate and successive surface grinding techniques prior to phosphating.

Keywords: phosphate coatings, mechanical preparation, roughness, surface morphology

© А.С. Сасс*, И.И. Торлопов, К.С. Рахметова, Д.А. Жумадуллаев,
М. Журинов, 2025.

«Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия
институты» АҚ, Алматы, Қазақстан.
E-mail: aleksandr-sass@mail.ru

МЕТАЛДАР БЕТІН МЕХАНИКАЛЫҚ ДАЙЫНДАУДЫҢ ФОСФАТТЫ ЖАБЫНДАР ҚАСИЕТТЕРІНЕ ӘСЕРІ

Сасс Александр Сергеевич — химия ғылымдарының кандидаты, АҚ «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» Технологиялық процесстерді модельдеу зертханасының жетекші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан,
E-mail: aleksandr-sass@mail.ru, ORCID: 0000-0003-4049-6314;

Торлопов Иван Игоревич — АҚ «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» Технологиялық процесстерді модельдеу секторының кіші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан,
E-mail: myndfrea@gmail.com, ORCID: 0000-0003-9660-6397;

Рахметова Кенжегүл Сағынбайқызы — АҚ «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» Технологиялық процесстерді модельдеу секторының ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан,
E-mail: rahmetova_75@mail.ru, ORCID: 0000-0002-2098-3169;

Жумадуллаев Дәулет Ахметұлы — АҚ «Д.В. Сокольский атындағы жанармай, Катализ және электрохимия институты» Технологиялық процесстерді модельдеу секторының ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан,
E-mail: dauletmmm@mail.ru, ORCID: 0000-0003-4049-6314;

Жұрынов Мұрат — химия ғылымдарының докторы, АҚ «Д.В. Сокольский атындағы Жанармай, катализ және электрохимия институты» бас директоры, Алматы, Қазақстан,
E-mail: ifce@ifce.kz, <https://orcid.org/0000-0001-5314-1219>.

Аннотация. Төмен көміртекті болаттың беттік қабатында қолданылатын мырыш-фосфат жабындарының қалыптасуына, морфологиясына және қорғау қабілетіне металл бетін технологиялық дайындаудың әсері зерттелді. Ст20 болат үлгілері 600, 800 және 1000 грит тегістеуішпен қолмен тегістелді, сонымен қатар 80 грит абразивті таспамен тегістеу машинасында өңделді, бұл өнеркәсіптік типтегі өрескел тазартуды модельдеді. Фосфаттау термостатталған мырыш-фосфат ерітіндісінде (70 °С, рН 3,0) үздіксіз араластыру кезінде жүргізілді, бұл жергілікті градиенттерді жоққа шығарды және қайталанатын тұндыру жағдайларын қамтамасыз етті. Олар фосфат жабыны массасының өсу динамикасын, оның СЭМ

мәліметтері бойынша беткі морфологиясын және Акимовтың жеделдетілген әдісі бойынша коррозияға қарсы тұрақтылығын зерттеді. Абразивті бөлшектердің мөлшерінің азаюымен (600 → 1000 grit) кедір-бұдыр төмендеді және жабынның соңғы меншікті салмағы артып, субстраттың тығыз және біркелкі жабылуын растады. Осыған қарамастан, Акимов бойынша қорғау уақыты қысқарып, электролиттің металл бетіне енуін тездететін ішкі қабатты микрокапиллярлық желінің пайда болуына байланысты болды. Керісінше, өрескел станокты тегістеу (80 grit) ашық кеуектілігі бар аралас пластина-ине морфологиясын қалыптастырды; мұндай жабын бір уақытта ең үлкен салмақпен және істен шығудың максималды уақытымен (59 с) сипатталды. Нәтижелер интегралды қалыңдықтың ауытқуы аз болғанымен, тегістеу бояуды немесе майды қолданар алдында тері тесігінің топологиясына және фосфат қабатының тиімділігіне мақсатты түрде әсер етуі мүмкін екенін көрсетеді. Ұсынылған нәтижелер әдеби деректерді толықтырады және металл бөлшектерін фосфаттамас бұрын абразивті өңдеу режимдерін түзету мүмкіндігін көрсетеді.

Түйін сөздер: фосфат жабындары, механикалық дайындық, кедір-бұдырлық, жабын морфологиясы

© А.С. Сасс*, И.И. Торлопов, К.С. Рахметова, Д.А. Жумадуллаев,
М. Журинов, 2025.

АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского»,
Алматы, Казахстан.
E-mail: aleksandr-sass@mail.ru

ВЛИЯНИЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ ПОДГОТОВКИ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА НА СВОЙСТВА ФОСФАТНЫХ ПОКРЫТИЙ

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, ORCID: 0000-0003-4049-6314;

Торлопов Иван Игоревич — младший научный сотрудник сектора моделирования технологических процессов, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: myndfrea@gmail.com, ORCID: 0000-0003-9660-6397;

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, ORCID: 0000-0002-2098-3169;

Жумадуллаев Даулет Ахметович — научный сотрудник сектора моделирования технологических процессов, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: dauletmmm@mail.ru, ORCID: 0000-0003-4049-6314;

Журинов Мурат — доктор химических наук, Генеральный директор АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: ifce@ifce.kz. <https://orcid.org/0000-0001-5314-1219>.



Аннотация. Изучено влияние технологической подготовки металлической поверхности на формирование, морфологию и защитную способность цинк-фосфатных покрытий, наносимых на низкоуглеродистую сталь. Образцы стали Ст20 шлифовали вручную наждачной бумагой зернистостью 600, 800 и 1000 grit, а также обрабатывали на ленточно-шлифовальном станке абразивной лентой 80 grit, что моделировало грубую зачистку промышленного типа. Фосфатирование проводили в термостатированном цинк-фосфатном растворе (70 °С, рН 3,0) при непрерывном перемешивании, что исключало локальные градиенты и обеспечивало воспроизводимые условия осаждения. Изучали динамику прироста массы фосфатного покрытия, его поверхностную морфологию по данным СЭМ и антикоррозионную стойкость по ускоренному методу Акимова. С уменьшением размера абразивных частиц (600 → 1000 grit) шероховатость снизилась, а конечный удельный привес покрытия возростал, подтверждая более плотный и равномерный охват подложки. Тем не менее защитное время по Акимову сокращалось, вероятно из-за образования внутрислойной микрокапиллярной сети, ускоряющей проникновение электролита к металлической поверхности. Напротив, грубая станочная шлифовка (80 grit) формировала смешанную пластинчато-игльчатую морфологию с более открытой пористостью; такое покрытие характеризовалось одновременно наибольшим привесом и максимальным временем до отказа (59 с). Полученные данные демонстрируют, что хотя колебания интегральной толщины невелики, шлифовкой можно целенаправленно влиять на топологию пор и эффективность фосфатного слоя перед нанесением краски или масла. Представленные результаты дополняют литературные данные и указывают на возможность корректирования режимов абразивной обработки перед фосфатированием металлических деталей.

Ключевые слова: фосфатные покрытия, механическая подготовка, шероховатость, морфология покрытия

Работа выполнена при финансовой поддержке по программе целевого финансирования МОН РК BR24992812 «Разработка материалов и технологий, направленных на комплексную противокоррозионную защиту технологического оборудования в нефтехимической, машинно- и приборостроительной отраслях промышленности»

Введение. Метод фосфатирования как обработки металлических поверхностей с образованием твердых фосфатсодержащих покрытий остаётся одной из наиболее распространённых технологий подготовки поверхности углеродистых, низколегированных и ряда цветных металлов. Ключевые преимущества метода – технологическая простота, низкая стоимость и отсутствие высокотоксичных реагентов (Statsyuk et al., 2020; Narayanan, 2005; Папилов, 2018). Как правило, для получения фосфатных покрытий используют цинксодержащие фосфатные растворы с добавлением т.н. соли «Мажеф» – смеси нитратов цинка, железа и марганца – с добавлением нитрита и нитрата натрия, а также разнообразных добавок – ускорители

телей органического и неорганического происхождения, ПАВ и т.п. В литературе описано большое количество самых разнообразных рецептур (нитраты, нитриты, H_2O_2 , хлораты, гипохлориты, хроматы, перманганаты, персульфаты), соединений металлов, более положительных, чем железо (Cu, Ag, Ni, Co, W, Mo), восстановителей (сульфидов, фосфористой кислоты и ее солей, Zn-пыли), азотсодержащих и других органических соединений (анилина, хинолина, бензальдегида, пиридина, пикриновой кислоты и др.). В производственных условиях в качестве ускорителей предложены окислители и соли тяжелых металлов, например, таких, как медь и никель (Narayanan, 2005; Burduhos-Nergis et al., 2023; Старикова и др., 2020).

Фосфатная пленка на поверхности металла состоит из внутреннего слоя, непосредственно связанного с металлом и сцепленного с ним. Этот внутренний слой так же связан с внешним прочным слоем из окристаллизованных вторичных и третичных фосфатов, которые и определяют защитные свойства покрытия. По мере утолщения пленка начинает изолировать металлическую подложку, что приводит к замедлению и полной остановки процесса фосфатирования. Так как процесс фосфатирования происходит в кислой среде, то наблюдается так же обратный процесс растворения пленки. Когда эти оба процесса уравниваются, рост фосфатной пленки прекращается, т.е. при низких значениях pH она частично растворяется, при этом начинается процесс травления металла с потерей веса образца (Jiang et al., 2020; Herbáth et al., 2023; Rummyantseva et al., 2021). Таким образом, процесс фосфатирования носит сложный характер, и скорость формирования фосфатного покрытия определяется рядом параметров – температурой, величиной pH, скоростью перемешивания и т.п. Среди многочисленных факторов, определяющих качество покрытий, решающую роль играет предварительная механическая обработка металлического покрытия, осуществляемая либо вручную, либо посредством автоматизированного процесса (пескоструйная/дробеструйная обработка) (Narayanan, 2005; Папилов, 2018). В этой связи в данной работе было рассмотрено влияние механической обработки и связанных с ней параметров покрытия (шероховатость) на качество формирующихся фосфатных покрытий.

Материалы и основные методы.

Материалы:

В рамках исследования использовались металлические пластины из 3 марок стали: Ст20, 09Г2С и 12Х18Н10Т. При синтезе фосфатного раствора использовались следующие реактивы:

- цинк азотнокислый $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ («ч.д.а.», ГОСТ 5106–77);
- кислота фосфорная H_3PO_4 («х.ч.», ГОСТ 6552–80);
- кислота азотная HNO_3 («х.ч.», ГОСТ 4461–77);
- никель азотнокислый $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ («ч.д.а.», ГОСТ 4055–78).

Методы:

Предварительная обработка поверхности проводилась шлифованием бумагой с различной зернистостью (600, 800 и 1000 grit) в течение 15 мин. Для достижения нужной степени шероховатости проводилось последовательное шлифование

бумагами с меньшей зернистостью, после чего – бумагой с требуемой зернистостью. Ряд образцов подвергнулся обработке на ленточном шлифовальном станке JET, оборудованном лентой с зернистостью 80 grit. Часть обработанных таким образом пластин подвергалась дополнительной ручной шлифовке. В каждом случае для обеспечения достоверности результатов проводили по два измерения. В случае образцов, шлифованных на станке, ввиду необходимости учета анизотропии, вели измерение вдоль и поперек направления, соответствующего движению ленты при шлифовке на станке.

Синтез фосфатных покрытий осуществлялся в термостатированной установке с перемешиванием фосфатирующего раствора. В ходе фосфатирования регистрировались величины pH и температуры с использованием pH-метра pH-150МИ («Измерительная техника», РФ) с комбинированным электродом и термодатчиком.

Шероховатость обработанных пластин определялась с использованием портативного профилометра (Surface Roughness Tester TR220, Shandong IPRE Inspection Technology, КНР). Для проведения измерений прибор устанавливался на измеряемую поверхность, прибором регистрировались микронеровности по мере движения датчика по поверхности. Перед проведением измерений прибор предварительно калибровался по кварцевой пластине (1,257 мкм).

Для исследования структуры образцов методом СЭМ использовался низковакуумный сканирующий электронный растровый микроскоп JSM-6610LV (JEOL, Япония) с приставкой для микроанализа и локальным рентгенофлуоресцентным анализом элементного состава поверхности.

Для испытания полученных покрытий на коррозионную стойкость использовался реактив Акимова (82 г/л CuSO_4 , 15 г/л NaCl , HCl) (Statsyuk et al., 2020).

Результаты и обсуждение. В рамках предварительной оценки был проведен предварительный анализ элементного состава исходных металлических пластин методом сканирующей электронной микроскопии. Результаты исследования элементного состава пластин сведены в Таблице 1.

Таблица 1 – Элементный состав исходных образцов по данным СЭМ

Марка	Содержание элемента, масс. %						
	O	Al	Si	Mn	Fe	Cr	Ni
Ст20	—	0,32	0,28	0,38	99,02	—	—
09Г2С	—	0,21	0,43	1,28	98,09	—	—
12Х18Н10Т	2,22	0,67	0,48	1,43	68,21	18,82	8,18

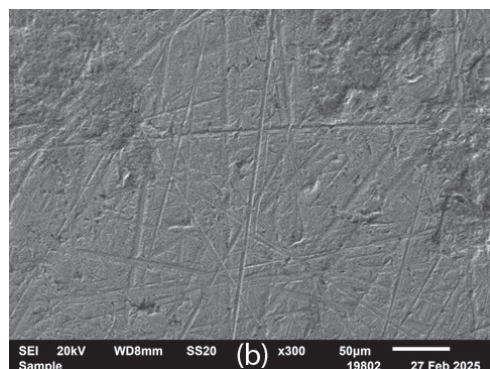
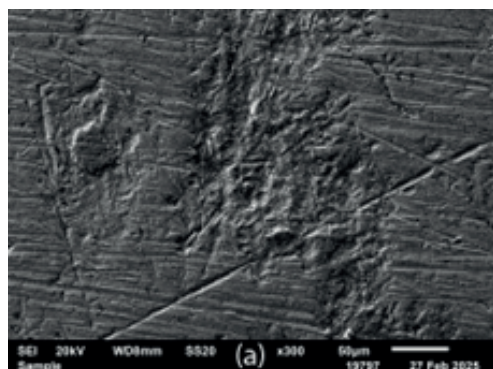
Можно видеть, что химический состав выбранных марок существенно различается по содержанию легирующих элементов. Низкоуглеродистая Ст20 практически лишена легированных добавок; напротив, сталь 09Г2С содержит повышенную долю марганца (~ 1,3% Mn), что обеспечивает большую склонность поверхности к пассивации в кислых средах. Нержавеющая сталь марки 12Х18Н10Т содержит 18% Cr и 10% Ni, образующих плотную пассивную плёнку, поэтому для неё, строго говоря, не требуется дополнительная механическая активация перед нанесением покрытий.

В целях установления подходящих условий подготовки для дальнейшего нанесения фосфатных покрытий с требуемыми характеристиками было проведено исследование влияния способа подготовки исходной стали, для чего подготовлен ряд пластин из различных марок стали и с различной предварительной подготовкой поверхности (вручную – 600, 800 и 1000 grit, на станке – 80 grit). Результаты исследования шероховатости образцов представлены в Таблице 2.

Таблица 2 – Результаты исследования шероховатости шлифованных пластин

Марка стали	Обработка	Направление	Шероховатость, мкм		
			Опыт 1	Опыт 2	Среднее
Ст20	600	—	0,696	0,454	0,575
	600	—	0,595	0,592	0,594
	800	—	0,505	0,505	0,505
	1000	—	0,180	0,162	0,171
	80	вдоль	1,720	2,158	1,939
		поперек	4,033	3,412	3,723
	80 + 800	вдоль	1,490	1,512	1,501
		поперек	3,419	3,009	3,214
80 + 1000	вдоль	0,873	0,673	0,773	
	поперек	1,833	2,139	1,986	
09Г2С	600	—	0,823	0,730	0,777
	600	—	0,654	0,753	0,704
	800	—	0,228	0,239	0,234
	80	вдоль	1,920	1,103	1,512
		поперек	2,555	2,691	2,623
	80 + 800	вдоль	1,277	0,729	1,003
		поперек	2,513	3,187	2,850
	80 + 1000	вдоль	0,397	0,595	0,496
поперек		1,007	1,831	1,419	
12Х18Н10Т	б/обр.	—	0,156	0,250	0,203
	1000	—	0,206	0,220	0,213

На Рисунке 1 представлены микрофотографии образцов, полученные методом сканирующей электронной микроскопии.



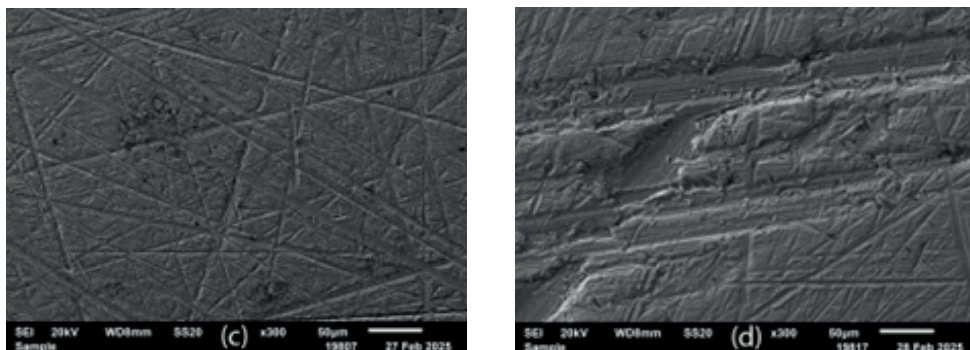


Рисунок 1 – Микрофотографии образцов поверхности ($\times 300$) пластин марки Ст20 после обработки: вручную, 600 grit (a); 800 grit (b); 1000 grit (c); на станке, 80 grit (d)

Количественную связь между морфологией поверхности и зернистостью применяемой шлифовальной бумаги иллюстрируют результаты измерения шероховатости: по мере увеличения зернистости бумаги при ручной обработке шероховатость уменьшается (Рисунок 2).

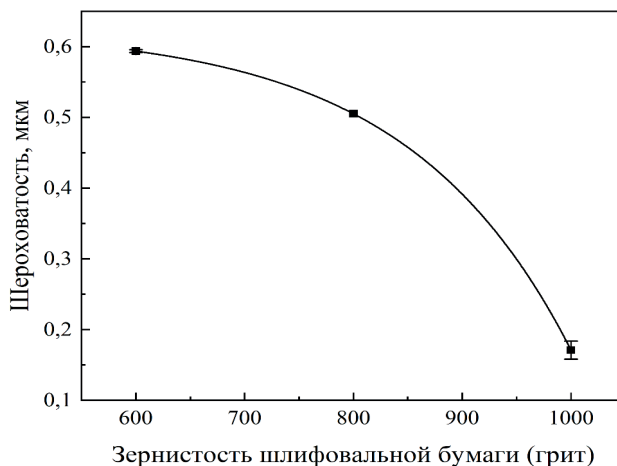


Рисунок 2 – Влияние зернистости шлифовальной бумаги на шероховатость поверхности образцов марки Ст20, обработанных вручную

Наиболее резкое уменьшение Ra ($\sim 60\%$) наблюдается при доводке до 1000 grit; переход 600 \rightarrow 800 grit снижает шероховатость на $\sim 15\%$.

В случае проведения предварительного шлифования на станке (80 grit) на поверхности образцов образуются глубокие борозды, вызванные трением о бумагу при высокой скорости. Эти борозды, параллельные движению бумаги на станке, образуют глубокие впадины на поверхности образцов, ведя к повышенной шероховатости в различных направлениях. Обработка на станке обуславливает также высокие значения коэффициентов анизотропии K_a , рассчитываемых как:

$$K_a = Ra_{\parallel} / Ra_{\perp}, \quad (1)$$

где Ra_{\parallel} – шероховатость вдоль направления прокатки, Ra_{\perp} – шероховатость поперек прокатки.

На Рисунках 3 и 4 приведены значения шероховатости в зависимости от зернистости применяемой шлифовальной бумаги при ручной обработке после исходной обработки на станке, на Рисунке 5 приведены усредненные значения коэффициентов анизотропии в зависимости от зернистости применяемой шлифовальной бумаги при ручной обработке после исходной обработки на станке.

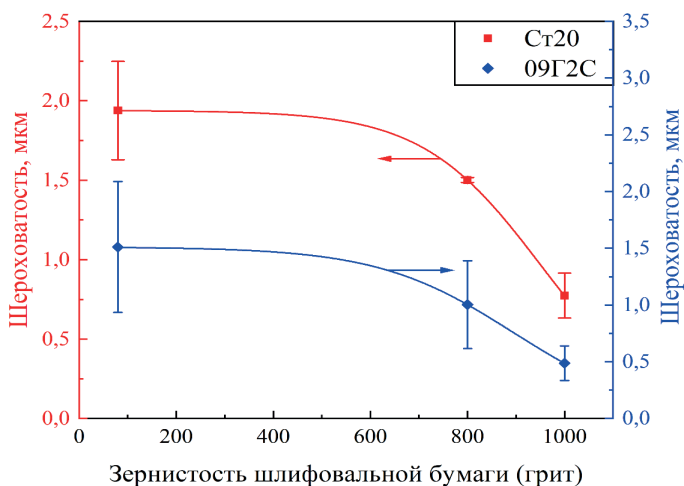


Рисунок 3 – Влияние зернистости бумаги на шероховатость поверхности образцов марок Ст20 и 09Г2С, обработанных на станке с последующей обработкой вручную, вдоль направления прокатки

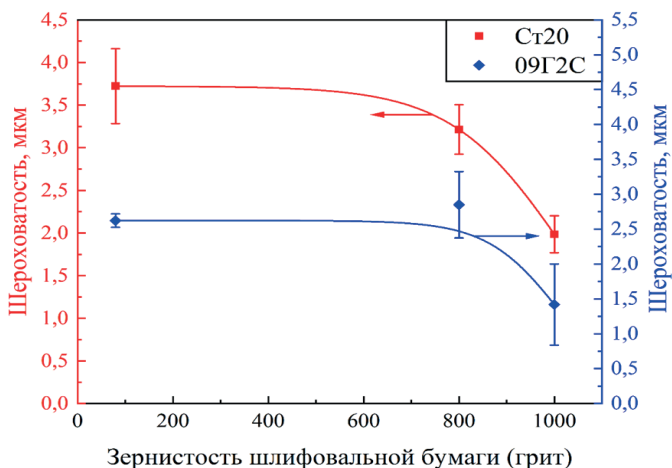


Рисунок 4 – Влияние зернистости бумаги на шероховатость поверхности образцов марок Ст20 и 09Г2С, обработанных на станке с последующей обработкой вручную, поперек направления прокатки

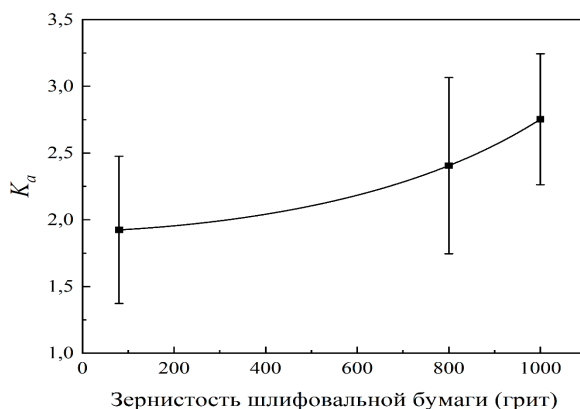


Рисунок 5 – Влияние зернистости шлифовальной бумаги на коэффициент анизотропии шероховатости поверхности образцов, обработанных на станке с последующей обработкой вручную

Вероятное увеличение коэффициента анизотропии шероховатости поверхности с ростом зернистости шлифовальной бумаги объясняется различной природой обработки: образованные при обработке на станке направленные структуры при переходе на более зернистую бумагу сглаживаются, но, как свидетельствуют микрофотографии СЭМ (Рисунок 1), в значительно меньшей степени в продольном направлении, т.к. этому мешает образованный на станке рельеф. При грубой обработке на станке обработка идет за счет срезания приповерхностных слоев материала, а при мелкозернистой доводке – за счет пластической деформации поверхности, и мелкие абразивы не снимают материал равномерно, но выравнивают поверхность в одном направлении, усиливая анизотропию. Величина коэффициента анизотропии по полученным данным не зависит от типа применяемой стали.

В случае нержавеющей стали (12Х18Н10Т) исходная поверхность имеет меньшую среднюю шероховатость, чем при обработке даже при 1000 грит. Это обуславливает отсутствие необходимости ее обработки.

Для проверки влияния механической обработки на свойства покрытий вели фосфатирование подготовленных описанным выше образом металлических пластин (сталь Ст20; 600, 800, 1000 и 80 грит) и использованием стандартного фосфатирующего раствора (4,10 г/кг $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$, 1,47 мл/кг 85% H_3PO_4 , 0,30 мл/кг 65% HNO_3 , 0,52 г/кг NaOH, остальное – вода). Температура нанесения – 70°C, начальная величина pH – 3,00, продолжительность нанесения – 10–15 мин. Фосфатные покрытия характеризовали гравиметрическим методом с использованием электронных весов (цена деления 0,001 г, три измерения массы). Величины привеса покрытий относили к расчетной поверхности пластин (0,0025 м² для пластин размером 5,0×2,5 см).

Результаты измерения масс покрытий в виде удельных привесов пластин даны на Рисунке 6.

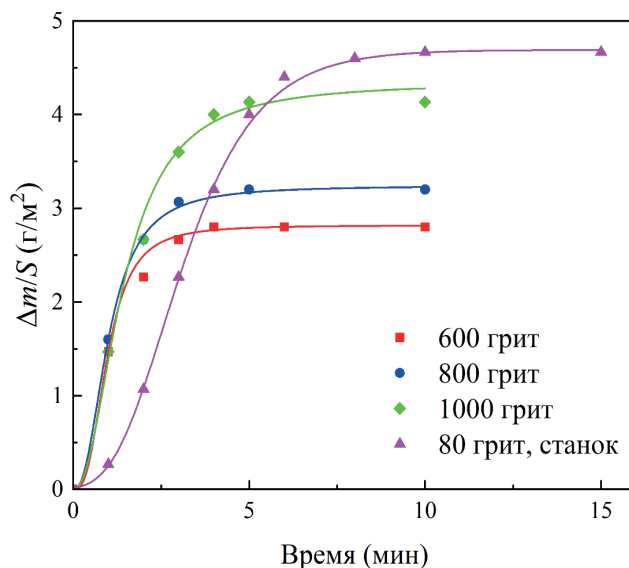


Рисунок 6 – Удельный привес фосфатных покрытий во времени в зависимости от предварительной механической обработки пластин (70°C, pH₀ 3,00, 1000 об/мин, пластины 2,5×5,0 см)

Наблюдаемые профили изменения привеса при разных способах обработки пластин носят схожий характер. Кривые можно условно подразделить на две стадии: начальная стадия зародышеобразования, на которой возникают кристаллы фосфатных солей на поверхности, и последующая стадия роста кристаллов до достижения динамического равновесия между возникновением кристаллов и их перерасторением (Narayanan, 2005; Jiang et al., 2020, Herbáth et al., 2023). В общем виде наблюдаемые кривые хорошо описываются экспоненциальными зависимостями.

Можно наблюдать, что в случае ручной обработки исходных пластин шлифовальной бумагой кривые носят идентичный характер за исключением изменения предельной величины удельного привеса: от 2,8 г/м² для 600 grit до 4,1 г/м² для 1000 grit. Рост этой величины с увеличением зернистости шкурки и, соответственно, уменьшением шероховатости объясняется тем, что мелкие поперечные царапины, образуемые при ручной шлифовке, дают на поверхности плотную сеть микродефектов (Рисунок 1), которые являются хорошими центрами зародышеобразования. Чем меньше шероховатость, тем мельче эти центры и, соответственно, тем более плотный слой покрытия образуется. Этот результат хорошо согласуется с данными литературы (Nivart et al., 2003; Kim et al., 2020).

Обработка пластин на станке (80 grit) ведет к резкой деформации поверхности за счет возникновения «задиоров» – образуется грубый рельеф с замкнутыми впадинами, где pH большее время сохраняет сравнительно низкие значения, и реакция начинается несколько позднее. Другой возможной причиной наличия индукционного эффекта, вероятно, является пассивация поверхности (налеп)

после механической деформации. После прохождения индукционного периода начинается резкий рост привеса покрытия до более высокого предельного значения ($4,7 \text{ г/м}^2$), что обусловлено, предположительно, более высокой поверхностью образованного покрытия даже после разрушения наклепа и, соответственно, большим числом зародышей на единицу массы.

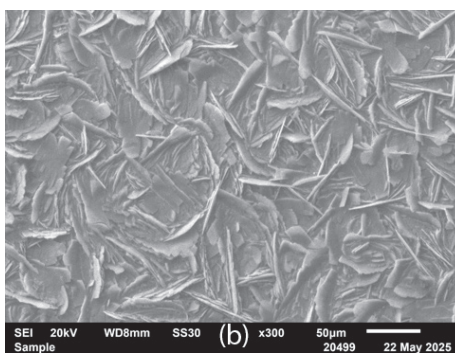
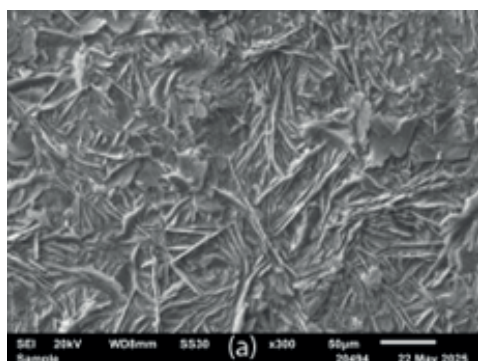
Для объективной оценки защитных свойств сформированных плёнок был применён быстрый капиллярно-коррозионный тест по Акимову, имитирующий действие влажной атмосферы: время визуального появления пятен меди принимается за момент «прорыва» и характеризует стойкость сформированного покрытия. Такой подход чувствителен к морфологии и пористости слоя, а не только к его интегральной толщине. Результаты исследования представлены в Таблице 3.

Таблица 3 – Результаты исследования свойств покрытий по методу Акимова (70°C , pH_0 3,00, 1000 об/мин, пластины $2,5 \times 5,0$ см)

Образец	Стойкость по Акимову, с
600 grit	43
800 grit	46
1000 grit	30
80 grit, станок	59

Сопоставление полученных данных указывает на то, что величина привеса не является прямым индикатором коррозионной стойкости. Образец 1000 grit имеет наибольший привес среди образцов, обработанных вручную, но минимальное время до прорыва по Акимову (30 с). Доводка поверхности шлифовальной бумагой с зернистостью 600 и 800 grit дает большие значения времени до прорыва, хотя и меньшие величины интегрального привеса.

Для анализа полученных закономерностей и объяснения наблюдаемого несоответствия результатов гравиметрического метода и метода Акимова, согласно которым покрытия с большей массой характеризуются меньшей стойкостью к коррозии, было проведено исследование поверхности сформированных покрытий методом СЭМ (Рисунок 7).



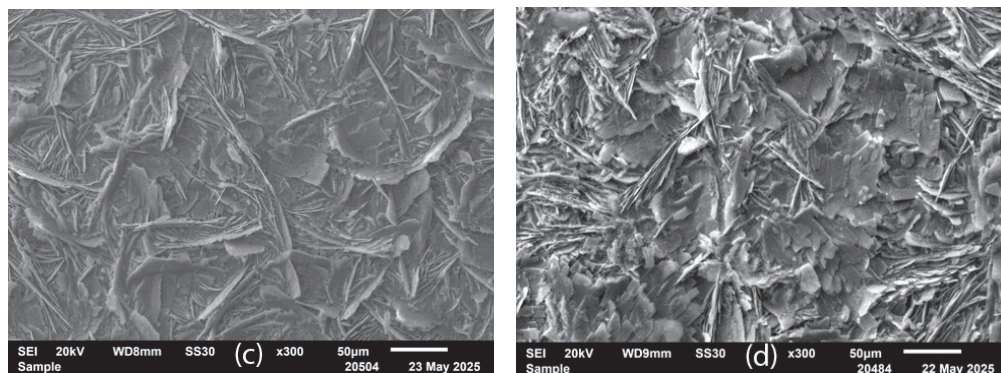


Рисунок 7 – Микрофотографии образцов поверхности ($\times 1000$) пластин марки Ст20 после обработки и фосфатирования: вручную, 600 grit (a); 800 grit (b); 1000 grit (c); на станке, 80 grit (d)

На микрофотографии СЭМ образцов, подготовленных вручную с использованием шлифовальной бумаги различной зернистости (Рисунок 7, а–с), наблюдаются характерные протяженные образования листовой формы: в случае 600 grit они составляют 10–40 мкм в длину и 1–2 мкм в толщину. Переход к 800 и 1000 grit соответственно ведет к увеличению числа частиц с увеличением их длины и уменьшением диаметра за счет роста анизотропии шероховатости. При 1000 grit образуется плотное сплошное покрытие из мелких кристаллов, предположительно, ввиду увеличения числа центров зародышеобразования. Вероятно, данное покрытие дает микрокапиллярный слой, характеризующийся меньшей устойчивостью по Акимову, чем покрытия, подготовленные при 600 и 800 grit.

В отличие от покрытий, подготовленных вручную, в случае образца, подготовленного на станке, на микрофотографии (Рисунок 7, d) наблюдается образование несколько отличающегося покрытия, образованного одновременно тонкими игольчатыми кристаллами и частицами чешуйчато-пластинчатой формы. Это может объясняться предпочтительным формированием кристаллов определенной морфологии в разных местах покрытия за счет наличия толстых борозд, определяющих наличие зон локальных пересыщений соответственно на дне борозд и на гребнях. Предположительно, достигнутая таким образом морфология покрытия обеспечивает большую его устойчивость за счет отсутствия открытых каналов к поверхности металла, что позволяет судить о возможности управления качеством фосфатных покрытий за счет предварительной механической обработки исходных пластин металла.

Заключение. В ходе работы установлено, что последовательная ручная шлифовка от 600 до 1000 grit понижает шероховатость стали Ст20, одновременно увеличивая повышая удельный привес фосфатного слоя. Несмотря на рост массы, стойкость по методу Акимова уменьшается, что связано с переходом от разреженной пластинчатой морфологии к мелкопористой губчатой поверхности,

что ускоряют капиллярное проникновение электролита в ходе испытания по Акимову. Грубая станочная обработка (80 grit) формирует направленные борозды; при фосфатировании в этом случае зарождение кристаллов протекает преимущественно на гребнях, образуя крупные пластины и полузамкнутые полости. Такое сочетание обеспечивает максимальный привес покрытия при наибольшей стойкости по Акимову. Из полученных данных можно утверждать, что ключевым фактором формирования стойких антикоррозионных покрытий является топология пор, которую можно регулировать с помощью методики шлифования.

Литература

- Burduhos-Nergis D.P., Sandu A.V. Burduhos-Nergis D.D., Vizureanu P., Bejinariu C. (2023) Phosphate conversion coating – A short review, *Arch Metall Mater*, 68:1029-1034. DOI: 10.24425/amm.2023.145471
- Herbáth B., Kovács K., Jakab M., Makó É. (2023) Crystal structure and properties of zinc phosphate layers on aluminum and steel alloy surfaces, *Crystals*, 13(3):369. DOI: 10.3390/cryst13030369
- Hivart P., Bricout J.P. (2003) Influence of cleaning pretreatments on tribological properties of zinc phosphated steels, *Ind Lubr Tribol*, 55(2):90–96. DOI: 10.1108/00368790310470921
- Jiang C., Gao Z., Pan H., Cheng X. (2020) The initiation and formation of a double-layer phosphate conversion coating on steel, *Electrochem Commun*, 114:106676. DOI: 10.1016/j.elecom.2020.106676
- Kim H.Y., Noh Y.T., Jeon J.H., Byoun Y.M., Kang H.S., Hyun S.K. (2020) Effect of surface roughness on crystal size of manganese phosphate coating of carbon steel, *J Nanosci Nanotechnol*, 20(7):4312–4317. DOI: 10.1166/jnn.2020.17551
- Narayanan T.S.N.S. (2005) Surface pretreatment by phosphate conversion coatings – A review, *Rev Adv Mater Sci*, 9:130–177.
- Папиров Р.В. (2018) Разработка процессов низкотемпературного кристаллического фосфатирования: дисс. ... к.т.н. – Москва: ПХТУ, 136 с.
- Rumyantseva V., Konovalova V., Narmaniya B. (2021) Modified phosphate coatings applied to steel by cold method, *J Phys Conf Ser*, 2131(4):042027. DOI: 10.1088/1742-6596/2131/4/042027
- Statsyuk V., Fogel L., Bold A., Sultanbek U., Ait S., Sassykova L. (2020) Protective properties of phosphate coatings based on rust converters, *J Chem Technol Metall*, 55(6):2151–2157
- Старикова Е.Ю., Фейлер Л.А. (2020) Защитные фосфатные покрытия металлов, *Вестник КузГТУ*, (6):46-50. DOI: 10.26730/1999-4125-2020-6-46-50

References

- Burduhos-Nergis D.P., Sandu A.V. Burduhos-Nergis D.D., Vizureanu P., Bejinariu C. (2023) Phosphate conversion coating – A short review, *Arch Metall Mater*, 68:1029-1034. DOI: 10.24425/amm.2023.145471 (in Eng.)
- Herbáth B., Kovács K., Jakab M., Makó É. (2023) Crystal structure and properties of zinc phosphate layers on aluminum and steel alloy surfaces, *Crystals*, 13(3):369. DOI: 10.3390/cryst13030369 (in Eng.)
- Hivart P., Bricout J.P. (2003) Influence of cleaning pretreatments on tribological properties of zinc phosphated steels, *Ind Lubr Tribol*, 55(2):90–96. DOI: 10.1108/00368790310470921 (in Eng.)
- Jiang C., Gao Z., Pan H., Cheng X. (2020) The initiation and formation of a double-layer phosphate conversion coating on steel, *Electrochem Commun*, 114:106676. DOI: 10.1016/j.elecom.2020.106676 (in Eng.)
- Kim H.Y., Noh Y.T., Jeon J.H., Byoun Y.M., Kang H.S., Hyun S.K. (2020) Effect of surface roughness on crystal size of manganese phosphate coating of carbon steel, *J Nanosci Nanotechnol*, 20(7):4312–4317. DOI: 10.1166/jnn.2020.17551 (in Eng.)
- Narayanan T.S.N.S. (2005) Surface pretreatment by phosphate conversion coatings – A review, *Rev Adv Mater Sci*, 9:130–177. (in Eng.)
- Papirov R.V. (2018) Razrabotka protsessov nizkotemperaturnogo kristallicheskogo fosfatirovaniya

[Development of low-temperature crystalline phosphating processes]: Diss. ... Cand. Tech. Sci – Moscow: RCTU, 136 p. (in Russ.)

Rumyantseva V., Konovalova V., Narmaniya B. (2021) Modified phosphate coatings applied to steel by cold method, *J Phys Conf Ser*, 2131(4):042027. DOI: 10.1088/1742-6596/2131/4/042027 (in Eng.)

Starikova Ye.Yu., Feyler L.A. (2020) Zashchitnye fosfatnye pokrytiya metallov [Protective phosphate coatings on metals], *Vestn KuzGTU*, (6):46–50. DOI: 10.26730/1999-4125-2020-6-46-50 (in Russ.)

Statsyuk V., Fogel L., Bold A., Sultanbek U., Ait S., Sassykova L. (2020) Protective properties of phosphate coatings based on rust converters, *J Chem Technol Metall*, 55(6):2151–2157 (in Eng.)

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

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

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

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

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

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

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

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

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

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

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

Подписано в печать 3.09.2025.

Формат 60x88¹/₈.
18,0 п.л. Заказ 3.