

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

**ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES**

**№2
2026**

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

2026 • 2



ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

Editor-in-Chief:

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

Editorial Board:

KALIMOLDAYEV Maksat Nuradilovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56153126500>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2428551>

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

RAMAZANOV Tlekkaul Sabitovich, (Deputy Editor-in-Chief), Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Academician of NAS RK (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6701328029>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/13503476>

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ABILMAGZHANOV Arlan Zainutallaevich, PhD in Chemistry, First Deputy Director General of JSC "Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry named after D.V. Sokolsky", (Almaty, Kazakhstan), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES.

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

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

The certificate of registration of a periodical printed publication in the Committee of Information of the Ministry of Information and Social Development of the Republic of Kazakhstan № **KZ93VPY00121157** issued **05.06.2025**

Thematic scope: *physics and chemistry*.

Periodicity: 4 times a year.

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

Главный редактор:

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

Редакционная коллегия:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

АБИЛМАТЖАНОВ Арлан Зайнуталлаевич, кандидат химических наук, первый заместитель генерального директора АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского», (Алматы, Казахстан), <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57197468109>, <https://www.webofscience.com/wos/author/record/2024265>

ACADEMIC JOURNAL OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES

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

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

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

Тематическая направленность: физика, химия.

Периодичность: 4 раза в год.

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

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

CONTENTS

PHYSICS

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

CHEMISTRY

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

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

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

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

ХИМИЯ

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

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

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

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

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

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

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

Нуртай Ж., Орынбасар Р.О., Аймағанбетова З.К., Жантурина Н.Н.
Диатомит пен диметил метилфосфонат толтырғыштары бар винилэфир шайыр үлгілерінің кинетикалық параметрлерінің модельдеу.....272

Сағынтаева А., Жаниқұлов Н., Сударев Е., Қайырбаева М., Жакипбаев Б.
Гипс-цемент-пуццоланды композициялық материал алу үшін қажетті шикізаттардың сапасын зерттеу.....286

Сатаева С., Ермуханова С., Уразова А., Мендығалиева А., Сабитов Б.
Толуолдың фотокаталитикалық тотығуы арқылы бензол алу.....302

Сдикова Г.Ж., Далабаева Н.С., Сарова Н.Б., Мұхтар Т.Ж., Жалтырбаева Н.К.
Фосфор ингибиторлардың болаттың жемірілуіне қарсы тиімділігі.....315

Шаймардан М., Ажиханова Ж., Әбутәліп М., Тоқтарбайұлы О.
Phlomis Tuberosa L. өсімдігі биомассасынан лигнинді қышқылдық өңдеу арқылы бөліп алу және сипаттау.....329

Есимсиитова З.Б., Сейсенова А., Орынғалиева С.Ж., Сануар А., Манап К.Р.
Энергиялық қолдану үшін жылжымалы пиролиз қондырғысын пайдалану арқылы күріш қауызынан көміртекті материалдар алу.....338

Жетенова М.С., Сүлейменова М.Ш., Нұралы Ә.М., Мутушев А.Ж., Калимолдина Л.М.
Өсімдік шикізатынан алынған құрамында каротиноид бар сығындыларды әзірлеу және зерттеу.....353

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

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

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Коштыбаев Т.Б., Алиев Ш., Алиева М.Е., Жавлиева А.Т.

Ковариантный подход к кинетической теории плазмы в сильном электромагнитном поле.....13

Кемелбекова А., Шонгалова А., Бондарь Е., Отунчи Е.

Технологии переработки отработанных литий-ионных аккумуляторов: экологическое воздействие, получаемые продукты и будущие направления развития.....25

Қойлық Н.О., Баймбетова Г.А., Дәлелханқызы А., Қаптағай Г.Ә., Примкулова Ж.Е.

Упрощение фермионной динамико-симметрической модели для идентичных частиц и её отображение в бозонное пространство.....38

Масақ Б., Ағыл-Мұсапар О., Амангелдинова С., Курмангалиева В., Сноу М.

Ограничения на юкавовские короткодействующие взаимодействия на основе нейтронной интерферометрии.....60

Нурбаев Б.М., Дмитриева Е.А.

Перовскиты на основе олова.....70

Нуртазина А.С., Жубаев А.К.

Исследование влияния высокодисперсной охры на кинетические характеристики эпоксидных композитов.....92

Шоканов А.К., Хамраев Ш.И., Смихан Е.А.

Мёссбауэровские исследования трассеров на основе летучей золы.....103

Уалиханова У.А., Курбан Е.Е., Сыздыкова А.М., Алтаева Г.С., Алтайбаева А.Б.

Разрешение вырождения метрических и телепараллельных теорий гравитации посредством многоканальной гравитационно-волновой астрономии.....119

Жадыранова А.А., Ержан Б.

Динамика отскоковых режимов в модифицированной телепараллельной гравитации.....134

Жусупова Н.К.

Применение методов машинного обучения при анализе гравитационных волн и космологических моделей.....151

ХИМИЯ

Аубакиров Е., Ахметова Ф., Ташмухамбетова Ж., Тоштай К., Амантайулы К.

Конверсия полимерных отходов в синтетическое топливо путем модификации цеолита тайжугзен солями вольфрама.....164

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

©Koshtybayev T.B.¹, Aliev Sh.², Aliyeva M.E.³, Zhavliyeva A.T.¹, 2026.

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

²Kyrgyz State University named after I. Arabaev, Bishkek, Kyrgyzstan;

³Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan.

*E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com

COVARIANT APPROACH TO THE KINETIC THEORY OF PLASMA IN A STRONG ELECTROMAGNETIC FIELD

Koshtybayev Talgat — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: koshtybayev70@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-7344-6801>;

Aliev Sharshenaly — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Doctor of Pedagogical Sciences, Professor, Kyrgyz State University named after I. Arabaev, Bishkek, Kyrgyzstan,

E-mail: alidoc2010@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-4704-2953>;

Aliyeva Moldir — Master of sciences, Senior lecturer, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: moldir-2008@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0440-6211>;

Zhavliyeva Ardak — Master of Pedagogical Sciences, lecturer, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-4554-7604>.

Abstract. This article presents the regularities of equilibrium statistical mechanics in the hypersurface formalism, the Hamiltonian of quantum electrodynamic plasma on hypersurfaces, and the kinetic characteristics in a strong electromagnetic field in a covariant form. The research method is based on the relativistic von Neumann equation for nonequilibrium statistical operators defined on spacelike planes in Minkowski space, canonical quantization of the system on hypersurfaces, and the covariant model of Coulomb gauge. Methods for deriving kinetic equations in the hypersurface formalism and transformations of correlation functions and nonequilibrium statistical operators with respect to unitary time evolution in an averaged electromagnetic field are shown. By applying inhomogeneous Lorentz transformations to state vectors on hypersurfaces, the covariant form of the Schrödinger equation and an equation similar to the nonrelativistic von Neumann equation for the statistical operator and a mixed quantum ensemble were derived. These equations and the equations of motion of operators were written in the Heisenberg and Schrödinger representations. Using the Legendre transformation, an

expression for the Hamiltonian of quantum electrodynamic plasma on a hypersurface was derived, kinetic equations were obtained by expanding field operators into plane waves, as well as equations for correlation functions and the photon density matrix. The dispersion law for photons on a hyperplane was uniquely defined as the average value of the operator of the photon density matrix. Taking into account the above-mentioned representation of field operators, expressions of the photon density matrix through operators were derived and presented. For the photon and fermion matrices obtained in these relations, chain equations for correlation functions arising in the calculation of commutators with the interaction Hamiltonian are constructed. These equations represent the fundamental canonical model of electromagnetic interactions in covariant form.

Keywords: hypersurface, quantum electrodynamic plasma, Hamiltonian, kinetic equation, Minkowski space, state vector, statistical operator

For citations: Koshtybayev T.B., Aliev Sh., Aliyeva M.E., Zhavliyeva A.T. Covariant Approach to the Kinetic Theory of Plasma in a Strong Electromagnetic Field. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 13–24. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.434>

©Қоштыбаев Т.Б.¹, Алиев Ш.², Алиева Е.М.³, Жавлиева А.Т.¹, 2026.

¹ Қазақ ұлттық педагогикалық қыздар университеті, Алматы, Қазақстан;

² И. Арабаев атындағы Қырғыз мемлекеттік университеті, Бішкек, Қырғызстан;

³ Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com

КҮШТІ ЭЛЕКТРОМАГНИТТІК ӨРІСТЕГІ ПЛАЗМАНЫҢ КИНЕТИКАЛЫҚ ТЕОРИЯСЫНА КОВАРИАНТТЫҚ КӨЗҚАРАС

Қоштыбаев Талғат — физика–математика ғылымдарының кандидаты, доцент, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: koshtybayev70@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-7344-6801>;

Алиев Шаршенали — физика–математика ғылымдарының кандидаты, педагогика ғылымдарының докторы, профессор, И. Арабаев атындағы Қырғыз мемлекеттік университеті, Бішкек, Қырғызстан, E-mail: alidoc2010@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-4704-2953>;

Алиева Мөлдір — жаратылыстану ғылымдарының магистрі, аға оқытушы, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан, E-mail: moldir-2008@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0440-6211>;

Жавлиева Ардақ — педагогика ғылымдарының магистрі, оқытушы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-4554-7604>.

Аннотация. Ұсынылып отырған мақалада гипержазықтықтар формализміндегі тепе–теңдік статистикалық механиканың заңдылықтары, гипержазықтықтардағы кванттық–электродинамикалық плазманың гамильтонианы мен күшті электромагниттік өрістегі кинетикалық сипаттамасы коварианттық нұсқада берілді. Зерттеу тәсілі Минковский кеңістігіндегі кеңістік тектес гипержазықтықтарда

анықталған тепе–теңсіз статистикалық операторларға арналған релятивистік фон Нейман теңдеуіне, гипержазықтықтардағы жүйенің каноникалық квантталуына және кулондық калибровканың коварианттық үлгісіне негізделген. Гипержазықтықтар формализміндегі кинетикалық теңдеулерді шығарып алу жолдары және орташаланған электромагниттік өріс бойынша корреляциялық функциялар мен тепе–теңсіз статистикалық операторлардың унитарлық уақыт бойынша түрлендірулері көрсетілген. Гипержазықтықтардағы күй векторларына біртекті Лоренц түрлендіруін қолдану арқылы Шредингер теңдеуінің коварианттық нұсқасы мен аралас кванттық ансамбльге арналған статикалық оператор үшін фон Нейманның релятивистік емес теңдеуі тәрізді теңдеу шығарылып көрсетілді. Бұл теңдеулер және операторларлық қозғалыс теңдеулері Гейзенбергтік және Шредингерлік бейнелерде жазылды. Лежандр түрлендіруі арқылы гипержазықтықтағы кванттық–электродинамикалық плазманың гамильтонианы, өрістік операторларды жазық толқындар бойынша жіктеу арқылы кинетикалық теңдеулер, корреляциялық функцияларға арналған теңдеулер мен фотондық тығыздық матрицасы шығарылып көрсетілді. Тығыздықтың фотондық матрицасының орташа мән ретінде оператордың орташасы гипержазықтықтағы фотондар үшін дисперсия заңы бір мәнді ретінде анықталды. Өрістік операторлардың жоғарыда атап өтілген бейнесін ескере отырып тығыздықтың фотондық матрицасының операторлар арқылы өрнектері шығарылып көрсетілді. Алынған осы қатынастардағы фотондық және фермиондық матрицалары әсерлесулер гамильтонианы бар коммутаторларды есептеу кезінде пайда болатын корреляциялық функцияларға арналған тізбекті теңдеулер құрылады. Бұл теңдеулер ковариантты тұрғада электромагниттік әсерлесулердің негізгі канондық үлгісі болып табылады.

Түйін сөздер: гипержазықтық, кванттық–электродинамикалық плазма, гамильтониан, кинетикалық теңдеу, Минковский кеңістігі, күй векторы, статикалық оператор

©Коштыбаев Т.Б.¹, Алиев Ш.², Алиева М.Е.³, Жавлиева А.Т.¹, 2026.

¹Казахский национальный женский педагогический университет,
Алматы, Казахстан;

²Кыргызский государственный университет имени И. Арабаева,
Бишкек, Кыргызстан;

³Казахский национальный педагогический университет имени Абая,
Алматы, Казахстан.

*E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com

КОВАРИАНТНЫЙ ПОДХОД К КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПЛАЗМЫ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

Коштыбаев Талгат — кандидат физико–математических наук, доцент, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: koshtybayev70@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-7344-6801>;

Алиев Шаршенали — кандидат физико–математических наук, доктор педагогических наук,

профессор, Кыргызский государственный университет имени И. Арабаева, Бишкек, Кыргызстан,
E-mail: alidoc2010@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-4704-2953>;

Алиева Молдир — магистр естественных наук, старший преподаватель, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: moldir-2008@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0440-6211>;

Жавлиева Ардак — магистр педагогических наук, преподаватель, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: zhavliyeva.11@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-4554-7604>.

Аннотация. В статье представлены основные положения равновесной статистической механики в формализме гиперплоскостей, рассмотрен гамильтониан квантово-электродинамической плазмы на гиперплоскостях и исследованы кинетические характеристики плазмы в сильном электромагнитном поле в ковариантной форме. Метод исследования основан на релятивистском уравнении фон Неймана для неравновесных статистических операторов, определённых на пространственноподобных гиперплоскостях пространства Минковского, каноническом квантовании системы в формализме гиперплоскостей и ковариантной модели кулоновской калибровки. Рассмотрены способы вывода кинетических уравнений, а также преобразования корреляционных функций и неравновесных статистических операторов по времени в усреднённом электромагнитном поле. С использованием неоднородных преобразований Лоренца для векторов состояния на гиперплоскостях получены ковариантная форма уравнения Шрёдингера и уравнение, аналогичное нерелятивистскому уравнению фон Неймана для статистического оператора смешанного квантового ансамбля. Уравнения движения операторов представлены в формализмах Гейзенберга и Шрёдингера. На основе преобразования Лежандра выведено выражение для гамильтониана квантово-электродинамической плазмы на гиперплоскости, получены кинетические уравнения, уравнения для корреляционных функций и фотонная матрица плотности. Закон дисперсии фотонов на гиперплоскости определён через среднее значение оператора фотонной матрицы плотности. Для фотонной и фермионной матриц построены цепочечные уравнения для корреляционных функций, возникающих при вычислении коммутаторов с гамильтонианом взаимодействия. Полученные результаты формируют каноническую модель электромагнитных взаимодействий в ковариантной форме и могут быть использованы при дальнейшем развитии кинетической теории релятивистской плазмы.

Ключевые слова: гиперплоскость, квантово-электродинамическая плазма, гамильтониан, кинетическое уравнение, пространство Минковского, вектор состояния, статический оператор

Кіріспе. Өте күшті электромагниттік өрістерде орналасқан плазманың кинетикалық теориясы сызықтық эффекттер, параметрлік орнықсыздық және релятивистік қозғалыста секілді жағдайларды ескеріп, зарядталған бөлшектердің қозғалысына қатысты бірқатар қасиеттерді тереңінен зерттей алады. Қайсыбір көп бөлшектік жүйелердегі жұптасқан соқтығысулар арқылы емес, кулондық алы-

стан әсер ету күштері арқылы қарастыру ыңғайлы. Аталған күштер ұжымдастық қоздыруларға (квазибөлшектер) себепші. Бұл кезде Больцманның кинетикалық теңдеуіндегі сол жақ мүшелермен ғана шектеліп, соқтығысу интегралын қолданбауға болады. Электрондық газдан және ауыр иондардан құрылған электрлі нейтрал жүйенің тепе-теңді күйінің бірлік көлемдегі электрондар мен иондардың саны тең болғандықтан, электр өрісінің кернеулігі нөлге тең болады. Күшті өрістер бөлшектердің траекториясын өзгерте алады, соның салдарынан электронның осцилляциялық энергиясы оның тыныштық күйінің энергиясынан көп болады. Бұл жағдай бөлшек пен өрістің әсерлесу энергиясы жылулық қозғалыстардың энергиясынан көп дегенді білдіреді. Сол себептен, кинетикалық теорияның зерттеушілік нәтижесін жоғарылату мақсатында қуатты сыртқы өрісті ескеретін Власов—Максвелл теңдеуін қолдануға тура келеді. Күшті өрістер жағдайында процестерге жұмсалатын уақыт релаксация уақытынан аз болғандықтан жұптық соқтығысулар ескерілмейді, сондықтан Власов теңдеуін басты математикалық құрал деп алынады. Күшті өрістер осцилляциялық ығысу, үлестірім функциясының өзгеруі және параметрлік орнықсыздықтар сияқты сызықты емес эффекттердің табиғатын ашып бере алады. Электрондар релятивистік қасиеттерге ие болғандықтан электрон—позитрон жұбының пайда болуы және радиациялық тежелулерді ескеретін кванттық кинетикалық теңдеулерді қолдануға мәжбүрлік пайда болады (Kukushkin et al., 2023; Mironov et al., 2018).

Күшті лазерлерлік импульстердің затпен әсерлесулеріне арналған зерттеулер күшті электромагниттік өріспен әсерлесетін релятивистік плазманың теориясын қарқынды түрде дамытуға септігін тигізді. Тұжырымдалған теориялық көзқарастар мен принциптік ұстанымдар кванттық электродинамика мен тепе-теңсіздік статистикалық механика заңдары арқылы іске асатындығы айқындалды. Тепе-теңсіздік кванттық—электродинамикалық плазманың теориясында орташаланған өрістік жуықтаудағы кинетикалық теңдеулер негізгі рөлді атқара алады. Өрістік операторлар үшін жазылған қозғалыс теңдеулері арқылы ковариантты кинетикалық теңдеуді алуға мүмкіндігі мол. Бұл теңдеудің шешімін коварианттық формализм көзқарасында қарастыру кезінде бірқатар қиындықтарға кезігеміз. Оның басты себебі, коварианттық функцияның 4-өлшемді Фурье түрлендіруі кезінде корреляциялық функциялар интегралдау қажет болады. Корреляциялық функциялардың спектрлік қасиеттері екі уақытты Грин функциясы бойынша қарастырылатыны мәлім, ол коварианттық функциялармен тығыз байланысты. Осы және осы тектес мәселелер кейінгі жылдары релятивистік кванттық кинетикалық теория тұрғысынан шешіліп жүр. Осы келтірілген көзқарастарды орташа өрістегі плазманың теориясына қолданып, диссипативті процестерді жан-жақты сипаттауға болады. Сонымен бірге, тығыздық матрицасының релятивистік әдісін ескеріп бір уақыттық формализмді коварианттық бейнеде жазуға және орташа өріс жуықтауы шеңберінен шығуға да болады (Koshtybayev & Aliyeva, 2024a; Koshtybayev & Aliyeva, 2024b).

Бұл мақала плазма теориясындағы коварианттық бір уақытты формализміне және ондағы кинетикалық теңдеулерге арналған. Гипержазықтық формализмін-

дегі тепе–теңділік статистикалық механика заңдры, гипержазықтықтағы плазманың гамильтонианының өрнегі және күшті электромагниттік өрістегі кинетикалық сипаттамасы коварианттық нұсқада берілетін болады. Зерттеу тәсілі ретінде Минковский кеңістігіндегі гипержазықтықтарда анықталған тепе–теңсіз статистикалық операторлар үшін жазылған релятивистік фон Нейман теңдеуіне, гипержазықтықтардағы жүйенің канондық квантталуына және кулондық калибровканың коварианттық бейнесіне негізделген. Кинетикалық теңдеулер гипержазықтықтар формализмін қолданып шығарылып көрсетіледі. Орташаланған электромагниттік өрістегі корреляциялық функциялар және тепе–теңсіз статистикалық операторды жіктеу тұтас уақыттық түрлендірулер бойынша орындалады.

Зерттеу материалдары. Магниттелген плазмадағы электрондар мен иондардың арасындағы энергия алмасуы арқылы іске асырылатын плазмалық каналдар мен беткі қабаттардың түзілуін зерттеуді материалдар қатарына қабылдауға болады. Релятивистік статистикалық механиканы кинетикалық теорияға қолданылу, операторлардың гипержазықтықтардағы коварианттық түрі, бір уақытты корреляциялық функциялар, электродинамиканың канондық квантталуы да тақырыпқа негізделген зерттеу материалдары бола алады. Статистикалық оператордың эффективті гамильтонианы, фон Нейман теңдеуіне сәйкес келуі гипержазықтықтар формализмі кинетикалық теңдеулерді алуға мүмкіндік туғызады (Lukin et al., 2021a).

Зерттеу әдістері. Релятивистік кинетикалық теориядағы интегралдық теңдеулерді уақытты Грин функциялары арқылы шешудің теориялық зерттеулер үшін маңызы зор. Аталған әдісті астрофизикалық жүйелерге де қолдауға болады, мұнда орташа өріс шарты рөл атқармайды. Плазманың кинетикалық қасиеттері үшін қуатты лазерлік импульстер арқылы әсер ету жеткілікті. Минковский кеңістігі бойынша гипержазықтықтардағы процестердің де зерттеу барысы үшін де маңызы бар. Операторларға арналған қозғалыс теңдеулерін қолдану арқылы плазманың электродинамикалық табиғатын ашу және кинетикалық теңдеулерді коварианттық нұсқада жазу оңайланады. Больцман немесе Власова теңдеулерін сызықтық емес эффекттерге қолдану арқылы негізгі деген нәтижелерге қол жеткізілітін болады. Қолданылатын негізгі әдістерге термоядролық синтездеуді, лазерлік плазма мен астрофизикалық нысандардағы үлестірім функциясының моменттерін, сандық модельдеу әдісін, күшті өрістерге арналған ығысулар теориясын, сонымен бірге бөлшектер жұбының пайда болуын, бөлшектердің динамикасы мен плазмаға арналған кулондық логарифмді жатқыза аламыз.

Нәтижелер. Арнайы салыстырмалылық теориясы бойынша жүйенің кванттық күйлері Минковский кеңістігі арқылы бақыланушылардың жиыны арқылы сипатталады. Аталған Мұндай беттердің ішінде үш өлшемді гипержазықтықтар мәселені шешуді қиындатады. Қандай да бір кеңістік тектес $\sigma \equiv \sigma_{n,\tau}$ гипержазықтық n^μ бірлік векторлармен және скаляр τ параметрімен (инвариантты уақытпен) берілетін болсын (Deminov, 2023) және оның теңдеуі

$$x \cdot n = \tau, \quad n^2 = n^\mu n_\mu = 1 \quad (1)$$

$n^\mu = (1, 0, 0, 0)$ санақ жүйесінде τ параметрі t уақыт айнымалысы ретінде жүреді. $\sigma_{n,\tau}$ –ға функционал болатын $|\Psi[\sigma_{n,\tau}]\rangle$ күй векторын пайдаланып, σ , $\tilde{\sigma} = L\sigma$ гипержазықтықтардағы күй векторларының арасындағы арақатынастарға $L = \{a, \Lambda\}$ біртекті Лоренц түрлендіруін қолдану арқылы Шредингер теңдеуінің коварианттық түрін шығарып алуға болады (Lifshic & Pitaevskij, 1979; Silin, 1998). $L = \{a, \Lambda\}$ түрлендіруінің нақты түрі

$$\sigma \rightarrow \tilde{\sigma} = L\sigma: x \rightarrow \tilde{x} = \Lambda x + a \quad (2)$$

Күй векторларының арасындағы байланыстар төменде келтірілген:

$$U(L)|\Psi[L\sigma]\rangle = |\Psi[\sigma]\rangle \quad (3)$$

мұндағы $U(L) = U(a, \Lambda)$ –біртекті Лоренц тобы. Бұл топтың $\hat{P}^\mu$, $\hat{M}^{\mu\nu}$ генераторлары энергия–импульстің 4–векторы мен бұрыштық моменттің 4–өлшемді тензоры (Izvekova et al., 2021; Lukin et al., 2021b). τ –дың мүмкін болатын мәндерін өзгертетін уақыттық трансляцияларға сәйкес $|\Psi[\sigma_{n,\tau}]\rangle = |\Psi(n, \tau)\rangle$ белгілеуін жасап, олар үшін $U(a, 1) = \exp(i\hat{P}_\mu a^\mu)$ скеріп, $a^\mu = n^\mu \delta\tau$ трансляциясына арналған

$$|\Psi(n, \tau + \delta\tau)\rangle + i\delta\tau (\hat{P}_\mu n^\mu) |\Psi(n, \tau)\rangle = |\Psi(n, \tau)\rangle \quad (4)$$

өрнегін ала аламыз. Осыдан Шредингердің релятивистік теңдеуін мына түрде аламыз:

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} |\Psi(n, \tau)\rangle = \hat{H}(n) |\Psi(n, \tau)\rangle \quad (5)$$

Осы теңдеуге сәйкес гипержазықтықтағы беттердің гамильтонианы

$$\hat{H}(n) = \hat{P}_\mu n^\mu \quad (6)$$

Айнымалы сыртқы өрісте энергия–импульс векторы мен гамильтониан τ –ға тәуелді (Kolesnikov & Manujlov, 2004; Kosarev, 2008). (5)–ке Шредингердің түйіндес теңдеуін қолданып кванттық ансамбльдердің статикалық $\lambda(n, \tau)$ операторы үшін жазылатын релятивистік емес фон Нейман теңдеуі тектес теңдеуді алуға болады:

$$\frac{\partial \lambda(n, \tau)}{\partial \tau} - i \left[\lambda(n, \tau), \hat{H}^\tau(n) \right] = 0 \quad (7)$$

Статикалық оператордың гейзенбергітік бейнесі τ -ға тәуелді емес, шектелген σ_{n, τ_0} гипержазықтықтағы функционалдар $\hat{\mathbb{K}}_H(x)$ операторларымен анықталады. Бұл τ параметрінің функциясы болып табылады және олар үшін

$$\Delta^\mu_v = \delta^\mu_v - n^\mu n_v \quad (8)$$

проекторын енгізу арқылы 4-векторды

$$x^\mu = n^\mu \tau + x^\mu_\perp, \tau = n \cdot x \quad (9)$$

Түрде жазып аламыз. мұндағы

$$x^\mu_\perp = \Delta^\mu_v x^v \quad (10)$$

x -тің көлденең құраушысы. Бұл жағдайда $\hat{\mathbb{K}}_H(x)$ операторлары да τ мен $x^\mu_\perp$ -тің функциясы болып табылады:

$$\hat{\mathbb{K}}_H(x) = \hat{\mathbb{K}}_H(n\tau + x_\perp) \equiv \hat{\mathbb{K}}_H(\tau, x_\perp) \quad (11)$$

$\hat{P}^\mu$ те τ -ға тәуелді емес, яғни

$$\partial_\mu \hat{\mathbb{K}}_H(x) = -i [\hat{\mathbb{K}}_H(x), \hat{P}_\mu] \quad (12)$$

Түрдегі қозғалыс теңдеуін пайдаланып, (6) түрдегі гамильтонианы бар теңдеуді алуға болады:

$$\hat{\mathbb{K}}_H(\tau, x_\perp) = \exp[i(\tau - \tau_0) \hat{\mathbb{K}}_H(n)] \hat{\mathbb{K}}_H(\tau_0, x_\perp) \exp[-i(\tau - \tau_0) \hat{\mathbb{K}}_H(n)] \quad (13)$$

$\sigma_{n, \tau}$ гипержазықтығындағы $H^\tau(n)$ гамильтонианды Лежандр түрлендіруін және (6)-ны пайдаланып анықтаймыз:

$$H^\tau(n) = P^\tau(n) n^\mu \equiv \int_{\sigma_{n, \tau}} d\sigma n^\mu T_{\mu\nu} n^\nu \quad (14)$$

мұндағы $T_{\mu\nu}(x)$ —энергия–импульс тензоры.

Плазмадағы кинетикалық процестерді σ_{n, τ_0} гипержазықтық формализмі үшін

спинор жазықтықтағы матрица болып табылатын $W_{aa'}(x, p; \tau)$ калибрлеуіш функцияны енгіземіз:

$$W_{aa'}(x, p; \tau) = \int d^4 y e^{ipy} \delta(y \cdot n) \exp \left\{ ie \Lambda \left(x + \frac{1}{2} y, x - \frac{1}{2} y; \tau \right) \right\} N_{aa'} \left(x + \frac{1}{2} y, x - \frac{1}{2} y; \tau \right) \quad (15)$$

мұндағы

$$\Lambda(x, x', \tau) = \int_0^1 ds (x^\mu - x'^\mu) A_\mu(\tau, x' + s(x - x')) \quad (16)$$

калибрлеуіш функция. Бір бөлшектік тығыздық операторының ($N_{aa'}$) орташасын жазайық:

$$N_{aa'}(x, x'; \tau) = \left\langle N_{aa'}(x, x') \right\rangle^\tau$$

Кинетикалық теорияда фотондық тығыздық матрицасын гипержазықтықтар формализмінде анықтау үшін A^μ операторларын жазық толқындар бойынша жіктеп алу қажет болады (Koshtybayev et al., 2025):

$$A^\mu(\tau, x) = \int \frac{d^4 q}{\sqrt{2\omega_n(q)} (2\pi)^3} \delta(q - \omega_n(q)) \sum_{k=1,2} e^\mu(q, k) e^{iqx} \quad (17)$$

Мұндағы $e^\mu(q, k)$ – поляризацияның нақтылы 4–векторы, ал гипержазықтықтағы фотондарға арналған дисперсия заңы

$$\omega_n(q) = \omega_n(-q) = \sqrt{-q^\mu q_\mu} \quad (18)$$

Тығыздықтың фотондық матрицасын төмендегі операторлар арқылы өрнектей аламыз:

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= \int \frac{d^4 q}{\sqrt{(2\pi)^3}} \delta(q) \exp(-iqx) a_k(q) \\ \psi_k^*(x) &= \int \frac{d^4 q}{\sqrt{(2\pi)^3}} \delta(q) \exp(iqx) a_k^*(q) \end{aligned} \quad (19)$$

Бұл операторлардың арасындағы орын ауыстырымдылық амалдары төменде көрсетіліген (Timohin et al., 2022):

$$[\psi_k(x), \psi_{k'}^*(x')] = \delta_{kk'} \delta^3(x - x')$$

$$[\psi_k(x), \psi_{k'}^*(x')] = [\psi_k^*(x), \psi_{k'}^*(x')] = 0$$

Тығыздықтың фотондық матрицасының орташасын $\lambda'(n, \tau)$ статистикалық оператордың көмегімен іске асыра аламыз (Zaitsev et al., 2018):

$$N_{kk'}(x, x'; \tau) = \langle \bar{N}_{kk'}(x, x') \rangle^\tau \quad (20)$$

Мұндағы

$$\bar{N}_{kk'}(x, x') = \psi_{k'}^*(x') \psi_k(x) \quad (21)$$

Егер, фотондық матрицаны $\lambda'(n, \tau)$ –ның орташасы бойынша жазар болсақ, онда:

$$N_{kk'}(x, x'; \tau) = \langle \bar{N}_{kk'}(x, x') \rangle^\tau - \langle \psi_k(x) \rangle^\tau \langle \psi_{k'}^*(x') \rangle^\tau \quad (22)$$

(15) және (20) өрнектерге арналған кинетикалық теңдеулерді шығарып алу үшін төмендегі қозғалыс теңдеулерін пайдалану керек:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} N_{aa'}(x, x'; \tau) = -i \text{Tr} \left\{ \left[\bar{N}_{aa'}(x, x'), \bar{H}_0(n) + \bar{H}^\tau(n) \right] \right\} \lambda'(n, \tau)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} N_{kk'}(x, x'; \tau) = -i \text{Tr} \left\{ \left[\bar{N}_{kk'}(x, x'), \bar{H}_0(n) + \bar{H}^\tau(n) \right] \right\} \lambda'(n, \tau)$$

Осы катынастардың оң жақ бөліктерін тығыздықтың фотондық және фермиондық матрицалары арқылы өрнектеп алуға болады (Shaihitdinov, 2014). Ол үшін $\bar{H}^\tau(n)$ әсерлесу гамильтонианы ескерілген коммутаторларды есептеу кезіндегі

$$F_{1\dots k}(x_1, \dots, x_k; n, \tau) = \langle \bar{Q}_1(x_1) \dots \bar{Q}_k(x_k) \rangle^\tau$$

корреляциялық функцияларға арналған төмендегі тізбекті теңдеулерді құрып аламыз:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} F_{1\dots k}(x_1, \dots, x_k; n, \tau) = -i \left\langle \left[\bar{Q}_1(x_1) \dots \bar{Q}_k(x_k), \bar{H}^\tau(n) \right] \right\rangle^\tau -$$

$$-\varepsilon \left\{ F_{1\dots k}(x_1, \dots, x_k; n, \tau) - \left\langle \bar{Q}_1(x_1) \dots \bar{Q}_k(x_k) \right\rangle_q^\tau \right\}$$

Мұндағы $\bar{Q}_i(x_i)$ – фермиондық және электромагниттік өріс операторларынан құрылған Шредингер операторлары, ал $\langle \dots \rangle_q^\tau$ символы квазитепе–теңді орташалар дегенді білдіреді (Charles et al., 2008; Lafleur et al., 2010).

Қорытынды. Сонымен, мақалада кванттық электродинамикалық плазманың электродинамикалық қасиеттері кванттық жуықтауда қарастырылып, оның күшті электромагниттік өріспен әсерлесу жағдайындағы кинетикалық теориясы зерттелді. Есептеулер гипержазықтық формализмін қолдану арқылы іске асырылды. Аталған формализмнің ковариантты үлгіде қолданылуы бірқатар жуықтауларды ковариантты түрде жазуға мүмкіндіктер береді. Мақалада баяндалған әдістер мен көзқарастың релятивистік емес тығыздық матрицасы әдісінен бірқатар өзгешеліктері бар екенін айтып өту керек, бұл релятивистік емес статистикалық механиканың көптеген әдістерін плазманың электродинамикасына қолдана алатындығымызды дәлелдейді. Нақты айтсақ, гипержазықтықтардағы тепе–теңсізділікті сипаттайтын статистикалық операторлар көп бөлшекті корреляцияларды ескере алады. Сонымен бірге, гипержазықтықтағы гейзенбергітік бейнелеулер инвариантты уақытқа тәуелді тепе–теңсізді Грин функциялары арқылы релятивистік емес жүйелердің диаграммалық техникасын жасап бере алады. Мақалада келтірілген жуықтауларды өрістік теорияның басқа да мәселелеріне, мысалы кваркты–глюонды плазмадағы тасымал құбылыстарына қолдануға болады.

References

- Charles C., Boswell R.W., Laine R. & MacLellan P. (2008) An experimental investigation of alternative propellants for the helicon. *Journal of Physics D: Applied Physics*. – No. 6. – P. 175213. DOI: 10.1088/0022-3727/41/17/175213 (in Eng.).
- Deminov R.G. (2023) *Metody kvantovoj teorii polja v fizike kondensirovannogo sostojaniya* [Methods of Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics]. – Kazan' 88. (in Russ.).
- Izvekova Yu.N., Kassem A.I., Popel S.I., Morozova T.I., Zelenyi L.M. (2021) Dusty Plasmas at the Moon: Effects of Magnetic Fields. *Journal of Physics: Conference Series*. – Vol. 1787. – P. 012051. DOI: 10.1088/1742-6596/1787/1/012051 (in Eng.).
- Kolesnikov E.K., Manujlov A.S. (2004) Kineticheskoe uravnenie dlja reljativistskogo jelektronnogo puchka, rasprostranjajushhegosja v plotnyh i razrezhennyh gazoplazmennyyh sredah prodol'no vneshnemu magnitnomu polju [Kinetic equation for a relativistic electron beam propagating in dense and rarefied gas-plasma media along an external magnetic field]. *Technical Physics*. – No. 74(9). – P. 103-107. (in Russ.).
- Kosarev I.N. (2008) Kinetic theory of a nonideal plasma: Dispersion relations. *Gas Discharges*. – No. 53. – P. 1296-1301. DOI: <https://doi.org/10.1134/S106378420810006X> (in Eng.).
- Koshtybayev T., Aliyeva M. (2024) Correlation functions of weakly inhomogeneous plasma. *Bulletin of the Karaganda University "Physics Series"*. – No. 29(3). – P. 6-14. DOI: <https://doi.org/10.31489/2024PH3/6–14> (in Eng.).
- Koshtybayev T., Aliyeva M. (2024) To plasma electrons motion theory in high-frequency fields. *Bulletin of the Karaganda University "Physics Series"*. – No. 29(2). – P. 19-26. DOI: <https://doi.org/10.31489/2024PH2/19–26> (in Eng.).
- Koshtybayev T., Tatenov A., Aliyeva M., Zhantleuov K. (2025) Influence of a constant magnetic field and a high-frequency electric field on plasma. *Bulletin of the Karaganda University "Physics Series"*. – No. 30(1). – P. 37-44. DOI: <https://doi.org/10.31489/2024PH1/37–44> (in Eng.).

Kukushkin A.B., Sdvizhenskii P.A., Flanagan J., Kos D., Neverov V.S., Szepesi G., Taylor D.M.A., and JET Contributors. (2023) Plasma Phys. Control. Fusion. – No. 65. – P. 075009 (in Eng.).

Lafleur T., Boswell R.W., & Charles C. (2010) Ion beam formation in a very low magnetic field expanding helicon discharge. Physics of Plasmas. – No. 17. – P. 043505. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3381093> (in Eng.).

Lifshic E.M., Pitaevskij L.P. (1979) Fizicheskaja kinetika [Physical kinetics]. – Moscow: Nauka. – 528 p. (in Russ.).

Lukin A. S., Artemyev A.V., Petrukovich A.A. (2021) On application of stochastic differential equations for simulation of nonlinear wave-particle resonant interactions. Physics of Plasmas. – No. 28. – P. 092904. DOI:10.1063/5.0058054 (in Eng.).

Lukin A.S., Artemyev A.V., Petrukovich A.A., Zhang X.J. (2021) Charged particle scattering in dipolarized magnetotail. Physics of Plasmas. – No. 28. – P. 102901. DOI:10.1063/5.0062160 (in Eng.).

Mironov M.I., Zaitsev F.S., Gorelenkov N.N., Afanasyev V.I., Chernyshev F.V., Nesenevich V.G., Petrov M.P. (2018) Sawtooth mixing of alphas, knock-on D, and T ions, and its influence on NPA spectra in ITER plasma. Nuclear Fusion. – No. 58 (8). – P. 1-9. DOI: <https://doi.org/10.1088/1741-4326/aab678> (in Eng.).

Shaihitdinov R.Z. (2014) The Mechanism of Attraction of Negatively Charged Macroparticles in Dusty Plasma. Low-Temperature Plasma in Functional Coating Processes. – No. 5. – P. 168-171. (in Eng.).

Silin V.P. (1998) Vvedenie v kineticheskuyu teoriyu gazov [Introduction to the kinetic theory of gases.]. – Moscow: Nauka. – 354 p. (in Russ.).

Timohin V.M., et al. (2022) Spektroskopicheskaja diagnostika periferijnoj plazmy tokamaka “Globus-M2” s ispol'zovaniem inzhkcii nejtral'nogo gelija [Spectroscopic diagnostics of the peripheral plasma of the Globus-M2 tokamak using neutral helium injection]. – JETP Letters. – P. 116(5). – P. 292-299. (in Russ.).

Zaitsev F.S., Shishkin A.G., Lukianitsa A.A., Suchkov E.P., Stepanov S.V., Anikeev F.A. (2018) The Basic Components of Software-Hardware System for Modeling and Control of the Toroidal Plasma by Epsilon-Nets on Heterogeneous Mini-Supercomputers. Communications in Computational Physics. – No. 24(1). – P. 1-263. DOI: 10.4208/cicp.OA-2017-0079 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 25–37

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.435>

UDC: 621.355.2; 628.4
IRSTI: 31.15.23; 31.29.00

©Kemelbekova A.^{1,2*}, Shongalova A.^{1,2}, Bondar E.¹, Otunchi Ye.¹, 2026.

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

²The Pennsylvania State University, State College, United States of America.

*E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university

RECYCLING TECHNOLOGIES FOR SPENT LITHIUM-ION BATTERIES: ENVIRONMENTAL IMPACT, RECOVERED PRODUCTS, AND FUTURE DEVELOPMENT TRENDS

Kemelbekova Ainagul — PhD, Senior Researcher, Institute of Physics and Technology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan; The Pennsylvania State University, State College, United States of America,

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

Shongalova Aigul — PhD, Senior Researcher, Institute of Physics and Technology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan; The Pennsylvania State University, State College, United States of America,

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

Bondar Ekaterina — PhD, Senior Researcher, Institute of Physics and Technology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: katebondar111@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6745-5462>;

Otunchi Yedil — Master of Technical Sciences, Engineer, Institute of Physics and Technology, Satbayev University, Almaty, Kazakhstan,

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

Abstract. The widespread use of lithium-ion batteries (LIBs), particularly driven by the rapid growth of the electric vehicle industry, is expected to lead to a sharp increase in the volume of spent batteries in the near future. Improper disposal of such batteries may result in environmental pollution, accumulation of heavy metals, and the loss of valuable resources. Commercial LIBs contain high-value metals such as lithium, cobalt, nickel, manganese, copper, and aluminum, as well as flammable organic electrolytes and fluorinated salts, which complicates their safe processing.

Currently, pyrometallurgical, hydrometallurgical, and direct regeneration methods for LIB recycling are being extensively studied. Pyrometallurgy enables the recovery of metals in alloy form, while hydrometallurgy focuses on obtaining high-purity ionic solutions. From these solutions, cobalt, nickel, lithium, and other metals can be recovered through electrolysis or chemical precipitation and subsequently used to synthesize new materials. Recent studies have demonstrated the high efficiency of

resynthesizing cathode materials such as LiCoO_2 , $\text{LiNi}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$, and LiFePO_4/C using precursors derived from spent LIBs.

However, the recycling sector faces several challenges: the structural diversity of batteries, complex module assembly, material mixing, lack of standardization, and safety concerns. Additionally, the development of cobalt-free cathode materials may reduce the economic viability of some traditional recycling methods. To improve future LIB recycling systems, it is necessary to standardize battery sorting and labeling, design batteries with recyclability in mind, strengthen regulatory frameworks, and implement environmentally safe technologies. Establishing an efficient recycling system will help conserve resources, reduce environmental impact, and support the transition toward a circular economy.

Keywords: lithium-ion batteries, electrolytes, recycling technologies, waste management, greenhouse gas emissions (GHG)

Financing. *The work was supported by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan under the program BR28712683 "Development of technology to reduce energy consumption and waste without compromising efficiency in the processing of lithium-ion batteries" and the authors acknowledge the Center for International Programs "Bolashak".*

For citations: *Kemelbekova A., Shongalova A., Bondar E., Otunchi Ye. Recycling Technologies for Spent Lithium-Ion Batteries: Environmental Impact, Recovered Products, and Future Development Trends. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.2. Pp. 25–37. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.435>*

©Кемелбекова А.^{1,2*}, Шонғалова А.^{1,2}, Бондарь Е.¹, Отунчи Е.¹, 2026.

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

²The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Америка Құрама Штаттары.

*E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university

ПАЙДАЛАНЫЛҒАН ЛИТИЙ-ИОНДЫ АККУМУЛЯТОРЛАРДЫ ҚАЙТА ӨНДЕУ ТЕХНОЛОГИЯЛАРЫ: ЭКОЛОГИЯЛЫҚ ӘСЕРІ, АЛЫНАТЫН ӨНІМДЕР ЖӘНЕ БОЛАШАҚ ДАМУ БАҒЫТТАРЫ

Кемелбекова Айнагуль — PhD, аға ғылыми қызметкер, Физика-техникалық институты, Satbayev University, Алматы, Қазақстан; The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Америка Құрама Штаттары,

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

Шонғалова Айгуль — PhD, аға ғылыми қызметкер, Физика-техникалық институты, Satbayev University, Алматы, Қазақстан; The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Америка Құрама Штаттары,

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

Бондарь Екатерина — PhD, аға ғылыми қызметкер, Физика-техникалық институты, Satbayev University, Алматы, Қазақстан,

E-mail: katebondar111@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6745-5462>;



Отунчи Еділ — техника ғылымдарының магистрі, инженер, Физика-техникалық институты, Satbayev University, Алматы, Қазақстан,
E-mail: e.otunchi@satbayev.university, <https://orcid.org/0009-0006-4361-8099>.

Аннотация. Литий-ионды аккумуляторлардың (ЛИА) кеңінен таралуы, әсіресе электр көліктері индустриясының қарқынды дамуы, жақын болашақта пайдаланылған аккумуляторлардың көлемінің күрт артуына әкеледі. Мұндай аккумуляторларды дұрыс кәдеге жаратпау қоршаған ортаның ластануына, ауыр металдардың жиналуына және бағалы ресурстардың ысырап болуына себеп болуы мүмкін. Коммерциялық ЛИА құрамында литий, кобальт, никель, марганец, мыс, алюминий сияқты жоғары құнды металдармен қатар, жанғыш органикалық электролиттер мен фторқұрамды тұздар бар, бұл оларды қауіпсіз өндеуді күрделендіреді.

Қазіргі таңда ЛИА-ны қайта өндеудің пирометаллургиялық, гидро-металлургиялық және тікелей регенерация әдістері кеңінен зерттелуде. Пирометаллургия металдарды қорытпа түрінде бөліп алуға мүмкіндік берсе, гидрометаллургия жоғары тазалықтағы иондық ерітінділер алуға бағытталған. Бұл ерітінділерден кобальт, никель, литий және басқа металдар электролиз немесе химиялық тұндыру арқылы бөлініп, жаңа материалдар синтездеуге қолданылады. Соңғы зерттеулер пайдаланылған ЛИА-дан алынған прекурсорлар негізінде LiCoO_2 , $\text{LiNi}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$, LiFePO_4/C сияқты катод материалдарын қайта синтездеудің жоғары тиімділігін көрсетті.

Алайда қайта өндеу саласы бірқатар қиындықтарға тап: аккумуляторлардың конструкциялық әртүрлілігі, модульдердің күрделі құрастырылуы, материалдардың араласуы, стандарттардың болмауы және қауіпсіздік мәселелері. Сонымен қатар, кобальтсыз катод материалдарының дамуы кейбір дәстүрлі қайта өндеу әдістерінің экономикалық тиімділігін төмендетуі мүмкін. Болашақта ЛИА-ны қайта өндеу жүйесін жетілдіру үшін аккумуляторларды сұрыптау мен таңбалауды стандарттау, қайта өндеуге ыңғайлы дизайн жасау, заңнамалық базаны күшейту және экологиялық қауіпсіз технологияларды енгізу қажет. Тиімді қайта өндеу жүйесін құру ресурстарды үнемдеуге, экологиялық жүктемені азайтуға және айналмалы экономика қағидаттарын жүзеге асыруға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: литий-ионды аккумуляторлар, электролиттер, қайта өндеу технологиялары, қалдықтарды басқару, парниктік газдар шығарындылары (GHG)

©Кемелбекова А.^{1,2*}, Шонғалова А.^{1,2}, Бондарь Е.¹, Отунчи Е.¹, 2026.

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

²The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Соединенные Штаты Америки.

*E-mail: a.kemelbekova@satbayev.university

ТЕХНОЛОГИИ ПЕРЕРАБОТКИ ОТРАБОТАННЫХ ЛИТИЙ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ: ЭКОЛОГИЧЕСКОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ, ПОЛУЧАЕМЫЕ ПРОДУКТЫ И БУДУЩИЕ НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ

Кемелбекова Айнагуль — PhD, старший научный сотрудник, Физико-технический институт, Satbayev University, Алматы, Казахстан; The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Соединенные Штаты Америки,

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

Шонғалова Айгуль — PhD, старший научный сотрудник, Физико-технический институт, Satbayev University, Алматы, Казахстан; The Pennsylvania State University, Стейт колледж, Соединенные Штаты Америки,

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

Бондарь Екатерина — PhD, старший научный сотрудник, Физико-технический институт, Satbayev University, Алматы, Казахстан,

E-mail: katebondar111@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6745-5462>;

Отунчи Еділ — магистр технических наук, инженер, Физико-технический институт, Satbayev University, Алматы, Казахстан,

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

Аннотация. Широкое распространение литий-ионных аккумуляторов (ЛИА), особенно в условиях стремительного развития индустрии электрического транспорта, в ближайшие годы приведёт к значительному увеличению объёмов образующихся отработанных аккумуляторов. Неправильная утилизация ЛИА может стать причиной загрязнения окружающей среды, накопления тяжёлых металлов и нерационального использования ценных ресурсов. Коммерческие литий-ионные аккумуляторы содержат литий, кобальт, никель, марганец, медь, алюминий и другие ценные металлы, а также горючие органические электролиты и фторсодержащие соли, что существенно усложняет процессы их безопасной переработки. В настоящее время активно развиваются пирометаллургические, гидрометаллургические методы и технологии прямой регенерации материалов ЛИА. Пирометаллургический подход позволяет извлекать металлы в виде сплавов, тогда как гидрометаллургические процессы обеспечивают получение высокочистых ионных растворов. Из таких растворов кобальт, никель, литий и другие металлы могут быть выделены методом химического осаждения или электролиза и использованы для синтеза новых функциональных материалов. Результаты современных исследований свидетельствуют о высокой эффективности повторного синтеза катодных материалов, включая LiCoO_2 , $\text{LiNi}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$ и LiFePO_4/C , на основе прекурсоров, полученных из отработанных аккумуляторов. Несмотря на достигнутый прогресс, отрасль переработки ЛИА сталкивается с рядом проблем, среди которых конструкционное разнообразие аккумуляторов, сложность демонтажа модульных систем, смешение различных материалов,

недостаточная стандартизация и вопросы безопасности. Кроме того, переход к катодным материалам с пониженным содержанием кобальта может снизить экономическую эффективность традиционных технологий переработки. В перспективе развитие отрасли требует стандартизации систем маркировки и сортировки аккумуляторов, проектирования конструкций, ориентированных на последующую переработку, совершенствования нормативно-правовой базы и внедрения экологически безопасных технологий. Создание эффективной системы переработки литий-ионных аккумуляторов позволит обеспечить рациональное использование ресурсов, снизить экологическую нагрузку и будет способствовать реализации принципов циркулярной экономики.

Ключевые слова: литий-ионные батареи, электролиты, технологии переработки, управление отходами, выбросы парниковых газов (GHG)

Kіріспе. Электр көлігі индустриясының қарқынды дамуына байланысты литий-ионды аккумуляторларға деген сұраныс үздіксіз өсіп келеді. Соның нәтижесінде жақын болашақта үлкен көлемдегі литий-ионды аккумуляторлар қызмет ету мерзімін аяқтап, кәдеге жарату мәселелерін күрделендіріп, қоршаған орта мен энергия үнемдеуге айтарлықтай зиян келтіруі мүмкін. Қазіргі коммерциялық литий-ионды аккумуляторлар құрамында ауыспалы валентті металл оксидтері немесе фосфаттар, алюминий, мыс, графит, зиянды литий тұздары бар органикалық электролиттер, полимерлі сепараторлар және пластик немесе металл корпусстар болады (Aaltonen et al., 2017). Пайдаланылған литий-ионды аккумуляторларды дұрыс кәдеге жаратпау қоршаған ортаның ластануына және бағалы ресурстардың ысырап болуына әкелуі ықтимал. Сондықтан соңғы жылдары мұндай аккумуляторларды қайта өңдеу мәселесіне назар арта бастады. Алайда энергия тығыздығы жоғары, қауіпсіздігі арттырылған және бағасы қолжетімді литий-ионды аккумуляторларға деген сұранысқа байланысты олардың материалдық құрамы үнемі өзгеріп, әртараптанып отырады. Бұл жағдай пайдаланылған аккумуляторларды қайта өңдеу процесін күрделендіреді.

Бұл мақалада пайдаланылған литий-ионды аккумуляторларды қайта өңдеу саласындағы соңғы жетістіктерге шолу беріледі: қайта өңдеу процестерінің дамуы, қайта өңдеу нәтижесінде алынатын өнімдер және қайта өңдеудің экологияға әсері қарастырылады.

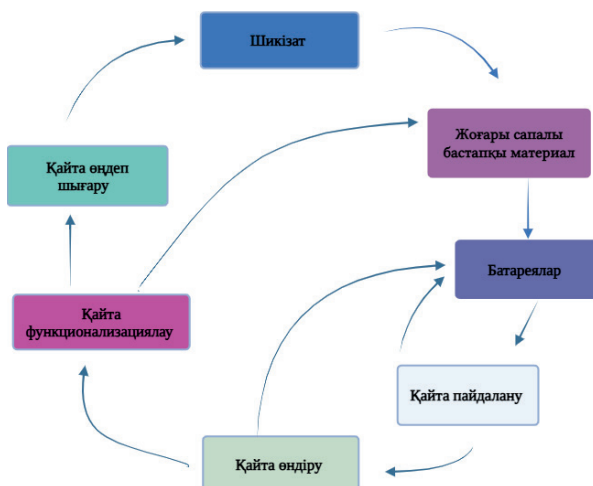
Соңғы бірнеше жылда энергия тығыздығы мен қуат шығару мүмкіндігі жоғары жаңа электрод материалдарының дамуына байланысты ЛИА қолдану аясы электр көліктеріне (ЭК) дейін кеңейді (Shakoor et al., 2023, Wang et al., 2022, Кауа et al., 2022). ЭК нарығы енді ғана қарқын алып келе жатқанын және ЭК аккумуляторларының қызмет ету мерзімі ТЭ-де қолданылатын аккумуляторларға қарағанда ұзағырақ болатынын ескерсек, алдағы бірнеше жылда ЭК-ден шыққан жарамсыз ЛИА көлемі аса күрделі кәдеге жарату мәселесін туындатпауы мүмкін (Corbus et al., 1995, Rantho, 2017). Алайда ЭК-ден жаппай шығарылатын пайдаланылған ЛИА-ның ресурс үнемдеу мен қоршаған ортаны қорғауға әсерін алдын ала болжауымыз қажет және оларды басқару үшін қандай шараларды қазірден бастап қабылдау керектігін түсіну маңызды.

ЛИА катодтан, анодтан, сепаратордан, электролиттен, сыртқы қаптамадан және тығыздағыш бөлшектерден тұрады. Қазіргі коммерциялық ЛИА-ларда катод материалы ретінде әртүрлі литий-құрамды оксидтер мен фосфаттар қолданылады: LiCoO_2 , LiMn_2O_4 , LiFePO_4 , $\text{LiNi}_{1-x-y}\text{Co}_x\text{Mn}_y\text{O}_2$ (NCM) және зерттеу нәтижелері бойынша катод материалдары нарығының жартысынан астамын LiCoO_2 және $\text{LiNi}_{0.33}\text{Co}_{0.33}\text{Mn}_{0.33}\text{O}_2$ құраған, ал олардың құрамында қауіпті ауыр металл – кобальт бар (Tong et al., 2019).

Сонымен қатар, органикалық электролиттерде жанғыш органикалық еріткіштер мен фтор-құрамды литий тұздары сияқты зиянды заттар болады (Idrees et al., 2019). Сондықтан ЛИА-ны тұрмыстық қоқысқа тікелей тастау ауыр экологиялық ластануға әкеледі. Бұдан бөлек, ЛИА құрамында Li, Co, Ni, Cu, Al сияқты жоғары құнды металдар бар. Олардың ішінде Co мен Li сирек кездеседі және салыстырмалы түрде қымбат, ал олардың ЛИА-дағы мөлшері тиісінше 5–15 wt.% және 2–7 wt.% құрайды, бұл табиғи кендердегі мөлшерден әлдеқайда жоғары (Labbé et al., 2012, Vega-Muratalla et al., 2024).

Осы айтылғандарға сүйене отырып, пайдаланылған ЛИА-ны қайта өңдеу аса маңызды, және толыққанды қайта өңдеу жүйесін құру үшін тиісті технологиялар мен нормативтік талаптар әзірленуі қажет. Шын мәнінде, қорғасын-қышқылды аккумуляторларды қайта өңдеу жүйесі жақсы жолға қойылған және ол белгілі бір тәжірибе мен бағыт-бағдар бере алады. Мысалы, АҚШ-та қорғасын-қышқылды аккумуляторлардың шамамен 99% қайта өңделеді, бұл тіпті шиналар, қағаз, алюминий банкілері, әйнек сияқты күнделікті қалдықтардың кез келген түрінен жоғары көрсеткіш болып табылады (Thompson et al., 2020). Алайда қорғасын-қышқылды аккумуляторлар мен ЛИА құрамдық жағынан айтарлықтай ерекшеленеді. Біріншісінде аккумулятор массасының ~60%-ы қорғасыннан тұрады және оны бөлшектегеннен кейін басқа компоненттерден оңай ажыратуға болады (Pillot, 2017). Ал ЛИА-да қолданылатын материалдардың әртүрлілігі қайта өңдеу процесін әлдеқайда күрделендіреді.

Литий-ионды аккумулятордың (1-сурет) өмірлік циклі пайдаланылған ЛИА-ны кәдеге жаратудағы күрделілікті айқындайды, себебі қайта қолдану, қайта өндірілген материалдарды батареяларда пайдалану, сондай-ақ катодты стехиометриялық қоспалар арқылы батарея сапасындағы материал ретінде қайта өңдеуге дейінгі регенерация сияқты аралық бағыттар бар. ЛИА өндірісі мен оларды қайта өңдеуге қатысты егжей-тегжейлі экологиялық бағалау жүргізіліп, қоршаған ортаға ең көп зиян келтіретін және парниктік газдар шығарындыларына ең көп үлес қосатын нақты технологиялық операцияларды анықтау қажеттілігі көрсетілді.



Сурет 1. Литий-ионды аккумулятордың өмірлік циклі.

Зерттеу материалдары. Зерттеу нысаны ретінде литий-ионды аккумуляторлардың (LIBs) әртүрлі катодтық материалдары қарастырылды. Қазіргі уақытта кеңінен қолданылатын катодтық материалдарға литий-темір-фосфат (LFP), литий-никель-марганец-кобальт оксиді (NMC), литий-марганец оксиді (LMO) және литий-кобальт оксиді (LCO) жатады. Бұл материалдар аккумуляторлардың электрохимиялық сипаттамаларын анықтап қана қоймай, олардың өндірісі мен қайта өңдеу процестерінің қоршаған ортаға әсеріне де ықпал етеді. Литий-ионды аккумуляторларды (LIBs) өндіру барысында суресурстарының ластануы, атмосфераға зиянды заттардың шығарылуы, сондай-ақ қатты қалдықтардың түзілуі орын алуы мүмкін, бұл адам денсаулығына да, қоршаған ортаға да айтарлықтай зиян келтіреді. Мұндай аккумуляторларға сұраныстың тұрақты өсуіне байланысты олардың өндірісімен байланысты парниктік газдар (GHG) шығарындылары маңызды экологиялық мәселе ретінде қарастырылуда. Жүргізген зерттеу нәтижелері бойынша (Lin et al., 2020) кеңінен қолданылатын үш түрлі катод материалдары үшін GHG шығарындылары бағаланған. Олардың мәліметтері бойынша, 28 кВт·сағ сыйымдылығы бар LFP, NMC және LMO катодты аккумуляторларын өндіру кезінде тиісінше 3061 кг CO₂-экв, 2912 кг CO₂-экв, және 2705 кг CO₂-экв парниктік газдары бөлінеді. Экономикалық тұрғыдан тиімді және кең таралғанына қарамастан, LCO катодтары жалпы GHG шығарындыларының шамамен 80% құрайды.

Өндіріс барысында бөлінетін газдардың құрамы шамамен: 40% көміртек тотығы (CO), 20% көмірқышқыл газы (CO₂), 30% сутек (H₂), сондай-ақ <3% сутек фториді (HF) және шамамен 7% көмірсутектерден тұрады. Келесі 1 – кестеде әлемнің әртүрлі елдерінде орналасқан компаниялардың қолданыстағы коммерциялық қайта өңдеу технологияларын және олардың қайта өңдейтін батарея түрлерін, сондай-ақ алынатын соңғы өнімдерді салыстырмалы түрде шолу жасалған.

Кесте 1. Коммерциялық процесс және батареяларды қайта өңдеумен айналысатын компаниялар.

Процесс	Компания (Атауы және Орналасқан Жері)	Шикізат	Нәтиже	Сілтеме
Гидро-металлургия	IPGNA Ent. (Recupyl), Франция	Батареялардың барлық түрі	LiCoO ₂ және Co(OH) ₂	Ellis, Mirza (2011)
	Sumitomo-Sony, Жапония	ЛИА	Co(OH) ₂	Saloojee, Lloyd (2015)
	Тохсо, Канада	Li, Ni-негізіндегі батареялар	LiCoO ₂	Saloojee, Lloyd (2015)
Пиро-металлургия	Eurodieuze, Франция	Батареялардың барлық түрі	Ni, Cd және болат	Kushnir (2015)
	Zimaval, Франция	Zn, Mn, Hg негізіндегі батареялар	Zn және Mn	Ellis, Mirza (2011)
	Dowa, Жапония	Батареялардың барлық түрі	Ni, Co	Ellis, Mirza (2011)
	Umicore, Бельгия	ЛИА және Ni-MH	Co және Ni	Saloojee, Lloyd (2015)
	Nippon Recycling center, Жапония	Ni-Cd, Ni-MH, ЛИА	Ni, Co, Cd, Al, Cu	Ellis, Mirza (2011)
	INMETCO, АҚШ	Ni - Cd	Cd, Ni, Zn	Saloojee, Lloyd (2015)
Пиро-гидро-металлургия	Glencore Plc., Швейцария	ЛИА және электр көліктері	Cu, Ni, Zn, Li	Saloojee, Lloyd (2015)

Әлемнің көптеген елдерінде аккумуляторларды қайта өңдеумен айналысатын лицензияланған кәсіпорындар жұмыс істейді. Литий-ионды батареяларды (LIBs) қайта өңдеуге маманданған негізгі компанияларға Accures, Umicore, Batrec AG, Sony-Sumitomo, Тохсо және басқа да фирмалар жатады. Өнеркәсіптік және зертханалық деңгейде батареяларды қайта өңдеудің басты мақсаты кобальт, литий, никель және марганец сияқты металдарды қалпына келтіру. Литий-ионды аккумуляторларды қайта өңдеу Ni-Cd және Ni-Mn батареяларына қарағанда әлдеқайда кең таралған (Ellis et.al., 2011).

LIBs құрамындағы жетілдірілген химиялық жүйелер қайта өңдеу үдерісін экологиялық тұрғыдан тиімді етеді, себебі оларда қауіпті заттар аз мөлшерде болады және қайта өңдеу үшін пирометаллургияға қарағанда гидрометаллургиялық әдістерді қолдануға мүмкіндік береді. Ресурстарды тиімді пайдаланумен қатар, қайта өңдеу тікелей экологиялық пайда әкеледі. Мысалы, LMO типті литий-ионды аккумулятордың өмірлік цикліндегі GHG шығарындылары бастапқы шикізат орнына қайта өңделген катод, алюминий және мыс қолданылған жағдайда 50%-ға дейін азаюы мүмкін (Dunn et al., 2012). Литий-ионды аккумуляторларда қолданылатын әртүрлі катодтық материалдардың металлдық құрамының айтарлықтай өзгеретінін көрсетеді: LiCoO₂ жүйелерінде кобальттың массалық үлесі өте жоғары болса, NCM типті материалдарда никель мен марганецтің үлесі басым. Бұл деректер катод химиясының эволюциясын, яғни кобальтқа тәуелділікті

азайтып, никельге бай, экологиялық қауіпі төмен жүйелерге көшу үрдісін айқын көрсетеді. Сонымен қатар, литийдің үлесі барлық материалдарда шамамен тұрақты деңгейде сақталып, қайта өңдеу стратегияларын жоспарлауда маңызды параметр болып табылады.

Өмірлік циклді бағалау (LCA) нәтижелері пирометаллургия және гидрометаллургия арқылы өндірілген батарея материалдарын бастапқы шикізатпен салыстырғанда, пирометаллургиялық өндірістің электр энергиясын көбірек тұтынатынын, сондай-ақ өте ұсақ қатты бөлшектер (PM2.5) және органикалық ұшпа қосылыстар (VOC) шығарындыларын гидрометаллургияға қарағанда екі есе көп бөлетінін көрсетеді (Arambarri et al., 2019).

Батарея жүйелерінің өмірлік циклін және экологиялық әсерін бағалауда аса маңызды параметр батареядағы материалдардың химиялық формасы. Әдетте Ni, Co, Cd, Mn, Zn сияқты элементтердің уыттылығы олардың қоршаған ортада оңай миграциялануымен байланысты қарастырылады. Алайда батарея өндірушілері химиялық құрамды жиі өзгертіп отырады, бұл қалпына келтірілген материалдарды жаңа жүйелерге енгізуді қиындатады. Мысалы, Ni-Cd батареяларында қолданылатын негізгі қосылыс нашар еритін кадмий оксиді, бірақ токсикологиялық әдебиеттерде көбіне жоғары еритін кадмий хлориді негізге алынады. Сол сияқты, пайдаланылған LIBs құрамындағы MnO_2 және Mn_3O_4 (марганец), $ZnMn_2O_4$ (мырыш), $LiNiO_2$ (никель) фазалары қалыпты температура мен қысымда оңай ерімейді, сондықтан олардың экологиялық әсерін бағалауда бұл фактор міндетті түрде ескерілуі тиіс.

Литий-ионды аккумуляторлардың қызмет ету мерзімі әдетте 3-4 жыл, немесе орта есеппен 1000 цикл (Chen et al., 2018).

Нәтижелер мен талқылаулар. Макродеңгейдегі қайта өңдеу үдерісін талдау барысында негізгі техникалық мәселелердің бірі батарея жинақтарын, модульдерді және жеке элементтерді қауіпсіз әрі тиімді бөлшектеу екендігі анықталды. Қызмет көрсету мерзімі ішінде механикалық беріктікті қамтамасыз ету қажеттілігіне қарамастан, конструкция қайта өңдеу кезеңінде оңай ашуға мүмкіндік беретін шешімдерді де қарастыруы тиіс.

Зерттеу нәтижелері батареяларды бөлшектеу кезінде металл құралдарды қолдану қысқа тұйықталу қаупін арттыратынын және ішкі компоненттердің қызуы мен тұтануына әкелуі мүмкін екенін көрсетті. Сондықтан қайта өңдеу үдерісінің қауіпсіздігін қамтамасыз ету үшін электр өткізбейтін құралдар мен арнайы бөлшектеу технологияларын қолдану ұсынылады. Бұл мәселе әсіресе өнеркәсіпте кеңінен пайдаланылатын призматикалық және цилиндрлік литий-ионды элементтер үшін өзекті болып табылады, себебі олардың конструкциялық ерекшеліктері бөлшектеу кезінде қосымша қауіпсіздік шараларын талап етеді. Көптеген зерттеу топтары модульдер мен батарея жинақтарын бөлшектеу жұмыстарын ақылды роботтар арқылы орындау қажет деген пікірде. Мұны жинақ деңгейінде жүзеге асыруға болады, бірақ әртүрлі жинақ конструкциялары, бекіткіштер мен желімдердің көптігі бұл процесті қиындатады. Жинақтардың пішіндері мен конфигурациялары өндірушілер арасында ғана емес, бір

өндірушінің өз модельдерінде де айтарлықтай өзгереді. Элементтің форматына карамастан, әдетте бірнеше элемент модульге біріктіріледі, бірақ элемент саны мен тізбектей/параллель қосылу конфигурациялары өте әртүрлі. Көп жағдайда модуль ішіндегі элементтер бір-біріне тұрақты түрде бекітіледі және техникалық қызмет көрсету кезінде бөлшектеуге арналмаған. Жалпы алғанда, қызмет көрсету немесе бөлшектеу тұрғысынан алғанда, тоғыз түрлі біріктіру технологиясы анықталған, олардың барлығы тұрақты қосылу әдістері болып табылады, сондықтан оларды ажырату көбіне деструктивті процесс болуы мүмкін.

Модульдер арасындағы қосылыстар әдетте қызмет көрсетуге ыңғайлырақ және бұрандалы немесе моментпен тартылатын қосылыстарды, сондай-ақ арнайы механикалық қысу арқылы бекітілетін push-fit типті қосылыстарды қолдануы мүмкін. Мұндай қосылыстардың қайталанатын сенімділігі модульдерді қызмет көрсету кезінде оңай ауыстыруға және өмірлік цикл соңында бөлшектеуді жеңілдетуге мүмкіндік береді. Элемент деңгейінде стандарттау әлдеқайда қиын, себебі цилиндрлік, rouch және призматикалық элементтер кеңінен қолданылады. Жақында жүргізілген зерттеулерде электродтар арасындағы полимерлі сепараторды элементтің белсенді компоненттерін ажырату әдісі ретінде қолдануға болатыны көрсетілді. Li және әріптестері жасаған құрылғы вакуумды конвейер, қысқыштар және бірнеше скримерлер арқылы анодты, катодты және сепараторды ажыратуға мүмкіндік береді.

Пайдаланылған ЛИА-ны қайта өңдеу нәтижесінде алынатын өнімдер. Батареяларды қайта өңдеу процесінің соңғы кезеңінде пайдаланылған ЛИА құрамындағы металл құндылықтары қорытпалар, шлактар, ерітінділер және тұнбалар сияқты басқа заттарға айналады. Мысалы, пирометаллургиялық өңдеуден кейін литий, алюминий және темірдің бір бөлігі шлаққа өтеді, ал бұл шлак бетон өндірісінде пайдалы толтырғыш ретінде қолданылуы мүмкін; ал мыс, кобальт, никель және темірдің бір бөлігінен тұратын қорытпа кейіннен бөлініп, тазартылып, қайта қолдануға жарамды таза металдарға айналады.

Гидрометаллургиялық процесте шаймалау кезеңінен кейін құрамында әртүрлі иондар бар ерітінді алынады, оны металдар, химиялық реагенттер, жаңа электрод материалдары және басқа функционалдық материалдар сияқты құнды өнімдерге өңдеуге болады.

Металдар және химиялық заттар. Әдетте таза металдар шаймалау ерітіндісінен электрохимиялық тұндыру арқылы алынады. Мысалы, ғылыми-зерттеу жұмыстарында пайдаланылған ұялы телефон батареяларынан таза кобальтты электрохимиялық әдіспен және $\text{Li-Co}_x\text{Ni}_{1-x}\text{O}_2$ қалдық материалынан таза никельді электролиз арқылы бөліп алған. Электрохимиялық шаймалау және кейінгі электролиз арқылы 99.2% кобальт, 99.5% мыс және 96% электролиттік марганец диоксидін (EMD) өндіргені жайлы мақалаларда мәліметтер кездеседі. Қалдық LiCoO_2 шаймалау ерітіндісінен 99.5% тазалықтағы кобальтты электролиз арқылы қалпына келтірген. Алынған металдар кейін қорытпа жасауға немесе химиялық шикізат ретінде өңдеуге жіберіледі.

Пайдаланылған ЛИА-дан химиялық шикізат алу үшін тиімді тәсіл шаймалау

ерітіндісінен тікелей жоғары тазалықтағы, жоғары қосылған құны бар химиялық қосылыстарды синтездеу. Қазіргі зерттеулер таза металдарды алудан гөрі әртүрлі қосылыстарды тікелей синтездеуге көбірек бағытталған. Мысалы, алынатын қосылыстар:

Кобальт қосылыстары: $\text{CoC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{Co}(\text{OH})_2$, $\text{Co}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, CoCO_3 , $\text{Co}_2(\text{PO}_4)_2$, $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$.

Никель қосылыстары: $\text{Ni}(\text{OH})_2$, NiCl_2 , $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

Литий қосылыстары: Li_2CO_3 , Li_3PO_4 .

Басқа өнімдер: CuSO_4 , MnO_2 , $\text{MnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, FeCl_3 , Ni–Co–Mn гидроксидтері.

Бұл химиялық заттардың көпшілігі жоғары тазалыққа ие және қосымша тазартуды қажет етпей-ақ жаңа материалдар өндірісінде шикізат ретінде қолданылуы мүмкін.

Электрод материалдары. Жоғарыда айтылғандай, пайдаланылған ЛИА-ның катод материалдарындағы литий, кобальт, никель, марганец, темір сияқты металдарды қайта өңдеу арқылы жоғары тазалықта қалпына келтіруге болады. Соңғы жылдары көптеген ауыспалы валентті металл оксидтері ЛИА үшін әлеуетті анод материалдары ретінде де қарастырылуда. Сондықтан пайдаланылған ЛИА-дан қалпына келтірілген металл құндылықтары жаңа электрод материалдарын синтездеуге арналған маңызды шикізат көзі бола алады.

Микродеңгейдегі қайта өңдеу мәселелері. Электролиттен, сепаратордан және қаптамадан бөлінгеннен кейін, құрамында негізгі құндылық шоғырланған электрод материалдарын олардың жеке компоненттеріне ажырату қажет. Қайта өңдеудегі негізгі кедергі — ток жинағыш пен белсенді материал арасындағы интерфейсті ажырату. Байланыстырғыштың (binder) маңыздылығы көбіне ескерілмейді. Мұнда екі түрлі бұзылу механизмі бар:

1. Ток жинағыш пен белсенді материал арасындағы адгезиялық байланысты бұзу;
2. белсенді бөлшектер арасындағы когезиялық байланысты бұзу.

Органикалық еріткіштер байланыстырғышты еріту үшін лиганд ретінде қолданылуы мүмкін, ал сілтілік лигандтар алюминийді ойып (etching) жібереді. Сулы тотықтырғыш қышқылдар мыс пен алюминийді тотықтырып, металл оксидтерін де еріте алады. Ток жинағыш материалдарының ойылуы кейінгі өңдеу сатыларында қиындық тудырады, себебі металл оксидтерінің мыс немесе алюминиймен ластануы қайта қалпына келтірілген катод материалдарының өнімділігіне кері әсер етеді.

Алайда суға еритін қоспаларды дұрыс таңдау және бөлу процесін оңтайландыру жасыл еріткіштерді қолдана отырып, жақсы бөлінген және таза қалдық ағындарын алуға мүмкіндік береді. Мұндай бөлу әдістерімен анод пен катодты қысқа циклді қайта өңдеу мүмкін. Сулы жүйелерде графитті қайта өңдеп, оңай қайта қолдануға болады, бірақ катод материалын қайта пайдаланар алдында көбіне релитация (қайта литиймен қанықтыру) немесе «сауықтыру» қадамы қажет, әйтпесе оның меншікті сыйымдылығы жеткіліксіз болады.

Қосымша жеңілдету ретінде ток жинағыш пен белсенді материал арасында

байланыстырғышты қажет етпейтін жаңа электрод конструкцияларын қарастыруға болады. Бұл жаңа идея емес: бастапқы сілтілік цилиндрлік батареялар мұны ұзақ уақыттан бері қолданып келеді және электрод ретінде ток жинағыштарға тығыздалған белсенді ұнтақтарды пайдаланады. Алайда бұл тәсіл әлі литий-ионды жүйелерге енгізілмеген және болашақ зерттеулер үшін перспективалы бағыт болуы мүмкін.

Қорытынды мен ұсыныстар. Электр көліктерінің өндірісінің айтарлықтай артуы жақын болашақта көптеген пайдаланылған литий-ионды аккумуляторлардың (ЛИА) пайда болуына әкеледі. Оларды дұрыс қайта өңдеу өте маңызды, өйткені олардың құрамында бағалы металдар мен зиянды заттар бар. Пайдаланылған ЛИА-дан металл құндылықтарын қалпына келтіруге бағытталған көптеген қайта өңдеу процестері әзірленді, олардың кейбірі тіпті өнеркәсіптік деңгейде жүзеге асырылуда.

Идеал қайта өңдеу процесі пайдаланылған ЛИА-ның барлық компоненттерін төмен энергия шығынымен және қоршаған ортаны ластамай қалпына келтіруге қабілетті болуы тиіс. Қазіргі уақытта мұндай талаптарға сәйкес келетін технологиялар бойынша белгілі бір ғылыми жетістіктер бар. Алайда ЛИА құрамындағы материалдардың әртүрлілігіне байланысты олардың барлығы күрделі өңдеу сатыларын немесе қымбат реагенттерді қажет етеді. Сондықтан анағұрлым тиімді қайта өңдеу технологияларын дамыту үшін әлі де көп күш жұмсау қажет.

Сонымен қатар, ЛИА қайта өңдеу индустриясы бірнеше басқа қиындықтарға да тап болады. Біріншіден, қорғасын-қышқылды аккумуляторлардан айырмашылығы, ЛИА технологиясы мен химиясы үнемі өзгеріп отырады, ал қайта өңдеу технологиялары бұл өзгерістерге ілесе алмай келеді. Мысалы, егер катодтар кобальтсыз материалдардан жасалса, пирометаллургиялық процесс экономикалық тұрғыдан тиімсіз болуы мүмкін.

Екіншіден, ЛИА қайта өңдеу индустриясы дамыған сайын қайта өңдеу ағынында аккумулятор түрлерінің араласуы мәселесі туындауы мүмкін. Мысалы, кейбір шағын электр көліктері немесе электр велосипедтері үшін ЛИА мен қорғасын-қышқылды аккумуляторлар геометриялық жағынан өзара алмастырылатын етіп жасалуы мүмкін. Бұл ЛИА-ның қорғасын балқыту пештеріне қате жіберілуіне әкеліп, өрт, жарылыс және ластану қаупін тудырады.

Үшіншіден, ЛИА қайта өңдеуге қатысты толыққанды заңдар, ережелер және стандарттар жүйесі жоқ. Мұндай жүйе қайта өңдеу процесін стандарттап, пайдаланылған ЛИА-ны қауіпсіз жинауды, тасымалдауды және өңдеуді қамтамасыз етер еді.

References

- Aaltonen M., Peng C., Wilson B.P., Lundström M. (2017). Leaching of metals from spent lithium-ion batteries. *Recycling*. – No. 2(4). – P. 20. DOI:10.3390/recycling2040020 (in Eng.).
- Arambarri J., Hayden J., Elkurdy M., Meyers B., Hamatth Z.S.A., Abbassi B., Omar W. (2019). Lithium-ion car batteries: Present analysis and future predictions. *Environmental Engineering Research*. – No. 24(4). – P. 699-710. DOI:10.4491/eer.2018.383 (in Eng.).

Chen W.S., Ho H.J. (2018). Recovery of valuable metals from lithium-ion batteries NMC cathode waste materials by hydrometallurgical methods. *Metals*. – No. 8(5). – P. 321. DOI:10.3390/met8050321 (in Eng.).

Corbus D., & Hammel C.J. (1995). Current status of environmental, health, and safety issues of lithium polymer electric vehicle batteries (No. NREL/TP-463-7540). National Renewable Energy Lab., Golden, CO (United States). (in Eng.).

Dunn J.B., Gaines L., Kelly J.C., Gallagher K.G. (2016). Life cycle analysis summary for automotive lithiumion battery production and recycling. *REWAS 2016: Towards Materials Resource Sustainability*. – P. 73-79. DOI:10.1002/9781119275039.ch11 (in Eng.).

Ellis T.W., Mirza A.H. (2014). Battery recycling: defining the market and identifying the technology required to keep high value materials in the economy and out of the waste dump. *Research Gate*. – P. 1188-1204. (in Eng.).

Idrees, M., Liu, L., Batool, S., Luo, H., Liang, J., Xu, B., Kong, J. (2019). Cobalt-doping enhancing electrochemical performance of silicon/carbon nanocomposite as highly efficient anode materials in lithium-ion batteries. *Engineered Science*. – No. 6(5). – P. 64-76. DOI: 10.30919/es8d798 (in Eng.).

Kaya M. (2022). Lityum İyon Pil Geri Dönüşüm Teknolojileri. *Circular Economy*. – No. 1(2). DOI:10.1016/j.ccc.2022.100015 (in Eng.).

Kushnir D. (2015). Lithium-ion battery recycling technology 2015. Current state and future prospects. – P. 1-56. (in Eng.).

Labbé J.F., Daw G. (2012). Panorama 2011 du marché du lithium (Doctoral dissertation, Bureau de recherches géologiques et minières [BRGM]; Centre d'Economie de la Sorbonne. <https://shs.hal.science/halshs-00809298v1> (in Eng.).

Lim, M. K., Lai, M., Wang, C., & Lee, Y. (2022). Circular economy to ensure production operational sustainability: A green-lean approach. *Sustainable Production and Consumption*. – No. 30. – P. 130-144. DOI:10.1016/j.spc.2021.12.001 (in Eng.).

Lin J., Li L., Fan E., Liu C., Zhang X., Cao H., Chen R. (2020). Conversion mechanisms of selective extraction of lithium from spent lithium-ion batteries by sulfation roasting. *ACS applied materials & interfaces*. – No. 12(16). – P. 18482-18489. DOI: 10.1021/acsami.0c00420 (in Eng.).

Pillot C. (2017). The rechargeable battery market and main trends 2016–2025. In *Proceedings of the 33rd Annual International Battery Seminar & Exhibit*, Fort Lauderdale, FL, USA. – Vol. 20. – P. 1-45. (in Eng.).

Rantho M.N. (2017). Synthesis and characterization of vanadium disulfide nanosheets and carbonized iron cations adsorbed onto polyaniline for high-performance supercapacitor applications. University of Pretoria (South Africa). (in Eng.).

Saloojee F., Lloyd J. (2015). Lithium battery recycling process. Department of Environmental Affairs Development Bank of South Africa (Project No. DB-074 (RW1/1016)). – No. 27(0). (in Eng.).

Shakoor N., Adeel M., Ahmad M.A., Zain M., Waheed U., Javaid R.A., Rui Y. (2023). *Environmental Science and Ecotechnology*. DOI: 10.1016/j.es.2023.100252 (in Eng.).

Thompson D.L., Hartley J.M., Lambert S.M., Shiref M., Harper G.D., Kendrick E., Abbott A.P. (2020). Cutting-edge research for a greener sustainable future. *Green Chem*. – No. 22. – P. 7571-7581. DOI:10.1039/D0GC01831G (in Eng.).

Tong H., Zhou Q., Zhang B., Wang X., & Yao Y. (2019). A novel core-shell structured nickel-rich layered cathode material for high-energy lithium-ion batteries. *Engineered Science*. – No. 8(5). – P. 25-32. DOI: 10.30919/es8d502 (in Eng.).

Vega-Muratalla V.O., Ramírez-Márquez C., Lira-Barragán L.F., Ponce-Ortega J.M. (2024). Review of lithium as a strategic resource for electric vehicle battery production: Availability, extraction, and future prospects. *Resources*. – No. 13(11). – P. 148. DOI: 10.3390/resources13110148 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 38–59

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.436>

UDC: 539.1.01

IRSTI: 539.1.01

**©Koilyk N.¹, Baimbetova G.¹, Dalelkhankyzy A.², Kaptagay G.²,
Primkulova Zh.¹, 2026.**

¹Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan;

²Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan.

*E-mail: Zhazira_1001@mail.ru

SIMPLIFICATION OF THE FERMIONIC DYNAMICAL SYMMETRY MODEL FOR IDENTICAL PARTICLES AND ITS MAPPING INTO BOSONIC SPACE

Koilyk Nurgali — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: nurgali.koilyk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0281-0096>;

Baimbetova Gulzada — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: bgulzada_74@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4922-5310>;

Dalelkhankyzy Anar — PhD, Associate Professor, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: dalelkhankyzy.d@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-4974-2860>;

Kaptagay Gulbanu — PhD, Associate Professor, Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: gulbanu.kaptagai@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5586-7339>;

Primkulova Zhazira — Master's degree, Teacher, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: Zhazira_1001@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-8783-2797>.

Abstract. In this paper, we study a simplified scheme of a fermionic dynamical-symmetric model designed to describe multiparticle nuclear systems with identical fermions. Interest in such an approach is related to the need to create more compact and computationally efficient methods for analyzing the collective properties of atomic nuclei while preserving the key features of the microscopic interaction of nucleons. The study considers the possibility of reducing the number of independent variables by identifying dominant collective paired states that play a major role in the formation of the core spectrum. Shell-nucleon description of the collective states of nuclei of medium and heavy atomic weight remains a difficult task. Therefore, the macroscopic study of collective excitations of the model has always been involved in the problem, the connection of which with the usual shell structure of nuclei was not strong. In



contrast, the fermionic dynamical-symmetric model proposed for describing collective excitations of multi-nucleon systems is directly related to the shell model of nuclei.

The main attention is paid to the procedure of mapping fermionic operators into bosonic space. This transition makes it possible to replace the complex description of the system of interacting fermions with a simpler algebraic scheme based on effective bosonic operators. It is shown that after the transformation, the structure of the Hamiltonian becomes much more compact, and the study of energy levels, collective excitations, and transition probabilities is significantly simplified.

Additionally, it is noted that the proposed method preserves the fundamental symmetric properties of the original fermionic model, thereby achieving a correct description of the physical characteristics of nuclear systems. The use of algebraic and group-theoretic methods expands the possibilities of analyzing spectral patterns and facilitates the interpretation of the results obtained. The proposed approach can be effectively applied in the study of spherical and weakly deformed nuclei, and also helps to reduce computational costs in problems of theoretical nuclear physics.

Keywords: fermionic model, dynamical symmetry, identical particles, model simplification, bosonic space, mapping (transformation), quantum system, operator formalism, second quantization, symmetry algebra

For citations: Koilyk N., Baimbetova G., Dalekhankyzy A., Kaptagay G., Primkulova Zh. *Simplification of the Fermionic Dynamical Symmetry Model for Identical Particles and Its Mapping into Bosonic Space. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences.* 2026. No.2. Pp. 38–59. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.436>

©Қойлық Н.О.¹, Байымбетова Г.А.¹, Дәлелханқызы А.², Қаптағай Г.А.²,
Примкулова Ж.Е.¹, 2026.

¹Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті,
Алматы, Қазақстан;

²Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: Zhazira_1001@mail.ru

БІРДЕЙ БӨЛШЕКТЕР ҮШІН ФЕРМИОНДЫ ДИНАМИКАЛЫ- СИММЕТРИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДІ ЫҚШАМДАУ ЖӘНЕ ОНЫ БОЗОНДЫҚ КЕҢІСТІККЕ БЕЙНЕЛЕУ

Қойлық Нұрғали — физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан, E-mail: nurgali.koilyk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0281-0096>;

Байымбетова Гүлзада — физика-математика ғылымдарының кандидаты, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан, E-mail: bgulzada_74@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4922-5310>;

Дәлелханқызы Анар — PhD, қауымдастырылған профессор, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан, E-mail: dalekhankyzy.d@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-4974-2860>;

Қаптағай Гүлбану — PhD, қауымдастырылған профессор, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: gulbanu.kaptagai@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5586-7339>;

Примкулова Жазира — магистр, оқытушы, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: Zhazira_1001@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-8783-2797>.

Аннотация. Бұл жұмыста бірдей фермиондардан тұратын көпбөлшекті ядролық жүйелерді сипаттауға арналған фермионы динамика-симметриялық модельдің ықшамдалған нұсқасы қарастырылады. Мұндай тәсілге қызығушылық ядролардағы нуклондардың микроскопиялық өзара әсерлесу ерекшеліктерін сақтай отырып, ұжымдық қасиеттерді сипаттаудың ықшам әрі есептеу тұрғысынан тиімді әдістерін құру қажеттілігімен байланысты болды. Зерттеу барысында ядро спектрінің қалыптасуында маңызды рөл атқаратын ұжымдық жұптық күйлерді бөліп көрсету арқылы тәуелсіз айнымалылар санын азайту мүмкіндігі талданады және көрсетілді. Орташа және ауыр атомдық массалы ядролардың ұжымдық күйлерін қабықшалық-нуклондық тұрғыдан сипаттау әлі де күрделі мәселелердің бірі болып отыр. Сондықтан, ұжымдық козуларды макроскопиялық түрде зерттейтін модельдер әрдайым үлкен қызығушылық тудырдумен қатар олардың ядролардың дәстүрлі қабықшалық құрылымымен байланысы жеткілікті түрде берік емес. Ал бұларға қарағанда, көпнуклонды жүйелердің ұжымдық козуларын сипаттауға ұсынылған фермионды динамика-симметрия моделі ядролардың қабықшалық моделімен тікелей байланысты болып табылады.

Негізгі назарда, фермиондық операторларды бозондық кеңістікке бейнелеу процедурасына аударылған болатын. Мұндай түрлендіру өзара әсерлесетін фермиондар жүйесінің күрделі сипаттамасын тиімді бозондық операторларға негізделген қарапайым алгебралық схемаға ауыстыруға мүмкіндік береді. Түрлендіруден кейін Гамильтониан құрылымының едәуір ықшамдалатыны, ал энергия деңгейлерін, ұжымдық козуларды және ауысу ықтималдықтарын зерттеу айтарлықтай жеңілдейтіні көрсетілді.

Сонымен қатар, ұсынылған әдіс бастапқы фермиондық модельдің негізгі симметриялық қасиеттерін сақтайтыны атап өтіледі. Бұл ядролық жүйелердің физикалық сипаттамаларын дұрыс бейнелеуге мүмкіндік береді. Алгебралық және теориялық-топтық әдістерді пайдалану спектрлік заңдылықтарды талдау мүмкіндіктерін кеңейтіп, алынған нәтижелерді түсіндіруді жеңілдетеді. Ұсынылған тәсіл сфералық және әлсіз деформацияланған ядроларды зерттеуде тиімді қолданылып, теориялық ядролық физикадағы есептеу шығындарын азайтуға мүмкіндік береді.

Түйінді сөздер: көпбөлшекті ядролық жүйе, фермиондық құрылым, динамикалық симметрия, бозондық оператор, кванттық модель, ядролық спектр, екінші реттік кванттау әдісі, алгебралық әдіс, нуклон жұптары, теориялық түрлендірулер

©Койлык Н.О.¹, Баймбетова Г.А.¹, Дәлелханқызы А.², Қаптағай Г.Ә.²,
Примкулова Ж.Е.¹, 2026.

¹Казахский национальный педагогический университет имени Абая,
Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный женский педагогический университет,
Алматы, Казахстан.

*E-mail: Zhazira_1001@mail.ru

УПРОЩЕНИЕ ФЕРМИОННОЙ ДИНАМИКО-СИММЕТРИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ИДЕНТИЧНЫХ ЧАСТИЦ И ЕЁ ОТОБРАЖЕНИЕ В БОЗОННОЕ ПРОСТРАНСТВО

Койлык Нұрғали — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: nurgali.koilyk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0281-0096>;

Баймбетова Гульзада — кандидат физико-математических наук, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: bgulzada_74@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4922-5310>;

Дәлелханқызы Анар — PhD, ассоциированный профессор, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: dalelkhankyzy.d@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-4974-2860>;

Қаптағай Гүлбану — PhD, ассоциированный профессор, Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан,
E-mail: gulbanu.kaptagai@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5586-7339>;

Примкулова Жазира — магистр, преподаватель, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,
E-mail: Zhazira_1001@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-8783-2797>.

Аннотация. В данной работе исследуется упрощённая схема фермионной динамико-симметрической модели, предназначенной для описания многочастичных ядерных систем с идентичными фермионами. Интерес к подобному подходу обусловлен необходимостью разработки более компактных и вычислительно эффективных методов анализа коллективных свойств атомных ядер при сохранении основных особенностей микроскопического взаимодействия нуклонов. В исследовании рассматривается возможность сокращения числа независимых переменных путём выделения доминирующих коллективных парных состояний, играющих ключевую роль в формировании ядерного спектра. Следует отметить, что оболочечно-нуклонное описание коллективных состояний ядер среднего и тяжёлого массового диапазона по-прежнему остаётся сложной задачей. По этой причине значительный интерес традиционно вызывали макроскопические модели коллективных возбуждений, связь которых с классической оболочечной структурой ядра была недостаточно обоснована. В отличие от таких подходов фермионная динамико-симметрическая модель, предложенная для описания коллективных возбуждений многонуклонных систем, непосредственно связана с оболочечной моделью ядра и позволяет сохранить микроскопическую основу описания. Основное внимание в работе уделено процедуре отображения ферми-

онных операторов в бозонное пространство. Такой переход позволяет заменить сложное описание системы взаимодействующих фермионов более простой алгебраической схемой, основанной на эффективных бозонных операторах. Показано, что после соответствующего преобразования структура гамильтониана существенно упрощается, а исследование энергетических уровней, коллективных возбуждений и вероятностей переходов становится более удобным. Установлено, что предложенный подход сохраняет фундаментальные симметричные свойства исходной фермионной модели, обеспечивая корректное описание физических характеристик ядерных систем. Использование алгебраических и теоретико-групповых методов расширяет возможности анализа спектральных закономерностей и облегчает интерпретацию полученных результатов. Предложенная схема может эффективно применяться при исследовании сферических и слабодеформированных ядер, а также способствует снижению вычислительных затрат в задачах теоретической ядерной физики.

Ключевые слова: фермионная модель, динамическая симметрия, идентичные частицы, упрощение модели, бозонное пространство, отображение (преобразование), квантовая система, операторный формализм, вторичное квантование, алгебра симметрии

Кіріспе. Теориялық ядролық физиканың маңызды бағыттарының бірі – бір-дей бөлшектерден тұратын кванттық жүйелердің құрылымы мен динамикалық қасиеттерін зерттеу болып табылады. Мұндай жүйелердің физикалық қасиеттері олардың кванттық-статистикалық ерекшеліктерімен анықталады. Паули тыйым салу принципіне бағынатын фермиондар атом ядроларының құрылымын, энергетикалық спектрлерін және ядролық заттың қасиеттерін сипаттауда негізгі рөл атқарады. Сондықтан фермиондық жүйелерді зерттеу ядролық құбылыстардың микроскопиялық табиғатын түсінудің маңызды алғышарты болып саналады.

Көпбөлшекті ядролық жүйелерді сипаттауда динамикалық симметрия қағидаларына негізделген теориялық модельдер кеңінен қолданылады. Мұндай модельдер жүйенің ішкі симметрияларын анықтауға, ұжымдық қозғалыстардың ерекшеліктерін талдауға және энергетикалық деңгейлердің қалыптасу заңдылықтарын зерттеуге мүмкіндік береді. Алайда фермиондық модельдердің математикалық аппаратының күрделілігі оларды практикалық есептеулерде қолдануды қиындатады. Әсіресе, көпөлшемді конфигурациялық кеңістіктерді қарастырған жағдайда есептеу көлемі күрт өсіп, аналитикалық және сандық әдістердің тиімділігі төмендейді. Осыған байланысты фермиондық жүйелерді қарапайым әрі есептеу тұрғысынан тиімді формализмдер арқылы сипаттау теориялық ядролық физиканың өзекті мәселелерінің бірі болып табылады.

Соңғы жылдары фермиондық жүйелерді сипаттаудың ықшам және жоғары тиімді теориялық тәсілдерін әзірлеу мәселесі өзекті ғылыми бағыттардың біріне айналды. Солардың ішінде фермиондық операторларды бозондық операторлар жүйесіне бейнелеу әдісі ерекше орын алады. Бұл формализм көпфермионды жүйелердің күрделі динамикасын қарапайым математикалық құрылымға

келтіріп, есептеу процедураларын едәуір жеңілдетеді. Бұдан бөлек, бозондық бейнелеу ұжымдық қозғалыстар мен спектрлік заңдылықтарды зерттеуде көрнекі әрі тиімді құрал болып табылады.

Ядролық спектрлерді сипаттауда қабықшалық модель мен Бор–Моттelsonның ұжымдық үлгісі маңызды нәтижелер бергенімен, көпнуклонды жүйелердің симметриялық қасиеттерін толық ашып көрсету үшін неғұрлым жалпы теориялық тәсілдерді қолдану қажеттілігі сақталуда (Bohr et al., 1975). Осы тұрғыдан алғанда, топтық-теориялық әдістерге негізделген модельдер ерекше қызығушылық тудырады, өйткені олар ұжымдық қозғалыстар мен қозуларды унитарлық және ортогоналдық симметрия топтарының алгебралық құрылымдары арқылы сипаттауға мүмкіндік береді (Elliott, 1958; Wybourne, 1974). Мұндай тәсілдер ядролық жүйелердің спектрлік ерекшеліктерін зерттеуде тиімді құрал ретінде кеңінен пайдаланылуда.

Фермиондық динамикалық симметрия тұжырымдамасына сүйене отырып жүргізілген зерттеулер көпнуклонды жүйелердің микроскопиялық моделін жетілдіруге мүмкіндік берді (Wu Ch. et al., 1987). Аталған әдісте жүйенің Гамильтонианы өзара байланысқан фермиондық жұптардың операторлары арқылы құрылады. Одан әрі бұл операторлар бозондық бейнелеу процедурасы негізінде тиімді бозондық кеңістікке ауыстырылады. Нәтижесінде алынған бозондық Гамильтониан ұжымдық ядролық қозғалыстарды сипаттайтын феноменологиялық бозондық модельдермен салыстырылып, олардың арасындағы сәйкестіктер мен айырмашылықтарды талдауға мүмкіндік береді. Мұндай тәсіл фермиондық және бозондық сипаттамалардың өзара байланысын зерттеуде маңызды рөл атқарып, ұжымдық құбылыстардың микроскопиялық табиғатын тереңірек түсіндіруге жағдай жасайды.

Симметрия ұғымының ядролық физикаға енгізілуі Вигнердің изоспиндік $SU(2)$ симметриясына арналған зерттеулерімен тығыз байланысты (Wigner, 1937). Бұл тәсіл нуклондардың ішкі қасиеттерін сипаттаудың жаңа мүмкіндіктерін ашты. Кейіннен Эллиотт $SU(3)$ симметриясына негізделген модельді ұсынып, оның көмегімен деформацияланған ядролардағы квадрупольдық ұжымдық қозулардың табиғатын түсіндіруге жол ашты. Осы жұмыстар алгебралық әдістердің ядролық құрылым теориясындағы маңызын айқындады. Бүгінгі таңда ядролық жүйелерді зерттеуде $Sp(6)$, $SO(8)$ тәрізді күрделі симметрия топтары мен суперсимметриялық формализмдер кеңінен қолданылады (Iachello, 1987; Sejnar, 2010). Мұндай әдістер көпфермионды жүйелердің спектрлік және құрылымдық қасиеттерін біртұтас теориялық негізде қарастыруға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, қазіргі есептеу технологияларының дамуы күрделі топтық-теориялық модельдерді сандық тұрғыдан жүзеге асыруды жеңілдетіп, матрицалық элементтерді есептеу тиімділігін арттырды. Нәтижесінде симметрия принциптеріне негізделген әдістердің қолданылу мүмкіндіктері айтарлықтай кеңейді (Rowe, 2010).

Материалдар және әдістер. Орташа және ауыр ядролардың ұжымдық күйлерін қабықшалық модель шеңберінде зерттеу көпфермионды жүйелердің

күрделі табиғатына байланысты елеулі қиындықтар туындатады. Алайда көптеген феноменологиялық модельдер ұжымдық қасиеттерді сәтті сипаттағанымен, олардың микроскопиялық қабықшалық құрылыммен байланысы толық айқындалмаған. Фермионды динамикалық-симметрия модельі бұл мәселені шешудің тиімді жолдарының бірі болып табылады, себебі ол ұжымдық қозуларды қабықшалық модельдің негізінде қарастыруға мүмкіндік береді. Модельдің базалық объектілері ретінде корреляцияланған S және D жұптары таңдалып алынады. Осы жұптарды тудыру және жою операторлары мультипольдік операторлармен бірге тұйық Ли алгебрасын құрайды. Мұндай алгебралық құрылым көпнуклонды жүйелердің симметриялық қасиеттерін зерттеуге және олардың спектрлік сипаттамаларын бірізді түрде сипаттауға мүмкіндік береді.

Нуклондардың ұжымдық қозғалыстарын сипаттауда фермионды динамикалық-симметрия модельі феноменологиялық өзара әсерлесуші бозондар модельіне қарағанда анағұрлым толық микроскопиялық негіз ұсынады. Тіпті тек корреляцияланған S және D жұптарын қарастырғанның өзінде, бұл модель ұжымдық құбылыстарды сипаттаудың ішкі бірізділігін сақтайды. Зерттеуде ФДСМ-нің $s-d$ кеңістігімен шектелген қарапайымдалған нұсқасы пайдаланылды. Бұл формализмде ұжымдық қозғалыстардың симметриялық қасиеттері Ли алгебрасы генераторлары арқылы сипатталып, жүйенің Гамильтонианы сол алгебраның инварианттары негізінде құрылады. Осындай тәсіл көпфермионды жүйелердің спектрлік қасиеттерін зерттеуді жеңілдетіп, есептеу күрделілігін төмендетуге мүмкіндік береді.

Ядролық жүйелердің төмен энергиялы ұжымдық күйлерін қалыптастыруда когерентті S және D жұптары шешуші рөл атқарады. Олардың маңыздылығы осы жұптардың ядроның қабықшалық құрылымынан туындайтын микроскопиялық табиғатымен анықталады. Осыған байланысты фермионды динамикалық-симметрия модельі ұжымдық режимдерді қабықшалық модельмен тікелей байланыстыра отырып сипаттауға мүмкіндік береді. Мұндай тәсіл ұжымдық қасиеттерді фермиондық жүйенің ішкі симметриялары негізінде түсіндіруге жағдай жасайды. Бұдан бөлек, бозондық модельдерге тән динамика-симметриялық заңдылықтарды фермиондық деңгейде де алуға болады, сондықтан көптеген жағдайларда фермион–бозон түрлендірулерін енгізбей-ақ ұжымдық спектрлердің негізгі қасиеттерін зерттеу мүмкіндігі сақталады.

Динамикалық симметрия әдісі көпбөлшекті кванттық жүйелердің күрделі қозғалыстарын сипаттауда әмбебап теориялық аппарат ретінде қолданылады. Оның басты артықшылығы – толық Гамильтонианды әртүрлі қозғалыс режимдеріне сәйкес келетін бөліктерге және симметрияның бұзылуын сипаттайтын мүшелерге жіктеу мүмкіндігі. Мұндай жіктеу аналитикалық және сандық есептеулерді едәуір жеңілдетеді. Ядролық құрылымның барлық ұжымдық қасиеттері фермиондық еркіндік дәрежелерінен туындайтындықтан, осы жұмыста динамикалық симметриялардың қалыптасу ерекшеліктері фермиондық-қабықшалық тәсіл негізінде зерттеледі.

Нәтижелер және талқылау. Зерттеу барысында бірдей фермиондардан

тұратын жүйелерге арналған фермионды динамикалық-симметрия модельінің ықшамдалған формасы қарастырылып, оның бозондық кеңістікке түрлендірілу процедурасы жүзеге асырылды. Симметрия принциптерін пайдалану және ұжымдық қозғалыстарды анықтайтын негізгі өзара әсерлесулерді бөліп көрсету арқылы Гамильтонианның математикалық құрылымы едәуір жеңілдетілді. Мұндай тәсіл есептің тиімді өлшемін қысқартып, көпбөлшекті жүйелерді сипаттаудағы есептеу шығындарын азайтуға мүмкіндік береді. Түрлендіру нәтижесінде фермиондық операторлар мен тиімді бозондық дәрежелер еркіндігі арасында бірімді сәйкестік орнатылды. Бұл ұжымдық қозуларды қарапайым алгебралық формализм аясында сипаттауға жағдай жасады. Есептеулер көрсеткендей, әлсіз және орташа корреляциялар аймағында алынған бозондық модель бастапқы фермиондық жүйенің энергетикалық спектрін, симметриялық қасиеттерін және негізгі физикалық сипаттамаларын жоғары дәлдікпен қайта жаңғырта алады. Осылайша, ұсынылған әдістің ұжымдық күйлерді зерттеудегі қолданбалы тиімділігі мен теориялық негізділігі расталды.

Фермионды динамикалық-симметрия модельінің қарапайым асимптотикалық шектерін өзара әсерлесуші бозондар модельінің сәйкес симметриялық режимдерімен салыстыру үшін фермиондық жүйенің бозондық бейнеленуі жүзеге асырылды (Baktybaev, 2008). Бұл процедура екі модель арасындағы байланыстың математикалық құрылымын және олардың физикалық интерпретациясын тереңірек зерттеуге мүмкіндік береді. Сонымен бірге, әдіс нақты ядролар үшін энергетикалық деңгейлерді, спектрлік заңдылықтарды және электромагниттік ауысулар ықтималдықтарын салыстырмалы түрде талдауға жағдай жасайды. Зерттеуде бөлінбеген жұптар мен қалыпты және аномальды жұптық орбиталар арасындағы араласу процестері ескерілмейтін фермионды динамикалық-симметрия модельінің ықшамдалған нұсқасы қарастырылды. Осы модель шеңберінде фермиондық Гамильтонианды тиімді бозондық Гамильтонианға түрлендіретін аналитикалық әдістер зерттеліп, олардың ұжымдық күйлерді сипаттаудағы қолданылу мүмкіндіктері талданды. Алынған нәтижелер ұсынылған формализмнің нақты ядролардың спектрлік қасиеттерін зерттеуде тиімді теориялық құрал бола алатынын көрсетті.

Бозондық бейнелеу әдістері бұрын Гинокчио моделі шеңберінде біртекті нуклондық жүйелерді зерттеу үшін табысты қолданылған (Arima, 1981). Осы жұмыста бұл тәсіл кеңейтіліп, протондық және нейтрондық ішкі құрылымдарды бір мезгілде ескеретін көпнуклонды Гамильтониан қарастырылады. Мұндай модель активті нуклондар саны өзгерген кезде ядролық жүйелердің вибрациялық сипаттан ротациялық режимге біртіндеп ауысуын сипаттауға мүмкіндік береді. Теориялық формализмді ықшамдау мақсатында Гамильтонианның қарапайымдалған нұсқасы пайдаланылып, қалдық жұптық өзара әсерлесулер монопольдік және квадрупольдік компоненттермен шектелді (Koilyk, 2023). Бұдан бөлек, корреляциялық әсерлерді сипаттайтын жұптық матрицалық элементтердің мәндері сәйкес қабықшалық деңгейлердің дегенерациясымен анықталатын шамаларға пропорционал деп алынды. Осындай жуықтау модельдің

негізгі физикалық мазмұнын сақтай отырып, көпфермионды есептердің сандық орындалуын едәуір жеңілдетеді.

Фермионды динамикалық-симметрия моделі шеңберінде бір нуклонның толық бұрыштық импульсі жалған орбиталық импульс пен жалған спиннің қосындысы ретінде қарастырылады $\vec{j} = \vec{k} + \vec{i}$.

Осы жіктеуге сәйкес $k-i$ базисіндегі нуклонды тудыру операторы фермиондық a_{jm}^+ операторлары арқылы Клебш–Гордан коэффициенттерін пайдаланып өрнектеледі.

$$b_{km_k im_i}^+ = \sum_{jm} \langle k m_k im_i | jm \rangle a_{jm}^+.$$

-бейнелеудегі фермиондық операторды жалған орбиталық және жалған спиндік базистегі операторлар арқылы келесі түрде жазуға болады:

$$a_{jm}^+ = \sum_{km_k im_i} \langle k m_k im_i | jm \rangle b_{km_k im_i}^+. \quad (1)$$

Мұндағы $\langle k m_k im_i | jm \rangle$ -шамалары бұрыштық импульстерді қосу ережелерін сипаттайтын Клебш–Гордан коэффициенттері болып табылады. Аталған түрлендіру фермиондық жүйенің симметриялық қасиеттерін псевдоорбиталық және псевдоспиндік дәрежелер еркіндігі арқылы сипаттауға мүмкіндік береді және фермионды динамикалық-симметрия моделінің алгебралық құрылымын құруда маңызды рөл атқарады.

Бұл, $k-i$ байланысын пайдалану қабықшалық модельдің толық конфигурациялық кеңістігінен ұжымдық қасиеттері басым болатын S және D жұптарына сәйкес келетін ішкі кеңістікті бөліп көрсетуге мүмкіндік береді. Мұндай фермиондық жұптар жоғары когерентті құрылымдар болып табылады және ядролардағы ұжымдық қозғалыстардың негізгі тасымалдаушылары ретінде қарастырылады.

Бұл қасиетті айқынырақ көрсету үшін $k-i$ базисінен қабықшалық модельдің бастапқы j -базисіне кері түрлендіру жүргізіледі. Аталған түрлендіру нормаланған $9j$ -символдары арқылы жүзеге асырылады:

$$\begin{aligned} | (k_1 k_2) K (i_1 i_2) I; r \mu \rangle &= [b_{(k_1 i_1)}^+ b_{(k_2 i_2)}^+]_{\mu}^{(r)} | 0 \rangle = \\ &= \sum_{j_1 j_2} \begin{Bmatrix} k_1 & i_1 & j_1 \\ k_2 & i_2 & j_2 \\ K & I & r \end{Bmatrix} [a_{j_1}^+ a_{j_2}^+]_{\mu}^{(r)} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

Алынған өрнек S-жұптардың k және i -дәрежелер еркіндігі тұрғысынан қарастырғанда Купер жұптарына ұқсас қасиеттерге ие екенін көрсетеді. Басқаша

айтқанда, олар жұптық конденсация күйінде болатын күшті корреляцияланған фермиондық құрылымдарды сипаттайды. Қабықшалық модельдің бастапқы базисінде мұндай күйлер көптеген конфигурациялардың араласуымен сипатталса, $k-i$ байланысы негізіндегі бейнелеуде олардың құрылымы ықшам әрі көрнекі түрде өрнектеледі.

Осының нәтижесінде ұжымдық қозулардың микроскопиялық табиғатын зерттеуге қолайлы жаңа базистік кеңістік қалыптасады. Мұндай формализм көпнуклонды жүйелердің спектрлік қасиеттерін талдауды жеңілдетіп қана қоймай, олардың ұжымдық күйлерінің фермиондық негізін тереңірек түсіндіруге мүмкіндік береді.

Бір үлкен қабықша шегінде орналасқан біртекті нуклондар жүйесін қарастырып, тек екібөлшекті қалдық өзара әсерлесулерді ескерген жағдайда, жүйенің толық Гамильтонианы келесі түрде жазылады:

$$H = \sum_j \varepsilon_j a_j^\dagger a_j + V_p + V_Q, \quad (3)$$

мұндағы ε_j – бірбөлшекті деңгейлердің энергиялары, ал V_p және V_Q сәйкесінше жұптық және мультипольдік өзара әсерлесулерді сипаттайтын мүшелер болып табылады. Бұл операторлар жалпы жағдайда төмендегі өрнектермен беріледі:

$$V_p = \frac{1}{4} \sum_{\lambda j_1 j_2 j'_1 j'_2} \langle j_1 j'_1 \lambda | V_p | j_2 j'_2 \lambda \rangle [a_{j_1}^\dagger a_{j'_1}^\dagger]^{(\lambda)} [a_{j_2} a_{j'_2}]^{(\lambda)}, \quad (4)$$

$$V_Q = \frac{1}{4} \sum_{r j_1 j_2 j'_1 j'_2} \langle j_1 j_2 r | V_Q | j'_1 j'_2 r \rangle [a_{j_1}^\dagger a_{j_2}]^{(r)} [a_{j'_1}^\dagger a_{j'_2}]^{(r)}. \quad (5)$$

Берілген өрнектерден Гамильтонианның құрылымы көпсанды матрицалық элементтер мен бұрыштық импульстарды байланыстыру коэффициенттерін қамтиды. Сондықтан мұндай формализмді тікелей пайдалану көпнуклонды жүйелер үшін есептеулердің күрделілігін айтарлықтай арттырады.

Осы себепті бастапқы Гамильтонианды фермионды динамикалық-симметрия моделінің алгебралық құрылымына келтіру мақсатында оны ықшамдаудың әртүрлі тәсілдері қарастырылады. Мұндай ықшамдау негізгі физикалық мазмұнды сақтай отырып, ұжымдық қозғалыстарды анықтайтын жетекші өзара әсерлесулерді бөліп көрсетуге және есептеу процедураларын едәуір жеңілдетуге мүмкіндік береді. Нәтижесінде күрделі көпфермионды есептерді симметрия принциптеріне негізделген ықшам әрі тиімді теориялық схема шеңберінде зерттеу мүмкіндігі туады.

1-тәсіл. Фермиондық динамикалық симметрия моделінде қалдық жұптық өзара әсерлесудің басым бөлігі монопольдік және квадрупольдік корреляциялар-

мен анықталады. Осыған байланысты $\lambda = 0$ және $\lambda = 2$ мүшелерін ғана сақтай отырып, жұптық өзара әсерлесуді сипаттайтын V_p операторы $k - i$ базисінде ықшам түрде жазылады:

$$V_p = \frac{1}{4} \sum \langle (k_1 k_2) K(i_1 i_2) I \lambda | V_p | (k'_1 k'_2) K'(i'_1 i'_2) I'_1 \lambda [b_{k_1 i_1}^+ b_{k_2 i_2}^+]_{\lambda}^{(KI)} \rangle \quad (6)$$

Бұл өрнек жалған орбиталық және жалған спиндік дәрежелер еркіндігіне негізделген $k - i$ байланысының артықшылықтарын пайдалануға мүмкіндік береді. Нәтижесінде өзара әсерлесудің күрделі құрылымы симметрия қасиеттерін сақтай отырып қарапайым алгебралық формаға келтіріледі. Мұндай ықшамдау модельдің негізгі физикалық мазмұнын жоғалтпай, көпнуклонды жүйелердің ұжымдық күйлерін сипаттау кезінде есептеу тиімділігін айтарлықтай арттырады.

2-тәсіл. Жұптық өзара әсерлесудің матрицалық элементтері корреляцияланған жұптарды құрайтын деңгейлердің дегенерация дәрежесіне пропорционал деп қабылданады. Бұл жағдайда оларды келесі параметрлеу арқылы өрнектеуге болады:

$$\langle (kk)K(ii)I\lambda | V_p | (k'k')K'(i'i')I'\lambda \rangle = 2\sqrt{\Omega_{ki}\Omega_{k'i'}} G_{\lambda}^{(\alpha\alpha')}.$$

Осы жуықтауды пайдалану нәтижесінде жұптық өзара әсерлесуді сипаттайтын V_p операторы ықшам операторлық формаға келтіріледі:

$$V_p = \sum_{\alpha\alpha'} [G_0^{(\alpha\alpha')} S^+(\alpha) S(\alpha') + G_2^{(\alpha\alpha')} D^+(\alpha) D(\alpha')]. \quad (7)$$

Мұндағы бірінші мүше монопольдік жұптық корреляцияларды, ал екінші мүше квадрупольдік сипаттағы ұжымдық корреляцияларды ескереді. Осылайша, бастапқы көпбөлшекті өзара әсерлесудің негізгі бөлігі S және D жұптары арқылы сипатталатын тиімді алгебралық формаға келтіріледі.

k -белсенді схема жағдайында қалыпты жұптылыққа сәйкес келетін S -оператор $\alpha = n_k$ кезінде $S^+(\alpha = n_k) = S^+ = [b_{1i}^+ b_{1i}^+]^{(00)}$ түрінде анықталады. Бұл оператор бұрыштық импульсі нөлге тең когерентті жұптарды тудырып, жүйедегі жұптық корреляциялардың негізгі үлесін сипаттайды. Ал D -операторы ұқсас құрылым бойынша құрылады, бірақ оның толық бұрыштық импульсі $\lambda = 2$ болады. Сондықтан ол квадрупольдік ұжымдық козуларды қалыптастыратын корреляцияланған жұптарды сипаттайды.

Осылайша, S - және D -жұптары фермионды динамикалық-симметрия моделіндегі негізгі ұжымдық дәрежелер еркіндігі ретінде қарастырылып, күрделі көпнуклонды жүйелердің спектрлік қасиеттерін салыстырмалы түрде қарапайым алгебралық аппарат көмегімен зерттеуге мүмкіндік береді.

3-тәсіл. Мультипольдік өзара әсерлесуді сипаттайтын V_Q мүшесін ықшамдау мақсатында оның матрицалық элементтері арнайы параметрлеу арқылы беріледі:

$$\langle (k\bar{k})K(i\bar{i})I;r | V_Q | (k'\bar{k}')K(i'\bar{i}')I;r \rangle = 2\sqrt{\Omega_{ki}\Omega_{k'i'}} B_r^{(xx')}.$$

Осы параметрлеуді пайдалану нәтижесінде мультипольдік өзара әсерлесу операторы келесі ықшам түрге келтіріледі:

$$V_Q = \sum_{xx'} B_r^{(xx')} P^r(x) P^r(x'). \quad (8)$$

Мұндағы $P_\mu^r(k) = \sqrt{\frac{\Omega_{ki}}{2}} [b_{ki}^+ b_{ki}]_\mu^{(r)}$, бірбөлшектік мультипольдік операторларды білдіреді, ал $P_\mu^r(i)$ операторы осыған ұқсас түрде анықталады. Бұл операторлар жүйедегі мультипольдік қозулар мен ұжымдық қозғалыстардың симметриялық қасиеттерін сипаттауға мүмкіндік береді.

Жоғарыда енгізілген жуықтауларды ескере отырып, $k-i$ схемасындағы фермионды динамикалық-симметрия моделінің жалпы Гамильтонианы келесі ықшам түрде жазылады:

$$H_{\Phi\text{ДСМ}} = e_0 v_0 + \sum_{ki} e_{ki} n_{ki} + \sum_{xx'} [G_0^{(xx')} S^+(x) S(x') + G_2 D^+ D] + \\ + \sum_{r, xx'} B_r^{(xx')} P^r(x) P^r(x'). \quad (9)$$

Алынған өрнек фермионды динамикалық-симметрия моделінің негізгі құрылымдық элементтерін біртұтас түрде біріктіреді. Мұнда бірбөлшектік энергиялар, жұптық корреляциялар және мультипольдік ұжымдық өзара әсерлесулер бірыңғай алгебралық формализм шеңберінде қарастырылады. Осындай ықшам жазылу модельдің динамикалық симметриясын айқын көрсетіп қана қоймай, көпнуклонды жүйелердің спектрлік қасиеттерін аналитикалық және сандық әдістер арқылы зерттеуді едәуір жеңілдетеді. Сонымен қатар, Гамильтонианның бұл түрі ұжымдық қозғалыстардың негізгі механизмдерін бөліп көрсетуге мүмкіндік беріп, фермиондық жүйенің микроскопиялық сипаттамалары мен оның макроскопиялық ұжымдық қасиеттері арасындағы байланысты зерттеуге қолайлы теориялық негіз қалыптастырады.

Инертті мультипольдік операторларды есепке алу симметриялық құрылымның күрделенуіне және модельдің алгебралық аппаратының кеңеюіне алып келеді. (9)-өрнекпен берілген фермионды динамикалық-симметрия модель Гамильтонианы S , D және s ішкі кеңістіктерін фермиондық кеңістіктің қалған бөлігінен бөліп қарастыруға мүмкіндік береді. Соның нәтижесінде k -белсенді схема үшін модель $Sp(6) \times SU(2)$, ал i -белсенді схема үшін $SO(8) \times SU(2)$ динамикалық симметрияларын сақтайды.

Практикалық есептеулерде мұндай Гамильтонианды сәйкес ішкі топтардың

тәуелсіз Казимир операторлары арқылы өрнектеу анағұрлым тиімді болып табылады. Бұл тәсіл модельдің симметриялық қасиеттерін айқын көрсетіп қана қоймай, энергия спектрін аналитикалық түрде зерттеуді де жеңілдетеді. $Sp(6) \times SU(2)$ -динамикалық симметриясы жағдайында жүйенің Гамильтонианы топтық құрылымдардың Казимир инварианттары арқылы келесі түрде жазылады:

$$H_6 = H_0 + v_0 C_{SU(2)} + v_1 C_{SU(2)} + g_0 C_{SU(2)}^Y + V_2 C_{SU(3)} + G_2 C_{Sp(6)} + V_3 L^2.$$

Бұл өрнек модельдің әртүрлі динамикалық үлестерін жеке қарастыруға мүмкіндік береді және жүйенің спектрлік қасиеттеріне әрбір симметрияның қосатын үлесін анық көрсетеді. Гамильтонианның H_0 мүшесі жүйенің негізгі энергетикалық және құрылымдық параметрлерін сипаттайтын фондық бөлікті білдіреді және келесі түрде анықталады:

$$H_0 = h_0 + \varepsilon_0 \tau_0 + \varepsilon_1 n_1 + \eta_0 \frac{\tau_0(\tau_0 - 1)}{2} + \eta_1 \frac{n_1(n_1 - 1)}{2} + \eta \frac{n(n - 1)}{2}.$$

Мұндағы параметрлер бірбөлшектік энергияларды және нуклондар арасындағы тиімді өзара әсерлесулерді сипаттайды. Ал Казимир операторлары симметрия топтарының инварианттық қасиеттерін ескеріп, жүйенің ұжымдық қозғалыстары мен спектрлік құрылымын анықтайды. Осылайша, Гамильтонианның барлық мүшелері өзара байланысқан симметриялық үлестер ретінде қарастырылып, көпнуклонды жүйелердің динамикалық қасиеттерін біртұтас алгебралық формализм аясында сипаттауға мүмкіндік береді. Мұндай тәсіл ұжымдық күйлердің қалыптасу механизмдерін түсіндірумен қатар, ядролық спектрлерді есептеудің тиімді теориялық негізін қамтамасыз етеді.

Ал $SO(8) \times su(2)$ динамикалық симметриясы жүзеге асқан жағдайда Гамильтонианның құрылымы күрделене түсіп, қосымша симметриялық инварианттарды қамтиды. Мұндай жағдайда жүйенің Гамильтонианы келесі түрде жазылады:

$$H_8 + H_0 + v_0 C_{su_2} + v_1 C_{SU_2} + g_0 C_{SU_2}^T + g_5 C_{SO_5} + g_6 C_{SO_6} + G_2 C_{SO_8} + g L^2. \quad (10)$$

Берілген өрнек көпнуклонды жүйелердің энергия спектрін әртүрлі симметрия топтарының Казимир операторлары арқылы сипаттауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, ол фермионды динамикалық-симметрия моделінің алгебралық құрылымын және ұжымдық қозғалыстардың симметриялық табиғатын айқын көрсетеді.

Жалпы жағдайда фермионды динамикалық-симметрия моделі бес түрлі асимптотикалық шекке ие болады. Бұл шектердің физикалық мазмұнын талдау үшін алдымен модельдің қарапайымдалған нұсқасы қарастырылады. Мұндай жуықтауда Гамильтониан құрамында тек жұптық және квадрупольдік өзара әсерлесулерді сипаттайтын мүшелер ғана сақталады. Нәтижесінде ықшамдалған

фермиондық динамикалық симметрия Гамильтонианы төмендегі түрде өрнектеледі:

$$H_{\text{ФДСМ}}^0 = G_0 S^{(T)+} S^T + B_2 P^r P^r. \quad (11)$$

Бұл өрнекте бірінші мүше жүйедегі жұптық корреляцияларды сипаттаса, екінші мүше квадрупольдік ұжымдық қозғалыстардың үлесін анықтайды. Осылайша модельдің негізгі физикалық мазмұны сақталып, күрделі көпбөлшекті өзара әсерлесулердің басым бөлігі тиімді түрде ескеріледі.

Қарапайымдалған Гамильтониан негізінде динамикалық симметрияның негізгі екі шегі $Sp(6) \times SU(2)$ және $SO(8) \times SU(2)$ жағдайлары қарастырылады. Бұл шектерде Гамильтонианның құрылымы едәуір ықшамдалып, толықтай Казимир операторлары арқылы өрнектеледі. Мұндай тәсіл жүйенің спектрлік қасиеттерін аналитикалық түрде зерттеуге мүмкіндік беріп, ұжымдық қозғалыстардың симметриялық табиғатын айқын көрсетеді. Сонымен қатар, асимптотикалық шектерді талдау әртүрлі ұжымдық режимдердің қалыптасу механизмдерін түсіндіруде маңызды рөл атқарады.

Бірінші асимптотикалық шек $Sp(6) \times SU(2)$ динамикалық симметриясына сәйкес келеді. Бұл жағдайда ықшамдалған Гамильтониан келесі түрде өрнектеледі:

$$H_6 = \varepsilon n - \frac{G_0}{4} n(n-1) + G_0 \left[C_{SU(2)}^T - \frac{\Omega(\Omega+2)}{4} \right] + B_2 C_{SU(3)} - \frac{3B_2}{8} L^2.$$

Ал $SO(8) \times SU(2)$ симметриясы жүзеге асқан жағдайда Гамильтонианның баламалы түрі төмендегі өрнекпен анықталады:

$$H_8 = \varepsilon n - \frac{G_0 n(n-1)}{4} + G_0 \left[C_{SU_2}^T - \frac{\Omega(\Omega+2)}{4} \right] + B_2 C_{SO_6} - B_2 C_{SO_5} \quad (12)$$

Алынған өрнектер фермионды динамикалық-симметрия моделінің негізгі динамикалық шектерін айқын көрсетеді және күрделі көпфермионды Гамильтонианды симметрия топтарының Казимир операторлары арқылы ықшам түрде сипаттауға мүмкіндік береді. Мұндай тәсіл жүйенің спектрлік қасиеттерін зерттеуді жеңілдетіп, әртүрлі ұжымдық режимдердің қалыптасу механизмдерін симметрия принциптері тұрғысынан түсіндіруге жағдай жасайды.

(12)-өрнектерді талдау көрсеткендей, $B_2 = 0$ болған жағдайда жүйенің динамикасы негізінен монопольдік жұптасу әсерімен анықталады. Мұндай режимде $SU(2)$ симметриясы басым орын алып, жүйенің энергетикалық спектрі вибрациялық сипатқа ие болады. Бұл жағдай жұптық корреляциялардың жетекші рөл атқаратын ядролық күйлерге сәйкес келеді.

Керісінше, $G_0 = 0$ немесе оның үлесі елеусіз аз болған кезде квадруполь-квадрупольдік өзара әсерлесу негізгі факторға айналады. Нәтижесінде k -белсенді схема үшін $SU(3)$, ал i -белсенді схема үшін $SO(6)$ динамикалық

симметриялары жүзеге асады. Физикалық тұрғыдан алғанда, $SU(3)$ шегі осьтік симметриялы роторлық қозғалыстарды сипаттайды, ал $SO(6)$ шегі γ -тұрақсыз деформацияланған ядролардың ұжымдық қасиеттерін бейнелейді.

Осылайша, жүргізілген талдау жұптардың ыдырау процестері мен қалыпты және аномальды жұптар деңгейлер арасындағы шашырау әсерлері ескерілмейтін фермионды динамикалық-симметрия моделінің ықшамдалған нұсқасы шеңберінде жүзеге асырылады. Мұндай жуықтау төмен энергиялы ұжымдық күйлердің негізгі қасиеттерін сипаттау үшін жеткілікті дәлдік береді. Нәтижесінде жүйедегі бірбөлшектік және екібөлшектік өзара әсерлесулерді қамтитын, параметрлер саны шектеулі ықшам Гамильтониан алынады.

Протондық және нейтрондық дәрежелер еркіндігі ескерілген жағдайда фермионды динамикалық-симметрия моделінің негізгі Гамильтонианы келесі түрде жазылады:

$$H_{\text{ФДСМ}}^0 = G_{0\pi} S_{\pi}^+ S_{\pi} + G_{0\nu} S_{\nu}^+ S_{\nu} + B_{2\pi} P_{\pi}^2 P_{\pi}^2 + B_{2\nu} P_{\nu}^2 P_{\nu}^2 + B_{2\pi\nu} P_{\pi}^2 P_{\nu}^2. \quad (13)$$

Бұл өрнекте алғашқы екі мүше протондық және нейтрондық жұптық корреляцияларды сипаттаса, қалған мүшелер квадрупольдік ұжымдық өзара әсерлесулердің үлесін анықтайды. Осылайша модель ядроның ұжымдық қасиеттерін қалыптастыратын негізгі механизмдерді біртұтас түрде қамтиды.

Гамильтонианмен қатар электромагниттік квадрупольдік ауысуларды сипаттау үшін бірбөлшектік жуықтауда келесі ауысу операторы енгізіледі:

$$T(E2) = e_{\pi} P_{\pi}^2 + e_{\nu} P_{\nu}^2. \quad (14)$$

Мұндағы e_{π} және e_{ν} шамалары сәйкесінше протондық және нейтрондық тиімді зарядтарды сипаттайды. Бұл оператор $E2$ -ауысуларының ықтималдықтарын есептеуге және теориялық нәтижелерді тәжірибелік деректермен салыстыруға мүмкіндік береді.

Келесі кезеңде фермионды динамикалық-симметрия модельінің негізгі идеясы жүзеге асырылады, яғни корреляцияланған фермиондық жұптарды тиімді бозондық дәрежелер еркіндігі арқылы сипаттау қарастырылады. Осы мақсатта жалпы жұптық оператор төмендегі түрде анықталады:

$$P_{LM}^{\dagger} = \sum_{ij} a_{ij}^{(L)} (a_i^{\dagger} a_j^{\dagger})_{LM}. \quad (15)$$

Мұндағы L және M кванттық сандары жұптың толық бұрыштық импульсі мен оның кеңістіктегі проекциясын анықтайды, ал $a_{ij}^{(L)}$ коэффициенттері жұптың құрылымдық сипаттамаларын береді. Аталған оператор фермиондық жүйедегі ұжымдық корреляцияларды тиімді бозондық айнымалылар арқылы сипаттаудың бастапқы негізін құрайды және фермиондық кеңістіктен бозондық формализмге өтудің негізгі элементі болып табылады.

Жұптық операторлардың анықтамасына сәйкес ұжымдық қозғалыстарды сипаттауда негізгі рөл атқаратын ең төменгі мультипольдік күйлер $L = 0$ және $L = 2$ болып табылады. Бозондық бейнелеу процедурасында бұл күйлер сәйкесінше s - және d -бозондармен сәйкестендіріледі:

$$s^\dagger \leftrightarrow P_{00}^\dagger, d_M^\dagger \leftrightarrow P_{2M}^\dagger. \quad (16)$$

Бұл сәйкестік тек формальды алмастыруды білдірмейді. Оның негізгі мақсаты фермиондық және бозондық операторлар арасындағы алгебралық құрылымның сақталуын қамтамасыз ету болып табылады. Осы себепті ұжымдық жұптық операторлар бозондық операторларға тән коммутациялық қасиеттерді жуық түрде қанағаттандырады:

$$[P_{LM}, P_{L'M'}^\dagger] \approx \delta_{LL'} \delta_{MM'}. \quad (17)$$

Мұндағы $\delta_{LL'}$ және $\delta_{MM'}$ Кронекер символдары болып табылады. Бұл қатынас ұжымдық фермиондық жұптардың бозондарға ұқсас қасиет көрсететінін және олардың тиімді бозондық дәрежелер еркіндігі ретінде қарастырылуы мүмкін екенін білдіреді.

Нәтижесінде бастапқы күрделі көпфермионды жүйе бозондық кеңістікке бейнеленіп, ұжымдық қозғалыстарды сипаттау едәуір қарапайым әрі есептеу тұрғысынан тиімді формаға көшіріледі. Мұндай түрлендіру көпнуклонды жүйелердің спектрлік қасиеттерін зерттеуді жеңілдетіп қана қоймай, олардың ұжымдық күйлерінің негізгі физикалық ерекшеліктерін сақтауға мүмкіндік береді.

Осылайша, фермионды динамикалық-симметрия моделінің бастапқы Гамильтонианы тиімді бозондық формализм аясында қайта жазылып, ұжымдық күйлерді сипаттайтын бозондық модельдің құрылымына келтіріледі. Бұл тәсіл фермиондық және бозондық сипаттамалардың арасындағы байланысты талдауға, сондай-ақ алынған теориялық нәтижелерді бозондық бейнелеу негізінде алынған қорытындылармен салыстыруға мүмкіндік береді. Өз кезегінде мұндай салыстыру фермионды динамикалық-симметрия моделінің физикалық негізділігін бағалауда маңызды рөл атқарады.

Зерттеудің қолданбалы нысаны ретінде ауыр массалық аймақта орналасқан ядролар таңдап алынды. Атап айтқанда, протондық $Z = 50 - 82$ және нейтрондық $N = 82 - 126$ қабықшалары арасындағы кеңістік қарастырылады. Бұл аймақта нейтрондық және протондық дәрежелер еркіндігінің өзара әсерлесуі маңызды рөл атқаратындықтан, жүйенің симметриялық құрылымы $Sp_v(6) \otimes SO_\pi(8)$ схемасы арқылы сипатталады деп болжанады.

Ұсынылған формализмнің мүмкіндіктерін тексеру мақсатында жұп-жұп ^{190,192,194}Pt платина изотоптарының тізбегі зерттеу объектісі ретінде таңдалды. Аталған изотоптар қатарында протондық жұптар саны тұрақты болып қалып,

$N_\pi = 2$ мәніне тең, ал нейтрондық жұптар саны $N_v = 4$ -тен $N_v = 7$ -ге дейін өзгереді. Мұндай жүйелер ұжымдық қасиеттердің эволюциясын және нейтрондық конфигурациялардың спектрлік сипаттамаларға әсерін зерттеуге қолайлы мүмкіндік береді. Соңғы жылдары платина изотоптарының құрылымын зерттеуге арналған эксперименттік және теориялық жұмыстардың саны айтарлықтай өсті. Дегенмен, бұл ядролардың төмен энергиялы күйлерін толық әрі бірізді сипаттайтын әмбебап теориялық модель әлі де қалыптасқан жоқ. Сондықтан платина изотоптары ұжымдық қозғалыстарды сипаттайтын әртүрлі модельдердің тиімділігін тексеруге арналған маңызды тестілік жүйелердің бірі болып табылады.

Бұрын жүргізілген зерттеулерде, әсіресе Бор–Моттelsonның геометриялық моделі аясында, өтпелі аймақта орналасқан ядролардың құрылымында әртүрлі деформациялық режимдердің бәсекелестігі байқалатыны көрсетілген. Мұндай ядроларда созылған және сығылған пішіндер арасындағы тепе-теңдікпен қатар, Y -тұрақсыздық құбылысы маңызды рөл атқарады. Соның нәтижесінде олардың спектрлік құрылымы мен электромагниттік ауысу сипаттамалары күрделі сипатқа ие болады.

Осы ерекшеліктерге байланысты ^{190,192,194}Pt изотоптары фермионды динамикалық-симметрия моделінің болжамдарын тексеру үшін қолайлы объектілер болып табылады. Бұл ядроларды зерттеу ұжымдық қозғалыстардың табиғатын тереңірек түсінуге және модельдің өтпелі аймақтағы ядроларды сипаттау мүмкіндіктерін бағалауға мүмкіндік береді. Аталған құрылымдық ерекшеліктерге байланысты платина изотоптарын сипаттау барысында өзара әсерлесуші бозондар моделінде толық Гамильтонианды дәл диагоналдау әдісін қолдану қажеттілігі туындайды. Бұл, ең алдымен, олардың спектрлік қасиеттерінің модельдің белгілі қарапайым асимптотикалық шектерінің ешқайсысына толық сәйкес келмеуімен түсіндіріледі. Сондықтан мұндай ядролар өтпелі аймақта орналасқан жүйелер ретінде қарастырылып, олардың құрылымын сипаттау үшін неғұрлым жалпы теориялық тәсілдерді қолдануды талап етеді.

Осы жұмыста ^{190,192,194} Pt платина изотоптарының төмен энергиялы күйлерінің спектрлік құрылымы фермионды динамикалық-симметрия моделінің ықшамдалған Гамильтонианы (13), квадрупольдік электромагниттік ауысуларды сипаттайтын $E2$ -операторы және олардың бозондық кеңістікке бейнеленуі негізінде зерттеледі. Мұндай тәсіл ұжымдық қозғалыстардың микроскопиялық табиғатын сақтай отырып, спектрлік сипаттамаларды тиімді түрде есептеуге мүмкіндік береді.

Алынған теориялық нәтижелердің сенімділігін бағалау мақсатында есептеу нәтижелері бірнеше белгілі модельдердің болжамдарымен салыстырылады. Атап айтқанда, салыстырмалы талдау $SU(6)$ дәл симметриясына негізделген өзара әсерлесуші бозондар моделімен (Dalelkhanzy, 2025), Давыдов–Чабанның геометриялық тәсілімен (Davydov, 1960) және қолжетімді эксперименттік деректермен жүргізіледі. Мұндай салыстыру фермионды динамикалық-

симметрия моделінің өтпелі аймақтағы ауыр ядролардың ұжымдық қасиеттерін сипаттау мүмкіндіктерін жан-жақты бағалауға және оның қолданылу шекараларын анықтауға мүмкіндік береді.

Осылайша, платина изотоптарының спектрлік сипаттамаларын әртүрлі теориялық тәсілдер негізінде салыстыру ұжымдық қозғалыстардың табиғатын тереңірек түсіндіруге және фермионды динамикалық-симметрия моделінің болжамдарының эксперименттік деректермен сәйкестік дәрежесін анықтауға жағдай жасайды.

1-кестеде фермиондық динамикалық-симметрия моделі (ФДСМ) мен өзара әсерлесуші бозондар моделі (ӘБМ) бойынша дәл диагонализация әдісі арқылы алынған ротациялық жолақтардың салыстырмалы спектрлері және ^{190}Pt , ^{192}Pt , ^{194}Pt изотоптары үшін тәжірибелік деректер (Koilyk, 2026; Finger et al., 1972; Cummane et al., 1976; Lederer, 1978) келтірілген. Кестеде әрбір ядро үшін бір ғана ротациялық жолақ қарастырылып, салыстырмалы талдау жүргізілді. Эксперименттік ираст-ротациялық жолақтың энергетикалық деңгейлері ФДСМ және ӘБМ шеңберінде есептелген нәтижелермен салыстырылып, модельдердің сипаттау дәлдігі бағаланды.

Кесте 1. Эксперименттік ротациялық $^{190,192,194}\text{Pt}$ ираст-жолақты ФДСМ және ӘБМ бойынша есептелген мәндермен салыстыру.

I_{π}	Эксперимент			ФДСМ			ӘБМ		
	^{190}Pt	^{192}Pt	^{194}Pt	^{190}Pt	^{192}Pt	^{194}Pt	^{190}Pt	^{192}Pt	^{194}Pt
0_1^+	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2_1^+	0,30	0,32	0,33	0,30	0,32	0,32	0,32	0,32	0,34
4_1^+	0,74	0,78	0,81	0,72	0,76	0,78	0,78	0,76	0,80
6_1^+	1,29	1,37	1,41	1,24	1,34	1,38	1,28	1,28	1,36
8_1^+	1,92	2,02	2,10	1,89	1,98	2,08	1,80	1,94	2,01
10_1^+	2,25	2,52	2,44	1,17	2,50	2,40	2,40	2,34	2,64
12_1^+	2,73	2,62	2,83	2,64	2,64	2,78	2,82	2,62	3,04
14_1^+	3,06	3,00		2,98	3,02		3,36	3,02	
16_1^+	3,77	3,54		3,61	3,56		3,72	3,44	
18_1^+	0	4,20			4,25		4,16	3,86	

1-ші кестеде келтірілген нәтижелер бойынша есептелген орташа салыстырмалы қателіктер ^{190}Pt изотопы үшін ФДСМ және ӘБМ модельдерінде сәйкесінше 8.29% және 5.02%, ^{192}Pt үшін 1.19% және 3.54%, ал ^{194}Pt үшін 2.20% және 4.62% болды. Нәтижелер фермиондық динамикалық-симметриялық модельдің ^{192}Pt және ^{194}Pt изотоптарының ротациялық спектрлерін сипаттауда жоғары дәлдік көрсететінін, ал ^{190}Pt үшін өзара әсерлесуші бозондар моделінің тәжірибелік

деректермен жақсырақ сәйкес келетінін көрсетеді. Жалпы алғанда, екі модель де платина изотоптарының төменгі энергетикалық күйлерін қанағаттанарлық дәлдікпен сипаттайды. Алынған нәтижелерді зерттеу теориялық есептеулер мен эксперименттік мәліметтер арасындағы сәйкестік дәрежесін анықтауға, сондай-ақ қолданылған модельдердің сенімділігі мен қолданылу шекараларын бағалауға жағдай жасайды. Энергетикалық спектрлерді салыстыру барысында фермионды динамикалық-симметрия моделінің ықшамдалған нұсқасы негізгі ұжымдық күйлердің орналасу заңдылықтарын жеткілікті дәлдікпен қайта өндіре алатыны байқалады.

Сонымен қатар, есептелген және тәжірибелік энергия деңгейлерінің өзара сәйкестігі модельде ескерілген жұптық және квадрупольдік корреляциялардың платина изотоптарының ұжымдық қасиеттерін сипаттауда маңызды рөл атқаратынын көрсетеді. Ал өзара әсерлесуші бозондар моделімен жүргізілген салыстыру екі тәсілдің де негізгі спектрлік заңдылықтарды қанағаттанарлық деңгейде сипаттай алатынын, алайда жекелеген күйлер үшін олардың дәлдік деңгейінде айырмашылықтар болуы мүмкін екенін көрсетеді.

Фермионды динамикалық-симметрия моделі мен өзара әсерлесуші бозондар моделі негізінде есептелген энергетикалық деңгейлердің нәтижелері ^{190,192,194}Pt изотоптары үшін тәжірибелік деректермен салыстырылып, олардың β -және γ -жолақтарына қатысты мәндері 2-кестелерде келтірілген. Ұсынылған салыстырмалы талдау әртүрлі теориялық тәсілдердің төмен энергиялы ұжымдық күйлерді сипаттау қабілетін бағалауға мүмкіндік береді. Осылайша, 2-кестелерде келтірілген нәтижелер фермиондық динамикалық симметрия моделінің ауыр платина изотоптарының құрылымын зерттеуде қолдануға жарамды теориялық құрал екенін растайды және оның болжамдарының эксперименттік деректермен сәйкестігін сандық тұрғыдан бағалауға мүмкіндік береді.

Кесте 2. Фермионды динамика-симметриялық модель және өзара әсерлесуші бозондар моделі көмегімен есептелген энергияның эксперименттік мәндерінің ^{190,192,194}Pt ядросының β, γ – жолақтарымен салыстыру.

I^π	Эксперимент			ФДСМ			ӘБМ		
	¹⁹⁰ Pt	¹⁹² Pt	¹⁹⁴ Pt	¹⁹⁰ Pt	¹⁹² Pt	¹⁹⁴ Pt	¹⁹⁰ Pt	¹⁹² Pt	¹⁹⁴ Pt
2_2^+	0,60	0,61	0,62	0,58	0,60	0,65	0,60	0,60	0,65
3_1^+	0,92	0,92	0,92	0,89	0,90	0,89	1,05	0,99	0,80
4_2^+	1,13	1,20	1,23	1,10	1,17	1,17	1,07	1,11	1,06
5_1^+	1,45	1,48	1,50	1,46	1,45	1,45	1,55	1,55	1,35
6_2^+	1,73	1,65	1,73	1,70	1,61	1,64	1,65	1,70	1,60
7_1^+	1,95	2,11	2,11	1,91	2,06	2,01	2,0	2,0	-
8_2^+	2,03	2,15	2,19	2,0	2,10	2,11	2,15	2,15	2,20
9_1^+	2,43	2,36	-	2,45	2,39	2,37	2,55	2,24	-
10_2^+	2,52	2,61	2,45	2,50	2,58	2,40	2,70	2,42	2,54
0_2^+	0,92	1,01	1,12	0,95	1,0	1,37	0,95	0,95	1,14

$2_{\frac{1}{2}}^{+}$	1,20	1,25	1,65	1,22	1,23	1,59	1,25	1,17	1,42
$4_{\frac{1}{2}}^{+}$	1,49	1,68	2,45	1,51	1,60	2,40	1,63	1,51	2,41
$6_{\frac{1}{2}}^{+}$	1,97	2,02	0,62	1,99	1,98	0,65	2,06	1,88	0,65
$8_{\frac{1}{2}}^{+}$	2,20	2,35	0,92	2,20	2,30	0,89	2,41	2,12	0,80
$10_{\frac{1}{2}}^{+}$	2,50	2,67	1,23	2,45	2,61	1,17	2,55	2,50	1,06

2-ші кестеде берілген β және γ -жолақтардың энергетикалық спектрлері бойынша жүргізілген салыстырмалы талдау ФДСМ нәтижелерінің тәжірибелік деректермен жақсырақ сәйкес келетінін көрсетті. Орташа салыстырмалы қателіктер ^{190}Pt , ^{192}Pt және ^{194}Pt изотоптары үшін сәйкесінше 1.74%, 2.11% және 5.21% болды. Ал ӘБМ бойынша бұл көрсеткіштер 5.63%, 5.84% және 7.88%-ға тең. Осылайша, қарастырылған изотоптардың β және γ -жолақтарының құрылымын сипаттауда ФДСМ моделінің дәлдігі жоғары екендігі байқалады.

Кестелерде келтірілген нәтижелер көрсеткендей, 4 МэВ-қа дейінгі қозу энергиялары аймағында $^{190,192,194}\text{Pt}$ изотоптарының белгілі төмен энергиялы күйлері екі теориялық тәсіл арқылы да қанағаттанарлық дәлдікпен сипатталады. Жалпы алғанда, есептелген энергия деңгейлерінің тәжірибелік мәндерден ауытқуы 5–10% шамасында болады. Сонымен қатар, $SU(6)$ симметриясына негізделген өзара әсерлесуші бозондар моделінің кейбір жағдайларда фермионды динамикалық-симметрия моделіне қарағанда төменірек дәлдік көрсететіні байқалады. Жекелеген күйлер үшін теориялық және эксперименттік мәндер арасындағы айырмашылық 20%-ға дейін жетуі мүмкін.

Екі теорияның маңызды нәтижелерінің бірі – ротациялық сипаттағы күйлермен қатар сфералық құрылым элементтерінің қатар өмір сүретінін дұрыс сипаттауы болып табылады. Сонымен бірге олар ауыр платина изотоптарында байқалатын «бэкбендинг» құбылысын сапалық тұрғыдан да, сандық тұрғыдан да түсіндіре алады. Бұл құбылыс бұрыштық импульстің өсуімен энергия деңгейлерінің орналасу заңдылығының өзгеруімен сипатталады. Бэкбендинг эффектісін талдау үшін әдетте $\Delta E_I = E_I - E_{I-2}$ шамасы қарастырылады. Кіші бұрыштық импульстер аймағында бұл айырма ротациялық модельге сәйкес бірқалыпты өзгереді. Алайда бұрыштық импульс белгілі бір критикалық мәнге жеткеннен кейін (I_c) энергия аралықтарының өзгеру заңдылығы күрт бұзылады. Мұндай ерекшеліктер ядро ішіндегі нуклондық жұптардың қайта құрылуымен және жоғары импульсті орбиталардың қатыса бастауымен түсіндіріледі.

Зерттелген платина изотоптары үшін бұл құбылыс айқын байқалады. Атап айтқанда, ^{190}Pt және ^{192}Pt ядроларында критикалық аймақ шамамен $I_c \approx 12\hbar$ мәніне сәйкес келеді, ал ^{194}Pt ядросында бұл өзгеріс ертерек, шамамен $I_c \approx 10\hbar$ маңында басталады. Мысалы, ^{190}Pt ядросы үшін $\Delta E(8^{+} \rightarrow 10^{+}) = 0.62 \text{ МэВ}$, ал $\Delta E(10^{+} \rightarrow 12^{+}) = 0.12 \text{ МэВ}$ болып өзгереді. Энергия айырмасының осындай күрт кемуі бэкбендинг құбылысының айқын көрінісі болып табылады және ядроның ұжымдық ротациялық режимінен квазибөлшектік конфигурациялардың маңызды рөл атқаратын жаңа динамикалық күйге ауысуын көрсетеді.

Осылайша, фермионды динамикалық-симметрия моделі де, өзара әсерлесуші бозондар моделі де платина изотоптарындағы спектрлік заңдылықтарды және жоғары спинді күйлерде байқалатын құрылымдық өзгерістерді сәтті сипаттайды. Алайда фермионды динамикалық-симметрия моделінің нәтижелері тәжірибелік деректермен біршама жақсырақ сәйкес келіп, оның ауыр өтпелі ядролардың ұжымдық қасиеттерін зерттеудегі тиімділігін көрсетеді.

Қорытынды. Зерттеу барысында фермионды динамикалық-симметрия моделінің ықшамдалған нұсқасы қарастырылып, оның бозондық кеңістікке бейнелену мүмкіндіктері талданды. Алынған нәтижелер ұсынылған ықшамдау процедурасының көпфермионды жүйелердегі негізгі ұжымдық еркіндік дәрежелерін бөліп көрсетуге мүмкіндік беретінін және модельдің физикалық мазмұнын сақтай отырып, есептеу күрделілігін едәуір төмендететінін көрсетті. Фермиондық операторларды тиімді бозондық айнымалылармен алмастыру күрделі көпбөлшекті есептердің алгебралық құрылымын жеңілдетіп, энергетикалық спектрлер мен электромагниттік ауысуларды зерттеудің тиімді құралын ұсынады.

Жүргізілген талдау әлсіз және орташа деңгейдегі корреляциялар жағдайында ұсынылған тәсілдің бастапқы фермиондық жүйенің негізгі спектрлік сипаттамаларын жеткілікті дәлдікпен қайта өндіретінін көрсетті. Алайда корреляциялық әсерлер күшейген кезде жуықтаудың дәлдігі төмендей бастайды, бұл модельді одан әрі жетілдіру және жоғары ретті әсерлесулерді ескеру қажеттігін көрсетеді.

Қолданбалы есептеулер нәтижесінде платина изотоптарының төмен энергиялы күйлерінің құрылымы зерттеліп, олардың спектрлік қасиеттері тәжірибелік деректермен салыстырылды. Алынған нәтижелер көрсеткендей, қарастырылған изотоптардың ұжымдық қасиеттері негізінен ($O(6)$) динамикалық симметриясына сәйкес келеді, ал ($SU(3)$) симметриясының үлесі салыстырмалы түрде әлсіз байқалады. Мұндай қорытынды эксперименттік спектрлерде байқалатын бірқатар ерекшеліктерді, соның ішінде γ -тұрақсыздыққа тән заңдылықтарды түсіндіруге мүмкіндік береді.

Сонымен қатар зерттеу нәтижелері өзара әсерлесуші бозондар моделінің ($U(5)$) шектік симметриясы платина изотоптарының деңгейлік құрылымын толық сипаттай алмайтынын көрсетті. Әсіресе, бұл тәсіл бэкбендинг құбылысының пайда болуын және жоғары бұрыштық импульсті күйлердің кейбір ерекшеліктерін қанағаттанарлық деңгейде түсіндіре алмайды. Ал фермионды динамикалық-симметрия моделі аталған эффектілерді сипаттауда анағұрлым тиімді нәтижелер береді.

Жалпы алғанда, өзара әсерлесуші бозондар моделінің қарапайым асимптотикалық шектері барлық жағдайда жоғары дәлдік көрсете бермейді. Дегенмен, оның толық ($s-d$) Гамильтонианын дәл диагоналдау тәжірибелік деректермен жақсы келісетін нәтижелер алуға мүмкіндік береді. Сонымен қатар фермионды динамикалық-симметрия моделі ядролық жүйелердің ұжымдық еркіндік дәрежелерін микроскопиялық деңгейде сипаттауға кеңірек мүмкіндік

береді. Алайда мұндай жағдайда Гамильтонианның құрылымы күрделене түседі және ұжымдық қозулардың фермиондық табиғатын тереңірек зерттеуді талап етеді. Сондықтан фермиондық және бозондық сипаттамаларды байланыстыратын теориялық тәсілдерді одан әрі дамыту ядролық құрылым теориясының маңызды бағыттарының бірі болып қала береді.

References

- Arima A., Yoshida N., Ginocchio J.N. (1981) Boson mappings of the Ginocchio model of the fermion systems. *Phys. Lett.* – Vol. B101. – P. 209-222. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.34.2373> (in Eng.).
- Baktybaev K., Koilyk N.O., & Ramankulov K.E. (2008). Fermionno-teoreticheskoe gruppovoe issledovanie kollektivnykh sostoyanii yader [Fermion-theoretical group study of collective nuclear states]. – *KazNU Bulletin. Physics Series.* – No. 26(2). Retrieved from <https://bph.kaznu.kz/index.php/zhuzhu/article/view/1446> (in Russian).
- Bohr A., Mottelson B.R. (1975) *Nuclear Structure. Nuclear Deformations.* – New York: W.A. Benjamin. – Vol. 2. ISBN: 9780805310160. (in Eng.).
- Cejnar P., Jolie J., Casten R.F. (2010) Quantum phase transitions in the shapes of atomic nuclei. *Rev. – Mod. Phys.* – Vol. 82. – P. 2155-2212. DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.2155> (in Eng.).
- Cummane J.C., Pliparinen M., Daly P.J. et.all. (1976) Hig-spin levels structure of 190, 192, 194 Pt. *Phys. Rev.* – Vol. C1. – P. 2197-2212. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.13.2197> (in Eng.).
- Dalekhankyzy A., Baimbetova G.A., Koilyk N.O., Toktarbai S., & Beisebaeva A. (2025). Kvazispinovi formalizm vzaimodeistviia bozonov i ego primenenie v yadernoi teorii [Quasispin formalism of boson interaction and its application in nuclear theory]. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences.* – No. 2. <https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.341> (in Russian).
- Davydov A.S., Chavan A.A. (1960) On investigation the collective states of the π -rotation nuclei. *Nucl. Phys.* – Vol.20. – P. 499-513. DOI: [https://doi.org/10.1016/0029-5582\(60\)90191-7](https://doi.org/10.1016/0029-5582(60)90191-7) (in Eng.).
- Elliott J.P. (1958) Collective motion in the nuclear shell model. *Proc. Roy. Soc. London A.* – Vol. 245. – P. 128-145. <https://doi.org/10.1098/rspa.1958.0072> (in Eng.).
- Finger M., Foucher R., Hussen J.P et.all. (1972) Properties of low-lying levels in the even platinum nuclei. *Nucl. Phys.* – Vol. A188. – P. 369-378. DOI: [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(72\)90064-4](https://doi.org/10.1016/0375-9474(72)90064-4) (in Eng.).
- Iachello F., Arima A. (1987) *The Interacting Boson Model.* Cambridge: Cambridge Univ. Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511895517> (in Eng.).
- Koilyk N.O., Dalekhanqyzy A., Kaptagai G.A., Kokazhayeva A.B., Shambulov N.B. (2023) Teoretiko-gruppovoe issledovanie kollektivnykh sostoyanii mnogonuklonnykh yadernykh sistem [Group-theoretical study of collective states of multinucleon nuclear systems]. *Reports of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan.* – Vol. 345(1). – P. 148-163. <https://doi.org/10.32014/2023.2518-1483.191> (in Russian).
- Koilyk, N. O. (2026). Kopnuklondy zhuierldin uzhyndyk kuilerinin mikroskopiialyk sipattamasy [Microscopic description of collective states of multinucleon systems]. – Almaty: Poligrafia. – 104 p. ISBN 978-601-353-428-2. (in Kazakh).
- Lederer C.M., Shirley V.S. (1978) *Table of Isotopes.* 7th ed. New York: John Wiley & Sons. – 1523 p. ISBN 0-471-04179-3. (in Eng.).
- Rowe D.J., Wood J.L. (2010) *Fundamentals of Nuclear Models: Foundational Models.* Singapore: World Scientific. <https://doi.org/10.1142/7421> (in Eng.).
- Wigner E. (1937) On the Consequences of the Symmetry of the Nuclear Hamiltonian. *Physical Review.* – Vol. 51. – No. 2. – P. 106-119. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.51.106> (in Eng.).
- Wu Ch. L., Fend D.H., Chen X-G., Chen J.Q., Gnidry M.W. (1987) Fermion dynamical symmetry model of nuclei: Basis, Hamiltonian, and symmetries. – *Phys. Rev.* – Vol. 36. – P. 1157-1180. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.36.1157> (in Eng.).
- Wybourne B.G. (1974) *Classical Groups for Physicists.* – New York: Wiley. ISBN 0-471-96505-7. (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 60–69

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.437>

UDC: 539.12.16

IRSTI: 31.15.37

©Massak B.¹, Agyl-Mussapar O.¹, Amangeldinova S.¹, Kurmangaliyeva V.^{1*},
Snow M.², 2026.

¹Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

²Indiana University, Bloomington, USA.

*E-mail: venera_baggi@mail.ru

CONSTRAINTS ON YUKAWA-TYPE SHORT-RANGE INTERACTIONS FROM NEUTRON INTERFEROMETRY DATA

Massak Bekarys — PhD student, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: bekarysbereketov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3003-6210>;

Agyl-Mussapar Orazbay — PhD student, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: oagilmuzaffar@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1160-1226>;

Amangeldinova Sabina — PhD student, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: sabinaa247@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1062-1073>;

Kurmangaliyeva Venera — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,
al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: venera_baggi@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8046-8508>;

Snow Michael — Professor, Indiana University, Bloomington, USA,

E-mail: wsnow@iu.edu, <https://orcid.org/0000-0002-8931-5513>.

Abstract. This work presents an analysis of Yukawa-type short-range interactions based on neutron interferometry data. The aim of the study is to investigate possible modifications of gravity at angstrom length scales and to establish experimental constraints on their parameters. Such interactions are predicted by several theories beyond the Standard Model and may lead to deviations from the conventional gravitational potential at very short distances.

Within the framework of a theoretical model describing coherent neutron scattering in a crystal, the dependence of the normalized scattering amplitude $b(Q)/b(0)$ on the momentum transfer is examined. The model incorporates the main interactions predicted by the Standard Model and includes an additional Yukawa-type correction representing a possible contribution from new physics. As a result, the total theoretical dependence is expressed as the sum of the Standard Model contribution and the hypothetical interaction.

The theoretical predictions are compared with available experimental data. The measured values are in good agreement with Standard Model expectations, and no

systematic deviations are observed. Therefore, no direct evidence for an additional interaction is obtained. Instead, the analysis is used to place constraints on its possible parameters. The fitting procedure yields upper limits on the parameter α_g for $\lambda \approx 0.1\text{--}1\text{ \AA}$.

The obtained results indicate that, if an additional short-range interaction exists, its strength must be significantly weaker than the gravitational interaction. These findings demonstrate the high sensitivity of neutron interferometry at atomic length scales and confirm its effectiveness for probing new physics.

Keywords: Standard Model, dark matter, dark energy, modified gravity, Yukawa potential, neutron interferometry, short-range interactions, scattering amplitude

Financing. This research was conducted as part of the targeted funding program for the project AP23484023, titled “Investigation of exotic interactions of neutrons with matter”.

For citations: Massak B., Agyl-Mussapar O., Amangeldinova S., Kurmangaliyeva V., Snow M. Constraints on Yukawa-Type Short-Range Interactions from Neutron Interferometry Data. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 60–69. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.437>

©Масак Б.¹, Ағыл-Мұсапар О.¹, Амангелдинова С.¹, Курманғалиева В.^{*1},
Сноу М.², 2026.

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

²Индиана Университеті, Блумингтон, АҚШ.

*E-mail: venera_baggi@mail.ru

НЕЙТРОНДЫҚ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ НЕГІЗІНДЕ ЮКАВА ТИПТІ ҚЫСҚА-ҚАШЫҚТЫҚТАҒЫ ӨЗАРА ӘСЕРЛЕСУЛЕРГЕ ШЕКТЕУЛЕР ҚОЮ

Масак Бекарыс — PhD докторант, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: bekarysbereketov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3003-6210>;

Ағыл-Мұсапар Оразбай — PhD докторант, ө әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: oagilmuzaffar@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1160-1226>;

Амангелдинова Сабина — PhD докторант, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: sabinaa247@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1062-1073>;

Курманғалиева Венера — физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: venera_baggi@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8046-8508>;

Сноу Майкл — профессор, Индиана университеті, Блумингтон, АҚШ,

E-mail: wsnow@iu.edu, <https://orcid.org/0000-0002-8931-5513>.

Аннотация. Бұл жұмыста нейтрондық интерферометрия деректері негізінде Юкава типті қысқа-қашықтықтағы өзара әрекеттесулерге талдау жүргізілді.

Зерттеудің мақсаты – ангстремдік масштабтарда гравитациялық өзара әрекеттесудің ықтимал модификацияларын тексеру және олардың параметрлеріне эксперименттік шектеулер қою. Мұндай зерттеулердің өзектілігі Стандартты модельден тыс бірқатар теориялардың өте қысқа қашықтықтарда байқалуы мүмкін жана әлсіз әсерлесулердің болуын болжауымен байланысты болып табылады. Осындай әсерлесулер гипотетикалық жеңіл бөлшектердің алмасуы нәтижесінде туындап, гравитациялық потенциалға Юкавалық түзетулер енгізуі мүмкін.

Нейтрондардың кристалдағы когерентті шашырауын сипаттайтын теориялық модель аясында $b(Q)/b(0)$ нормаланған шашырау амплитудасының импульс берілісіне тәуелділігі қарастырылды. Модельде Стандартты модель шеңберіндегі негізгі әсерлесулер ескеріліп, қосымша ықтимал әсер ретінде Юкава типті түзету енгізілді. Нәтижесінде толық теориялық тәуелділік Стандартты модель үлесі мен ықтимал жана әсерлесудің қосындысы түрінде жазылды.

Теориялық есептеулер эксперименттік деректермен салыстырылып, өлшенген шамалардың теориялық болжамдармен жақсы сәйкес келетіні анықталды. Деректерде жүйелі ауытқулардың байқалмауы жана күштің тікелей тіркелмегенін көрсетеді. Осыған байланысты жана әсерлесуді анықтаудан гөрі оның параметрлеріне шектеулер қою міндеті қарастырылды. Жүргізілген сәйкестендіру нәтижесінде $\lambda \approx 0.1 - 1 \text{ \AA}$ диапазонында α_G параметрінің жоғарғы шектері анықталды.

Алынған нәтижелер көрсеткендей, егер қысқа-қашықтықтағы қосымша өзара әрекеттесу шын мәнінде бар болса, онда оның күші гравитациялық әсерлесумен салыстырғанда едәуір әлсіз болуы тиіс. Зерттеу нәтижелері нейтрондық интерферометрияның атомаралық масштабтардағы ерекше жоғары сезімталдығын растайды және оның жана физиканы іздеудегі, сондай-ақ іргелі өзара әрекеттесулерді тексерудегі тиімді эксперименттік құрал екенін көрсетеді.

Түйін сөздер: Стандартты модель, қараңғы материя, қараңғы энергия, модификацияланған гравитация, Юкава потенциалы, нейтрондық интерферометрия, қысқа-қашықтықтағы өзара әсерлесулер, шашырау амплитудасы

©Масак Б.¹, Агыл-Мусапар О.¹, Амангелдинова С.¹, Курмангалиева В.^{*1},
Сноу М.², 2026.

¹Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

²Университет Индианы, Блумингтон, США.

*E-mail: venera_baggi@mail.ru

ОГРАНИЧЕНИЯ НА ЮКАВОВСКИЕ КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ОСНОВЕ НЕЙТРОННОЙ ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ

Масак Бекарыс — PhD докторант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: bekarysbereketov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3003-6210>;

Агыл-Мусапар Оразбай — PhD докторант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,



E-mail: oagilmuzaffar@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1160-1226>;

Амангелдинова Сабина — PhD докторант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: sabinaa247@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1062-1073>;

Курмангалиева Венера — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Казахский Национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: venera_baggi@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8046-8508>;

Сноу Майкл — профессор, Университет Индианы, Блумингтон, США,

E-mail: wsnow@iu.edu, <https://orcid.org/0000-0002-8931-5513>.

Аннотация. В данной работе проведён анализ короткодействующих взаимодействий юкавовского типа на основе данных нейтронной интерферометрии. Целью исследования является проверка возможных модификаций гравитации на ангстремных масштабах и установление экспериментальных ограничений на параметры дополнительных взаимодействий. Актуальность исследования обусловлена тем, что ряд современных теоретических моделей, выходящих за рамки Стандартной модели, предполагает существование новых слабых взаимодействий, проявляющихся на малых расстояниях и вызывающих отклонения от ньютоновского закона тяготения. В рамках теоретической модели когерентного рассеяния нейтронов в кристалле исследована зависимость нормированной амплитуды рассеяния ($b(Q)/b(0)$) от передаваемого импульса. При этом учитывались основные взаимодействия, описываемые Стандартной моделью, а также дополнительная поправка юкавовского типа, рассматриваемая как возможное проявление новой физики. Полная теоретическая зависимость представлена в виде суммы вклада Стандартной модели и дополнительного взаимодействия. Сравнение теоретических расчётов с экспериментальными данными показало их хорошее согласие и отсутствие систематических отклонений. В связи с этим прямых свидетельств существования новой силы обнаружено не было, однако получены строгие ограничения на её параметры. В результате проведённого фитирования определены верхние пределы параметра αG в диапазоне характерных длин $\lambda \approx 0,1-1 \text{ \AA}$. Полученные результаты свидетельствуют о том, что в случае существования дополнительного короткодействующего взаимодействия его интенсивность должна быть существенно ниже силы гравитационного взаимодействия. Это подтверждает высокую чувствительность методов нейтронной интерферометрии на атомарных масштабах и демонстрирует их эффективность для поиска новой физики и проверки фундаментальных взаимодействий на ультракоротких расстояниях.

Ключевые слова: Стандартная модель, тёмная материя, тёмная энергия, модифицированная гравитация, потенциал Юкавы, нейтронная интерферометрия, короткодействующие взаимодействия, амплитуда рассеяния

Кіріспе. Элементар бөлшектердің Стандартты моделі электромагниттік, әлсіз және күшті өзара әсерлесулерді жоғары дәлдікпен сипаттайды. Алайда ол гравитацияның кванттық сипаттамасын қамтымайды және заманауи физиканың бірқатар іргелі мәселелеріне толық жауап бермейді. Атап айтқанда, қараңғы

материя мен қараңғы энергияның табиғаты, сондай-ақ қысқа қашықтықтардағы мүмкін болатын гравитациялық ауытқулар мәселелері ашық күйінде қалып отыр. Осыған байланысты Стандартты модельден тыс әлсіз жаңа әсерлесулерді іздеу қазіргі теориялық және эксперименттік физиканың маңызды бағыттарының бірі болып табылады (Mostepanenko and Novello, 2001; Bezerra et al., 2010).

Көптеген кеңейтілген теорияларда (Klimchitskaya and Mostepanenko, 2017) кәдімгі материя бөлшектері арасында қосымша әлсіз күштерді тудыруы мүмкін жеңіл тасымалдаушы бөлшектердің болуы болжанады. Мұндай жаңа әсерлесулер өте қысқа қашықтықтарда тиімді потенциалдың өзгеруі арқылы байқалуы мүмкін. Макроскопиялық масштабта Ньютонның кері квадраттар заңы жоғары дәлдікпен тексерілгенімен, субнанометрлік диапазонда гравитацияны тікелей өлшеу оның аса әлсіз болуына байланысты мүмкін емес. Сол себепті бұл масштабта ықтимал ауытқуларды тек жоғары дәлдікті жанама әдістер арқылы ғана зерттеуге болады (Chen et al., 2016; Masuda and Sasaki, 2009).

Осындай әдістердің бірі — мінсіз кристалдарда жүргізілетін нейтрондық интерферометриялық және дифракциялық өлшеулер. Нейтрон электрлік бейтарап бөлшек болғандықтан, электростатикалық фондық әсерлерге аз ұшырайды және зат арқылы терең ене алады. Бұл қасиеттер оны ангстремдік масштабтағы әлсіз өзара әсерлесулерді зерттеу үшін тиімді құрал етеді (Heacock et al., 2021). Нейтронның $b(Q)$ шашырау амплитудасының берілген Q импульске тәуелділігін талдау арқылы әсерлесу потенциалының кеңістіктік құрылымы жөнінде ақпарат алуға болады және Стандартты модель болжамынан мүмкін болатын ауытқулар анықталуы мүмкін.

Осы жұмыста нейтрондық интерферометрия нәтижелері негізінде ықтимал гравитациялық модификацияларға шектеу қою мүмкіндігі талданады. Теориялық модель мен эксперименттік деректерді статистикалық салыстыру арқылы қосымша әлсіз әсерлесу параметрлеріне шектеулер қойылады. Осылайша, зерттеу ангстремдік қашықтықтарда іргелі заңдарды тексеру аясын кеңейтуге бағытталған.

Зерттеу материалдары және әдістері. Нейтронның кристаллда шашырауын сипаттау үшін ең алдымен оның атомдармен әсерлесу потенциалы қарастырылады. Шашырау амплитудасы кеңістіктегі осы потенциалдың Фурье түрлендіруімен анықталатындықтан, амплитуданың берілген импульс Q -ға тәуелділігі өзара әрекеттесудің кеңістіктік құрылымын тікелей бейнелейді. Сондықтан өлшенетін $b(Q)/b(0)$ шамасының теориялық болжамнан ауытқуы жаңа физиканың белгісі болуы мүмкін. Мұнда $b(Q)$ — берілген Q импульс кезіндегі нейтронның шашырау амплитудасы, ал $b(0)$ — нөлдік импульс жағдайындағы (яғни алға бағытталған шашырау) амплитуда. Солайша $b(Q)/b(0)$ шамасы амплитуданың салыстырмалы өзгерісін сипаттайды және әсерлесу потенциалының кеңістіктік құрылымы туралы ақпарат береді. Стандартты модель аясында бұл шаманың импульске тәуелділігі толық анықталған және барлық белгілі әсерлесулерді ескереді. Егер эксперименттік деректер осы тәуелділіктен жүйелі түрде ауытқыса, бұл әсерлесу потенциалына қосымша белгісіз мүше енгізілгенін, яғни Стандартты модельден тыс жаңа өзара әрекеттесудің бар екенін көрсетуі мүмкін.

Стандартты модель шеңберінде нейтрон мен кристалл атомдарының арасындағы әсерлесу бірнеше физикалық үлестердің қосындысынан тұрады. Біріншіден, нейтрон ядромен күшті әсерлеседі. Екіншіден, нейтронның ішкі құрылымына байланысты электрондармен әсерлесудің әлсіз электромагниттік үлес бар. Үшіншіден, кристалл торының жылулық тербелістері шашырау амплитудасын әлсіретеді. Осы әсерлерді ескергенде нормаланған амплитуда келесі түрде жазылады:

$$\frac{b(Q)}{b(0)} = e^{-W} \left(1 - Z \frac{b_{ne}}{b(0)} \right) + f_e(hkl) \frac{b_{ne}}{b(0)} \quad (1)$$

Мұнда W — Дебай–Уоллер факторы, ол атомдардың жылулық қозғалысын сипаттайды; Z — атомдық номер; b_{ne} — нейтронның электрондармен шашырау амплитудасы; ал $f_e(hkl)$ — кристалдағы электрондық зарядтың кеңістіктік таралуын сипаттайтын және дифракциялық жазықтыққа тәуелді электрондық форм-фактор. Берілген Q импульс кристалл геометриясымен және Миллер индекстерімен (hkl) анықталады, сондықтан әртүрлі шағылулар әртүрлі Q мәндерін береді:

$$Q = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (2)$$

мұндағы a — кристалл торының параметрі. Осылайша, бірнеше Q нүктесін салыстыру арқылы амплитуданың қашықтық масштабына тәуелділігі зерттеледі. Бұл сипаттама Стандартты модель аясында толық анықталған және қосымша еркін параметрлерді енгізбейді. Алайда егер нейтрон мен атом арасында қосымша әлсіз әсерлесу бар болса, ол потенциалға жаңа мүше қосады. Ньютонның бүкіләлемдік тартылыс заңынан мүмкін болатын ауытқуларды сипаттаудың бірден-бір әмбебап және кеңінен қолданылатын әдісі — Юкава типті модификацияланған гравитациялық потенциалды енгізу болып табылады (Mostepanenko and Novello, 2001; Bezerra et al., 2010). Бұл әдістер нақты бір фундаменталды теорияға сүйенбейді және Стандартты модельден тыс ықтимал өзара әрекеттесулердің кең ауқымды тобын феноменологиялық әдіспен, яғни эксперименттік құбылыстарға негізделген параметрлер арқылы сипаттауға мүмкіндік береді.

Классикалық Ньютон физикасында r арақашықта орналасқан нүктелік m_1 және m_2 массалары арасындағы гравитациялық потенциал келесі түрде ие

$$V_N(r) = -G \frac{m_1 m_2}{r} \quad (3)$$

мұндағы G —гравитациялық тұрақты. Егер де табиғатта қосымша әлсіз әсерлесулер бар болатын болса, онда потенциалдық энергия аз арақашықтықта кері квадраттар заңынан ауытқуға алып келетін қосымша қосылғышқа ие болады. Осындай түзетудің ең кең таралған түрі Юкава-потенциалы түрінде жазылады:

$$V_N(r) = -G \frac{m_1 m_2}{r} \left(1 + \alpha e^{-\frac{r}{\lambda}} \right) \quad (4)$$

Бұл жердегі α параметрі ньютондық гравитациямен салыстырғандағы жаңа әсерлесудің салыстырмалы күшін сипаттайды, ал λ параметрі сол әсерлесудің әсер ету қашықтығын немесе сипаттамалық радиусын анықтайды. Физикалық тұрғыдан λ параметрі болжамды әсерлесуді тасымалдаушы бөлшектің массасымен келесідей байланысқан:

$$\lambda = \frac{\hbar}{mc} \quad (5)$$

мұндағы m - қосымша әсерлесуді қамтамасыз етуші бозонның массасы. Осылайша, Юкава-потенциалы нуклондар арасындағы жеңіл скаляр немесе векторлық бөлшектердің алмасуы нәтижесінде табиғи түрде пайда болады (Klimchitskaya and Mostepanenko, 2017). α параметрінің таңбасы әсерлесудің түрін анықтайды. $\alpha > 0$ жағдайында қосымша күш тартылыс күші болып, ал $\alpha < 0$ жағдайында тебілу күші болып табылады.

Жаңа әсерлесу күшінің әсер ету аймағы өте үлкен жағдайда, яғни $\lambda \gg r$ жағдайында Юкавалық қосылғыш шамамен тұрақты шамаға айналып ($e^{-\frac{r}{\lambda}} \approx 1$), жаңа әсерлесудің күші гравитациялық тұрақтының тиімді өзгеруіне алып келеді, яғни гравитациялық тұрақтының күшеюі немесе әлсіреуі түрінде байқалады. Ал әсерлесу күшінің әсер ету аймағы өте кіші жағдайда, яғни $\lambda \ll r$ жағдайында экспоненталық шама өте кішкентай мәнге ие болып ($e^{-\frac{r}{\lambda}} \approx 0$), жаңа әсерлесуші күш тез «өшіп қалады», яғни ол тәжірибеде байқалмайды. Осыған байланысты Юкава-потенциалын тексеруге арналған тәжірибелер λ -ның белгілі бір аймағы үшін ғана сезімтал болады. Бір әдіс микрометрді тексерсе, екіншісі нанометрді, басқасы миллиметрді, яғни λ -ның барлық аймағын бір ғана тәжірибе жаба алмайды. Әр әдіс параметрлік кеңістіктің шектеулі бөлігін ғана қамтиды.

Нейтронның шашырау амплитудасы әсерлесу потенциалының кеңістіктегі құрылымымен анықталатындықтан, потенциалға қосымша мүше енгізілсе, амплитуданың импульске тәуелділігі де өзгереді. Басқаша айтқанда, жаңа Юкава типті әсерлесу потенциалдың формасын өзгертеді, ал бұл өзгеріс Фурье түрлендіру арқылы шашырау амплитудасында көрініс табады. Борн жуықтауында амплитуда потенциалдың Фурье түрлендіруіне пропорционал болғандықтан, Юкава типті қосымша мүше Q -ға тәуелді ерекше функция береді:

$$\delta \left(\frac{b(q)}{b(0)} \right) = \alpha \frac{Q^2 \lambda^2}{1 + Q^2 \lambda^2} e^{-w} \quad (6)$$

Бұл өрнек жаңа әсерлесудің қандай жағдайда байқалуы мүмкін екенін көрсетеді. Егер $Q\lambda$ өте кіші болса, әсер әлсірейді; егер $Q\lambda$ шамамен бірге тең болса, ықпал максималды болады; ал өте үлкен мәндерде функция қанығу режиміне өтеді. Демек, эксперименттің сезімталдығы қолжетімді Q диапазонымен анықталады.

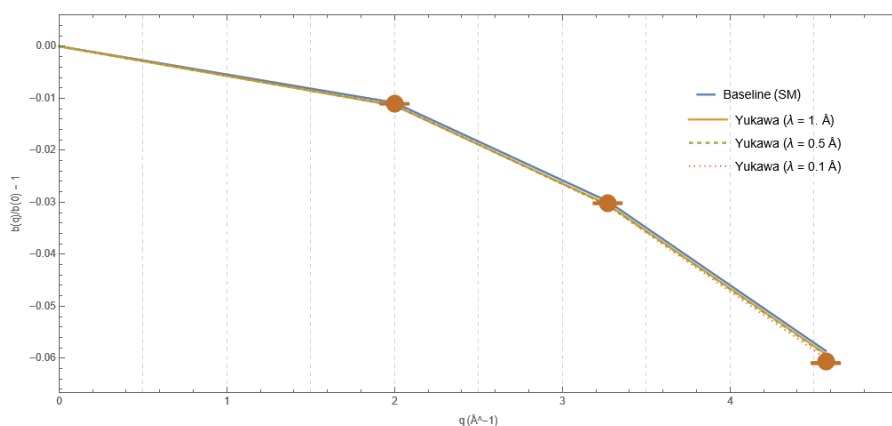
Осылайша толық теориялық тәуелділік Стандартты модель үлесі мен ықтимал Юкава түзетуінің қосындысы ретінде жазылады.

$$\frac{b(Q)}{b(0)} = e^{-W} \left(1 - Z \frac{b_{ne}}{b(0)} \right) + f_s(hkl) \frac{b_{ne}}{b(0)} \quad (7)$$

Мұндағы e^{-W} – Дебай-Уоллер факторы, атомдардың жылулық тербелістерін сипаттайды, Z – атомдық номер, $f_s(hkl)$ – электрондық форма-фактор, b_{ne} – нейтрон-электрон шашырау амплитудасы, $b(Q)$ және $b(0)$ – сәйкесінше импульс берілімі Q кезіндегі және нөлдік импульс кезіндегі шашырау амплитудалары.

Нәтижелер мен талқылаулар. Тәжірибелік деректерді талдау нейтронның кристалда шашырауын сипаттайтын теориялық модель аясында жүргізілді. Бұл модельде шашырау амплитудасының $b(Q)/b(0)$ қатынасы импульс берілісіне тәуелді түрде анықталады және нейтронның шашырауына әсер ететін негізгі белгілі физикалық факторларды ескереді. Сонымен қатар, ықтимал жаңа әсерлесулерді есепке алу үшін Юкава типті түзету енгізілді.

Осыған байланысты өлшенген $b(Q)/b(0)$ мәндері Стандартты модель және Юкава түзетуі бар теориялық қисықтармен салыстырылды. Бұл салыстырудың нәтижелері 1-суретте көрсетілген.



Сурет 1. Нормаланған $b(Q)/b(0)$ шашырау амплитудасының Q импульс берілісіне тәуелділігі және Юкава типті түзетудің ықпалы.

Суреттен көрінгендей, эксперименттік нүктелер Стандартты модель қисығына жақсы сәйкес келеді. Юкава типті түзетуді енгізу теориялық қисықтың пішінін аздап өзгертеді, алайда бұл өзгерістер эксперименттік қателіктер шегінде қалып отыр. Яғни, деректерде Стандартты модельден жүйелі ауытқу байқалмайды.

Тәжірибелік деректерде (Heacock et al., 2021) айқын ауытқу байқалмағандықтан, талдаудың негізгі мақсаты — өлшеулермен үйлесетін α_G параметрінің шекті мәндерін анықтау болып табылады. Әртүрлі λ мәндері үшін α_G параметрінің жоғарғы шектері анықталып, нәтижелері 1-кестеде келтірілген.

Кесте 1. Юкава типті потенциал үшін α_G параметрінің жоғарғы шектері.

$\lambda(\text{Å})$	α_G
1	1.8928×10^{-28}
0.5	2.8367×10^{-28}
0.1	2.4250×10^{-27}

Кестеден көрінгендей, әсер ету радиусы азайған сайын α_G параметріне қойылатын шектеулер әлсірейді. Бұл қысқа қашықтықтарда Юкава потенциалының үлесі азаюымен байланысты.

Жалпы алғанда, алынған нәтижелер $\lambda \approx 0.1-1 \text{ Å}$ диапазонында жаңа күштің айқын белгілері байқалмайтынын көрсетеді. Бұл тәсіл нейтрондық интерферометрияны ангстремдік масштабтағы ықтимал гравитациялық модификацияларды зерттеудің жанама, бірақ сезімтал құралы ретінде пайдалануға мүмкіндік береді.

Қорытынды. Бұл жұмыста нейтрондық интерферометрия деректері негізінде Юкава типті қысқа-қашықтық өзара әрекеттесулерге талдау жүргізілді. Эксперименттік нәтижелер Стандартты модель болжамдарымен сәйкес келетіні және жүйелі ауытқулар байқалмайтыны көрсетілді.

Жүргізілген сәйкестендіру нәтижесінде $\lambda \approx 0.1-1 \text{ Å}$ диапазонында α_G параметріне жоғарғы шектеулер қойылды. Алынған нәтижелер жаңа әсерлесудің ықтимал күші гравитациямен салыстырғанда өте әлсіз болуы тиіс екенін көрсетеді.

Нейтрондық интерферометрия атомаралық масштабтарда жоғары сезімтал әдіс болып табылады және қысқа-қашықтықтағы ықтимал жаңа физиканы зерттеуде тиімді құрал ретінде қарастырылады.

References

Banishev A.A., Wagner J., Emig T., Zandi R., Mohideen U. (2013) Demonstration of angle-dependent Casimir force. *Physical Review Letters*. – Vol. 110. – P. 250403. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.250403> (in Eng.).

Banishev A.A., Wagner J., Emig T., Zandi R., Mohideen U. (2014) Angular dependence of the Casimir force. *Physical Review B*. – Vol. 89. – P. 235436. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.235436> (in Eng.).

Bezerra V.B., Klimchitskaya G.L., Mostepanenko V.M., Romero C. (2010) Advance and prospects in constraining Yukawa-type corrections to Newtonian gravity. *Physical Review D*. – Vol. 81. – P. 055003. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.81.055003> (in Eng.).

Bimonte G., López D., Decca R.S. (2016) Isoelectronic determination of the thermal Casimir force. *Physical Review B*. – Vol. 93. – P. 184434. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.184434> (in Eng.).

Chen Y.J., Tham W.K., Krause D.E., López D., Fischbach E., Decca R.S. (2016) Stronger limits on Yukawa interactions. *Physical Review Letters*. – Vol. 116. – P. 221102. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.221102> (in Eng.).

Chiu H.C., Klimchitskaya G.L., Marachevsky V.N., Mostepanenko V.M., Mohideen U. (2009) Demonstration of the asymmetric lateral Casimir force. *Physical Review B*. – Vol. 80. – P. 121402. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.121402> (in Eng.).

Chiu H.C., Klimchitskaya G.L., Marachevsky V.N., Mostepanenko V.M., Mohideen U. (2010) Lateral Casimir force between sinusoidally corrugated surfaces. *Physical Review B*. – Vol. 81. – P. 115417. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.115417> (in Eng.).

Decca R.S., Fischbach E., Klimchitskaya G.L., Krause D.E., López D., Mostepanenko V.M. (2003) Improved tests of extra-dimensional physics. *Physical Review D*. – Vol. 68. – P. 116003. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.68.116003> (in Eng.).

Decca R.S., López D., Chan H.B., Fischbach E., Krause D.E., Jamell C.R. (2005) Constraining new forces using isoelectronic technique. *Physical Review Letters*. – Vol. 94. – P. 240401. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.240401> (in Eng.).

Decca R.S., López D., Fischbach E., Klimchitskaya G.L., Krause D.E., Mostepanenko V.M. (2005) Precise comparison of theory and experiment for the Casimir force. *Annals of Physics*. – Vol. 318. – P. 37–80. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aop.2005.03.003> (in Eng.).

Decca R.S., López D., Fischbach E., Klimchitskaya G.L., Krause D.E., Mostepanenko V.M. (2007) Tests of new physics from Casimir pressure measurements. *Physical Review D*. – Vol. 75. – P. 077101. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.75.077101> (in Eng.).

Decca R.S., López D., Fischbach E., Klimchitskaya G.L., Krause D.E., Mostepanenko V.M. (2007) Constraints on light particles from Casimir effect. *European Physical Journal C*. – Vol. 51. – P. 963–975. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-007-0324-4> (in Eng.).

Ederth T. (2000) Template-stripped gold surfaces with rms roughness suitable for force measurements. *Physical Review A*. – Vol. 62. – P. 062104. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.62.062104> (in Eng.).

Heacock B., Fujiie T., Haun R.W. et al. (2021) Pendellösung interferometry probes neutron charge radius. *Science*. – Vol. 373. – P. 1239–1243. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.abc2794> (in Eng.).

Klimchitskaya G.L., Mostepanenko V.M. (2017) Constraints on axionlike particles and non-Newtonian gravity. *Physical Review D*. – Vol. 95. – P. 123013. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.95.123013> (in Eng.).

Masuda M., Sasaki M. (2009) Limits on nonstandard forces. *Physical Review Letters*. – Vol. 102. – P. 171101. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.171101> (in Eng.).

Mostepanenko V.M., Novello M. (2001) Constraints on non-Newtonian gravity from the Casimir force measurements between two crossed cylinders. *Physical Review D*. – Vol. 63. – P. 115003. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.63.115003> (in Eng.).

Sedighi M., Svetovoy V.B., Broer W.H., Palasantzas G. (2014) Casimir forces from silicon carbide surfaces. *Physical Review B*. – Vol. 89. – P. 195440. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.195440> (in Eng.).

Sedighi M., Svetovoy V.B., Palasantzas G. (2016) Casimir force measurements from silicon carbide surfaces. *Physical Review B*. – Vol. 93. – P. 085434. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.085434> (in Eng.).

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

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

UDC: 539.23
IRSTI: 29.19.16

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

¹Satbayev university, Almaty, Kazakhstan;

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

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

TIN-BASED PEROVSKITES

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

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

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



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

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

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

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

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

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

²ТОО Физика-Техникалық Институт, Алматы, Қазақстан.

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

ҚАЛАЙЫ НЕГІЗІНДЕГІ ПЕРОВСКИТТЕР

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ПЕРОВСКИТЫ НА ОСНОВЕ ОЛОВА

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Осы мақсатқа сәйкес келесі зерттеу мақсаттары анықталды:

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

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

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

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

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

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

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

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

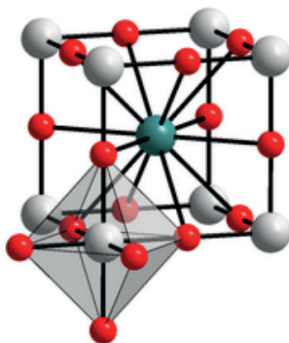
9. $\text{Sn}^{2+} \rightarrow \text{Sn}^{4+}$ тотығуын және ылғал мен оттегінің әсерін қоса алғанда, қалайы негізіндегі перовскиттердің тұрақтылығына әсер ететін негізгі ыдырау механизмдерін жүйелеу;

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

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

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

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



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

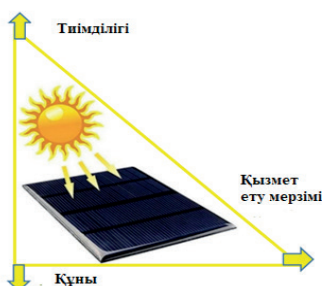
Бастапқыда перовскиттің кристалдық құрылымы кубтық болып саналды, бұл бірнеше жүз химиялық қосылыстарға тән перовскиттің құрылымдық түрін анықтауға негіз болды. Дегенмен, кейінірек $CaTiO_3$ құрылымы идеалды кубтық түрінен сәл ауытқып кететіні анықталды: бөлме температурасында ол орторомбтық, R_{pm}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



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

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

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

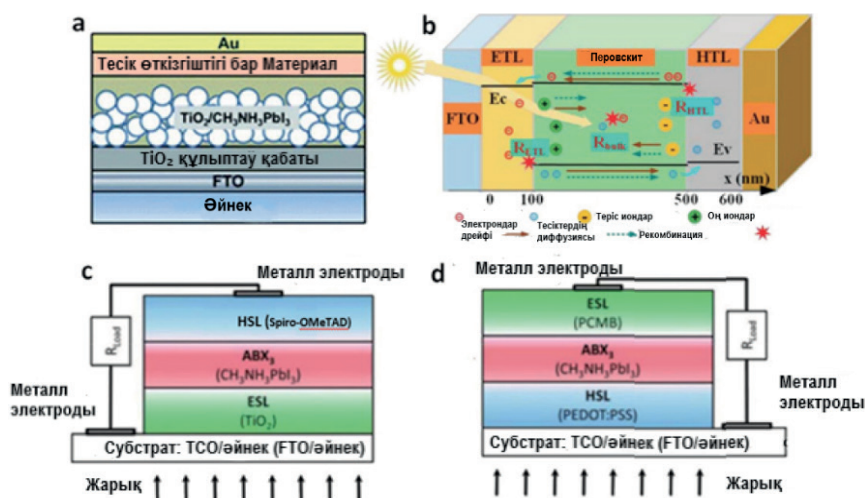


Сурет 3. Күн элементтері үшін «алтын үшбұрыш».

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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



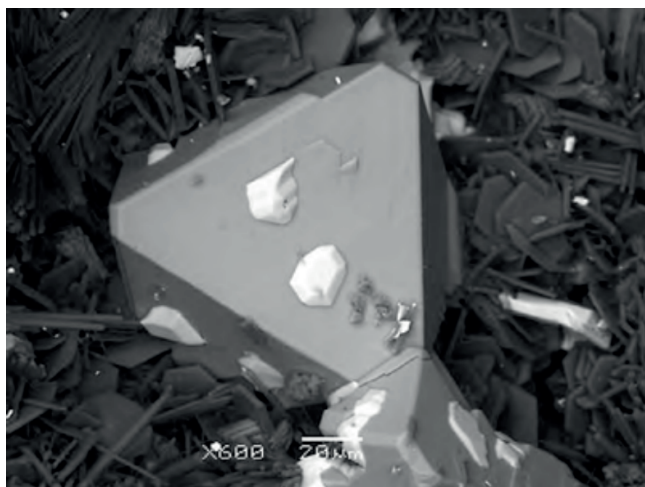
Сурет 5. Қорғасынның (Pb) адам ағзасының мүшелеріне ықтимал токсикологиялық әсері.

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

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

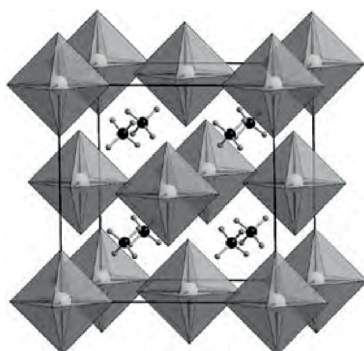
Қалайы негізіндегі перовскиттер. Перовскитке ұқсас құрылымы бар табиғи түрде кездесетін қалайы негізіндегі минерал - паницит, химиялық формуласы $(NH_4)_2SnCl_6$ болатын аммоний гексахлорстанаты(IV). (Demartin et al., 2006) бұл

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



Сурет 6. Алуנית үстіндегі паничиит кристалдарының сканерлеуші электрондық микрофотографиясы.

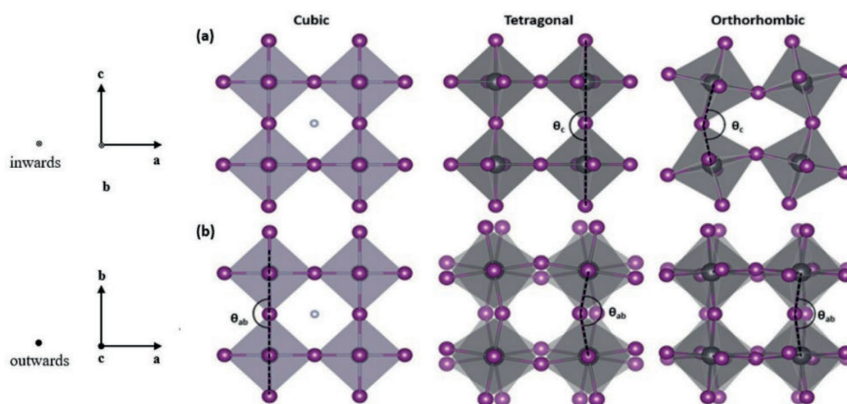
Паничиит кубтық жүйеге, $Fm\bar{3}m$ кеңістіктік тобына жатады (№ 225), $Z = 4$; Бірлік ұяшық параметрі $a = 10.064(1) \text{ \AA}$, ал бірлік ұяшық көлемі $V = 1019.4(2) \text{ \AA}^3$. Октаэдрлік SnCl_6^{2+} ионында алты эквивалентті $\text{Sn}-\text{Cl}$ арақашықтығы $2.429(1) \text{ \AA}$, ал $\text{Cl}-\text{N}$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



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

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

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



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

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

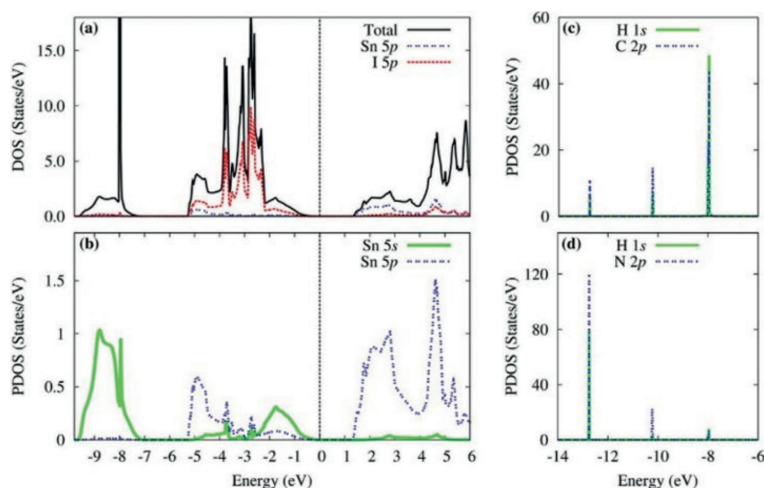
моноклиникалық құрылымға қосымша фазалық ауысу байқалады. Сонымен қатар, Шуэллер және оның әріптестері бөлме температурасынан салқындаған кезде 225-250 К температура диапазонында кубтық $Pm3m$ фазасынан тетрагональды $P4/mbm$ фазасына бірінші фазалық ауысуды анықтады (Schueller et al., 2018). Кейінгі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

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

Электрондық қасиеттер. Оптоэлектрондық құрылғыларда қалайы негізіндегі

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

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



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

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

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

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

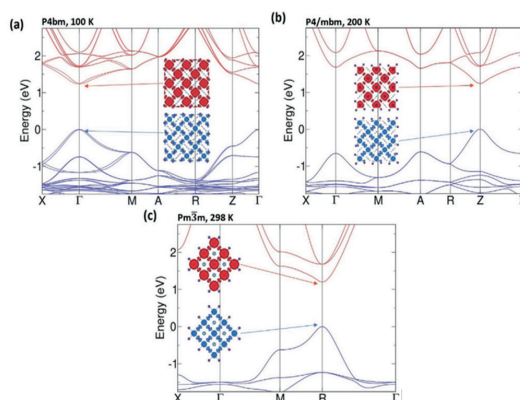
Кесте 1. MASnI_3 үшін үш түрлі кристаллографиялық бағыт бойымен есептелген тесіктер мен электрондардың тиімді массалары электрон массасына m_0 қатысты түрде көрсетілген (Feng et al., 2014).

Тиімді массалар	Кристаллографиялық бағыттар		
	[100]	[010]	[001]
m_E^*	3.74	0.81	5.77
m_h^*	0.59	1.14	0.53

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

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

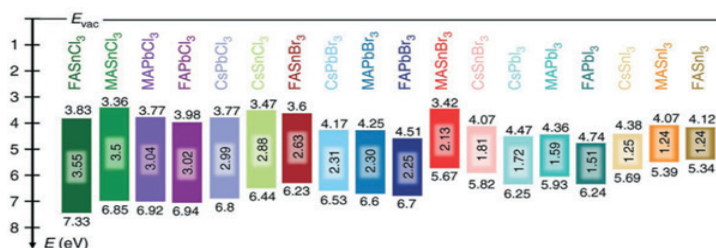
VBM маңында жолақ дегенерацияланбаған және оның дисперсиясы изотропты; сондықтан тек бір тесіктің тиімді массасы алынды. 0,069 төмен тиімді тесік массасы шамамен $585 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ деп бағаланған өте жоғары тесіктің қозғалғыштығын көрсетеді. Спин-орбиталық байланыс болмаған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

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

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

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

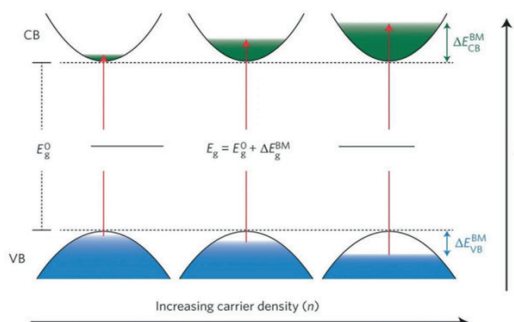
галогендерді немесе В учаскесіндегі иондарды ауыстыру айтарлықтай өзгерістерге әкеледі (Huang et al., 2013). Бұл қосылыстарда І-ді Вг-мен ауыстыру тыйым салынған аймақты 1,3-тен 2,4 эВ-қа дейін біркелкі реттеуге мүмкіндік береді, бұл бір түйіспелі және тандемді күн батареялары үшін тиімді. Нагана және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



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

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

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



Сурет 12. Берштейн–Мосс эффектісінің сызбалық бейнесі.

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

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

References

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 92–102

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.439>

UDC: 678.686
IRSTI: 44.41.35

©Nurtazina A.S., Zhubaev A.K., 2026.

Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan.
E-mail: Nurtazina_83@mail.ru

STUDY OF THE EFFECT OF HIGHLY DISPERSED OCHRE ON THE KINETIC CHARACTERISTICS OF EPOXY COMPOSITES

Nurtazina Ainur — Master of Physics, Senior Lecturer, Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan, E-mail: Nurtazina_83@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0009-4245-0951>;

Zhubaev Abzal — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Aktobe Regional University named after K. Zhubanov, Aktobe, Kazakhstan,
E-mail: mosslab.kz@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-7148-9403>.

Abstract. This study comprehensively investigated the influence of plasticizers (DBP and ORPP) and the mineral filler ochre on the structural and physicochemical properties of epoxy composites. The results demonstrated that the introduced components do not disrupt the structure of the polymer matrix but instead enable the targeted modification of its properties. FTIR spectroscopy analysis revealed that the interactions between the components occur mainly through hydrogen bonding, while the structural stability of the system is maintained. The use of oligoresorcinol phenyl phosphate (ORPP), a halogen-free oligomeric flame retardant, together with dibutyl phthalate (DBP) as a plasticizer for epoxy polymers, is an effective approach for producing compositions with improved curing kinetics, enhanced flame resistance, and increased flexibility and mechanical strength. The effectiveness of using ochre as an inexpensive and active filler was confirmed at a loading of 30 wt. parts for ORPP-containing systems and 10–50 wt. parts for DBP-containing systems, resulting in improved kinetic characteristics and a higher degree of cure. The incorporation of ochre into the epoxy composite reduced the gelation time of the ORPP-containing system from 50 to 10 minutes and the curing time from 56 to 14 minutes. This effect is attributed to an increase in the maximum curing temperature from 104°C to 162°C. For the DBP-containing system, the

gelation time decreased slightly from 50 to 49 minutes, whereas the curing time increased from 56 to 65 minutes. This behavior is associated with an increase in the maximum curing temperature to 142°C. Furthermore, a comparative analysis of thermally treated and untreated composites showed that the degree of cure increased from 96% to 99.4% for the ORPP–ochre system (30 wt. parts) and from 94% to 99.2% for the DBP–ochre system (50 wt. parts). Therefore, selecting an optimal degree of cure is a crucial factor in ensuring the desired performance characteristics of epoxy systems. The obtained results provide opportunities for developing new materials with high flame resistance, improved strength, and enhanced flexibility.

Keywords: plasticizer, ORFF, DBF, ochre powder, IS spectroscopy, degree of curing, maximum curing temperature

For citations: Nurtazina A.S., Zhubaev A.K. Study of the Effect of Highly Dispersed Ochre on the Kinetic Characteristics of Epoxy Composites. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 92–102. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.439>

©Нуртазина А.С., Жубаев А.К., 2026.

Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан.

E-mail: Nurtazina_83@mail.ru

ДИСПЕРСТІЛІГІ ЖОҒАРЫ ОХРАНЫҢ ЭПОКСИДТІ КОМПОЗИТТЕРДІҢ КИНЕТИКАЛЫҚ СИПАТТАМАЛАРЫНА ЫҚПАЛЫН ЗЕРТТЕУ

Нуртазина Айнур — физика магистрі, аға оқытушы, Қ.Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан, E-mail: Nurtazina_83@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0009-4245-0951>;

Жубаев Абзал — физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, Қ.Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан, E-mail: mosslab.kz@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-7148-9403>.

Аннотация. Зерттелу барысында эпоксидті композиттердің құрылымдық және физика-химиялық қасиеттеріне пластификаторлар (ДБФ, ОРФФ) мен минералды толтырғыш – охраның әсері кешенді түрде зерттелді. Зерттеу нәтижелері енгізілген компоненттердің полимер матрицасының құрылымын бұзбай, керісінше оның қасиеттерін мақсатты түрде өзгертуге мүмкіндік беретіндігі дәлелденді. ИҚ-спектроскопия талдауы компоненттер арасындағы өзара әрекеттесулердің негізінен сутектік байланыстар арқылы жүретінін және жүйенің құрылымдық тұрақтылығы сақталатыныны байқалды.

Модификациялаушы қоспалар ретінде соңғы олигомерлі галогенсіз антипирен қасиеті бар олиго резорцинфенилфосфатты (ОРФФ) және дибутилфталат (ДБФ) эпоксидті полимер үшін пластификатор ретінде қолдану кинетикалық қасиеттері жақсартылған, отқа төзімділігі жоғары және жүйеге икемділік, беріктік қасиетін беретін композициялар алудың тиімді тәсілі болып табылады. ОРФФ-ға охраны (30 массалық үлес мөлшерінде), ал ДБФ-ке (10, 50 массалық үлес мөлшерінде) эпоксидті полимерге арзан әрі белсенді толтырғыш ретінде қолданудың тиімділігі дәлелденді, ол кинетикалық қасиеттерін және қату дәрежесін жақсартады. Охраны эпоксидті композит құрамына енгізу температураның уақытқа тәуелділігі бойынша ОРФФ үшін гель түзілу уақыты (50 минуттан 10 минутқа дейін) қысқаруы байқалды. Қату уақыты (56 минуттан 14 минутқа дейін) қысқарғанын байқаймыз. Бұл құбылыс қатайту процесінің максимал температурасының (104°C-тан 162°C-қа) дейін жоғарылауымен түсіндіріледі. Ал ДБФ үшін (50 минуттан 49 минутқа дейін) қысқаруы байқалды. Қату уақыты (56 минуттан 65 минутқа дейін) ұзарғандығын байқаймыз. Бұл құбылыс қатайту процесінің максимал температурасының (142°C-қа) дейін жоғарылауымен түсіндіріледі. Сонымен қатар, салыстырмалы түрде термиядан өңделген және өңделмеген композиттердің қату дәрежелері ОРФФ-ға охраны (30 массалық үлес мөлшерінде) 96%-99,4%-ға өсті, ал ДБФ-ке (50 массалық үлес мөлшерінде) 94%-99,2%-ға өсті. Сондықтан эпоксидті жүйелер үшін қату дәрежесінің оңтайлы мәнін таңдау материалдың эксплуатациялық сипаттамаларын қамтамасыз етудің маңызды шарты болып табылады. Зерттеу нәтижелері отқа төзімді және беріктік, икемділігі жоғары жаңа материалдарды алуға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: пластификатор, ОРФФ, ДБФ, охра ұнтағы, ИК спектрі, қату дәрежесі, максималды қату температурасы

©Нуртазина А.С., Жубаев А.К., 2026.

Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова,

Актобе, Казахстан.

E-mail: Nurtazina_83@mail.ru.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВЫСОКОДИСПЕРСНОЙ ОХРЫ НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИТОВ

Нуртазина Айну — магистр физики, старший преподаватель, Актюбинского регионального университета имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан,

E-mail: Nurtazina_83@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0009-4245-0951>;

Жубаев Абзал — кандидат физико-математических наук, доцент, Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан,

E-mail: mosslab.kz@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-7148-9403>.

Аннотация. В работе проведено комплексное исследование влияния пластификаторов - дибутилфталата (ДБФ) и олигорезорцинфенилфосфата (ОРФФ), а также минерального наполнителя - высокодисперсной охры -

на структурные и физико-химические свойства эпоксидных композитов. Установлено, что введение модифицирующих компонентов не нарушает структуру полимерной матрицы, а позволяет целенаправленно регулировать её свойства. Результаты ИК-спектроскопического анализа показали, что взаимодействие между компонентами осуществляется преимущественно за счёт водородных связей, при этом структурная стабильность системы сохраняется. Показано, что использование олигорезорцинфенилфосфата, обладающего свойствами безгаложенного олигомерного антипирена, а также дибутилфталата в качестве пластификатора является эффективным способом получения эпоксидных композиций с улучшенными кинетическими характеристиками, повышенной огнестойкостью, высокой прочностью и гибкостью. Установлена эффективность применения охры в количестве 30 масс. ч. для систем с ОРФФ и 10–50 масс. ч. для систем с ДБФ в качестве доступного и активного наполнителя, способствующего повышению степени отверждения и улучшению кинетических параметров процесса. Введение охры в систему с ОРФФ привело к сокращению времени гелеобразования с 50 до 10 мин и времени полного отверждения с 56 до 14 мин, что обусловлено повышением максимальной температуры отверждения со 104 до 162 °С. Для системы с ДБФ время гелеобразования уменьшилось с 50 до 49 мин, тогда как продолжительность отверждения увеличилась с 56 до 65 мин, а максимальная температура процесса возросла до 142 °С. Сравнительный анализ термообработанных и необработанных образцов показал увеличение степени отверждения с 96 до 99,4 % для композиции ОРФФ + охра (30 масс. ч.) и с 94 до 99,2 % для композиции ДБФ + охра (50 масс. ч.). Полученные результаты подтверждают, что выбор оптимальных режимов отверждения является важным условием обеспечения высоких эксплуатационных характеристик эпоксидных материалов. Разработанные композиции могут быть использованы для создания новых материалов с повышенной огнестойкостью, прочностью и эластичностью.

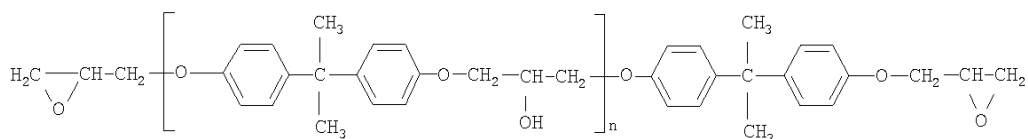
Ключевые слова: ОРФФ, ДБФ, порошок охры, ИК-спектр, степень отверждения, максимальная температура отверждения

Кіріспе. Қазіргі уақытта жоғары механикалық беріктігімен, химиялық әсерлерге төзімділігімен және төмен салмағымен ерекшеленетін полимерлі композициялық материалдарға деген сұраныс айтарлықтай артып отыр. Осындай материалдар арасында эпоксидті шайырлар негізінде алынатын композиттер маңызды орын алады. Олар машина жасау, құрылыс индустриясы, авиациялық техника және қорғаныс салаларында кеңінен қолданыс табуда. Эпоксидті жүйелердің химиялық қасиеттері олардың молекулалық құрылымына, қолданылатын қатайтқыштың түріне, сондай-ақ құрамына енгізілетін модификаторлар мен толтырғыштардың ерекшеліктеріне тікелей тәуелді. Осы себепті эпоксидті композициялардың қатаюу процесінің кинетикасын зерттеу олардың технологиялық параметрлері мен эксплуатациялық қасиеттерін тиімді басқаруда аса маңызды болып табылады. Өндіріс пен техниканың түрлі салаларында эпоксидті композиттер жоғары механикалық беріктілігі және химиялық тұрақтылығының арқасында көптеген

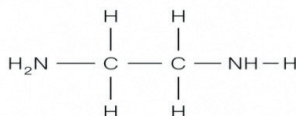
салаларда кеңінен қолданылады. Алайда олардың табиғи қаттылығы, сондай-ақ сыртқы ортаға бейімделу әсерінің шектеулігі материал қасиетін жақсартуды қажет етеді (Chen, 2021).

Осыған байланысты, эпоксидті композиттерді модификациялау, атап айтқанда тиімді пластификаторлар мен минералды толтырғышты енгізу олардың құрылымдық және физика-химиялық қасиеттерін жақсартудың өзекті бағыты болып табылады. Дисперсті минералдарды енгізу материал құнын төмендетіп қана қоймай, сапасын арттыруға мүмкіндік береді. Зерттеу барысында модификациялаушы қоспа ретінде екі түрлі пластификатор және дисперсті толтырғыш енгізіліп, жаңа эпоксидті композит алу барысында әртүрлі әдістермен олардың қасиеттері зерттелінді (Chen, 2021; Chursova, 2020).

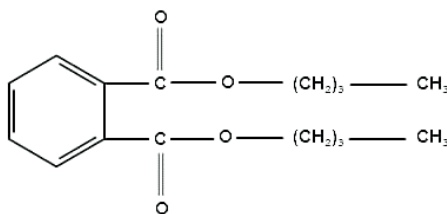
Материалдар мен әдістер. Байланыстырушы: эпоксидті дианды шайыр ЭД-20 (1 сурет). Қатайтқыш: полиэтиленполиамин ПЭПА (2 сурет). Модификациялаушы қоспалар: 1. Дибутилфталат ДБФ (3 сурет), 2. Олиго резорцинфенилфосфат ОРФФ (4 сурет). Толтырғыш: Охра



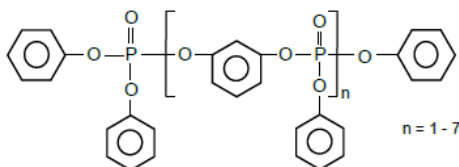
Сурет 1. ЭД-20 Эпоксидті дианды шайырдың химиялық формуласы.



Сурет 2. ПЭПА химиялық формуласы.



Сурет 3. Дибутилфталат (ДБФ) пластификаторы (ГОСТ 8728-88).



Сурет 4. Олиго резорцинфенилфосфат (ОРФФ) - олигомерлі галогенсіз антипирен қасиеті бар пластификатор.

Охра – табиғи дисперсті минералды толтырғыш болып табылады және негізінен темір оксидтерінен (көбінесе Fe_2O_3) тұрады. Ол табиғатта кең таралған, түсі сарыдан қызыл-қоңырға дейін өзгеріп отыратын ұнтақ тәрізді материал. Охраның түсі оның құрамындағы кремний және темір қосылыстарының түріне және мөлшеріне байланысты анықталады. Табиғи шығу тегі мен қарапайым өңдеу технологиясының арқасында ол арзан әрі қолжетімді материалдардың қатарына жатады (Ақтөбе облысы, Қазақстан) (Karataeva, 2024; Li, 2022).

Рентген флуоресцентті анализ S6 Jaguar (Bruker) қондырғысында зерттелген охраның химиялық құрамы пайыздық үлеспен көрсетілген (1-кесте).

Кесте 1. Охраның химиялық құрамы.

Компонент	SiO_2	Fe_2O_3	Al_2O_3	K_2O	TiO_2	MgO	CaO	P_2O_5
Концентрация, %	56.80	21.31	18.22	1.49	0.78	0.63	0.53	0.24

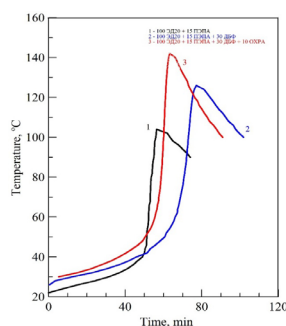
Бұл зерттеу жұмысында мынандай әдістер қолданылды:

1. Композитерді дайындау барысында екі түрлі модификациялаушы қоспалар мен дисперсті минералды толтырғыш охра алынып, (100 ЭД-20+15 ПЭПА+30 ОРФФ+10,30,50 охра), (100 ЭД-20+15 ПЭПА+30 ДБФ+10,30,50 охра) термометрмен және секундомердің көмегімен температураның уақыт бойынша өзгерісінің мәндерін алынды. Гель түзілу, қату уақыты, максималды қату температурасы анықталды.

2. Эпоксидті матрица мен дисперсті минерал арасындағы химиялық өзара әрекеттесулердің сипатын анықтау үшін инфрақызыл спектроскопия әдісі қолданылды. Үлгілер S6 Jaguar (Bruker ALPNA II) типті ИҚ-спектрометрде $4000\text{--}400\text{ см}^{-1}$ диапазонда зерттелді.

3. Эпоксидті композиттердің қату дәрежесін анықтау.

Нәтижелер мен талқылау. Жүргізілген зерттеулер нәтижесі композициялық материалдың да осы заңдылықтарға сәйкес жүретінін көрсетті (5-сурет). Бұл жағдайда гель түзілу уақытының 50 минуттан 49 минутқа дейін қысқаруы байқалды. Ал толық қатаю уақыты 56 минуттан 65 минутқа дейін ұзарғаны анықталды (2-кесте). Мұндай өзгеріс қатаю процесі кезінде максимал температураның 142°C -қа дейін көтерілуімен түсіндіріледі (Kumar, 2022).

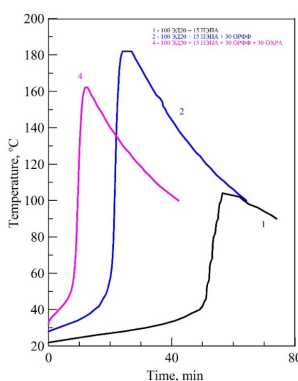


Сурет 5. Эпоксидті олигомердің ДБФ қосылған қатаю процесі кезіндегі температурасының өзгеруі.

Кесте 2. Композицияланған эпоксидті материалдардың қатаю көрсеткіштері.

Композиция құрамы, мас. үлес. (қату, 15 мас. үлес. ПЭПА)	Гель түзілу уақыты, τ, мин	Қату уақыты, τ, мин	Қату температурасы, °C
100 ЭД-20+15ПЭПА	50	56	104
100 ЭД-20+15ПЭПА+30ДБФ	52	78	128
100 ЭД-20+15ПЭПА+30ДБФ+10ОХРА	49	65	142

Дәл осылай екінші модификациялаушы қоспа ретінде ОРФФ алынды. Композитті дайындау барысында 100ЭД-20+15ПЭПА+30ОРФФ+10,30,50охра болатын қосылыстарды араластырып, термометрмен және секундомердің көмегімен температураның уақыт бойынша өзгерісінің мәндерін алынды. Төменде температураның уақытқа тәуелділік графигі көрсетілді (6-сурет).



Сурет 6. Қатаю процесі кезінде эпоксидті олигомер ОРФФ қосылған кездегі температурасының өзгерісі.

Кесте 3. Композицияланған эпоксидті материалдардың қатаю көрсеткіштері.

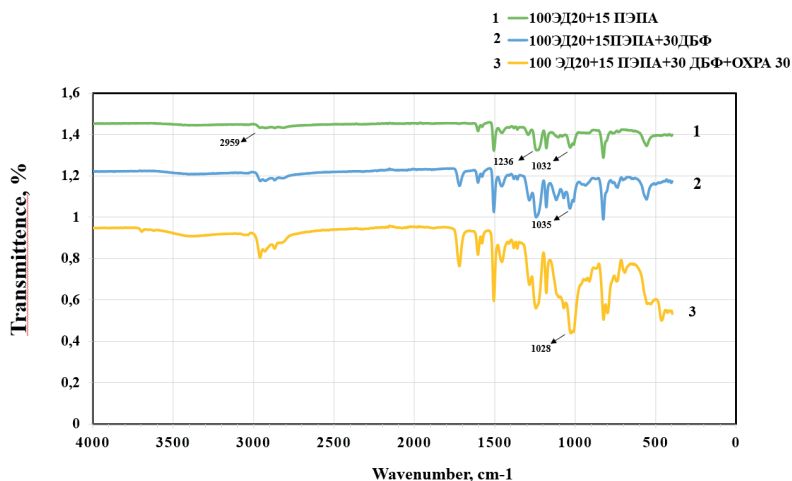
Композиция құрамы, мас. үлес. (қату, 15 мас. үлес. ПЭПА)	Гель түзілу уақыты, τ, мин	Қату уақыты, τ, мин	Қату температурасы, °C
100 ЭД-20+15ПЭПА	50	56	104
100 ЭД-20+15ПЭПА+30ОРФФ	18	27	182
100 ЭД-20+15ПЭПА+30ОРФФ+30ОХРА	10	14	162

Зерттеу нәтижелері композициялық материалдың берілген заңдылықтарға сәйкес өзгеретінін көрсетті (3-кесте). Талдау барысында гель түзілу кезеңінің айтарлықтай өзгеріп, 50 минуттан 10 минутқа дейін қысқарғаны анықталды. Сонымен қатар жүйенің толық қатаю уақыты да артып, 56 минуттан 14 минутқа дейін төмендегені байқалды. Бұл өзгерістер қатаю процесі кезінде бөлінетін жылу мөлшерінің артуымен байланысты, нәтижесінде температураның ең жоғарғы мәні 104°C-тан 162°C-қа дейін көтерілді. Қорытындылай келе, ДБФ және ОРФФ негізіндегі пластификаторлардың мөлшерлерін салыстыру нәтижесінде ДБФ үшін ең тиімді көрсеткіш 10 массалық үлесте байқалғаны анықталды. (Li, 2022; Zhou, 2023).

ОРФФ негізіндегі пластификатор қолданылған жүйеде ең жоғары тиімділік

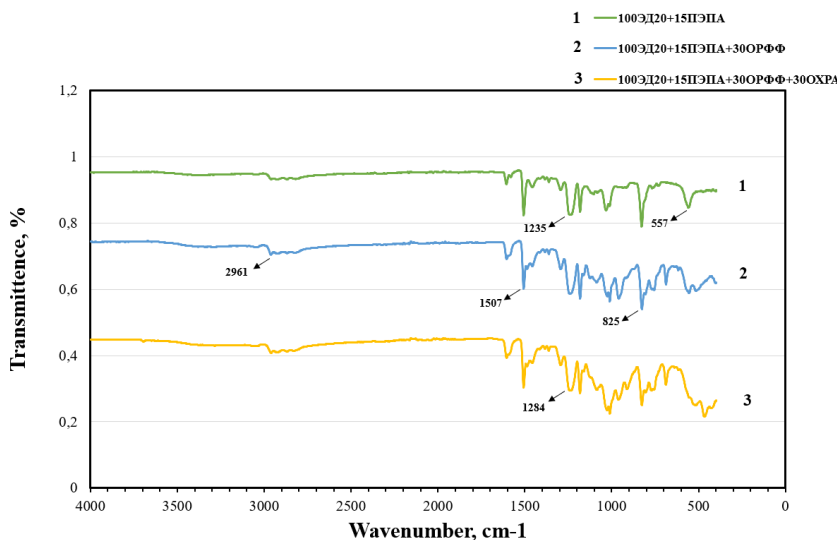
30 массалық үлесте анықталды, мұнда гель түзілу және қатаюу уақыты едәуір қысқарып, ал температуралық көрсеткіштердің артқаны байқалды. Осылайша, ДБФ үшін оңтайлы мөлшер 10 массалық үлес болса, ОРФФ үшін 30 массалық үлес ең тиімді құрам болып табылады (Li, 2020; Tlekova, 2024; Zhao, 2023).

ЭД-20 негізіндегі эпоксидті композициялардың ИҚ-спектрлері бастапқы эпоксидті матрицаға тән негізгі жұтылу жолақтарының сақталуымен сипатталады, бұл жүйеге ДБФ пластификаторы мен охра толтырғышын енгізу барысында полимер құрылымының химиялық деструкцияға ұшырамайтынын көрсетеді. 2959 см^{-1} аймағындағы жұтылу жолағы алифатты С–Н байланыстарының валенттік тербелістеріне сәйкес келеді. 1500–1600 см^{-1} аралығында байқалатын жолақтар ароматты сақиналардың тербелістерімен және эпоксидті шайыр құрылымындағы бензол ядросының тербелістерімен түсіндіріледі. 1236 см^{-1} және 1032 см^{-1} аймағындағы жұтылу максимумдары С–О–С эфирлік байланыстарының тербелістеріне тән, бұл эпоксидті торлы құрылымның сақталғанын дәлелдейді (Nurtazina, 2024; Rahman, 2023).



Сурет 7. ЭД-20, ПЭПА, ДБФ, ОХРА құрамдарының ИҚ-спектрлері.

ДБФ енгізілген үлгіде бұл жолақтардың қарқындылығының артуы пластификатор молекулаларының полимер тізбектері арасында орналасып, жүйенің икемділігін арттыратынын көрсетеді. Охра қосылған композицияда 1028 см^{-1} аймағындағы жұтылу жолағының күшеюі минералдық толтырғыш құрамындағы Si–O және металл–O байланыстарының тербелістерімен байланысты. Бұл эпоксидті матрица мен толтырғыш бөлшектері арасында физика-химиялық өзара әрекеттесулердің жүретінін және компоненттердің жақсы үйлесімділігін дәлелдейді (7-сурет).



Сурет 8. ЭД-20, ПЭПА, ОРФФ және ОХРА қосылыстарының ИҚ спектрлері.

ОРФФ енгізілген үлгіде спектрлік жолақтардың қарқындылығының өзгеруі пластификатор молекулаларының эпоксидті тор құрылымымен молекулааралық әрекеттесетінін және материалдың ішкі кернеуін төмендетіп, икемділігін арттыратынын көрсетеді. Охра қосылған жүйеде төмен жиілікті және 1000–1100 см^{-1} аралығындағы жолақтардың күшеюі толтырғыш бөлшектері мен полимер матрицасы арасында химиялық байланыстардың қалыптасуын сипаттайды.

Жалпы алғанда, ИҚ-спектрлік талдау ЭД-20 негізіндегі эпоксидті жүйеге ОРФФ пен охра енгізу барысында полимер матрицасының құрылымдық тұтастығы сақталатынын көрсетті (8-сурет). Сонымен қатар, жаңа компоненттер құрылымды бұзбай, оны қайта ұйымдастыру арқылы жүйеге енетіні байқалды. 1235–1284 см^{-1} аймағындағы спектрлік өзгерістер C–O–C, P–O–C және P=O байланыстарының болуымен түсіндірілсе, 1507 және 1604 см^{-1} маңындағы жолақтар ОРФФ құрамындағы ароматты фрагменттердің жүйеге енгенін дәлелдейді (Rahman, 2023; Sun, 2024).

Композиттердің қату дәрежесін анықтау термиялық өңдеуге дейін және кейін термиялық пеште 90°C температурада 1 сағат уақыт ішінде қыздырылды. Тәжірибе барысында екі түрлі пластификатор (ОРФФ, ДБФ) үшін охраның (10,30,50) массалық үлестері алынды. Салыстырмалы түрде рационалды нәтижені ОРФФ қолданылған жүйеде — 30 массалық үлес, ал ДБФ қолданылған жүйеде охраның тиімді мөлшері 50 массалық үлес екені анықталды (4-кестеде келтірілген) (Saba, 2021; Wang, 2021; Zhang, 2020).

Кесте 4. Эпоксидті композиттердің қату дәрежесі.

Композиция құрамы, мас.ү. ПЭПА мен қатырылған	Қату дәрежесі, X, %	Термиялық өңдеуден кейінгі қату дәрежесі, X, %
100 ЭД20+15ПЭПА	98,73	98,73
100 ЭД20+15ПЭПА+30ОРФФ	91,7	93
100 ЭД20+15ПЭПА+30ОРФФ+30ОХРА	96	99,4
100 ЭД20+15ПЭПА+30ДБФ	94	97
100 ЭД20+15ПЭПА+30ДБФ+50ОХРА	94	99,2

Қорытынды. Жұмыс барысында пластификаторлардың түрі мен мөлшері катаю процесінің кинетикасына және композиттің қасиеттеріне айтарлықтай әсер ететіні анықталды. ДБФ негізінен физикалық пластификатор ретінде әсер етіп, катаю процесін баяулатса, ОРФФ химиялық белсенділігі жоғары компонент ретінде құрылым түзілуін жеделдетеді. Зерттеу нәтижесінде тиімді құрамдар анықталып, ДБФ үшін 10 массалық үлес, ал ОРФФ үшін 30 массалық үлес ең оңтайлы екені дәлелденді.

Сонымен қатар, эпоксидті композиттердің құрылымдық және физика-химиялық қасиеттеріне пластификаторлар (ОРФФ, ДБФ) мен минералды толтырғыш – охранның әсері кешенді түрде зерттелді. Зерттеу нәтижелері көрсеткендей, енгізілген компоненттер полимер матрицасының құрылымын бұзбай, керісінше оның қасиеттерін мақсатты түрде өзгертуге мүмкіндік береді. ИҚ-спектроскопия талдауы компоненттер арасындағы өзара әрекеттесулердің негізінен сутектік байланыстар арқылы жүретінін және жүйенің құрылымдық тұрақтылығы сақталатынын дәлелдеді.

Қату дәрежесі бойынша икемді эпоксидті композиттер алу үшін ДБФ қолданылған жүйеде охранның тиімді мөлшері 50 массалық үлес, ал отқа төзімді антипирен үшін ОРФФ қолданылған жүйеде — 30 массалық үлес екені анықталды.

Жалпы алғанда, алынған нәтижелер эпоксидті композиттердің қасиеттерін пластификаторлар мен минералды толтырғыштарды дұрыс таңдау және үйлестіру арқылы тиімді басқаруға болатынын көрсетті. Бұл зерттеу қорытындылары жоғары берікті, икемді және ұзақ мерзімді композиттік материалдарды өндіру технологияларын жетілдіруге практикалық негіз бола алады.

References

- Chen L., Wu J., Hao J. (2021) Effect of mineral fillers on curing kinetics and thermal properties of epoxy composites. *Thermochimica Acta*. – No. 698. – P. 178874. (in Eng.).
- Chursova L.V., Panina N.N., Grebeneva T.A., Kutergina I.Yu. (2020) Epoksidnye smoly, otverditeli, modifikatory i svyazuuyushchie na ikh osnove [*Epoxy resins, curing agents, modifiers and binders based on them*]. Saint Petersburg: Profession Publishing Center. – P. 576. (in Rus.).
- Karataeva B.N., Nurtazina A.S., Tlekova G.S. (2024) Issledovanie epoksidnykh materialov, napolnennykh galvanicheskim shlamom [Study of epoxy materials filled with electroplating sludge]. In: *XVI International Scientific and Practical Conference "Innovative Technologies in Teaching Physical-Mathematical and Vocational-Technical Disciplines"*. Mozyr. – P. 258-259. (in Rus.).
- Kumar R., Singh S., Gupta A. (2022) Curing kinetics and thermal stability of epoxy resin systems modified with additives. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. – No. 147 – P.11235-11248. (in Eng.).

Li Q., Chen Y., Zhang S. (2022) Influence of inorganic fillers on curing behavior and performance of epoxy composites. *Journal of Applied Polymer Science*. – No. 139(15). – P. 51987. (in Eng.).

Liu X., Guo Z., Yang R. (2020) Recent advances in halogen-free flame retardants for epoxy resins. *Polymer Degradation and Stability*. – No. 178. – P. 109200. (in Eng.).

Nurtazina A.S., Plakunova E.V., Karataeva B.N., Tlekova G.S. (2024) Issledovanie vozmozhnosti ispol'zovaniya otkhodov galvanicheskoi promyshlennosti v kachestve napolnitelei dlya epoksidnykh matrits [Study of the possibility of using electroplating industry waste as fillers for epoxy matrices]. In: *International Scientific and Practical Conference "Functional Polymers for Pharmaceuticals, Oil Industry, Ecology, Bio- and Nanotechnologies and Current Issues of Natural Sciences"*. – Aktobe. – P. 150-153. (in Rus.).

Rahman M., Kim N.K., Nam I.W. (2023) Thermal and mechanical performance of plasticized epoxy composites. *Materials*. – No. 16(5). – P. 1890. (in Eng.).

Saba N., Jawaid M., Alothman O.Y. (2021) Effect of plasticizers on mechanical and thermal properties of epoxy systems. *Polymers*. – No. 13(4). – P. 601. (in Eng.).

Sun J., Zhang C., Liu Y. (2024) Enhanced flame retardancy and curing behavior of epoxy composites with phosphorus-containing additives and mineral fillers. *Polymers*. – No. 16(2). – P. 245. (in Eng.).

Tlekova G.S., Karataeva B.N. (2024) Gal'vanikalyq shlammen tolturylgan epoksidtik materialdardy zertteu [Study of epoxy materials filled with electroplating sludge]. In: *XX International Scientific and Practical Conference "Youth, Science and Innovation"*. – P. 382-384. (in Kazakh).

Wang P., Song L., Hu Y. (2021) Phosphorus-based flame retardants for epoxy resins: Recent developments. *Materials Today Chemistry*. – No. 20. – P. 100454. (in Eng.).

Zhang Y., Wang Q., Li J. (2020) Flame-retardant epoxy resins modified with phosphorus-containing compounds: A review. *Composites Part B: Engineering*. – No.199. – P. 108278. (in Eng.).

Zhao X., Wang L., Chen H. (2023) Recent progress in curing kinetics and flame retardancy of epoxy resin systems. *Progress in Polymer Science*. – No.145. – P. 101742. (in Eng.).

Zhou H., Liu H., Fang Z. (2023) Synergistic effect of flame retardants and fillers in epoxy composites. *Composites Science and Technology*. – No. 233. – P. 109876. (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 103–118

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.440>

UDC: 543.429.3:622.276.66

IRSTI: 29.19.31; 29.05.45

©Shokanov A.K., Khamrayev Sh.I., Smikhhan Y.A.*, 2026.

¹Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan.

*E-mail: erkebulan1@mail.ru

MÖSSBAUER STUDIES OF FLY ASH-BASED TRACERS

Shokanov Adilkhan — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: adilhan.shokanov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0479-6707>;

Khamrayev Sheripidin — Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: hamraev_sh@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8171-4360>;

Smikhhan Yerkebulan — Master's degree, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: erkebulan1@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0751-6585>.

Abstract. In oil and gas industry, monitoring of multistage hydraulic fracturing (MHF) operations in horizontal wells is a critical task that enables an objective evaluation of the contribution of each fracturing stage to total well productivity. Conventional chemical and radioactive tracers face limitations associated with environmental impact, regulatory restrictions, and signal overlap with reservoir fluids. The present study addresses the development of new generation of microtracers based on industrial fly ash, in which the unique combinations of iron-bearing phases (hematite α -Fe₂O₃, magnetite Fe₃O₄, maghemite γ -Fe₂O₃, fayalite Fe₂SiO₄, hercynite FeAl₂O₄, and Fe-substituted aluminosilicates) act as a fingerprint detectable by ⁵⁷Fe Mössbauer spectroscopy. Samples of fly ash collected from thermal power plants in Almaty (HPP, TPP-2), originating from combustion of Ekibastuz, Shubarkol and Karazhyralin coals, were investigated. Mössbauer measurements were carried out at room temperature in the transmission geometry on a specialized experimental rig protected by a Patent of the Republic of Kazakhstan for utility model. The hyperfine parameters of the spectra — isomer shift, quadrupole splitting, hyperfine magnetic field and component areas — were extracted by least-squares decomposition. It was established that each ash sample possesses a distinct hyperfine fingerprint that allows reliable identification of the corresponding stage in MHF flowback fluid. The results demonstrate the principal applicability of fly ash microtracers and the developed Mössbauer-based identification protocol for industrial control of fracturing operations.

Keywords: Mössbauer spectroscopy, fly ash, microtracers, multistage hydraulic fracturing, hyperfine structure, iron-bearing phases, hematite

Funding. *This research received no specific grant from any funding agency in the public, commercial, or not-for-profit sectors. The work was carried out within the framework of the Memorandum and the Agreement on Scientific Cooperation between Abai Kazakh National Pedagogical University (Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan) and the Institute of Nuclear Physics of the Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan for 2020–2023.*

For citations: Shokanov A.K., Khamrayev Sh.I., Smikhan Y.A. Mössbauer Studies of Fly Ash-Based Tracers. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 103–118. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.440>

©Шоканов А.К., Хамраев Ш.И., Смихан Е.А.*, 2026.

¹Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: erkebulan1@mail.ru

ҰШҚЫШ КҮЛ НЕГІЗІНДЕГІ ТРАССЕРЛЕРДІҢ МӨССБАУЭРЛІК ЗЕРТТЕУЛЕРІ

Шоканов Адилхан — физика-математика ғылымдарының кандидаты, профессор, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: adilhan.shokanov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0479-6707>;

Хамраев Шерипидин — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, профессор, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: hamraev_sh@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8171-4360>;

Смихан Еркебұлан — магистр, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: erkebulan1@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0751-6585>.

Аннотация. Мұнай-газ саласында көлденең ұңғымалардағы көп сатылы гидрожарылыс (КСГЖ) операцияларын бақылау маңызды міндет болып табылады, өйткені ол әр жарылыс сатысының ұңғыма өнімділігіне қосатын үлесін объективті бағалауға мүмкіндік береді. Дәстүрлі химиялық және радиоактивті трассерлер экологиялық әсер, нормативтік шектеулер және ұңғыма сұйықтығымен сигналдың қабаттасуы сияқты бірқатар шектеулерге ие. Берілген жұмыс өнеркәсіптік ұшқыш күл негізінде жаңа буын микротрассерлерді әзірлеуге арналған. Мұнда темірдің құрамында болатын фазалардың (гематит $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, магнетит Fe_3O_4 , магемит $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$, фаялит Fe_2SiO_4 , герцинит FeAl_2O_4 , темір алюмосиликаттары) ерекше комбинациялары ^{57}Fe ядроларында мөссбауэрлік спектроскопия арқылы тіркелетін «таңба» рөлін атқарады. Алматы қаласындағы жылу электр станцияларының (МАЭС, ЖЭО-2) Екібастұз, Шұбаркөл және Қаражыра кен орындарының көмірлерін жаққанда түзілген ұшқыш күлдің үлгілері зерттелді. Өлшемдер ҚР-ның пайдалы модельге патентімен қорғалған арнайы

тәжірибелік стендте бөлме температурасында өткізу геометриясында орындалды. Спектрлердің ультражұқа құрылымының параметрлері — изомерлік ығысу, квадруполдік ыдырау, эффективті магнит өрісі және компоненттер үлестері — ең кіші квадраттар әдісімен анықталып, спектр контуры квадруполдік дублеттер мен Зееман секстеттеріне бөлінді. Әр күл үлгісінің жеке ультражұқа «таңбасы» бар екендігі және бұл ұңғыма өнімінде сәйкес сатыны 10^{-4} – 10^{-6} масс. %-ға дейінгі концентрацияларда сенімді анықтауға мүмкіндік беретіндігі дәлелденді. Нәтижелер ұшқыш күл негізіндегі трассерлер мен әзірленген мессбауэрлік сәйкестендіру әдістемесін гидрожарылыс операцияларын өнеркәсіптік бақылау үшін қолдану принципті мүмкіндігін растайды және сонымен қатар көмір энергетикасының күл қалдықтарын қайта пайдалану мәселесін шешуге ықпал етеді.

Түйін сөздер: мессбауэрлік спектроскопия, ұшқыш күл, микротрассерлер, көп сатылы гидрожарылыс, ультражұқа құрылым, темір құрамды фазалар, гематит

©Шоканов А.К., Хамраев Ш.И., Смихан Е.А.*, 2026.

¹Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан.

*E-mail: erkebulan1@mail.ru

МЁССБАУЭРОВСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТРАССЕРОВ НА ОСНОВЕ ЛЕТУЧЕЙ ЗОЛЫ

Шоканов Адилхан — кандидат физико-математических наук, профессор, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,

E-mail: adilhan.shokanov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0479-6707>;

Хамраев Шерипидин — кандидат технических наук, доцент, профессор, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,

E-mail: hamraev_sh@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8171-4360>;

Смихан Еркебұлан — магистр, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,

E-mail: erkebulan1@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0751-6585>.

Аннотация. В нефтегазовой отрасли мониторинг операций многостадийного гидроразрыва пласта (МГРП) в горизонтальных скважинах является критически важной задачей, позволяющей объективно оценивать вклад каждой стадии в общую продуктивность скважины. Традиционные химические и радиоактивные трассеры имеют ряд ограничений, связанных с экологическими рисками, нормативными требованиями и возможным перекрытием сигнала с компонентами пластовых флюидов. Настоящая работа посвящена разработке нового поколения микротрассеров на основе промышленной летучей золы, в которых уникальные комбинации железосодержащих фаз - гематита (α -Fe₂O₃), магнетита (Fe₃O₄), маггемита (γ -Fe₂O₃), фаялита (Fe₂SiO₄), герцинита (FeAl₂O₄) и железосодержащих алюмосиликатов - выступают в качестве индивидуального «отпечатка», регистрируемого методом мессбауэровской спектроскопии на

ядрах ^{57}Fe . В исследовании использованы образцы летучей золы тепловых электростанций города Алматы (ГРЭС, ТЭЦ-2), образованные при сжигании углей Экибастузского и Каражыралинского месторождений Республики Казахстан, а также образцы золы местного американского угля. Измерения выполнены при комнатной температуре в геометрии пропускания на специализированном экспериментальном стенде, защищённом патентом Республики Казахстан на полезную модель. Параметры сверхтонкой структуры, включая изомерный сдвиг, квадрупольное расщепление, эффективное магнитное поле и доли компонент, определены методом наименьших квадратов с разложением спектрального контура на квадрупольные дублеты и зеемановские секстеты. Установлено, что каждый образец летучей золы обладает индивидуальным сверхтонким спектральным «отпечатком», обеспечивающим надёжную идентификацию соответствующей стадии в продукции скважины при концентрациях вплоть до 10^{-4} – 10^{-6} масс. %. Полученные результаты подтверждают принципиальную применимость трассеров на основе летучей золы и разработанной методики мёссбауэровской идентификации для промышленного контроля операций ГРП. Кроме того, предложенный подход одновременно способствует решению задачи рациональной утилизации зольных отвалов угольной энергетики.

Ключевые слова: мёссбауэровская спектроскопия, летучая зола, микротрассеры, многостадийный гидроразрыв пласта, сверхтонкая структура, железосодержащие фазы, гематит

Введение. Развитие технологий разработки трудноизвлекаемых запасов углеводородов в горизонтальных скважинах, в первую очередь технологии многостадийного гидроразрыва пласта (МГРП), требует наличия надёжных средств диагностики результативности каждой стадии стимуляции. Объективная оценка вклада отдельных интервалов перфорации в общий приток продукции скважины, выявление зон обводнения и установление эффективности применённых проппантов и жидкостей разрыва - задачи, решение которых напрямую определяет рентабельность месторождений с низкой проницаемостью (Yang et al., 2024).

Среди существующих методов промысловой диагностики (микросейсмический мониторинг, оптоволоконные системы DTS/DAS, наклонометры, диагностические инъекционные тесты DFIT) трассерные технологии занимают особое место благодаря относительной простоте применения, экономической эффективности и возможности получения количественных данных о приросте от каждой стадии (Lu et al., 2023; Xu et al., 2024). Принцип трассерного метода заключается в закачке вместе с жидкостью разрыва индикаторного вещества с уникальной идентификационной меткой в каждой стадии, последующей регистрации этих меток в продукции скважины и расчёте долевых вкладов стадий по соотношению их концентраций.

Однако традиционные химические трассеры (флуоресцентные, водорастворимые, нефтерастворимые) обладают рядом существенных недостатков: они

подвержены адсорбции на минералах коллектора, разлагаются в пластовых условиях, могут давать ложноположительные сигналы при наличии в пласте органических соединений, спектрально перекрывающихся с трассером (Lu et al., 2023). Радиоактивные трассеры, обладающие высокой чувствительностью обнаружения, в свою очередь, ограничены жёсткими нормативными требованиями к транспортировке, хранению и утилизации, а также экологическими рисками (Yang et al., 2024).

В последнее десятилетие активно ведётся поиск нерадиоактивных, экологически безопасных и одновременно высокочувствительных систем трассирования. Перспективным направлением стало использование наночастиц различной природы - оксидов железа, апконвертирующих наночастиц, магнитных наноэмульсий - в качестве «умных» меток (Boul et al., 2020; Kanj et al., 2022). Одновременно с этим получил развитие альтернативный подход, основанный на применении не специально синтезированных, а уже существующих в промышленности материалов, обладающих уникальной фазовой структурой, — летучей золы тепловых электростанций (Vereshchak et al., 2021; Waanders et al., 2003).

Летучая зола образуется в процессе пылевидного сжигания угля и представляет собой сложный многокомпонентный материал, содержащий стеклофазу, муллит $\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$, кварц SiO_2 , оксиды железа в различных степенях окисления, а также железосодержащие алюмосиликаты типа герцинита FeAl_2O_4 и фаялита Fe_2SiO_4 (Shokanov et al., 2020; Cardarelli et al., 2015). Соотношение этих фаз и параметры их сверхтонкой структуры зависят от сорта исходного угля, температуры сжигания, режима охлаждения и условий конкретной тепловой энергоустановки. Это означает, что зола разных ТЭС/ГРЭС, полученная из углей разных месторождений, обладает индивидуальным «фазовым отпечатком», который может быть зафиксирован методами ядерно-физического анализа.

Среди ядерно-физических методов наиболее информативной для исследования железосодержащих систем является мёссбауэровская (ядерная гамма-резонансная) спектроскопия на ядрах ^{57}Fe . Метод обеспечивает разрешение по изомерному сдвигу δ , квадрупольному расщеплению Δ и эффективному магнитному полю $H_{\text{эфф}}$, что позволяет однозначно идентифицировать валентное состояние железа ($\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$), его координационное окружение и магнитное состояние при концентрациях вплоть до 10^{-4} – 10^{-6} масс. % (Goldanskii et al., 1970; De Grave et al., 2005; Mashlan et al., 2022).

Цель настоящей работы - экспериментально подтвердить возможность использования образцов летучей золы тепловых электростанций различного происхождения в качестве микротрассеров для контроля эффективности отдельных стадий МГРП на основе уникальности параметров сверхтонкой структуры мёссбауэровских спектров каждого образца. В качестве экспериментальной базы был использован специализированный стенд, разработанный авторами и защищённый патентом Республики Казахстан на полезную модель.

Литературный обзор. Применение мёссбауэровской спектроскопии для

исследования летучих зол имеет более чем сорокалетнюю историю и ведётся в большинстве стран, эксплуатирующих угольную энергетику. Одной из ранних систематических работ стала публикация Williamson и др. (1984), в которой было показано, что в золе бурого угля австралийского месторождения Hazelwood железо присутствует преимущественно в виде кальциевого алюмоферрита $\text{Ca}_2\text{Fe}_{2-x}\text{Al}_x\text{O}_5$ с минорными примесями гематита и магнетита, причём фазовый состав определяется не только составом исходного угля, но и температурой осаждения золы в электрофильтрах.

Cardarelli и др. (2015) при исследовании летучих зол колумбийских ТЭС методом мёссбауэровской спектроскопии в сочетании со стандартом ASTM D3174 обнаружили в исходном угле пирит и ярозит, а в золах - пара- и ферритмагнитные фазы $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$, гематит и магнетит, в том числе суперпарамагнитный. Этот результат продемонстрировал возможность отслеживать минералогические трансформации железа на всех стадиях технологической цепочки, начиная от добычи угля и заканчивая улавливанием золы. Аналогичные подходы были развиты в работах Nishida и др. (2005), посвящённых анализу зол японских ТЭС, в исследованиях Bajukova и др. (2009) для зол сибирских углей, а также Waanders и др. (2003), сопоставивших результаты сканирующей электронной микроскопии и мёссбауэровских измерений на углях, продуктах их выветривания и зольных остатках.

Особый интерес представляет цикл работ, выполненных коллективом авторов из Казахстана, по детальному исследованию фазового состава зол экибастузских углей. В частности, в публикации Shokanov и др. (2020) методами мёссбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифракции для зол ТЭЦ-2 и ТЭЦ-3 г. Алматы установлено, что узкие фракции золы содержат железо преимущественно в виде магнетита Fe_3O_4 и гематита $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, причём в золе ТЭЦ-3 дополнительно присутствует маггемит $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ как продукт медленного окисления магнетита. Авторами также было показано, что доля магнетита в золе является температурным индикатором условий формирования: при $T \geq 1400^\circ\text{C}$ она возрастает за счёт распада гематита, маггемита, герцинита и снижения содержания железа в муллите.

В последующих работах того же коллектива (Vereshchak et al., 2021) была проведена гранулометрическая и магнитная сепарация золы экибастузского угля и показано, что с увеличением размера гранул доля магнитоупорядоченных компонент в мёссбауэровском спектре уменьшается; во фракции более 100 мкм доминируют парамагнитные минералы. После магнитной сепарации железо в ферросферах сосредоточено преимущественно в структуре $\text{Fe}_3\text{O}_4/\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ и $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, с долей Fe_3O_4 от 60 до 77 %.

Параллельно международные группы продолжают работы по применению мёссбауэровской спектроскопии для оценки воздействия зольных частиц на окружающую среду. Так, Magiera и др. (2020) использовали метод для идентификации железосодержащих фаз в почвах Верхнесилезского промышленного района Польши и показали, что характерные мёссбауэровские параметры магнетита и

гематита позволяют связать загрязнение почв с эмиссиями конкретных тепловых электростанций. В работе Joshi и др. (2009) аналогичный подход был применён для зол индийской ТЭС Kolaghat, где было установлено доминирование магнетита и гематита с примесью алюмосиликатной стеклофазы.

Применение трассеров в МГРП - относительно молодое, но интенсивно развивающееся направление. Lu и др. (2023) разработали методику интерпретации кривых обратного притока многостадийных трассеров для плотных коллекторов и показали, что для скважины HD4-3H в плотном коллекторе вклад первой стадии в нефтедобычу составил 18,65 %, что согласуется с данными микросейсмических измерений. Xu и др. (2024) применили химические трассеры на горизонтальной скважине индонезийской свиты Telisa и подтвердили возможность дифференцированной оценки эффективности интервалов МГРП. Boul и др. (2020) в обзоре нанотехнологий для нефтегазовой промышленности продемонстрировали перспективность функционализированных наночастиц оксидов железа в качестве суперпарамагнитных трассеров. Kanj и др. (2022) предложили использовать магнитные нановискеры на основе Fe_3O_4 в виде Pickering-наноземлюльсий для оптимизации проектирования сети трещин в плотных коллекторах.

Несмотря на большой объём накопленных данных, использование промышленных летучих зол с их природной фазовой неоднородностью в качестве недорогих микротрассеров для МГРП с идентификацией методом мёссбауэровской спектроскопии до настоящего времени систематически не исследовалось. Именно эту нишу и заполняет настоящая работа, основанная на ранее выполненных авторами публикациях (Shokanov, 2020; Vereshchak et al., 2021) и патентном решении в области конструкции экспериментального стенда (Shokanov, 2023).

Материалы и основные методы. В качестве объектов исследования были выбраны три образца летучей золы, образовавшейся при пылевидном сжигании углей различных месторождений на тепловых энергоустановках:

- образец а - летучая зола с электрофильтров ГРЭС г. Алматы, исходный уголь - Экибастузское месторождение (Республика Казахстан);
- образец б - летучая зола ТЭС США, исходный уголь - местный американский уголь;
- образец с - летучая зола ТЭЦ-2 г. Алматы, исходный уголь - Каражыралинского месторождения.

Образцы были получены отбором узких фракций по гранулометрической методике с последующим контролем гранулометрического состава методом ситового анализа в соответствии с ранее разработанной процедурой (Vereshchak et al., 2021). Подготовка образцов для мёссбауэровских измерений выполнялась в соответствии с методикой, изложенной в монографии Шоканова (2020): навески летучей золы из расчёта 100 мг/см^2 смешивались с парафином и прессовались в таблетки.

Лабораторные испытания на экспериментальном стенде. Лабораторные испытания моделирования технологии многостадийного гидроразрыва пласта

(МГРП) с использованием трассеров на основе летучей золы проводились на специализированном экспериментальном стенде, разработанном авторами и защищённом патентом Республики Казахстан на полезную модель № 6987 от 27.01.2023 г. (Shokanov, 2023). Стенд смонтирован в лаборатории Казахского национального педагогического университета имени Абая (г. Алматы) и оборудован системой подачи воды.

Принципиальная схема стенда включает следующие основные узлы: ёмкость с водой объёмом 1000 л; ёмкость для отсепарированной воды; самовсасывающий насос радиального действия с максимальным давлением наработки 5 атм и производительностью 65 л/мин; регулирующие запорные вентили (латунные шаровые краны, рассчитанные на условное давление до 4–5 атм); магистральные фильтры грубой и тонкой очистки с металлической сеткой пропускной способностью 1, 5, 15, 25, 50, 70 и 100 мкм; имитационная скважина; имитационная трещина; шаровой кран бака; манометр; пластиковый трубопровод диаметром 20 мм; группа защиты с расходомером. Стенд работает при давлениях от 1 до 4 атм, что позволяет моделировать реальные условия скважин при добыче трудноизвлекаемых запасов нефти и газа (Shokanov, 2020).

Технология эксперимента, основанная на использовании субмикронных частиц летучей золы в качестве трассеров, реализуется в следующей последовательности операций. На первом этапе трассирующие индикаторы - порошки летучей золы с заданным гранулометрическим составом - добавляются в воду в первом баке, после чего полученная смесь самовсасывающим насосом, расположенным ниже водяных коммуникаций и экспериментальных участков, подаётся через имитационную скважину или имитационную трещину и регулирующие вентили в магистральный трубопровод. На втором этапе жидкость с трассерами проходит через экспериментальный участок с магистральными фильтрами: продавленная вода протекает через фильтр, а микрочастицы остаются во внешнем контуре (колбе) фильтра. На третьем этапе из экспериментального участка отсепарированная вода через подпорные вентили возвращается во второй приёмный бак, а избыточное давление сбрасывается через группу защиты в атмосферу. На четвёртом этапе после завершения цикла «закачка - извлечение» картриджи фильтров с осевшими микрочастицами трассеров извлекаются, отфильтрованный порошок снимается с сетки, высушивается и подготавливается к ядерно-физическому анализу. По итогам цикла фиксируются показания манометров, расходомеров и других контрольных датчиков (Shokanov, 2020; Shokanov, 2023).

Стенд позволяет в лабораторных условиях имитировать процессы закачки трассерного материала в продуктивный пласт и его последующего извлечения с обратным потоком, что обеспечивает воспроизводимость результатов и возможность сопоставления различных партий микротрассеров между собой. По итогам отработки технологии на стенде в 2019 г. были подготовлены образцы трассеров, испытания которых отражены в Акте испытаний, выданном Институтом ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан, от 25.06.2019 г. (Shokanov, 2020).

Мёссбауэровские измерения. Высушенные образцы летучей золы и микрочастиц, отделённых от воды на фильтрах стенда, направлялись на анализ методом ядерной гамма-резонансной спектроскопии (ЯГРС) в Институт ядерной физики Министерства энергетики Республики Казахстан (ИЯФ МЭ РК, г. Алматы). Работы выполнялись в рамках Меморандума и Договора о научном сотрудничестве, заключённых между НАО «Казахский национальный педагогический университет имени Абая» МОН РК и ИЯФ МЭ РК на 2020–2023 гг.

Регистрация мёссбауэровских спектров проводилась на спектрометре MS-1104Em в режиме постоянных ускорений с источником гамма-квантов ^{57}Co в матрице хрома при комнатной температуре ($T = 295 \pm 2 \text{ K}$) в геометрии пропускания. Спектры регистрировались на 1024 канала. Калибровка шкалы скоростей осуществлялась по эталонному образцу $\alpha\text{-Fe}$, относительно которого приводятся значения изомерных сдвигов δ . Скоростной диапазон сканирования обеспечивал регистрацию как парамагнитных компонент с малыми квадрупольными расщеплениями, так и магнитоупорядоченных секстетов с эффективными полями до 530 кЭ (Shokanov, 2020).

Математическая обработка экспериментальных мёссбауэровских спектров выполнялась с применением программы SpectrRelax методами модельной расшифровки и восстановления функций распределения сверхтонких параметров. В качестве критерия наилучшего разложения мёссбауэровского спектра использовался χ^2 -параметр, оценивающий приближение суммы расчётных компонент к экспериментальным данным. Сложный спектральный контур разлагался на индивидуальные компоненты - квадрупольные дублеты (для парамагнитных фаз) и зеемановские секстеты (для магнитоупорядоченных фаз) в приближении лоренцевых форм линий (Shokanov, 2020; Goldanskii et al., 1970; Wertheim, 1996).

Идентификация фазовых состояний железа в исследуемых образцах осуществлялась путём сопоставления полученных параметров сверхтонкой структуры - изомерного сдвига δ , квадрупольного расщепления Δ , эффективного магнитного поля $H_{\text{эфф}}$ и относительной площади S - с эталонными значениями, известными для соединений железа (Shokanov, 2020; De Grave et al., 2005; Murad, 2010). Дополнительно для контроля минералогического состава была применена методика, использовавшаяся ранее в работах международных коллективов (Cardarelli et al., 2015; Joshi et al., 2009), включающая сопоставление мёссбауэровских данных с результатами рентгенофазового анализа и сканирующей электронной микроскопии.

Результаты. На рисунке 1 представлены мёссбауэровские спектры всех трёх исследованных образцов летучей золы, измеренные при комнатной температуре. Спектры отражают различия в состоянии катионов железа, наличие катионных и анионных вакансий, а также связанные с ними искажения кристаллической решётки шпинельной структуры и алюмосиликатной матрицы (Magiera et al., 2020).

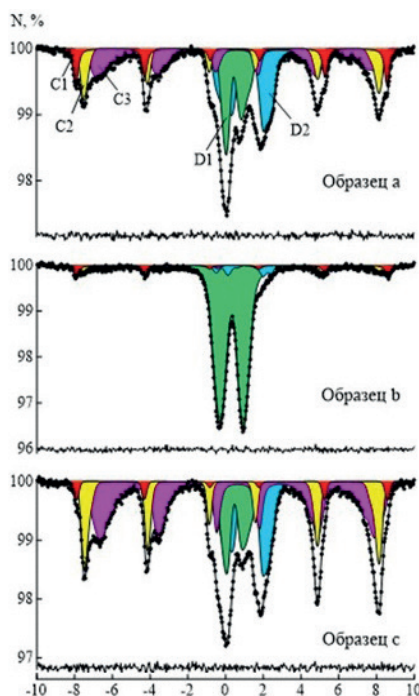


Рисунок 1. Мёссбауэровские спектры летучих зол: а — ГРЭС, b — ТЭС США, с — ТЭЦ-2.

На рисунке 2 представлен спектр образца №1 (ГРЭС, экибастузский уголь). Мёссбауэровский спектр характеризуется расширенным асимметричным квадрупольным дублетом без признаков магнитной структуры. Результаты компьютерной обработки показали, что данный сигнал фактически состоит из четырёх квадрупольных дублетов с близкими, но различными параметрами, отвечающих железу в различных диамагнитных позициях.

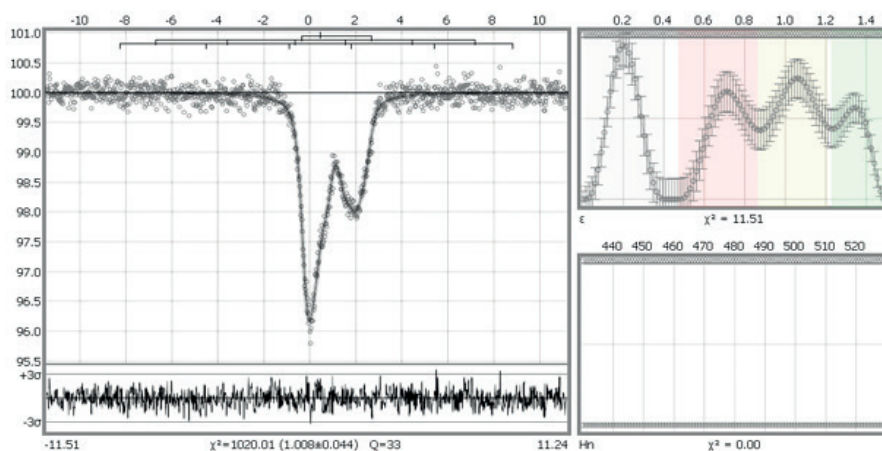


Рисунок 2. Мёссбауэровский спектр образца №1 (ГРЭС, Экибастуз).

Таблица 1. Сверхтонкая структура мёссбауэровского спектра образца №1.

№ п/п	Изомерный сдвиг, δ , мм/с	Квадрупольное расщепление, ϵ , мм/с	Магнитное расщепление, $H_{\text{эфф}}$, кЭ	Полуширина линии, Г, мм/с	Доля Fe, % в спектре	Формулы оксидов
1.	0,532±0,016	0,230±0,018	—	0,638±0,031	22,7±4,0	SiO ₂
2.	0,786±0,050	0,778±0,60	—	0,638±0,031	36,5±5,0	Al ₂ O ₃
3.	0,953±0,040	1,117	—	0,638±0,031	27,0±4,0	CaO
4.	1,272±0,170	1,263±0,160	—	0,638±0,031	13,9±4,0	SO ₃

Из данных таблицы 1 следует, что мёссбауэровский спектр образца №1 не содержит магнитной структуры. Он представлен четырьмя диамагнитными компонентами, находящимися в различных фазовых состояниях. Каждая из этих составляющих характеризуется собственной сверхтонкой структурой. Предположительно, данные компоненты соответствуют оксидам SiO₂, Al₂O₃, CaO и SO₃, в составе которых железо присутствует в двух- и трёхвалентном состоянии в различных концентрациях (Shokanov, 2020; Cardarelli et al., 2015).

Спектр следующей партии - образца №2 (ТЭС США, местный американский уголь) - имеет принципиально иные характеристики (рисунок 3). Параметры мёссбауэровского спектра этого образца существенно отличаются от спектра образца №1: помимо парамагнитной части, в нём отчётливо проявляется магнитоупорядоченная структура. Результаты компьютерной обработки показали, что спектр состоит из трёх квадрупольных дублетов и двух секстетов. При этом квадрупольные дублеты характеризуются различными параметрами изомерного сдвига и квадрупольного расщепления, что свидетельствует о сосуществовании ионов Fe²⁺ и Fe³⁺ в различных кристаллографических позициях.

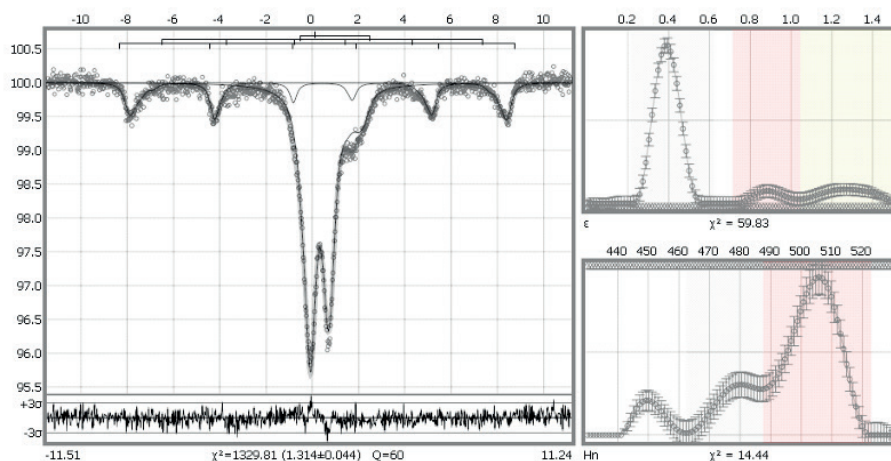


Рисунок 3. Мёссбауэровский спектр образца №2 (ТЭС США, местный американский уголь).

Мёссбауэровские параметры сверхтонкой структуры образца №2 представлены в таблице 2.

Таблица 2. Мёсбауэровские параметры сверхтонкой структуры образца №2.

№ п/п	Изомерный сдвиг, δ , мм/с	Квадрупольное расщепление, ϵ , мм/с	Магнитное расщепление, $H_{\text{эф}}$, кЭ	Полуширина линии, Г, мм/с	Доля Fe, %
1.	$0,3221 \pm 0,023$	$0,390 \pm 0,004$	—	$0,541 \pm 0,009$	$61,5 \pm 1,3$
2.	$0,621 \pm 0,022$	$0,902 \pm 0,040$	—	$0,541 \pm 0,009$	$5,5 \pm 1,0$
3.	$0,835 \pm 0,014$	$1,271 \pm 0,017$	—	$0,541 \pm 0,009$	$11,1 \pm 0,8$
4.	$0,366 \pm 0,007$	$-0,076 \pm 0,008$	$494,20 \pm 0,70$	$0,351 \pm 0,040$	$22,0 \pm 0,7$
5.	$0,366 \pm 0,007$	$-0,096 \pm 0,006$	$503,79 \pm 0,50$	$0,351 \pm 0,040$	$15,9 \pm 0,9$

В спектре образца №3 (ТЭЦ-2, каражыралинский уголь) наблюдается один квадрупольный дублет и два секстета (рисунок 4). По сравнению с образцом №2 здесь существенно выше доля магнитоупорядоченной фазы и значительно меньше число парамагнитных компонент, что свидетельствует о ином соотношении кристаллических железосодержащих фаз.

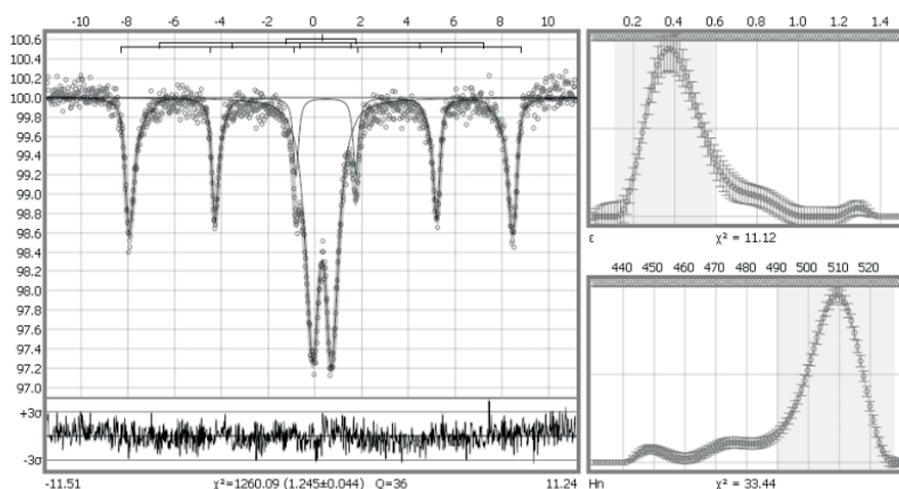


Рисунок 4. Мёсбауэровский спектр образца №3 (ТЭЦ-2, Каражыра).

Мёсбауэровские параметры сверхтонкой структуры образца №3 приведены в таблице 3.

Таблица 3. Мёсбауэровские параметры сверхтонкой структуры образца №3.

№ п/п	Изомерный сдвиг, δ , мм/с	Квадрупольное расщепление, ϵ , мм/с	Магнитное расщепление, $H_{\text{эф}}$, кЭ	Полуширина линии, Г, мм/с	Доля Fe, %	Фазовое состояние Fe
1.	$0,311 \pm 0,0025$	$0,3890 \pm 0,006$	—	$0,469 \pm 0,070$	$46,2 \pm 2,5$	$(3\text{Al}_{2-x}\text{Fe}_{x3+})\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$
2.	$0,370 \pm 0,0021$	$0,370 \pm 0,0021$	430,00	$0,240 \pm 0,016$	$16,0 \pm 0,5$	Fe_2SiO_4
3.	$0,3684 \pm 0,00022$	$0,1040 \pm 0,0022$	489,60	$0,240 \pm 0,016$	$38,0 \pm 0,7$	Fe_2O_3

Из данных таблицы 3 следует, что мёссбауэровский спектр образца №3 содержит одну диамагнитную и две магнитоупорядоченные компоненты. Дублет с изомерным сдвигом $\delta = 0,311$ мм/с и квадрупольным расщеплением $\varepsilon = 0,389$ мм/с (~46 % площади спектра) соответствует ионам железа в составе алюмосиликатной фазы со структурой типа муллита; секстет с $H_{\text{эфф}} = 430,0$ кЭ относится к фаялиту Fe_2SiO_4 , а секстет с $H_{\text{эфф}} = 489,6$ кЭ - гематиту $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Полученные параметры сверхтонкой структуры согласуются с эталонными значениями для соединений железа (Shokanov, 2020; Murad, 2010).

Обсуждение. Сопоставление полученных данных по трём образцам летучей золы выявляет принципиальные различия их сверхтонких структур, что и составляет физическую основу их применимости в качестве микротрассеров. Образец №1 характеризуется чисто парамагнитной структурой из четырёх дублетов, образец №2 - комбинированной структурой из трёх дублетов и двух секстетов, образец №3 - структурой из одного дублета и двух секстетов. Эта спектральная индивидуальность обусловлена различным фазовым составом железосодержащих минералов и валентным состоянием Fe в каждом из образцов.

Полученные результаты согласуются с общими тенденциями, описанными в литературе. Так, в работе Shokanov и др. (2020) для зол ТЭЦ-2 и ТЭЦ-3 г. Алматы было показано доминирование магнетита Fe_3O_4 и гематита $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ с долей магнетита 60–77 % в магнитной фракции; в нашем образце №3 (ТЭЦ-2) также наблюдается значительная магнитоупорядоченная фаза (54 % суммарной площади секстетов), однако в неё доминирующий вклад вносит гематит (38 %), а не магнетит. Это различие может быть связано с тем, что в исследованном нами образце был использован каражыралинский, а не экибастузский уголь, а также с различиями в режимах сжигания и охлаждения золы.

Параметры секстета с $H_{\text{эфф}} = 489,6$ кЭ практически совпадают с эталонными значениями для гематита $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ при комнатной температуре (Murad, 2010): $\delta \approx 0,37$ мм/с, $\varepsilon \approx -0,21$ мм/с, $B_{\text{hf}} \approx 51,7$ Тл (517 кЭ). Меньшее значение поля $H_{\text{эфф}} = 489,6$ кЭ в нашем эксперименте может указывать на изоморфное замещение части ионов Fe^{3+} алюминием с образованием алюмогематита $\text{Al-}\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, что является широко известным эффектом для природных и техногенных гематитсодержащих систем (De Grave et al., 2005; Murad, 2010).

Секстет с $H_{\text{эфф}} = 430,0$ кЭ и $\delta \approx 0,37$ мм/с отнесён к фаялиту Fe_2SiO_4 . Хотя для чистого синтетического фаялита характерно поле порядка 320 кЭ при комнатной температуре, в высокотемпературной алюмосиликатной матрице золы возможны кооперативные эффекты, повышающие эффективное поле. Альтернативно, данный секстет может быть отнесён к одной из подрешёток магнетита Fe_3O_4 , для которого характерны два магнитных подспектра с полями около 491 кЭ (тетраэдрические позиции Fe^{3+}) и 460 кЭ (октаэдрические позиции $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$) при комнатной температуре (De Grave et al., 2005). Окончательное разделение этих двух интерпретаций возможно при низкотемпературных мёссбауэровских измерениях с регистрацией перехода Морина.

Дублет с $\delta = 0,311$ мм/с и $\varepsilon = 0,389$ мм/с в образце №3 соответствует ионам Fe^{3+}

в искажённой октаэдрической координации. Подобные параметры характерны для железосодержащего муллита $(3\text{Al}_{2-x}\text{Fe}_x)_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$, в котором изоморфное замещение $\text{Al}^{3+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$ происходит в алюминий-кислородных октаэдрах. Этот вывод подтверждается данными рентгеновской дифракции для аналогичных зол экибастузских углей (Shokanov et al., 2020), где муллит $\text{Al}_6\text{Si}_2\text{O}_{13}$ выступает доминирующей кристаллической фазой алюмосиликатной матрицы.

Важным методическим аспектом является воспроизводимость идентификации образца на низких концентрациях, характерных для трассерных применений (10^{-4} – 10^{-6} масс. %). Для оценки чувствительности необходимо учитывать, что мёссбауэровский эффект пропорционален произведению содержания ^{57}Fe (природное изобилие 2,17 %) на коэффициент Лэмба-Мёссбауэра f . При типичных значениях $f \approx 0,7$ для оксидов железа и эффективной поверхностной плотности образца порядка 10 мг/см^2 по железу нижняя граница регистрации сверхтонкой структуры составляет 10^{-4} масс. %, что соответствует требованиям к индивидуальной идентификации стадий МГРП по результатам обратного притока (Lu et al., 2023). Для повышения чувствительности возможно изотопное обогащение материала ^{57}Fe .

Полученные индивидуальные сверхтонкие «отпечатки» каждого образца составляют физическую основу для практического применения летучих зол в качестве микротрассеров для МГРП. Закачка различных видов золы в разные ствола скважины с последующей мёссбауэровской регистрацией железосодержащих соединений из извлечённых проб позволит установить расположение трассерного материала в трещинах и оценить эффективность каждой стадии. По сравнению с традиционными химическими и радиоактивными трассерами предлагаемые микротрассеры на основе летучей золы обладают существенными преимуществами: они являются вторичным сырьём (продукт промышленных отходов ТЭС), экологически безопасны, химически стабильны в пластовых условиях и не подвержены адсорбции на минералах коллектора.

Сравнение современных нанотрассеров на основе функционализированных Fe_3O_4 -наночастиц (Boul et al., 2020; Kanj et al., 2022) показывает, что оба подхода имеют сравнимую чувствительность регистрации, однако трассеры на основе зол выигрывают в стоимости и доступности - особенно в условиях Казахстана с его развитой угольной энергетикой и большими накопленными объёмами золоотвалов. С другой стороны, наночастицы превосходят зольные трассеры по гомогенности и контролируемости размера, что важно для тонкого моделирования транспорта в плотных коллекторах. Возможной перспективой является разработка гибридных трассерных систем, сочетающих преимущества обоих подходов.

Заключение. Мёссбауэровские исследования трёх образцов летучей золы тепловых электростанций различного происхождения показали, что все исследованные образцы обладают уникальными сверхтонкими структурами, обусловленными различным фазовым составом и валентными состояниями железа. Это позволяет надёжно идентифицировать их методом мёссбауэровской

спектроскопии в качестве микротрассеров. Применение таких материалов при многостадийном гидроразрыве пласта обеспечивает контроль эффективности каждой стадии стимуляции, поскольку соединения железа хорошо идентифицируются с помощью эффекта Мёссбауэра (et al., 2020; Vereshchak et al., 2021; Cardarelli et al., 2015; Shokanov et al., 2023).

Основные результаты работы могут быть сформулированы следующим образом. Во-первых, экспериментально подтверждена индивидуальность сверхтонких структур мёссбауэровских спектров летучих зол трёх различных тепловых электростанций. Во-вторых, для образца №3 определены параметры сверхтонкой структуры - изомерный сдвиг, квадрупольное расщепление, эффективное магнитное поле и относительные доли компонент - для трёх железосодержащих фаз (алюмосиликат типа муллита, фаялит/магнетит и гематит/алюмогематит). В-третьих, продемонстрирована принципиальная возможность использования летучих зол в качестве микротрассеров для МГРП с идентификацией методом мёссбауэровской спектроскопии.

Практическое значение работы определяется тем, что предлагаемая технология позволяет использовать вторичное сырьё промышленных отходов угольной энергетики в высокотехнологичных нефтесервисных приложениях, что одновременно решает задачи мониторинга МГРП и утилизации зольных отвалов. Разработанный авторами экспериментальный стенд (Shokanov et al., 2023) обеспечивает необходимую методическую и метрологическую базу для дальнейших исследований по практическому внедрению технологии. Перспективным направлением дальнейших исследований является изучение поведения зольных микротрассеров в условиях, моделирующих пластовое давление и температуру, а также количественная оценка чувствительности регистрации по концентрации в продукции скважины.

References

- Bajukova O.A., Anshits N.N., Petrova M.I., Balaev A.D., Anshits A.G. (2009) Composition and magnetic properties of ferrospheres from coal fly ash. *Materials Chemistry and Physics*. – No. 114(1). – P. 495-503. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2008.10.001> (in Eng.).
- Boul P.J., Reddy B.R., Zhang J., Thaemlitz C. (2020) Nanotechnology research and development in upstream oil and gas. *Energy Technology*. – No. 8(1). – P. 1901216. <https://doi.org/10.1002/ente.201901216> (in Eng.).
- Cardarelli J.M., Camayo M.P., Pérez-Alcázar G.A. (2015) Mössbauer characterization of feed coal, ash and fly ash from a thermal power plant. *Hyperfine Interactions*. – No. 232(1-3). – P. 33-40. <https://doi.org/10.1007/s10751-015-1140-1> (in Eng.).
- De Grave E., Vandenbergh R.E. (2005) Mössbauer characterization of iron oxides and (oxy) hydroxides: the present state of the art. *Hyperfine Interactions*. – No. 161(1-4). – P. 81-98. <https://doi.org/10.1023/A:1012603603203> (in Eng.).
- Goldanskii V.I., Krizhanskii L.M., Khrapov V.V. (Eds.) (1970) *Khimicheskie primeneniya messbauerovskoj spektroskopii* [Chemical applications of Mössbauer spectroscopy]. – Moscow: Mir. – 504 p. (in Russian).
- Joshi S.K., Bajpai A., Thakur P., Mathur R. (2009) Microstructural and magnetic characterization of fly ash from Kolaghat Thermal Power Plant in West Bengal, India. *Hyperfine Interactions*. – No. 187(1-3). – P. 7-14. <https://doi.org/10.1007/s10751-008-9858-7> (in Eng.).
- Kanj M.Y., Rashid H., Giannelis E.P. (2022) Magnetic Pickering nanoemulsions for fluid conductivity

analysis in subsurface reservoirs. SPE Canadian Energy Technology Conference, SPE-208980-MS. <https://doi.org/10.2118/208980-MS> (in Eng.).

Lu X., Wang Z., Liu Y., Sun Y., Yang J., Wang J. (2024) Study on interpretation method of multistage fracture tracer flowback curve in tight oil reservoirs. ACS Omega. – No. 9(11). – P. 12647-12659. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c08923> (in Eng.).

Magiera T., Mendakiewicz M., Szuszkiewicz M., Jabłońska M., Chróst L. (2020) Application of Mössbauer spectroscopy for identification of iron-containing components in Upper Silesian topsoil being under industrial anthropopressure. – Materials. – No. 13(22). – P. 5266. <https://doi.org/10.3390/ma13225266> (in Eng.).

Mashlan M., Kholmetskii A., Yevdokimov V., Pechousek J., Verich O., Zboril R., Tsonchev R. (2006) Mössbauer spectrometer with resonant detector. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. – No. 243(1). – P. 241-246. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2005.07.198> (in Eng.).

Murad E. (2010) Mössbauer spectroscopy of clays, soils and their mineral constituents. Clay Minerals. – No. 45(4). – P. 413-430. <https://doi.org/10.1180/claymin.2010.045.4.413> (in Eng.).

Nishida T., Tokunaga M., Sugata Y., Kubuki S. (2005) Iron speciation in coal fly ash by Mössbauer spectroscopy. Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry. – No. 266(1). – P. 171-177. <https://doi.org/10.1007/s10967-005-0890-7> (in Eng.).

Shokanov A.K., Smikhhan Y.A. (2023) Stend dlya issledovaniya tekhnologii mnogostadiynogo gidrorazryva plasta s ispolzovaniem trasserov [Bench for studying multistage hydraulic fracturing technology with tracers]: Patent of the Republic of Kazakhstan for utility model. – No. 6987. Registered 27.01.2023. (in Russian).

Shokanov A.K., Vereshchak M.F., Manakova I.A. (2020) Mössbauer and X-ray studies of phase composition of fly ashes formed after combustion of Ekibastuz coal (Kazakhstan). Metals. – No. 10(7). – P. 929. <https://doi.org/10.3390/met10070929> (in Eng.).

Vereshchak M.F., Manakova I.A., Shokanov A.K., Sakhiev S.K. (2021) Mössbauer studies of narrow fractions of fly ash formed after combustion of Ekibastuz coal. Materials. – No. 14(23). – P. 7473. <https://doi.org/10.3390/ma14237473> (in Eng.).

Waanders F.B., Vinken E., Mans, A., Mulaba-Bafubiandi A.F. (2003) Iron minerals in coal, weathered coal and coal ash — SEM and Mössbauer results. Hyperfine Interactions. – No. 148/149(1-4). – P. 21-29. <https://doi.org/10.1023/B:HYPE.0000003760.89706.f6> (in Eng.).

Wertheim G.K. (1996) Effekt Messbauera. Printsipy i primeneniya [Mössbauer effect: Principles and applications]. – Moscow: Mir. (in Russian).

Williamson J., Nelson P.F., Fyfe W.S. (1984) Mössbauer analysis of iron phases in brown coal ash and fireside deposits. Fuel. – No. 63(8). – P. 1145-1150. [https://doi.org/10.1016/0016-2361\(84\)90436-8](https://doi.org/10.1016/0016-2361(84)90436-8) (in Eng.).

Xu Y., Pratama A., Lee J., Park S., Wijaya M., Iskandar R. (2023) Chemical tracer evaluation of first horizontal multistage fracturing treatment well in the Telisa formation, Indonesia. Abu Dhabi International Petroleum Exhibition and Conference, SPE-216769-MS. <https://doi.org/10.2118/216769-MS> (in Eng.).

Yang B., Zhao J., Mao J., Tan H., Zhang Y., Song Z. (2024) Recent advances in monitoring multistage hydraulic fracturing in unconventional reservoirs: Diagnostic techniques and applications. Energy Reports. – No. 11. – P. 2541-2562. <https://doi.org/10.1016/j.egy.2024.02.016> (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 119–133

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.441>

UDC: 524.834
IRSTI: 29.05.45

©Ualikhanova U.A.^{1*}, Kurban Y.Y.¹, Syzdykova A.M.¹, Altayeva G.S.²,
Altaibayeva A.B.¹, 2026.

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;

²Shokan Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan.

E-mail:ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

BREAKING THE DEGENERACY BETWEEN METRIC AND TELEPARALLEL GRAVITY THEORIES THROUGH MULTI-MESSENGER GRAVITATIONAL-WAVE ASTRONOMY

Ualikhanova Ulbossyn — PhD, Senior Lecturer, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2351-0658>;

Kurban Yermakhan — Master's student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: kuermahan@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-6639-0437>;

Syzdykova Arailym — PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8999-6566>;

Altayeva Gulsinay — Master, Senior Lecturer, Shokan Ualikhanov Kokshetau University, Kokshetau, Kazakhstan,

E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2611-7413>;

Altaibayeva Aziza — PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: aziza.ltaibayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9254-7027>.

Abstract. The physical origin of dark energy, as well as the increasing Hubble tension between the local and the early cosmic microwave background expansion rates of the universe, have motivated the development of alternative gravity theories. However, discerning among these models has proved to be a challenging task. While standard extensions of general relativity by means of metric modifications (e.g., $f(R)$ gravity) and their teleparallel analogs (e.g., $f(T)$ gravity) may appear structurally similar in terms of background cosmological evolution, they show an incredible degree of degeneracy. Since they can be fine-tuned to predict identical cosmic kinematics, using expansion measurements will leave us unable to know whether cosmic acceleration is driven by space-time curvature R or torsion T . In this paper, we show that this mathematical degeneracy can be explicitly broken when investigating the

dynamics of cosmic structures, that is, in the case of linear cosmological perturbations. We analytically prove that although both theories predict the existence of a modified gravitational friction term $\alpha_M \neq 0$, their polarization, which affects the propagation of primordial gravitational waves throughout the universe, they lead to different polarization spectra. The structural differences between curvature-induced fields and torsion-induced ones alter the amplitude and phase of individual polarization modes in distinct ways during the perturbative regime. Consequently, we propose a definitive observational test for future space-based gravitational wave interferometers. By measuring the polarization of gravitational waves, binary compact object mergers with known distances, these instruments can isolate these subtle asymmetric signatures. This approach offers a clean, model-independent breakthrough capable of bypassing historical mathematical degeneracies and unambiguously determining the true geometric nature of our space-time.

Keywords: dark energy, $f(R)$ gravity, $f(T)$ gravity, teleparallel gravity, gravitational waves, space-time geometry

Financing. *This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP26101851).*

For citations: Ualikhanova U.A., Kurban Y.Y., Syzdykova A.M., Altayeva G.S., Altaibayeva A.B. *Breaking the Degeneracy between Metric and Teleparallel Gravity Theories through Multi-Messenger Gravitational-Wave Astronomy. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences.* 2026. No.2. Pp. 119–133. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.441>

©Уалиханова У.А.^{1*}, Құрбан Е.Е.¹, Сыздыкова А.М.¹, Алтаева Г.С.²,
Алтайбаева А.Б.¹, 2026.

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан;

²Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан.

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

КӨП АРНАЛЫ ГРАВИТАЦИЯЛЫҚ-ТОЛҚЫНДЫҚ АСТРОНОМИЯ АРҚЫЛЫ МЕТРИКАЛЫҚ ЖӘНЕ ТЕЛЕПАРАЛЛЕЛЬДІ ГРАВИТАЦИЯ ТЕОРИЯЛАРЫНЫҢ АЙЫРМАШЫЛЫҒЫН ЗЕРТТЕУ

Уалиханова Улбосын — PhD, аға оқытушы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2351-0658>;

Құрбан Ермахан — магистрант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: kuermahan@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-6639-0437>;

Сыздыкова Арайлым — PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8999-6566>;



Алтаева Гүлсинай — магистр, аға оқытушы, Ш. Уәлиханов атындағы Көкшетау университеті, Көкшетау, Қазақстан,

E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2611-7413>;

Алтайбаева Азиза — PhD, қауымдастырылған профессор, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: aziza.ltaibayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9254-7027>.

Аннотация. Күңгірт энергияның физикалық шығу тегі, сондай-ақ ғаламның жергілікті және ерте ғарыштық микротолқынды фон кеңею жылдамдықтары арасындағы Хаббл шиеленісінің артуы балама гравитация теорияларының дамуына түрткі болды. Дегенмен, бұл модельдерді ажырату қиын міндет болып шықты. Метрикалық модификациялар (мысалы, $f(R)$ гравитация) және олардың телепараллель аналогтары (мысалы, $f(T)$ гравитация) арқылы жалпы салыстырмалылықтың стандартты кеңейтімдері фондық космологиялық эволюция тұрғысынан құрылымдық жағынан ұқсас болып көрінуі мүмкін болса да, олар жоғары дәрежедегі дегенерацияны көрсетеді. Оларды бірдей ғарыштық кинематиканы болжау үшін дәл баптауға болатындықтан, кеңею өлшемдерін пайдалану бізге ғарыштық үдеудің кеңістік-уақыт қисығымен R немесе бұралумен T байланысты екенін білуге мүмкіндік бермейді. Бұл мақалада біз ғарыштық құрылымдардың динамикасын зерттеген кезде, яғни сызықтық космологиялық ауытқулар жағдайында бұл математикалық дегенерацияны анық түрде бұзуға болатынын көрсетеміз. Біз екі теория да ғалам бойынша алғашқы гравитациялық толқындардың таралуына әсер ететін $\alpha_M \neq 0$ модификацияланған гравитациялық үйкеліс терминінің бар екенін болжағанымен, олар әртүрлі поляризация спектрлеріне әкелетінін аналитикалық түрде дәлелдейміз. Қисықтық тудыратын өрістер мен бұралу тудыратын өрістер арасындағы құрылымдық айырмашылықтар пертурбативті режим кезінде жеке поляризация режимдерінің амплитудасы мен фазасын әртүрлі жолдармен өзгертеді.

Демек, біз болашақ кеңістіктік гравитациялық толқын интерферометрлері үшін нақты бақылау сынағын ұсынамыз. Гравитациялық толқындардың поляризациясын өлшеу арқылы, белгілі қашықтықтағы екілік компакт нысандардың бірігуі арқылы, бұл құралдар осы нәзік асимметриялық қолтаңбаларды бөліп ала алады. Бұл тәсіл тарихи математикалық дегенерацияларды айналып өтіп, кеңістік-уақыт матасының шынайы геометриялық табиғатын бізмәнді түрде анықтауға қабілетті таза, модельге тәуелсіз серпіліс ұсынады.

Түйін сөздер: күңгірт энергия, $f(R)$ гравитациясы, $f(T)$ гравитациясы, телепараллель гравитация, гравитациялық толқындар, кеңістік-уақыт геометриясы

©Уалиханова У.А.^{1*}, Курбан Е.Е.¹, Сыздыкова А.М.¹, Алтаева Г.С.²,
Алтайбаева А.Б.¹, 2026.

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,
Астана, Казахстан;

²Кокшетауский университета имени Ш.Уалиханова, Кокшетау, Казахстан.
E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com

РАЗРЕШЕНИЕ ВЫРОЖДЕНИЯ МЕТРИЧЕСКИХ И ТЕЛЕПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ТЕОРИЙ ГРАВИТАЦИИ ПОСРЕДСТВОМ МНОГОКАНАЛЬНОЙ ГРАВИТАЦИОННО-ВОЛНОВОЙ АСТРОНОМИИ

Уалиханова Улбосын — PhD, старший преподаватель, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,

E-mail: ulbossyn.ualikhanova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2351-0658>;

Курбан Ермахан — магистрант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,

E-mail: kuermahan@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-6639-0437>;

Сыздыкова Арайлым — PhD докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,

E-mail: syzdykovarailym@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8999-6566>;

Алтаева Гульсинай — магистр, старший преподаватель, Кокшетауский университет имени Ш. Уалиханова, Кокшетау, Казахстан,

E-mail: gulsinay.altayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2611-7413>;

Алтайбаева Азиза — PhD, ассоциированный профессор, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,

E-mail: aziza.ltaibayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9254-7027>.

Аннотация. Физическая природа тёмной энергии, а также возрастающая напряжённость Хаббла, выражающаяся в расхождении между локально измеряемой скоростью расширения Вселенной и значениями, полученными по данным раннего реликтового излучения, стимулировали развитие альтернативных теорий гравитации. Однако выбор между такими моделями остаётся сложной задачей. Стандартные расширения общей теории относительности, основанные на модификации метрического формализма, например $f(R)$ -гравитация, и их телепараллельные аналоги, такие как $f(T)$ -гравитация, могут демонстрировать сходную фоновую космологическую эволюцию, что приводит к высокой степени теоретического вырождения. Поскольку данные модели могут быть построены таким образом, чтобы предсказывать идентичную космическую кинематику, одних только измерений расширения Вселенной недостаточно для установления того, обусловлено ли космическое ускорение кривизной пространства-времени R или кручением T . В данной работе показано, что указанное математическое вырождение может быть устранено при анализе динамики космических структур, в частности в режиме линейных космологических возмущений. Аналитически показано, что, несмотря на наличие в обеих теориях модифицированного члена гравитационного трения $\alpha_M \neq 0$, влияющего на распространение первичных гравитационных волн во Вселенной, метрические и телепараллельные модели

приводят к различным спектрам поляризации. Структурные различия между полями, порождаемыми кривизной, и полями, связанными с кручением, по-разному изменяют амплитуду и фазу отдельных поляризационных мод в режиме возмущений. На этой основе предложен наблюдательный тест для будущих космических гравитационно-волновых интерферометров. Измерение поляризации гравитационных волн от слияний двойных компактных объектов с известными расстояниями позволит выявить тонкие асимметричные сигнатуры, характерные для различных геометрических описаний гравитации. Предложенный подход открывает возможность модельно-независимого различения метрических и телепараллельных теорий гравитации, преодоления их фонового космологического вырождения и уточнения геометрической природы пространства-времени.

Ключевые слова: тёмная энергия, $f(R)$ - гравитация, $f(T)$ - гравитация, телепараллельная гравитация, гравитационные волны, геометрия пространства-времени

Кіріспе. Қазіргі заманғы фундаменталды физика мен бақылаулық космология терең парадигмалық трансформация қарсаңында тұр. Соңғы онжылдықтар бойы Λ CDM (Лямбда-Салқын Күңгірт Материя) деп аталатын Стандартты космологиялық модель Әлемнің эволюциясын сипаттау үшін өте табысты теориялық іргетас қызметін атқарды. Альберт Эйнштейннің Жалпы салыстырмалық теориясына сүйенетін бұл модель бастапқы нуклеосинтезден бастап, реликті фондық сәулеленудің температуралық анизотропиясына, Әлемнің ірі масштабты құрылымының қалыптасуына және галактикалардың таралуына дейінгі бақылау деректерінің кең спектрін тамаша түсіндіреді. Алайда, осы көрнекті жетістіктерге қарамастан, Λ CDM моделі өз ішінде концептуалды осалдықтарды қамтиды (Nojiri, 2011, 2; Davies, 1980, 2; Riess, 1998, 3). Олардың ең бастысы — физикалық табиғаты белгісіз екі субстанцияны постулаттау қажеттілігі: бариондық емес салқын күңгірт материя және космологиялық Λ тұрақтысы арқылы сипатталатын күңгірт энергия. Әлемнің кейінгі эволюция сатыларында оның үдемелі ұлғаюіне жауапты күңгірт энергия теориялық физиканың ең үлкен жұмбағы болып табылады. Λ -ны кванттық өріс теориясы шеңберінде вакуум энергиясы ретінде түсіндіру әрекеттері байқалатын мәнмен ондаған шама ретіндегі апатты сәйкессіздікке әкеп соғады, бұл шешілмейтін дәл реттеу проблемасы ретінде белгілі (Dimopoulos, 2021, 3; Gamonal, 2021, 3).

Оның үстіне, соңғы жылдары бақылаулық космология бұрын-соңды болмаған дағдарысқа тап болды, бұл стандартты парадигманы қайта қарауды мәжбүрлік етеді. Мовасын "Хаббл кернеулігі" (H_0 tension) деп аталатын құбылыс — әртүрлі тәуелсіз әдістермен өлшенген Хаббл тұрақтысының мәндері арасындағы статистикалық маңызды сәйкессіздік. Цефеидтер мен Ia типті жаңа жұлдыздардың фотометриялық қашықтықтарын калибрлеуге негізделген жергілікті өлшеулер (атап айтқанда, SH0ES ынтымақтастығының деректері) $H_0 \approx 73 \text{ км/с/Мпк}$ мәнін береді (Capozziello, 2016, 3; Capozziello, 2008, 2). Сонымен бірге, Planck спутнигінің Λ CDM моделінің қатаң шеңберінде реликтік сәулеленуді талдау

негізінде алынған ерте Әлем деректерін экстраполяциялау едәуір аз мәнді болжайды: $H_0 \approx 67 \text{ км/с/Мпк}$. Бұл сәйкессіздік бүгінгі күні 5σ статистикалық маңыздылық деңгейіне жетті, бұл құбылысты аспаптар калибрлеудің қарапайым жүйелік қателерімен түсіндіру мүмкіндігін толығымен жоққа шығарады (Carozziello, 1996, 2). Бұл кернеулік Әлемнің ұлғаю жылдамдығын динамикалық түрде өзгерте отырып, жаңа физиканың кейінгі сатыларда ($z < 1$) іске қосылуы керек екенін айқын көрсетеді (Paliathanasis, 2019, 2).

Экзотикалық материялық субстанцияларды енгізудің табиғи және математикалық талғамды баламасы ретінде модификацияланған гравитация теориялары табылады. Егер ЖСТ макроскопиялық ғарыштық масштабтарда гравитациялық әсерлесудің түпкілікті теориясы болмаса, онда үдемелі ұлғаю құбылысы таза геометриялық әсерлермен түсіндірілуі мүмкін. Осы тұрғыда гравитацияның «геометриялық үштігі» деген іргелі тұжырымдамасы ерекше маңызға ие. Бұл тәсіл бойынша, гравитациялық әсерлесу математикалық тұрғыдан үш түрлі жолмен эквивалентті түрде сипатталуы мүмкін: ғарыш-уақыт қисықтығы арқылы (Левит-Чивита байланыстылығын қолданатын метрикалық гравитация), ғарыш-уақыт иірілуі арқылы (Витценбек байланыстылығына негізделген телепараллельдік гравитация) және неметриалық арқылы. Тарихи тұрғыдан ЖСТ-ның ең терең зерттелген кеңейтімі метрикалық $f(R)$ гравитациясы болып табылады, мұнда Эйнштейн-Гилберт классикалық әрекетіндегі Ричи қисықтық скаляры R одан алынған алгебралық функциямен алмастырылады. Алайда соңғы кездері ЖСТ-ның телепараллельдік эквиваленті және оның тікелей жалпыламасы — $f(T)$ гравитациясы орасан зор теориялық назар аударуда. $f(T)$ теориясының басты айырмашылығы — негізгі динамикалық айнымалы ретінде тетрада өрісі h_μ^a -ның ғарыштың нөлдік қисықтығында қолданылуында, бұл ретте бүкіл гравитациялық динамика иірілу скалярында T кодталған (Papagiannopoulos, 2018, 2).

Терең концептуалды айырмашылықтарға қарамастан, екі парадигма — метрикалық $f(R)$ және телепараллельдік $f(T)$ — кеңістіктік жазық Фридман-Робертсон-Уокер (FRW) метрикасының фондық деңгейінде феноменологиялық нашарлау мәселесіне белгілі бір дәрежеде ұшырауы мүмкін. Бұл теориялардың математикалық аппараты $f(R)$ немесе $f(T)$ функциялық пішінін алдын ала берілген кез келген фондық ғарыштық ұлғаю тарихын $H(z)$ өте жоғары дәлдікпен қайта шығаратындай етіп таңдауға мүмкіндік береді. Бұл ғарыштық қашықтықтардың интегралдық өлшемдеріне негізделген дәстүрлі тесттердің Әлемнің ірі масштабты құрылымын қисықтық пен иірілудің қайсысы басқаратыны туралы мәселені түбегейлі шеше алмайтынын білдіреді. Бұл кинематикалық нашарлауды қатаң түрде бұзу үшін пертурбативтік деңгейге көшу және жаңа астрофизикалық зондтарды тарту қажет (Cataneo, 2016, 3).

Астрофизиканың көп арналы астрономия дәуіріне енуі — қос нейтрон жұлдыздар жүйесінің бірігуінен GW170817 гравитациялық-толқындық сигналының және онымен бірге жүретін GRB 170817A гамма-шапшылымының эпохалды тіркелуімен белгіленді — бұл ғалымдарға гравитация негіздерін тестілеу үшін тамаша құрал берді. Гравитациялық толқындар метриканың тура қозғалыстары

болып табылады және оның ішкі динамикасы туралы бұрмаланбаған ақпаратты өз бойында алып жүреді. Модификацияланған гравитация теорияларында тензорлық қозғалыстардың таралуы эффективті Планк массасының эволюциясы есебінен модификацияланады. Бұл модификацияланған гравитациялық үйкеліс (α_M) құбылысын тудырады, ол гравитациялық толқын амплитудасының қосымша әлсіреуіне әкеп соғады. Соның салдарынан, LISA немесе Einstein Telescope сияқты детекторлармен өлшенетін гравитациялық-толқындық фотометриялық қашықтық d_L^{GW} электромагниттік қашықтықтан d_L^{EM} жүйелі түрде ауытқитын болады (Nojiri, 2011, 3).

Дегенмен, метрикалық және телепараллельдік гравитация арасындағы нашарлауды түпкілікті шешу үшін тек гравитациялық үйкелістің өзі жеткіліксіз. Бұл мақаланың орталық дәлелі гравитациялық сәулеленудің поляризациялық модаларының спектрін талдау болып табылады. ЖСТ тек екі тензорлық поляризацияның өмір сүруіне жол береді. Метрикалық $f(R)$ гравитациясына көшу өріс теңдеулерінің ретін төртінші ретке дейін арттырады, бұл жаңа скалярлық еркіндік дәрежесін тудырып, қосымша жаңа поляризацияны пайда етеді. Керісінше, телепараллельдік $f(T)$ гравитациясында дифференциалдық теңдеулер түбегейлі екінші ретті теңдеулер болып қалады, және теория скалярлық модаларды тудырмайды. Осылайша, біз гравитациялық үйкеліс әсерлері бір мезгілде анықталған жағдайда скалярлық поляризацияның болмауы біздің Өлеміміздің телепараллельдік сипаттамасының әділдігінің математикалық қатаң дәлелі ретінде қызмет ететінін көрсетеміз (Kumar, 2023, 2).

Мақалада келтірілген есептеулер мен физикалық тұжырымдарды қадағалауды жеңілдету үшін, төмендегі 1-кестеде негізгі шартты белгілер мен олардың сипаттамалары жүйеленіп көрсетілген.

Кесте 1. Негізгі космологиялық шартты белгілер және олардың физикалық сипаттамалары.

Шарт-ты белгі	Сипаттамасы (Анықтамасы)	Жұмыстағы физикалық мәні / рөлі
H_0	Хаббл тұрақтысы (H_0 tension)	Өртүрлі әдістермен өлшенген Ғаламның қазіргі кеңею жылдамдығы мәндерінің арасындағы қайшылықты сипаттайды.
$f(R)$	Метрикалық гравитация теориясы	Кеңістік-уақыттың қисықтығына негізделген жалпы салыстырмалылық теориясының (ЖСТ) кеңейтілген түрі.
$f(T)$	Телепараллельді гравитация теориясы	Кеңістік-уақыттың бұралуына негізделген баламалы гравитациялық модель.
α_M	Модификацияланған гравитациялық үйкеліс параметрі	Эффективті Планк массасының өзгеруінен туындайтын, гравитациялық толқын амплитудасын бәсеңдететін параметр.
h_{ij}	Метрианың кіші тензорлық ауытқулары	Кеңістікте таралатын гравитациялық толқындардың математикалық сипаттамасы.
$M_\star^2$	Эффективті Планк массасы	Модификацияланған гравитацияда уақыт бойынша динамикалық түрде өзгертін тиімді тартылыс тұрақтысы.
$a(t)$	Масштабтық фактор	Ғаламның уақыт бойынша геометриялық өлшемдерінің ұлғаюын (кеңеюін) сипаттайтын шама.
H	Хаббл параметрі $H = \dot{a}/a$	Ғаламның фондық деңгейдегі динамикалық кеңею жылдамдығын көрсетеді.

z	Қызыл ығысу	Космологиялық қашықтық пен уақыт масштабын өлшеуге арналған негізгі көрсеткіш.
d_L^{GW}	Гравитациялық-толқындық фотометриялық қашықтық	Гравитациялық толқын детекторлары (LISA, ET) арқылы сигнал амплитудасы негізінде өлшенетін қашықтық.
d_L^{EM}	Электромагниттік фотометриялық қашықтық	Жарық немесе басқа электромагниттік сәулелену көмегімен анықталатын стандартты космологиялық қашықтық.
h_b	"Тыныс алатын" (breathing) скалярлық поляризация	Тек $f(R)$ теориясына тән, кеңістіктің симметриялы радиалды созылуы мен сығылуын тудыратын қосымша мода.
h_+, h_x	«Қосу» және «айқас» тензорлық поляризациялары	ЖСТ пен барлық баламалы теорияларда кездесетін стандартты гравитациялық толқын поляризациялары.

Сондай-ақ, мәтінде кездесетін негізгі аббревиатуралар мен олардың физикалық сипаттамалары 2-кестеде көрсетілген.

Кесте 2. Мәтінде кездесетін негізгі қысқартулар мен аббревиатуралар тізімі.

Аббревиатура	Толық атауы (Түпнұсқа тілінде)	Қазақша баламасы / Физикалық мағынасы
ЖСТ	Жалпы салыстырмалылық теориясы	Альберт Эйнштейннің классикалық тартылыс күші теориясы.
Λ CDM	Lambda-Cold Dark Matter	Космологиялық константа мен суық күңгірт затты есепке алатын стандартты космологиялық модель.
CMB	Cosmic Microwave Background	Реликтілік сәулелену. Ғаламның ерте кезеңінен қалған фондық жылулық сәулелену.
FRW	Friedman-Robertson-Walker	Фридман-Робертсон-Уокер метрикасы. Кеңістігі тегіс және біртекті Ғаламды сипаттайтын стандартты метрика.
SH0ES	Supernovae and H_0 for the Equation of State of dark energy	Хаббл тұрақтысын цефеидтер мен Ia типті суперновалар арқылы локалды өлшейтін халықаралық зерттеу коллаборациясы.
GW	Gravitational Wave	Гравитациялық толқын. Массаның үдемелі қозғалысынан туындайтын кеңістік-уақыт метрикасының толқындары.
EM	Electromagnetic	Электромагниттік. Жарық спектріндегі (гамма-сәулелер, оптикалық және т.б.) бақылауларға қатысты сипаттама.
WKB	Wentzel-Kramers-Brillouin	ВКБ-жуықтауы. Кванттық механика мен толқындық физикада квазиклассикалық есептеулер жүргізуге арналған математикалық әдіс.
LISA	Laser Interferometer Space Antenna	Лазерлік интерферометриялық ғарыштық антенна. Гравитациялық толқындарды тіркеуге арналған ғарыштық интерферометр.
ET	Einstein Telescope	Эйнштейн телескопы. Гравитациялық толқындарды тіркеуге арналған келесі буынның жерүсті детекторы.

Зерттеу материалдары. Сәйкестікті бұзу үшін метриканың кіші тензорлық ауытқуларын h_{ij} көлденең ізсіз калибрлеуде ($\partial_i h_j^j = 0, h_i^i = 0$) енгіземіз. Модификацияланған гравитацияда гравитациялық толқынның таралуы эффективті Планк массасына M_*^2 тәуелді, ол уақыттың функциясына айналады (Qi, 2023, 2):

$$S^{(2)} \propto \int dt d^3x a^3 M_*^2 \left[\dot{h}_{ij}^2 - \frac{(\nabla h_{ij})^2}{a^2} \right], \quad (1)$$

мұнда $a(t)$ — масштабтық фактор.

Әдістері. Осы әрекетке Эйлер-Лагранж теңдеулерін қолданып, оны h_{ij} - бойынша вариациялаймыз:

$$\frac{d}{dt} (a^3 M_*^2 \dot{h}_{ij}) - a M_*^2 \nabla^2 h_{ij} = 0. \quad (2)$$

Уақыт бойынша туындыны көбейтіндінің туындысы ретінде аша отырып, біздің алатынымыз:

$$(3a^2 \dot{a} M_*^2 + a^3 \dot{M}_*^2) \ddot{h}_{ij} + a^3 M_*^2 \ddot{h}_{ij} - a M_*^2 \nabla^2 h_{ij} = 0. \quad (3)$$

Теңдеуді $a^3 M_*^2$ - ге бөліп және Фурье-кеңістігіне көшіп ($\nabla^2 \rightarrow -k^2$), оны канондық түрге келтіреміз:

$$\ddot{h}_{ij} + \left(3 \frac{\dot{a}}{a} + \frac{\dot{M}_*^2}{M_*^2} \right) \dot{h}_{ij} + \frac{k^2}{a^2} h_{ij} = 0. \quad (4)$$

Хаббл параметрі $H = \dot{a}/a$ және өлшемсіз гравитациялық үйкеліс параметрі $\alpha_M = \frac{\dot{M}_*^2}{H M_*^2}$ енгізе отырып, гравитациялық толқындардың таралуының жалпыланған теңдеуін аламыз:

$$\ddot{h}_{ij} + 3H(1 + \alpha_M) \dot{h}_{ij} + \frac{k^2}{a^2} h_{ij} = 0. \quad (5)$$

Гравитациялық толқындардың жылдамдығы жарық жылдамдығына тең болып қалады ($c_T = 1$), алайда $\alpha_M \neq 0$ болуы амплитуданың қосымша әлсіреуіне әкеп соғады.

Нәтижелер. Фотометриялық қашықтықтардың қатынасы. ВКБ-жуықтауы (WKB) шеңберінде толқын амплитудасы h кинетикалық мүше коэффициентінің түбіріне кері пропорционалды түрде әлсірейді:

$$h \propto \frac{1}{a\sqrt{M_*^2}}. \quad (6)$$

Фотометриялық қашықтық d_L өлшенетін амплитудаға кері пропорционал. Осыдан гравитациялық-толқындық қашықтықтың d_L^{GW} стандартты электромагниттік қашықтыққа қатынасы келесідей жазылады:

$$\frac{d_L^{GW}}{d_L^{EM}} = \frac{a\sqrt{M_*^2}}{a\sqrt{(M_*^2)_0}} = \sqrt{\frac{M_*^2}{(M_*^2)_0}}, \quad (7)$$

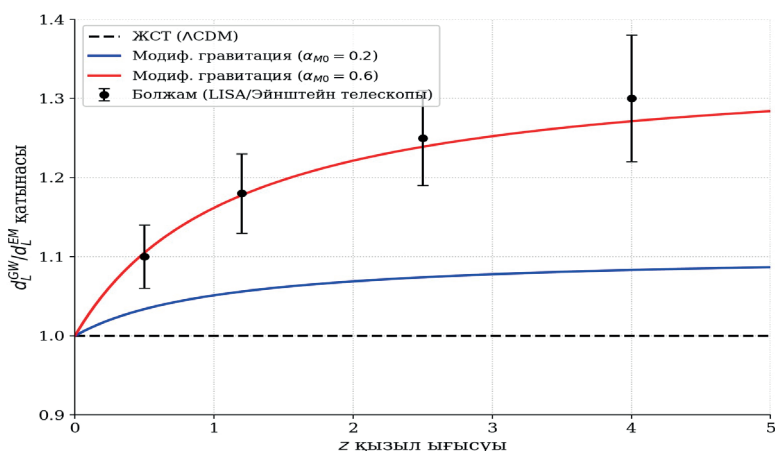
мұндағы 0 индексі $z = 0$ мәнді білдіреді. $\alpha_M = d(\ln M_*^2)/d(\ln a)$ анықтамасын $a = 1$ – ден a - ға дейін интегралдай отырып, келесідей теңдеу аламыз:

$$\ln \left(\frac{M_*^2}{(M_*^2)_0} \right) = \int_1^a \alpha_M d \ln a' \quad (8)$$

Қызыл ығысуға көшіп ($d \ln a = -dz/(1+z)$) және потенциалдап, соңғы қатынасты табамыз:

$$d_L^{GW}(z) = d_L^{EM}(z) \exp \left(\frac{1}{2} \int_0^z \frac{\alpha_M(z')}{1+z'} dz' \right). \quad (9)$$

Бұл құбылыс эффективті гравитациялық тұрақтының эволюциясын тікелей бақылау мүмкіндігін ашады. Әсер 1-суретте көрсетілген.



Сурет 1. Фотометриялық қашықтықтардың $\frac{d_L^{GW}}{d_L^{EM}}$ қызыл ығысуға z тәуелділігі. Нүктелі сызық ЖСТ (Λ CDM) болжамдарына сәйкес келеді, тұтас сызықтар — үйкеліс параметрінің α_M әртүрлі мәндері бар модификацияланған гравитация модельдері. Қателік жолақтары бар нүктелер LISA және Einstein Telescope детекторларының күтілетін сезімталдығын имитациялайды.

Талқылау. Бақылау аномалияларын талдау және түсіндіру. Біздің пертурбативтік талдауымыздың орталық элементі 1-сурет болып табылады, ол ғарыштық масштабтарда Жалпы салыстырмалылық теориясының негіздерін тексерудің түйінді бақылау критерийі болып саналады. Бұл графикте гравитациялық-толқындық фотометриялық қашықтықтың электромагниттік қашықтыққа қатынасының d_L^{GW}/d_L^{EM} қызыл ығысуға тәуелді эволюциясы көрсетілген. Осы қисықтардың артында тұрған физиканы түсіну бәсекелес геометриялық парадигмалар арасындағы нашарлауды бұзу үшін өте маңызды.

ЖСТ-ға негізделген стандартты ғарыштық модель (Λ CDM) шеңберінде гравитация тек ғарыш-уақыт қисықтығымен сипатталады, Планк массасы

өзгеріссіз қалады. Бұл координат жүйесінде гравитациялық толқындар мен фотондар бірдей таралады, тек Әлемнің адиабаттық ұлғаюы салдарынан әлсірейді. Математикалық тұрғыдан бұл екі қашықтық детерминациясының бірдей екендігімен көрінеді, ол графикте 1.0 деңгейіндегі қара нүктелі сызықпен көрсетілген. Осы көлденең сызықтан кез келген статистикалық маңызды ауытқу Эйнштейн теңдеулерімен сипатталмайтын «жаңа физиканың» болуын білдіреді.

Түсті қисықтар (көк және қызыл) гравитациялық үйкеліс параметрінің α_{MO} әртүрлі мәндерінде $f(R)$ және $f(T)$ сияқты модификацияланған гравитация теорияларының болжамдарына сәйкес келеді. Бұл қисықтардың z артқан сайын өсуі эффективті Планк массасының M_* динамикалық эволюциясының әсерін айқын көрсетеді. Кеңейтілген гравитация теорияларында ғарыш-уақыттың «тұтқырлығы» Әлемнің ұлғаюіне қарай өзгереді, бұл гравитациялық толқын амплитудасының қосымша әлсіреуіне әкеп соғады. Сигнал амплитудасы стандартты жағдайға қарағанда тезірек төмендейтіндіктен, детекторлармен тіркелетін d_L^{GW} қашықтығы жүйелі түрде асыра бағаланады. Осылайша, алыстағы объект бізге электромагниттік спектрге қарағанда гравитациялық спектрде «бұлыңғырырақ» болып көрінеді.

Теориялық қисықтардың үстіне салынған, LISA және Einstein Telescope сияқты болашақ интерферометрлердің өлшеулерін имитациялайтын деректер нүктелеріне ерекше назар аудару қажет. Қателіктердің тік жолақтары бар қара нүктелер «стандартты сиреналардың» — тіркелген электромагниттік аналогы бар қос нейтрон жұлдыздар жүйелерінің бірігу оқиғаларын тіркеу кезінде күтілетін статистикалық дәлдікті көрсетеді. Суреттен көрініп тұрғандай, келесі буын аспаптарының болжанатын сезімталдығы сенімділік аймақтары ЖСТ болжамдарының шегінен толығымен шығуына жеткілікті болады.

Демек, 1-сурет қосарлы функцияны орындайды. Біріншіден, ол тензорлық ауытқулардың абстрактілі математикалық формализмін тікелей эксперименттік тексеру жазықтығына көшіреді. Екіншіден, ол гравитация модификациясының кумулятивті сипатын көрсетеді: әсер үлкен ғарыштық қашықтықтарда анағұрлым айқын болады, бұл ГТ-астрономияның терең шолуларын күңгірт энергияның табиғатын зерттеудің таптырмас құралына айналдырады. Алайда, бұл тесттің ЖСТ-ны жоққа шығару қабілетіне қарамастан, ол модификацияның нақты нысаны (қисықтық немесе иірілу) туралы мәселені әлі де ашық қалдырады, бұл келесі бөлімде талқыланатын поляризациялық талдауды тартуды қажет етеді.

Поляризациялық модалар спектрі.

$d_L^{GW} \neq d_L^{EM}$ өлшемі ЖСТ-ны жоққа шығарады, бірақ $f(R)$ пен $f(T)$ -ні ажыратпайды. Дискриминатор ретінде теориялардың ішкі еркіндік дәрежелерінен туындайтын поляризациялық спектр шығады.

$f(R)$ гравитациясы үшін толық модификацияланған өріс теңдеулерін қарастырайық:

$$f_R R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} f g_{\mu\nu} - \nabla_\mu \nabla_\nu f_R + g_{\mu\nu} \square f_R = \kappa^2 T_{\mu\nu}^{(m)}, \quad (10)$$

мұндағы $f_R \equiv \partial f / \partial R$ Жасырын скалярлық еркіндік дәрежесін анықтау үшін осы теңдеудің ізін аламыз, оны кері метрика $g^{\mu\nu}$ арқылы жазамыз:

$$g^{\mu\nu} (f_R R_{\mu\nu}) = f_R R, \quad (11)$$

$$g^{\mu\nu} (-\frac{1}{2} f g_{\mu\nu}) = -2f, \quad (12)$$

$$g^{\mu\nu} (-\nabla_\mu \nabla_\nu f_R) = -\square f_R, \quad (13)$$

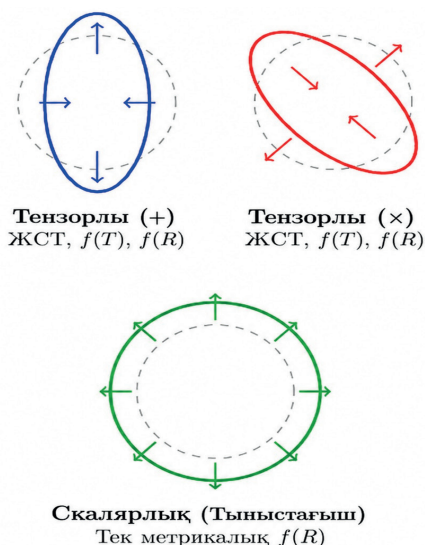
$$g^{\mu\nu} (g_{\mu\nu} \square f_R) = 4\square f_R. \quad (14)$$

Осы компоненттерді жинақтай отырып, жаңа скалярлық еркіндік дәрежесі (скалярон) үшін кинематикалық теңдеуді аламыз:

$$3\square f_R + f_R R - 2f = \kappa^2 T. \quad (15)$$

f_R - дің алдында Даламбер операторының $\square$ болуы қисықтықтың туындысының тәуелсіз массивтік скалярлық өріс ретінде таралатынын дәлелдейді. Бұл өрістің детекторлармен әсерлесуі қосымша поляризация h_b тудырады.

Телепараллельдік $f(T)$ гравитациясында қозғалыс теңдеулері екінші ретті болып қалады. Із алу салдары иірілу функцияларының алдында $\square$ операторының пайда болуына әкелмейді. Осылайша, негізгі $f(T)$ теориясы скалярлық модаларды қоздырмайды, тек стандартты тензорлық поляризациялар h_+ және $h_\times$ болжайды (2-сурет).



Сурет 2. Сынақ бөлшектер сақинасының әртүрлі поляризациялық модалар өткен кездегі деформациясының схематикалық бейнесі.

Қорытынды. Бұл жұмыста заманауи космологияның іргелі мәселесі — фондық ғарыштық ұлғаю деңгейіндегі гравитацияның балама теориялары арасындағы кинематикалық нашарлауды (дегенерацияны) жан-жақты теориялық зерттеу жүргізілді. Стандартты космологиялық модельдің (Λ CDM) өсіп келе жатқан дағдарысы, өзін ең айқын «Хаббл кернеулігі» H_0 tension) түрінде көрсетіп, Әлемнің кейінгі эволюция сатыларындағы динамикасы туралы түсініктерімізді қайта қарау қажеттілігін анық көрсетеді. Алайда, бұл мәселені модификацияланған гравитацияны енгізу арқылы шешу әрекеттері концептуалды кедергіге міндетті түрде тап болады: Жалпы салыстырмалық теориясының метрикалық кеңейтімдері (мысалы, ғарыш-уақыт қисықтығына негізделген $f(R)$ гравитациясы) және олардың телепараллельдік аналогтары (мысалы, абсолютті жазық кеңістіктегі иірілуге негізделген $f(T)$ гравитациясы) Хаббл параметрінің $H(z)$ бірдей ұлғаю тарихын математикалық тұрғыдан дәл қайта шығара алады. Бұл Ia типті жаңа жұлдыздар, бариондық акустикалық тербелістер және реликті сәулелену анизотропиясы сияқты дәстүрлі космологиялық зондтарды гравитациялық әсерлесудің шынайы геометриялық табиғатын ашу үшін түбегейлі жеткіліксіз етеді.

Біздің зерттеуіміздің басты нәтижесі көрсетілген феноменологиялық нашарлаудың фондық кинематикадан сызықтық ғарыштық ауытқулар динамикасына, атап айтқанда — гравитациялық толқындар физикасына көшу кезінде түпкілікті және қайтымсыз түрде жойылатынының қатаң аналитикалық дәлелі болып табылады. Астрофизиканың көп арналы астрономия дәуіріне енуі ғарыш-уақыт «матасын» тікелей тестілеу үшін бірегей терезені ашады.

Біріншіден, біз екі модификацияланған парадигманың — метрикалық және телепараллельдік — ғарыштық масштабтарда эффективті Планк массасының динамикалық эволюциясын болжайтынын көрсеттік. Бұл α_M параметрімен сипатталатын модификацияланған гравитациялық үйкеліс құбылысының пайда болуына әкеп соғады. Бұл үйкелістің болуы гравитациялық толқын амплитудасының кеңейіп жатқан Әлем арқылы таралу кезінде ЖСТ болжамдарынан өзгеше заңдылықпен әлсірейтінін білдіреді. Мұның салдары гравитациялық-толқындық фотометриялық қашықтық d_L^{GW} пен стандартты электромагниттік қашықтық d_L^{EM} арасындағы міндетті сәйкессіздік болып табылады. Келесі буын детекторларымен (LISA, Einstein Telescope немесе Cosmic Explorer) «стандартты сиреналар» (электромагниттік аналогы бар қос нейтрон жұлдыздар немесе қара құрдымдар) арқылы $d_L^{GW}/d_L^{EM} \neq 1$ қатынасын өлшеу инфрақызыл масштабтарда модификацияланған гравитацияның және ЖСТ-ның бұзылуының даусыз дәлелі қызметін атқарады.

Екіншіден, және бұл мақаланың орталық тұжырымы болып табылады, біз гравитациялық үйкеліс әсерінің өзі қисықтық пен иірілуді ажырата алмайтынын анықтадық. Шынайы дискриминатор (smoking gun) ретінде гравитациялық сәулеленудің поляризациялық спектрі шығады. Метрикалық $f(R)$ гравитациясы өріс теңдеулеріндегі жоғары (төртінші) туындылардың болуына байланысты қосымша скалярлық еркіндік дәрежесін — скаляронды міндетті түрде

тудырады. Бұл өрістің бақылаулық көрінісі үшінші, «тыныс алатын» (breathing) поляризациялық моданың қозуы болып табылады, ол кеңістіктің симметриялық радиалды созылуын және қысылуын тудырады. Керісінше, телепараллельдік $f(T)$ гравитациясында иірілу скаляры тетрада өрісінің тек бірінші туындыларын қамтиды, соның арқасында қозғалыс тендеуі қатаң екінші ретті сақтайды. Соның салдарынан, негізгі $f(T)$ теориясы таралатын скалярлық модаларды қамтымайды және тек екі классикалық тензорлық поляризацияны («плюс» және «крест») болжайды.

Осы теориялық нәтижелерге сүйене отырып, біз болашақ бақылау миссиялары үшін қатаң екі сатылы алгоритмді тұжырымдаймыз. Егер келесі онжылдықтың интерферометрлері гравитациялық-толқындық сигналдың аномальді әлсіреуін тіркесе (бұл $\alpha_M \neq 0$ дәлелдейді), зерттеушілер көп детекторлы поляризациялық жауап талдауын жүргізулері қажет. «Тыныс алатын» мода анықталған жағдайда, Әлем Риман геометриясымен басқарылады және $f(R)$ парадигмасы өзінің эксперименттік расталуын алады. Алайда, егер гравитациялық сәулелену қатаң тензорлық болып шықса, біз метрикалық модификацияны математикалық түрде жоққа шығаруға мәжбүр боламыз. Мұндай бақылаулар комбинациясы Әлемнің ірі масштабты құрылымының іргелі негізі ғарыш-уақыттың қисықтығы емес, оның Абсолютті Параллелизм геометриясымен сипатталатын иірілуі екенінің дәлелі болады.

Кеңірек философиялық және теориялық тұрғыдан алғанда, бұл нәтижелер күңгірт энергия мәселесін шешу шеңберінен әлдеқайда асып түседі. Гравитацияның телепараллельдік табиғатының расталуы теориялық физиканың негізін түбегейлі қайта қарауды талап етеді. Иірілуі бар геометрия гравитацияны калибрлік теориялар тіліне (электромагнетизм мен ядролық күштерге ұқсас) — нақтырақ айтқанда, ғарыш-уақыт трансляциялар тобына қайта тұжырымдауға мүмкіндік беретін табиғи математикалық құрылымға ие. Бұл, өз кезегінде, жоғары ретті метрикалық тәсілдерге тән патологиялардан бос, кванттық гравитацияның эффективті теориясын (УФ-аяқталу) құруға жаңа, математикалық тұрғыдан сәйкес жолдар аша алады. Осылайша, алдағы онжылдықтардағы прецизионды гравитациялық-толқындық астрономия H_0 дағдарысын шешіп қана қоймай, сонымен қатар фундаменталды әсерлесулердің түпкілікті бірыңғай теориясын құрудың дұрыс жолын көрсете алады. Осы жұмыста ұсынылған феноменологиялық маркерлер болашақ революциялық ашылулар үшін теориялық негізді қалайды.

References

- Capozziello S. et al. (1996) Noether symmetries in cosmology. La Rivista del Nuovo Cimento (1978-1999). – Vol. 19. – P. 1-114. (in Eng).
- Capozziello S., Francaviglia M. (2008) Extended theories of gravity and their cosmological and astrophysical applications. General Relativity and Gravitation. – No. 40. – P. 357-420. (in Eng).
- Capozziello S., SJ G.G., Vernieri D. (2016) String duality transformations in $f(R)$ gravity from Noether symmetry approach. Journal of Cosmology and Astroparticle Physics. – Vol. 2016. – No. 01. – P. 015. (in Eng).

Cataneo M. et al. (2016) Cluster abundance in chameleon $f(R)$ gravity I: toward an accurate halo mass function prediction. *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*. – Vol. 2016. – No. 12. – P. 024. (in Eng).

Davies P.C.W. (1980) Quantum fields in curved space. *General Relativity and Gravitation*. Vol. 1. One hundred years after the birth of Albert Einstein. Edited by A. Held. New York. – Vol. 1. – P. 255. (in Eng).

Dimopoulos K., Sánchez López S. (2021) Quintessential inflation in Palatini $f(R)$ gravity. *Physical Review D*. – Vol. 103. – No. 4. – P. 043533. (in Eng).

Gamonal M. (2021) Slow-roll inflation in $f(R, T)$ gravity and a modified Starobinsky-like inflationary model. *Physics of the Dark Universe*. – Vol. 31. – P. 100768. (in Eng).

Hohmann M., Järv L., Ualikhanova U. (2017) Dynamical systems approach and generic properties of $f(T)$ cosmology. *Physical Review D*. – Vol. 96. – No. 4. – P. 043508. (in Eng).

Kumar S. et al. (2023) New late-time constraints on $f(R)$ gravity. *Physics of the Dark Universe*. – Vol. 42. – P. 101281. (in Eng).

Nojiri S., Odintsov S.D. (2011) Unified cosmic history in modified gravity: from $F(R)$ theory to Lorentz non-invariant models. *Physics Reports*. – Vol. 505. – No. 2-4. – P. 59-144. (in Eng).

Nojiri S., Odintsov S.D. (2011) Unified cosmic history in modified gravity: from $F(R)$ theory to Lorentz non-invariant models. *Physics Reports*. – Vol. 505. – No. 2-4. – P. 59-144. (in Eng).

Paliathanasis A. (2019) Similarity solutions for the Wheeler–Dewitt equation in $f(R)$ -cosmology. *The European Physical Journal C*. – Vol. 79. – No. 12. – P. 1031. (in Eng).

Papagiannopoulos G. et al. (2018) New integrable models and analytical solutions in $f(R)$ cosmology with an ideal gas. *Physical Review D*. – Vol. 97. – No. 2. – P. 024026. (in Eng).

Qi Y. et al. (2023) The late-time dynamics of $F(R)$ gravity dark energy model. *Physics of the Dark Universe*. – Vol. 40. – P. 101180. (in Eng).

Riess A.G. et al. (1998) Observational evidence from supernovae for an accelerating universe and a cosmological constant. *The astronomical journal*. – Vol. 116. – No. 3. – P. 1009. (in Eng).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 134–150

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.442>

UDC: 524.8
IRSTI: 41.03.01

©Zhadyranova A.A.^{1*}, Yerzhan B.², 2026.

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;

²Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan.

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

DYNAMICS OF BOUNCE REGIMES IN MODIFIED TELEPARALLEL GRAVITY

Zhadyranova Aliya — PhD, Senior Lecturer, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1153-3438>;

Yerzhan Bauyrzhan — PhD student, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: bauyr.phy@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-5652-1039>.

Abstract. In this paper, a parametric analysis of bounce cosmology is carried out within the framework of $f(\mathbf{T}, \mathcal{T})$ gravity. The main objective of the study is to determine the influence of the model parameters on the dynamics of the bounce scenario and on the evolution of the main cosmological quantities. A bounce-type scale factor describing a non-singular cosmological evolution is considered, and on the basis of this parametrization the time behavior of the Hubble parameter, the deceleration parameter, the energy density, the pressure, and the equation-of-state parameter is investigated. In addition, particular attention is paid to the regions of fulfillment or violation of the null, weak, strong, and dominant energy conditions.

The results obtained for different parameter values make it possible to characterize the physical regimes in the vicinity of the bounce, to determine the behavior of the energy density and pressure at the bounce point, and to assess the possibility of the transition of the equation-of-state parameter into the phantom region. The analysis shows that the violation of the null energy condition plays an important role in the realization of the bounce scenario, whereas in some parametric regimes the dominant energy condition remains satisfied.

During the study, analytical expressions and graphical results are compared, making it possible to evaluate the influence of the model parameters on the character of the bounce, the fulfillment of the energy conditions, and the effective cosmological dynamics. The obtained results contribute to a deeper understanding of bounce cosmology in $f(\mathbf{T}, \mathcal{T})$ gravity and may serve as a theoretical basis for further investigations of non-singular

cosmological models in modified gravity theories. In addition, the conclusions help identify physically admissible parameter regions for bounce scenarios and may provide a basis for future studies of stability and cosmological perturbations.

Keywords: bounce cosmology, $f(T, \mathcal{T})$ gravity, parametric analysis, energy conditions, Hubble parameter, equation of state, scale factor

Financing. This work is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan, Grant No. AP26194585 Gravitational wave and observational estimates of the constraints of cosmological models with non-minimal coupling.

For citations: Zhadyranova A.A., Yerzhan B. Dynamics of Bounce Regimes in Modified Teleparallel Gravity. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.2. Pp. 134–150. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.442>

©Жадыранова А.А.^{1*}, Ержан Б.², 2026.

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан;

²Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

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

МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН ТЕЛЕПАРАЛЛЕЛЬ ГРАВИТАЦИЯДАҒЫ СЕРПІЛІС РЕЖИМДЕРІНІҢ ДИНАМИКАСЫ

Жадыранова Алия — PhD, аға оқытушы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1153-3438>;

Ержан Бауыржан — PhD докторант, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: bauyr.phy@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-5652-1039>.

Аннотация. Бұл жұмыста $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясы аясындағы серпіліс космологиясына параметрлік талдау жүргізіледі. Зерттеудің негізгі мақсаты - модель параметрлерінің серпіліс сценарийінің динамикасына және негізгі космологиялық шамалардың эволюциясына әсерін анықтау болып табылады. Жұмыста сингулярлықсыз космологиялық эволюцияны сипаттайтын серпіліс түріндегі масштабтық фактор қарастырылып, осы параметрлену негізінде Хаббл параметрі, баяулау параметрі, энергия тығыздығы, қысым және күй теңдеуі параметрінің уақыт бойынша өзгерісі зерттеледі. Сонымен қатар энергия шарттарының, атап айтқанда нөлдік, әлсіз, күшті және доминант энергия шарттарының орындалу немесе бұзылу аймақтарына ерекше назар аударылады. Параметрлердің әртүрлі мәндері үшін алынған нәтижелер серпіліс маңындағы физикалық режимдердің ерекшеліктерін сипаттауға, серпіліс нүктесіндегі энергия тығыздығы мен қысымның сипатын анықтауға, сондай-ақ күй теңдеуі параметрінің фантомдық аймаққа өту мүмкіндігін бағалауға мүмкіндік береді.

Жүргізілген талдау нәтижесінде серпіліс сценарийінің жүзеге асуы үшін нөлдік энергия шартының бұзылуы маңызды рөл атқаратыны, ал кейбір параметрлік режимдерде доминант энергия шартының сақталатыны көрсетіледі.

Зерттеу барысында аналитикалық өрнектер мен графиктік талдау нәтижелері өзара салыстырылып, модель параметрлерінің серпіліс сипатына, энергия шарттарының орындалуына және тиімді космологиялық динамикаға әсері бағаланады. Зерттеу нәтижелері $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясындағы серпіліс космологиясының қасиеттерін тереңірек түсінуге жағдай жасайды және модификацияланған гравитация теорияларындағы сингулярлықсыз космологиялық модельдерді одан әрі зерттеу үшін теориялық негіз бола алады. Сонымен бірге алынған қорытындылар серпіліс сценарийлерінің физикалық тұрғыдан жарамды параметрлер облысын анықтауға және болашақта орнықтылық пен космологиялық ұйытқуларды зерттеуге бағытталған жұмыстарға негіз болады.

Түйін сөздер: серпіліс космологиясы, $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясы, параметрлік талдау, энергия шарттары, Хаббл параметрі, күй теңдеуі, масштабтық фактор

©Жадыранова А.А.^{1*}, Ержан Б.², 2026.

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва,
Астана, Казахстан;

²Казахский национальный педагогический университет имени Абая,
Алматы, Казахстан.

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

ДИНАМИКА ОТСКОКОВЫХ РЕЖИМОВ В МОДИФИЦИРОВАННОЙ ТЕЛЕПАРАЛЛЕЛЬНОЙ ГРАВИТАЦИИ

Жадыранова Алия — PhD, старший преподаватель, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва, Астана, Казахстан,

E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1153-3438>;

Ержан Бауыржан — PhD докторант, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,

E-mail: bauyr.phy@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-5652-1039>.

Аннотация. В данной работе проведён параметрический анализ космологии отскока в рамках модифицированной телепараллельной $f(T, \mathcal{T})$ -гравитации. Целью исследования является определение влияния параметров модели на динамику сценария отскока и эволюцию основных космологических величин. Рассматривается масштабный фактор отскокового типа, описывающий несингулярную космологическую эволюцию. На основе выбранной параметризации исследовано временное поведение параметра Хаббла, параметра замедления, плотности энергии, давления и параметра уравнения состояния. Особое внимание уделено анализу выполнения и нарушения энергетических условий, включая нулевое, слабое, сильное и доминантное условия энергии. Полученные для различных

значений параметров результаты позволили охарактеризовать особенности физических режимов вблизи точки отскока, определить характер поведения плотности энергии и давления, а также оценить возможность перехода параметра уравнения состояния в фантомную область. Показано, что реализация сценария космологического отскока тесно связана с нарушением нулевого энергетического условия, тогда как в отдельных параметрических режимах сохраняется выполнение доминантного энергетического условия. В ходе исследования аналитические выражения сопоставлены с результатами графического анализа, что позволило оценить влияние параметров модели на характер отскока, выполнение энергетических условий и особенности эффективной космологической динамики. Полученные результаты способствуют более глубокому пониманию свойств космологии отскока в рамках $f(T, T)$ -гравитации и могут служить теоретической основой для дальнейших исследований несингулярных космологических моделей в теориях модифицированной гравитации. Кроме того, сделанные выводы позволяют определить физически допустимые области параметров сценариев отскока и могут быть использованы при последующем изучении устойчивости решений и космологических возмущений.

Ключевые слова: космология отскока, $f(T, T)$ гравитация, параметрический анализ, энергетические условия, параметр Хаббла, уравнение состояния, масштабный фактор

Кіріспе. Қазіргі космологиядағы іргелі мәселелердің бірі - Ғаламның бастапқы күйін сипаттау және бастапқы сингулярлық мәселесін шешу. Осы тұрғыда стандартты гравитациялық теорияларды жалпылайтын модификацияланған модельдерге қызығушылық артып келеді. Сондай бағыттардың бірі - кеңістік-уақыт геометриясын қисықтық арқылы емес, бұралу арқылы сипаттайтын телепараллель гравитация. Бұл тәсіл космологиялық эволюцияны жаңа қырынан зерттеуге мүмкіндік береді. Телепараллель теория негізінде ұсынылған $f(T, T)$ гравитациясында гравитациялық әрекет бұралу скаляры T мен энергия-импульс тензоры ізі T -ға тәуелді болады, сондықтан мұндай модельдерде Ғалам динамикасының күрделі режимдерін қарастыруға жол ашылады (Bahamonde et al., 2023; Harko et al., 2014). Телепараллель гравитацияның ковариантты және инвариантты тұжырымдалуы кейінгі еңбектерде кеңейтіліп, оның геометриялық негіздері мен физикалық интерпретациясы тереңірек зерттелді (Krššák et al., 2019). Кейінгі зерттеулерде бұл теория аясында космологиялық шешімдерді реконструкциялау, термодинамикалық қасиеттерді талдау, орнықтылықты зерттеу (Junior et al., 2016; Momeni and Myrzakulov, 2014), ұйытқулардың өсуін сипаттау және астрофизикалық қолданбалар қарастырылған, бұл $f(T, T)$ гравитациясының қазіргі космологиядағы маңызын көрсетеді (Farrugia and Said, 2016; Pace and Said, 2017).

Сонымен қатар, қазіргі теориялық космологиядағы өзекті бағыттардың бірі - сингулярлықсыз эволюциялық сценарийлерді құру. Мұндай балама тәсілдердің бірі ретінде серпіліс космологиясы кеңінен зерттелуде. Бұл сценарийде Ғалам

ығысу фазасынан ұлғаю фазасына сингулярлықсыз өтеді, яғни эволюция белгілі бір серпіліс нүктесі арқылы жүзеге асады (Battefeld and Peter, 2015; de Haro and Cai, 2015). Серпіліс космологиясы сингулярлықсыз эволюцияны сипаттайтын балама сценарий ретінде ұзақ уақыттан бері зерттеліп келеді, ал мұндай модельдердің жалпы қасиеттері мен негізгі қиындықтары шолу еңбектерінде жан-жақты қарастырылған (Novello and Perez Bergliaffa, 2008). Мұндай модельдер бастапқы сингулярлық мәселесін қайта қарастыруға және ерте Ғалам физикасын жаңа тұрғыдан түсіндіруге мүмкіндік береді. Телепараллель гравитация аясында да серпіліс сценарийлері белсенді түрде қарастырылған. Атап айтқанда, $f(T)$ гравитациясында matter bounce түріндегі шешімдер алынған, ал кеңейтілген телепараллель теорияларда симметриялы, осцилляциялық және басқа да серпіліс модельдері зерттелген (Cai et al., 2011; de la Cruz-Dombriz et al., 2018). Телепараллель теорияларда серпіліс шешімдері тек $f(T)$ гравитациясында ғана емес, сондай-ақ $f(T, B)$ тәрізді кеңейтілген үлгілерде де алынған, мұнда симметриялы, тербелмелі, matter bounce және басқа серпіліс сценарийлері зерттелген (Caguana et al., 2020). Дегенмен сингулярлықсыз космологиялық модельдерді құруда орнықтылық мәселесі әрдайым маңызды болып қалады, сондықтан олардың физикалық жарамдылығын бағалау кезінде бұл аспект міндетті түрде ескерілуі қажет (Kobayashi, 2016).

Осыған байланысты $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясындағы серпіліс космологиясын зерттеу ерекше қызығушылық тудырады. Бұл теория телепараллель тәсілдің артықшылықтарын материялық секторға тәуелділікпен ұштастырады, сондықтан Ғалам эволюциясының бейсызық және күрделі режимдерін зерттеуге қолайлы негіз береді. Соңғы жұмыстардың бірінде $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясы шеңберінде серпіліс сценарийі қарастырылып, оның космографиялық параметрлері зерттелген (Zubair et al., 2022). Алайда мұндай модельдердегі негізгі космологиялық шамалардың және энергия шарттарының параметрлерге тәуелді сипаттамасы әлі де тереңірек талдауды қажет етеді. Осыған орай, бұл жұмыстың мақсаты $-f(T, \mathcal{T})$ гравитациясындағы серпіліс космологиясына параметрлік талдау жүргізу. Зерттеуде модель параметрлерінің масштабтық факторға, Хаббл параметріне, баяулау параметріне, энергия тығыздығына, қысымға және күй теңдеуі параметріне әсері қарастырылады. Сонымен бірге серпіліс маңындағы энергия шарттарының орындалуы талданып, космологиялық эволюцияның физикалық тұрғыдан рұқсат етілетін режимдері сипатталады.

Қазіргі кезеңде модификацияланған гравитация теориялары ерте Ғалам эволюциясын түсіндіруде маңызды құралдардың біріне айналып отыр. Стандартты космологиялық модель көптеген бақылаулық нәтижелерді сәтті сипаттағанымен, бастапқы сингулярлық мәселесі, инфляциялық сценарийдің кейбір теориялық қиындықтары және қараңғы энергия мен қараңғы материяның табиғаты сияқты мәселелер толық шешімін тапқан жоқ (Battefeld and Peter, 2015). Осыған байланысты классикалық жалпы салыстырмалылық теориясын кеңейтетін және гравитациялық әсерді басқа геометриялық шамалар арқылы сипаттайтын балама тәсілдерге қызығушылық артуда. Осындай бағыттардың ішінде телепараллель

гравитация мен оның жалпыланған нұсқалары ерекше орын алады, себебі олар екінші ретті теңдеулермен сипатталады және космологиялық есептерде салыстырмалы түрде қолайлы математикалық аппарат береді (Bahamonde et al., 2023). $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясы осы тұрғыдан алғанда өте өзекті модельдердің бірі болып табылады. Бұл теорияда гравитациялық лагранжиан тек бұралу скалярына ғана емес, сондай-ақ энергия-импульс тензорының ізіне де тәуелді болады. Мұндай тәуелділік зат пен геометрия арасындағы байланысты күшейтіп (Harko et al., 2014), Ғалам эволюциясының дәстүрлі модельдерде кездеспейтін жаңа режимдерін қарастыруға мүмкіндік береді (Junior et al., 2016). Әсіресе серпіліс космологиясында мұндай қосымша байланыс нөлдік энергия шартының тиімді бұзылуына жағдай жасап, ығысу фазасынан ұлғаю фазасына сингулярлықсыз өтуді жүзеге асыруы мүмкін. Сондықтан $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясындағы серпіліс модельдерін параметрлік тұрғыдан талдау олардың физикалық мазмұнын ашу үшін ғана емес, сонымен қатар модификацияланған гравитацияның ерте Ғаламды сипаттаудағы мүмкіндіктерін бағалау үшін де маңызды болып табылады (Kobayashi, 2016; Zubair et al., 2022).

Материалдар және негізгі әдістер. Бұл жұмыста серпіліс космологиясы телепараллель гравитацияның жалпыланған $f(T, \mathcal{T})$ моделінде зерттеледі. Телепараллельдік тәсілде гравитациялық әсер кеңістік–уақыт қисықтығымен емес, бұралуымен сипатталады, ал негізгі айнымалы ретінде тетрада өрісі алынады (Bahamonde et al., 2023). Бұл негізде құрылған $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясы бұралу скаляры T мен энергия–импульс тензоры ізі $\mathcal{T}$ -ға тәуелді болатындықтан, зат пен геометрия арасындағы байланыс күрделеніп, космологиялық эволюцияның жаңа режимдерін сипаттауға мүмкіндік береді (Harko et al., 2014). Бұл теорияның космологиядағы қолданылуы, атап айтқанда Λ CDM моделін реконструкциялау, термодинамика, орнықтылық, құрылымдардың өсуін сипаттау бағыттарында кеңінен қарастырылған (Farrugia and Said, 2016).

Сингулярлықсыз ерте Ғалам сценарийлерін түсіндіруде серпіліс космологиясы маңызды орын алады. Мұндай модельде Ғалам алдымен ығысу фазасынан өтеді, содан кейін белгілі бір сәтте серпіліс жасап, ұлғаю фазасына көшеді (Battefeld and Peter, 2015; de Haro and Cai, 2015). Телепараллельдік теорияларда серпіліс шешімдері $f(T)$ және оның кеңейтілген нұсқаларында да алынған (Cai et al., 2011; de la Cruz-Dombriz et al., 2018). Сонымен бірге сингулярлықсыз модельдер үшін энергия шарттарының орындалуы мен орнықтылық мәселесі ерекше мәнге ие (Kobayashi, 2016). $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясындағы серпіліс сценарийлерінің космографиялық параметрлері де бұрын зерттелген (Zubair et al., 2022), сондықтан бұл жұмыста олардың параметрлерге тәуелді сипатын тереңірек қарастыру көзделеді.

Модельдің әрекеті және негізгі шамалар. Телепараллель гравитацияда негізгі динамикалық айнымалы ретінде метрика емес, тетрада өрісі алынады. Тетрада кеңістік-уақыттың әр нүктесінде жанама кеңістікте ортонормаль базис құрып, кеңістік-уақыт геометриясын сипаттауға мүмкіндік береді (Bahamonde et al., 2023). Жалпы салыстырмалылық теориясында гравитация римандық

қисықтықпен байланысты болса, телепараллель тәсілде гравитациялық өзара әсер бұралу арқылы өрнектеледі. Осы себепті бұл теорияда Вейценбёк байланысы пайдаланылады, ол нөлдік қисықтықпен, бірақ нөлден өзгеше бұралуымен сипатталады (Harko et al., 2014). Мұндай геометриялық құрылым гравитациялық өрістің динамикасын жаңа түрде жазуға мүмкіндік береді және космологияда сингулярлықсыз шешімдерді зерттеу үшін ыңғайлы негіз қалыптастырады.

$f(T, \mathcal{T})$ теориясында бұралу скаляры T мен энергия-импульс тензорының ізі $\mathcal{T}$ бір мезгілде ескеріледі. Егер $f(T, \mathcal{T}) = 0$ деп алсақ, онда теория телепараллель эквиваленттің қарапайым түріне келеді, ал $f(T)$ немесе $f(T, \mathcal{T})$ түріндегі жалпылаулар енгізілген кезде космологиялық динамика айтарлықтай күрделене түседі (Harko et al., 2014). Бұл жалпылау әсіресе біртекті және изотропты Ғалам модельдерінде маңызды, себебі геометриялық және материялық үлестердің бірігуі арқылы энергия тығыздығы мен қысымның тиімді сипаты өзгереді. Соның нәтижесінде серпіліс, үдемелі ұлғаю немесе фантомдық аймаққа өту сияқты құбылыстарды бір теория шеңберінде сипаттау мүмкін болады (Junior et al., 2016; Momeni and Myrzakulov, 2014). $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясындағы әсер мына түрде жазылады (Harko et al., 2014).

$$S = \frac{1}{16\pi G} \int d^4x e [T + f(T, \mathcal{T})] + \int d^4x e \mathcal{L}_m, \quad (1)$$

мұндағы $e = \det(e_\mu^A) = \sqrt{-g}$, G - гравитациялық тұрақты, $\mathcal{L}_m$ - заттың лагранж тығыздығы. Бұл әсерден алынатын өрістік теңдеулер метрикалық және материялық шамалардың өзара байланысын анықтайды. $f(T, \mathcal{T})$ моделінің ерекшелігі - заттың қасиеттері тек энергия тығыздығы мен қысым арқылы ғана емес, сонымен бірге олардың $\mathcal{T}$ ізі арқылы да геометриялық секторға тікелей әсер етеді. Сондықтан мұндай теориялар стандартты космологиялық эволюциядан ауытқитын режимдерді, соның ішінде серпіліс тәрізді сингулярлықсыз өтулерді сипаттауға қабілетті (Zubair et al., 2022).

Біртекті және изотропты Ғаламды сипаттау үшін жазық Фридман–Леметр–Робертсон–Уокер метрикасы қарастырылады

$$ds^2 = dt^2 - a^2(t)(dx^2 + dy^2 + dz^2). \quad (2)$$

Осы фон үшін диагональ тетрада

$$e_\mu^A = \text{diag}(1, a(t), a(t), a(t)), \quad (3)$$

түрінде алынады. Мұндай жағдайда бұралу скаляры

$$T = -6H^2, \quad (4)$$

қатынасы арқылы өрнектеледі, мұндағы $H = \frac{\dot{a}}{a}$ - Хаббл параметрі (Harko et al., 2014).

Зат идеал сұйықтық ретінде қарастырылып, энергия–импульс тензоры келесідей жазылады

$$T_{\mu\nu} = (\rho + p)u_\mu u_\nu - p g_{\mu\nu}, u_\mu = (1, 0, 0, 0), \quad (5)$$

мұнда ρ - энергия тығыздығы, p - қысым. Энергия–импульс тензорының ізі келесідей болып табылады

$$\mathcal{T} = \rho - 3p. \quad (6)$$

Серпіліс параметрленуі. Бұл жұмыста серпіліс сценарийін сипаттау үшін масштабтық фактордың келесі параметрленуі пайдаланылады (Zubair et al., 2022)

$$a(t) = \sqrt{a_0^2 + \gamma^2 t^2}, \quad (7)$$

Таңдалған $a(t)$ параметрленуі серпіліс космологиясын сипаттаудың қарапайым әрі көрнекі тәсілдерінің бірі болып табылады. Бұл өрнектің басты артықшылығы - серпіліс нүктесінде масштабтық фактордың нөлге түспеуі. Яғни $t = 0$ кезінде $a(0) = a_0$, сондықтан модельде бастапқы сингулярлық пайда болмайды. Мұндағы a_0 параметрі серпіліс сәтіндегі Ғаламның минимал өлшемін сипаттайды, ал γ параметрі ығысу мен ұлғаю фазаларының қарқындылығын басқарады. γ неғұрлым үлкен болса, серпіліс маңындағы эволюция соғұрлым тез жүреді және қисықтардың пішіні соғұрлым айқын өзгереді.

Серпіліс сценарийін кинематикалық тұрғыдан сипаттауда Хаббл параметрінің таңба өзгерісі шешуші рөл атқарады. Егер $t < 0$ кезінде $H < 0$ болса, бұл Ғаламның ығысу фазасында екенін көрсетеді. Ал $t = 0$ кезінде $H = 0$ болуы серпіліс нүктесіне сәйкес келеді. Одан кейін $t > 0$ үшін $H > 0$ болып, Ғалам ұлғаю фазасына өтеді. Демек, таңдалған параметрлену серпіліс космологиясының негізгі физикалық шарттарын табиғи түрде орындайды. Баяулау параметрі де осы маңда айқын өзгеріп, серпіліс маңындағы динамиканың бірқалыпты емес сипатын көрсетеді. Бұл параметрленуден Хаббл параметрі келесідей табылады.

$$H(t) = \frac{\dot{a}}{a} = \frac{\gamma^2 t}{a_0^2 + \gamma^2 t^2}. \quad (8)$$

Сондықтан

$$H(t) < 0 (t < 0), H(0) = 0, H(t) > 0 (t > 0), \quad (9)$$

яғни Ғалам ығысу фазасынан серпіліс арқылы ұлғаю фазасына өтеді.

Хаббл параметрінің уақыт бойынша туындысы

$$\dot{H}(t) = \frac{\gamma^2(a_0^2 - \gamma^2 t^2)}{(a_0^2 + \gamma^2 t^2)^2}, \quad (10)$$

болса, баяулау параметрі келесі түрде анықталады

$$q(t) = -1 - \frac{H}{\dot{H}} = -\frac{a_0^2}{\gamma^2 t^2}. \quad (11)$$

$f(T, \mathcal{T})$ моделі. Параметрлік талдауда сызықтық емес модель қолданылады

$$f(T, \mathcal{T}) = \alpha\sqrt{-T} + \beta\mathcal{T}, \quad (12)$$

мұндағы α және β - еркін тұрақтылар. Бұл модель серпіліс космологиясын зерттеуде қолданылған және бейсызық әсерлерді есепке алуға мүмкіндік береді (Zubair et al., 2022). (12) моделі бейсызық сипатқа ие және серпіліс космологиясын зерттеуде тиімді үлгілердің бірі болып саналады. Бұл модельде $\sqrt{-T}$ мүшесі бұралу скалярының бейсызық үлесін сипаттаса, $\beta\mathcal{T}$ мүшесі зат пен геометрия арасындағы қосымша байланысты анықтайды. Соның нәтижесінде энергия тығыздығы мен қысымның уақыт бойынша өзгерісі стандартты космологиядағыдан өзгеше сипатқа ие болады. Мұндай модельдерде фантомдық аймаққа өту, теріс қысымның пайда болуы және энергия шарттарының тиімді бұзылуы табиғи түрде жүзеге асуы мүмкін (Harko et al., 2014).

Параметрлік тұрғыдан карағанда α және β тұрақтылары модельдің негізгі физикалық қасиеттерін анықтайды. α бұралу үлесінің салмағын белгілесе, β материялық іздің теорияға әсерін сипаттайды. Ал γ серпіліс параметрленуінің кинематикалық сипатына жауап береді. Сондықтан дәл осы параметрлердің әртүрлі мәндерін салыстыру модельдің қай режимдерде сингулярлықсыз серпілісті тиімді сипаттайтынын анықтауға мүмкіндік береді.

Аталған функция үшін туындылар $f_T = -\frac{\alpha}{2\sqrt{-T}}$, $f_{\mathcal{T}} = \beta$, $f_{TT} = -\frac{\alpha}{4(-T)^{\frac{3}{2}}}$, $f_{T\mathcal{T}} = 0$. Осы өрнектерді модификацияланған космологиялық теңдеулерге қою арқылы энергия тығыздығы $\rho(t)$, қысым $p(t)$ және күй теңдеуі параметрі есептеледі

$$\omega(t) = \frac{p(t)}{\rho(t)}. \quad (13)$$

Талдау барысында α , β және γ параметрлерінің әртүрлі мәндері үшін аталған шамалардың уақыт бойынша эволюциясы салыстырылады.

Энергия шарттары. Энергия шарттары гравитациялық теорияларда қарастырылатын модельдің физикалық орындылығын бағалаудың маңызды

құралдарының бірі болып табылады. Жалпы салыстырмалылықта және оның әртүрлі модификацияларында энергия-импульс тензорының қасиеттері кеңістік-уақыт геометриясының эволюциясымен тікелей байланысты болғандықтан, энергия шарттары материяның қандай режимдерде физикалық тұрғыдан рұқсат етілетінін анықтауға мүмкіндік береді. Басқаша айтқанда, бұл шарттар энергия тығыздығының, қысымның және олардың әртүрлі комбинацияларының таңбасын талдау арқылы модельдің шынайы физикалық жүйеге сәйкес келу-келмеуін көрсетеді. Стандартты космологиялық модельдерде энергия шарттары көбінесе оң энергия тығыздығы мен каузалдықтың сақталуын қамтамасыз ететін негізгі критерийлердің бірі ретінде қарастырылады.

Классикалық космологияда энергия шарттарының маңызы әсіресе Ғалам эволюциясының ерте кезеңдерін сипаттауда айқын көрінеді. Мысалы, әлсіз энергия шарты материяның энергия тығыздығының теріс болмауын талап етеді, ал доминант энергия шарты энергия ағынының жарық жылдамдығынан артық таралмауын қамтамасыз ететін шектеу ретінде қарастырылады. Күшті энергия шарты, өз кезегінде, гравитацияның тартылыс сипатын күшейтетін шарттардың бірі болып табылады. Алайда серпіліс космологиясында жағдай өзгеше болады: мұнда Ғалам ығысу фазасынан ұлғаю фазасына өтуі үшін тиімді түрде тартылысты әлсірететін немесе оған қарсы әсер ететін динамикалық режим қажет. Осындай жағдайда кейбір энергия шарттарының, әсіресе нөлдік энергия шартының, бұзылуы серпіліс сценарийінің табиғи бөлігі ретінде қарастырылады.

Серпіліс космологиясында ең маңызды шарттардың бірі - нөлдік энергия шарты (NEC). Оның бұзылуы $\rho + p < 0$ түрінде жазылады және дәл осы теңсіздік Хаббл параметрінің таңба өзгертуіне мүмкіндік беретін негізгі механизмдердің бірі болып табылады. Егер бұл шарт орындала берсе, онда классикалық жағдайда ығысудан кейінгі ұлғаюға тегіс өту қиынға соғады. Сондықтан серпіліс модельдерінде NEC бұзылуы көбінесе міндетті немесе кемінде өте маңызды белгі ретінде қарастырылады. Бұл құбылыс әсіресе модификацияланған гравитация теорияларында, соның ішінде $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясында, геометриялық түзетулердің есебінен пайда болуы мүмкін.

Энергия шарттарын талдау тек формальды математикалық тексеріс емес, сонымен қатар модельдің физикалық интерпретациясын тереңдететін құрал болып табылады. Мысалы, егер $\rho \geq 0$ және $\rho - p \geq 0$ шарттары орындалса, онда модельде материяның тиімді сипаттамасы толықтай бейфизикалық аймаққа кетпейді деп қорытынды жасауға болады. Ал $\rho + 3p < 0$ болуы Ғаламның үдемелі динамикасына немесе серпіліс маңындағы антигравитациялық тәртізді әсерлерге сәйкес келуі мүмкін. Сондықтан энергия шарттарының әрқайсысын жеке қарастыру модельдің әртүрлі физикалық қасиеттерін ашуға көмектеседі.

Бұл жұмыста энергия шарттары қарастырылған $f(T, \mathcal{T})$ моделі үшін параметрлік тұрғыдан талданады. Негізгі мақсат - параметрлердің өзгеруі кезінде қандай шарттар орындалатынын, қайсысы бұзылатынын және бұл құбылыстардың серпіліс сценарийімен қалай байланысатынын анықтау. Әсіресе серпіліс маңындағы $\rho + p$ комбинациясының таңбасы мен күй

теңдеуі параметрінің сипаты басты назарда болады. Мұндай талдау модельдің сингулярлықсыз космологиялық эволюцияны сипаттаудағы жарамдылығын бағалауға мүмкіндік береді. Модельдің физикалық орындылығын бағалау үшін энергия шарттары қарастырылады.

Нөлдік энергия шарты:

$$\text{NEC: } \rho + p \geq 0.$$

Әлсіз энергия шарты:

$$\text{WEC: } \rho \geq 0, \rho + p \geq 0.$$

Доминант энергия шарты:

$$\text{DEC: } \rho \geq 0, \rho - p \geq 0.$$

Күшті энергия шарты:

$$\text{SEC: } \rho + 3p \geq 0.$$

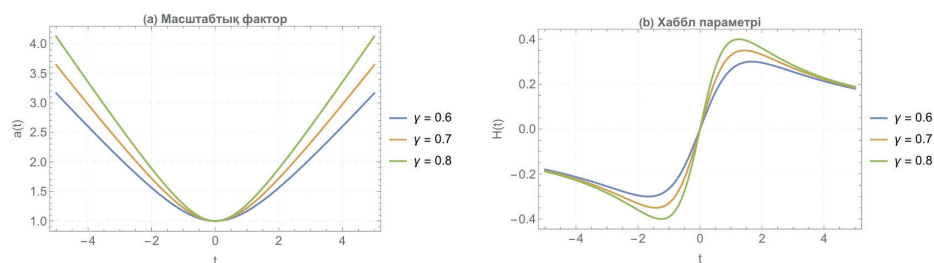
Серпіліс космологиясында **NEC**-тің бұзылуы аса маңызды, себебі дәл осы шарттың бұзылуы ығысудан ұлғаюға өтуді қамтамасыз етеді (Battefeld and Peter, 2015; Kobayashi, 2016). Бастапқы $f(T, \mathcal{T})$ серпіліс моделінде де серпіліс маңында **NEC** пен **SEC** бұзылып, ал **DEC** сақталатыны көрсетілген, бұл бейсингуляр серпіліс үшін маңызды белгі болып табылады (Zubair et al., 2022).

Зерттеу әдісі. Параметрлік талдау барысында $a(t)$, $H(t)$, $\rho(t)$, $p(t)$, $\omega(t)$, сондай-ақ $\rho + p$, комбинацияларының уақыт бойынша өзгерісі зерттеледі. Негізгі назар β және γ параметрлерінің әсеріне аударылады, ал α параметрі қажет болған жағдайда тұрақты етіп алынады. Сандық есептеулер мен графиктік визуализация Wolfram Mathematica бағдарламасында орындалады. Мұндай тәсіл серпіліс маңындағы фантомдық аймаққа өту мүмкіндігін, энергия шарттарының бұзылу немесе орындалу облыстарын және модельдің физикалық тұрғыдан жарамды параметрлер кеңістігін анықтауға мүмкіндік береді.

Нәтижелер және талқылау. Бұл бөлімде $f(T, \mathcal{T}) = \alpha\sqrt{-T} + \beta\mathcal{T}$ сызықтық емес моделі үшін серпіліс космологиясының параметрлік қасиеттері талданады. Есептеулерде $a_0 = \alpha = 1$, $\beta = 0.3$ және $\gamma = 0.6, 0.7, 0.8$ мәндері пайдаланылады, өйткені осы параметрлерде модельдің негізгі динамикалық ерекшеліктері анық көрінеді. Қарастырылған параметрлену (7) серпіліс сценарийінің орындалуын қамтамасыз етеді. Масштабтық фактор $t = 0$ нүктесінде нөлге түспей, $a(0) = a_0$ минимал мәнін қабылдайды. Ал Хаббл параметрі (8) $t < 0$ аймақта теріс, $t = 0$ кезінде нөлге тең, ал $t > 0$ аймақта оң мәндерге өтеді. Бұл Ғаламның ығысу фазасынан ұлғаю фазасына серпіліс арқылы өтетінін көрсетеді. γ

артқан сайын масштабтық фактор қисығының еңістігі күшейіп, серпіліс маңындағы эволюция жылдамырақ болады.

1-суреттен серпіліс сценарийінің орындалатыны анық көрінеді. Масштабтық фактор $t = 0$ нүктесінде нөлге түспей, $a(0) = a_0$ минимал мәнін қабылдайды, ал Хаббл параметрі $t < 0$ аймақта теріс, $t = 0$ кезінде нөлге тең және $t > 0$ аймақта оң мәндерге өтеді. Бұл Ғаламның ығысу фазасынан ұлғаю фазасына серпіліс арқылы өтетінін көрсетеді.



Сурет 1. а) $a(t)$ масштабтық факторы мен б) $H(t)$ Хаббл параметрінің уақытқа тәуелділігі әртүрлі γ мәндері үшін.

Алынған графиктерден серпіліс сценарийінің тек сапалық емес, сонымен қатар параметрлік тұрғыдан да орнықты екені байқалады. γ параметрінің өзгеруі масштабтық фактор мен Хаббл параметрінің пішініне тікелей әсер етеді: γ өскен сайын серпіліс маңындағы қисықтардың еңістігі артып, эволюция қарқыны күшейеді. Бұл модельде серпіліс тек бір ғана арнайы жағдайда емес, белгілі бір параметрлер аралығында жүзеге асатынын көрсетеді. Осындай параметрлік орнықтылық серпіліс космологиясын физикалық тұрғыдан мағыналы ету үшін маңызды, өйткені кездейсоқ емес, салыстырмалы түрде тұрақты сценарийлер ғана реалистік модель ретінде қарастырылуы мүмкін.

Энергия тығыздығының серпіліс нүктесі маңында максимумға жетуі Ғалам динамикасының осы аймақта ерекше белсенді екенін көрсетеді. Бұл құбылыс ығысу фазасынан кейінгі ауысу сәтінде тиімді гравитациялық әсердің күшеюімен байланысты. Ал қысымның бүкіл эволюция бойында теріс болуы серпіліс механизмінің негізгі физикалық тіректерінің бірі болып табылады. Теріс қысым тек жеделдетілген ұлғаюды ғана емес, сонымен қатар серпіліс маңында тартылысқа қарсы тиімді әсер тудыруы мүмкін. Сондықтан энергия тығыздығы мен қысымның осындай сипаты қарастырылған модельдің сингулярлықсыз эволюцияны жүзеге асыру қабілетін нақтылайды.

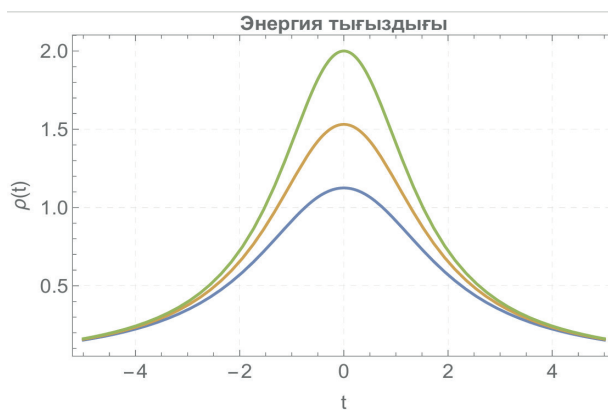
Қарастырылған $f(T, \mathcal{T}) = \alpha\sqrt{-T} + \beta\mathcal{T}$ сызықтық емес моделін және серпіліс параметрленуін модификацияланған космологиялық теңдеулерге қою арқылы энергия тығыздығы ρ , қысым p және күй теңдеуі параметрі ω үшін келесі өрнектер алынады

$$\rho = \frac{9(\beta-1)\gamma^4 t^2 - 15\beta\gamma^2}{(4\beta(\beta+1)-3)(\gamma^2 t^2 + 1)^2} \quad (14)$$

$$p = \frac{3\gamma^2(\beta + (\beta + 1)\gamma^2 t^2 + 2)}{(4\beta(\beta + 1) - 3)(\gamma^2 t^2 + 1)^2}, \quad (15)$$

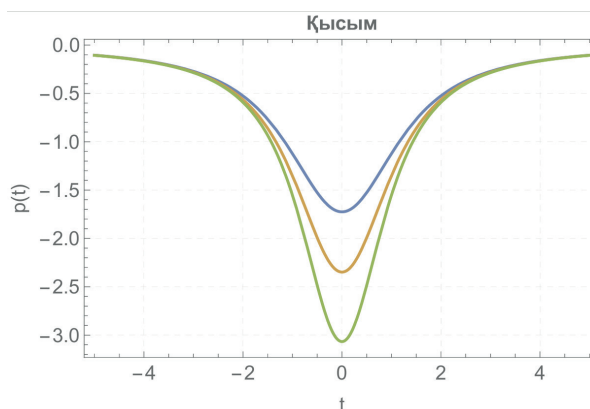
$$\omega = \frac{\beta + (\beta + 1)\gamma^2 t^2 + 2}{3(\beta - 1)\gamma^2 t^2 - 5\beta}. \quad (16)$$

2-суретке сәйкес, $\rho(t)$ энергия тығыздығы серпіліс нүктесіне жақындаған сайын айтарлықтай өсіп, $t = 0$ маңында шыңға жетеді, одан кейін уақыт ұлғайған сайын біртіндеп кемиді. Мұндай сипат серпіліс сәтінде энергияның күшті қайта үлестірілуі жүретінін көрсетеді.



Сурет 2. $\rho(t)$ энергия тығыздығының уақытқа тәуелділігі әртүрлі γ мәндері үшін.

3-суреттен қысымның $p(t)$ бүкіл эволюция бойында теріс болып қалатыны көрінеді. Бұл серпіліс механизмінде теріс қысымның маңызды рөл атқаратынын білдіреді. Серпіліске дейін ол аз ғана теріс мәндерден басталып, серпіліс маңында анағұрлым терең теріс аймаққа өтеді, ал серпілістен кейін қайтадан шағын теріс мәндерге ұмтылады. Бұл нәтиже серпіліс механизмінде теріс қысымның маңызды рөл атқаратынын білдіреді.



Сурет 3. $p(t)$ қысымның уақыт бойынша өзгерісі әртүрлі γ мәндері үшін.

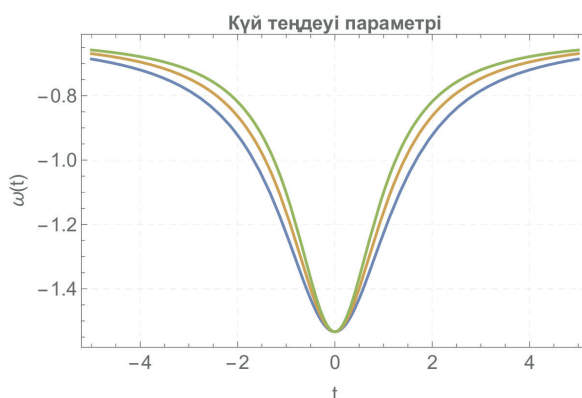
4-суретке сәйкес, Күй тендеуі параметрі $\omega(t)$ барлық қарастырылған γ мәндері үшін теріс болып қалады және серпіліс маңында

$$\omega = -1$$

фантомдық шекарасын кесіп өтіп,

$$\omega < -1$$

аймағына енеді. Бұл ығысудан ұлғаюға өтуді қамтамасыз ететін негізгі белгілердің бірі болып табылады.



Сурет 4. $\omega(t)$ күй тендеуі параметрінің уақытқа тәуелділігі әртүрлі γ мәндері үшін.

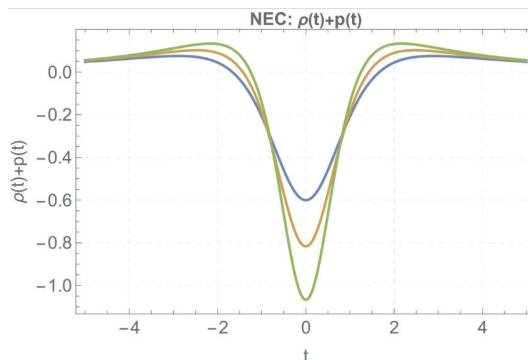
Күй тендеуі параметрінің $\omega < -1$ аймағына өтуі серпіліс сценарийін түсіндіруде аса маңызды. Бұл нәтиже модельдің фантомдық тәртіпке уақытша өтетінін білдіреді. Әдетте дәл осындай аймақта нөлдік энергия шарты бұзылып, ығысудан ұлғаюға өтуді қамтамасыз ететін тиімді жағдайлар қалыптасады. Қарастырылған модельде бұл өту тек математикалық формальдылық емес, графиктерде айқын байқалатын нақты динамикалық ерекшелік ретінде көрінеді. Сондықтан $\omega(t)$ -нің сипаттамасы серпіліс космологиясының физикалық интерпретациясында негізгі көрсеткіштердің бірі болып табылады.

Энергия шарттарын талдауда негізгі назар нөлдік энергия шартына сәйкес келетін $\rho + p$ комбинациясына аударылады. Сызықтық емес модель үшін ол

$$\rho + p = \frac{6(\alpha+1)\gamma^2(\gamma^2 t^2 - 1)}{(2\beta+3)(\gamma^2 t^2 + 1)^2}, \quad (17)$$

түрінде жазылады. Бұл өрнектен серпіліс маңында $\rho + p < 0$ болатыны көрінеді, яғни нөлдік энергия шарты (NEC) бұзылады, соның нәтижесінде күй тендеуі параметрі фантомдық аймаққа өтеді және сингулярлықсыз серпіліс

жүзеге асады. **5-суретте** серпіліс маңында $\rho + p < 0$ екені анық байқалады, яғни бұл аймақта NEC шарты бұзылады.



Сурет 5. $\rho + p$ комбинациясының уақытқа тәуелділігі, серпіліс маңында NEC шартының бұзылуы көрсетілген.

Нөлдік энергия шартының бұзылуы серпіліс космологиясының ең маңызды теориялық белгілерінің бірі болып саналады. Стандартты жалпы салыстырмалылық аясында мұндай бұзылу ерекше немесе проблемалық жағдай ретінде қарастырылса, модификацияланған гравитация теорияларында ол тиімді геометриялық үлестердің салдарынан табиғи түрде туындауы мүмкін (Kobayashi, 2016). Қарастырылған $f(T, \mathcal{T})$ моделінде дәл осындай жағдай байқалады: серпіліс маңында $\rho + p < 0$, яғни NEC бұзылады. Бұл өз кезегінде серпіліс нүктесінің қалыптасуына, Хаббл параметрінің таңба өзгертуіне және Ғаламның ұлғаю фазасына өтуіне мүмкіндік береді. Демек, алынған нәтижелер $f(T, \mathcal{T}) = \alpha\sqrt{-T} + \beta\mathcal{T}$ моделінің серпіліс космологиясын сәтті сипаттай алатынын көрсетеді. Масштабтық фактор серпіліс нүктесінде нөлге түспейді, Хаббл параметрі таңбасын өзгертеді, энергия тығыздығы максимумға жетеді, қысым теріс болып қалады, ал күй теңдеуі параметрі фантомдық аймаққа өтеді. Сонымен қатар серпіліс маңында NEC-тің бұзылуы сингулярлықсыз өтудің қажетті шарты ретінде көрінеді. Сондықтан бұл модель $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясындағы физикалық тұрғыдан мазмұнды серпіліс сценарийлерінің бірі болып табылады.

Қорытынды. Жалпы алғанда, жүргізілген параметрлік талдау $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясының серпіліс космологиясын сипаттауда жеткілікті икемді теория екенін көрсетті. Бір жағынан, таңдалған модель салыстырмалы түрде қарапайым аналитикалық өрнектер береді. Екінші жағынан, ол серпіліс, фантомдық аймақ, теріс қысым және энергия шарттарының бұзылуы сияқты күрделі физикалық құбылыстарды сипаттай алады. Бұл $f(T, \mathcal{T})$ теориясының тек формальды жалпылау емес, нақты космологиялық есептерге қолдануға болатын мазмұнды модель екенін айғақтайды. Болашақта мұндай талдауды бақылаулық шектеулермен, орнықтылық шарттарымен және космологиялық ұйытқулармен толықтыру теорияның қолданылу аясын одан әрі кеңейте түседі.

Бұл жұмыста $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясы аясындағы серпіліс космологиясына параметрлік талдау жүргізілді. Зерттеу барысында $f(T, \mathcal{T}) = \alpha\sqrt{-T} + \beta\mathcal{T}$ сызықтық емес моделі және $a(t) = \sqrt{a_0^2 + \gamma^2 t^2}$ түріндегі серпіліс параметрленуі қарастырылды. Талдау нәтижелері модельдің сингулярлықсыз серпіліс сценарийін сипаттай алатынын көрсетті яғни, масштабтық фактор серпіліс нүктесінде нөлге түспейді, ал Хаббл параметрі теріс мәннен оң мәнге ауысып, Ғаламның ығысу фазасынан ұлғаю фазасына өтуін сипаттайды.

Параметрлік зерттеу γ параметрінің серпіліс маңындағы эволюция қарқынына елеулі әсер ететінін көрсетті. Энергия тығыздығы серпіліс нүктесі маңында максимумға жетеді, қысым бүкіл эволюция бойында теріс мәндерде сақталады, ал күй теңдеуі параметрі серпіліс аймағында фантомдық шекараны кесіп өтіп, $\omega < -1$ облысына енеді. Бұл нәтижелер қарастырылған модельде серпіліс механизмінің жүзеге асуын қамтамасыз ететін физикалық шарттардың орындалатынын білдіреді.

Энергия шарттарын талдау серпіліс маңында $\rho + p < 0$ болатынын, яғни нөлдік энергия шартының бұзылатынын көрсетті. Бұл - серпіліс космологиясының негізгі белгілерінің бірі. Сонымен қатар алынған нәтижелер бойынша күшті энергия шарты да бұзылады, ал доминант энергия шарты сақталады. Демек, қарастырылған $f(T, \mathcal{T})$ моделі серпіліс космологиясын сипаттауда физикалық тұрғыдан мазмұнды және параметрлік тұрғыдан қолайлы модельдердің бірі болып табылады.

Жүргізілген талдау $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясындағы серпіліс сценарийінің қасиеттерін тереңірек түсінуге мүмкіндік береді. Алынған нәтижелерді болашақта модельдің орнықтылығын, космологиялық ұйытқуларын және параметрлер кеңістігінің кеңейтілген облыстарын зерттеуде пайдалануға болады.

References

- Bahamonde S., Dialektopoulos K.F., Escamilla-Rivera C., Farrugia G., Gakis V., Hendry M., Hohmann M., Said J.L., Mifsud J., and Di Valentino E. (2023). Teleparallel gravity: From theory to cosmology. Reports on Progress in Physics. – No. 86. – P. 026901. DOI:https://doi.org/10.1088/1361-6633/ac9cef (in Eng.).
- Battefeld D., and Peter P. (2015). A critical review of classical bouncing cosmologies. Physics Reports. – No. 571. – P. 1-66. DOI:https://doi.org/10.1016/j.physrep.2014.12.004 (in Eng.).
- Cai Y.-F., Chen S.-H., Dent J.B., Dutta S., and Saridakis E.N. (2011). Matter bounce cosmology with the $f(T)$ gravity. Classical and Quantum Gravity. – No. 28. – P. 215011. DOI:https://doi.org/10.1088/0264-9381/28/21/215011 (in Eng.).
- Caruana M., Farrugia G., and Levi Said J. (2020). Cosmological bouncing solutions in $f(T, \mathcal{B})$ gravity. The European Physical Journal C. – No. 80. – P. 640. DOI:https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-020-8204-3 (in Eng.).
- de Haro J., and Cai Y.-F. (2015). An extended matter bounce scenario: Current status and challenges. General Relativity and Gravitation. – No. 47. – P. 95. DOI:https://doi.org/10.1007/s10714-015-1936-y (in Eng.).
- de la Cruz-Dombriz Á., Farrugia G., Said J.L., and Sáez-Chillón Gómez D. (2018). Cosmological bouncing solutions in extended teleparallel gravity theories. Physical Review D. – No. 97. – P. 104040. DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevD.97.104040 (in Eng.).

Farrugia G., and Said J.L. (2016). Growth factor in $f(T, \mathcal{T})$ gravity. *Physical Review D*. – No. 94. – P. 124004. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.94.124004> (in Eng.).

Harko T., Lobo F.S.N., Otalora G., and Saridakis E.N. (2014). $f(T, \mathcal{T})$ gravity and cosmology. *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*. – No. 2014. – P. 021. DOI: <https://doi.org/10.1088/1475-7516/2014/12/021> (in Eng.).

Junior E.L.B., Rodrigues M.E., Salako I.G., and Houndjo M.J.S. (2016). Reconstruction, thermodynamics and stability of the Λ CDM model in $f(T, \mathcal{T})$ gravity. *Classical and Quantum Gravity*. – No. 33. – P. 125006. DOI: <https://doi.org/10.1088/0264-9381/33/12/125006> (in Eng.).

Kobayashi T. (2016). Generic instabilities of non-singular cosmologies in Horndeski theory: A no-go theorem. *Physical Review D*. – No. 94. – P. 043511. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.94.043511> (in Eng.).

Krššák M., van den Hoogen R.J., Pereira J.G., Böhmer C.G., and Coley A.A. (2019). Teleparallel theories of gravity: Illuminating a fully invariant approach. *Classical and Quantum Gravity*. – No. 36. – P. 183001. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6382/ab2e1f> (in Eng.).

Momeni D., and Myrzakulov R. (2014). Cosmological reconstruction of $f(T, \mathcal{T})$ gravity. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*. – No. 11. – P. 1450077. DOI: <https://doi.org/10.1142/S0219887814500777> (in Eng.).

Novello M., and Perez Bergliaffa S.E. (2008). Bouncing cosmologies. *Physics Reports*. – No. 463. – P. 127-213. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2008.04.006> (in Eng.).

Pace M., and Said J.L. (2017). A perturbative approach to neutron stars in $f(T, \mathcal{T})$ -gravity. *The European Physical Journal C*. – No. 77. – P. 283. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-017-4838-1> (in Eng.).

Zubair M., Farooq M., and Güdekli E. (2022). A study of bouncing cosmology in framework of $f(T, \mathcal{T})$ gravity with probing of cosmographic parameters. *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*. – No. 19. – P. 2250135. DOI: <https://doi.org/10.1142/S0219887822501353> (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 151–163

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.443>

UDC:524.8
IRSTI: 41.23.17

©Zhusupova N.K., 2026.

Kazakh National Pedagogical University after Abai, Almaty, Kazakhstan.
E-mail: zhnaz88@gmail.com

APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS IN THE ANALYSIS OF GRAVITATIONAL WAVES AND COSMOLOGICAL MODELS

Zhusupova Nazym — PhD student, Kazakh National Pedagogical University after Abai, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: zhnaz88@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0001-8900-0829>.

Abstract. The article examines the problem of complex assessment and adaptation of the effectiveness of machine learning (ML) and deep learning (DL) algorithms in processing the continuous data stream of modern interferometric detectors (LIGO, Virgo, KAGRA) and statistical testing of cosmological models. The main purpose of the work is to fundamentally improve the detection quality of weak gravitational wave signals resulting from the coalescence of double compact objects in conditions of a low signal-to-noise ratio ($\text{SNR} < 8$), and to develop an accelerated, mathematically sound technique for limiting modified gravity parameters based on observational data. The study conducted an extensive comparative analysis of the capabilities of convolutional neural networks (1D and 2DCNN) and recurrent architectures (LSTM) to suppress stochastic noise, detect anomalies, and classify quasi-periodic signals. As the main scientific novelty of the work, an algorithmic solution is proposed that makes it possible to increase the accuracy of detecting gravitational waves against the background of complex nonlinear noise to 96.1% compared with the traditional approach of matched Filtering. In addition, the time for calculating the fundamental parameters of modified cosmological models (in particular, $f(T, \mathcal{T})$ gravity), such as the Hubble parameter ($H(z)$) and the primary scale factor (a_0), with the integration of international data and observational data from Pantheon+ based on the use of neural network regression models is several times reduced compared to using traditional MCMC methods.

The results obtained prove the high rate of convergence, the statistical stability of machine learning methods, and the extremely high potential for use in future third-generation detectors (Einstein Telescope, Cosmic Explorer) for pre-filtering real-time data and estimating cosmological parameters. This approach opens up new

perspectives in solving the problems of Hubble tension and singularity in the standard Λ CDM model.

Keywords: Gravitational waves, machine learning, signal processing, interferometric detectors, neural networks

***For citations:** Zhushupova N.K. Application of Machine Learning Methods in the Analysis of Gravitational Waves and Cosmological Models. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.2. Pp. 151–163. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.443>*

©Жусупова Н.К., 2026.

Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: zhnaz88@gmail.com

МАШИНАЛЫҚ ОҚЫТУ ӘДІСТЕРІН ГРАВИТАЦИЯЛЫҚ ТОЛҚЫНДАР МЕН КОСМОЛОГИЯЛЫҚ МОДЕЛЬДЕРДІ ТАЛДАУДА ҚОЛДАНУ

Жусупова Назым — PhD докторант, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: zhnaz88@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0001-8900-0829>.

Аннотация. Мақалада заманауи интерферометрлік детекторлардың (LIGO, Virgo, KAGRA) үздіксіз деректер ағынын өңдеудегі және космологиялық модельдерді статистикалық тестілеудегі машиналық оқыту (МО) мен терең оқыту (ТО) алгоритмдерінің тиімділігін кешенді бағалау және бейімдеу мәселесі зерттеледі. Жұмыстың негізгі мақсаты – төмен сигнал-шу қатынасы ($\text{SNR} < 8$) жағдайында қос ықшам объектілердің коалесценциясынан туындайтын әлсіз гравитациялық-толқындық сигналдарды анықтау сапасын түбегейлі арттыру және бақылау мәліметтері негізінде модификацияланған гравитация параметрлерін шектеудің үдетілген, математикалық негізделген әдістемесін жасау болып табылады. Зерттеу барысында стохастикалық шуды басу, аномалияларды анықтау мен квазипериодтық сигналдарды классификациялауға арналған конволюциялық нейрондық желілердің (1D және 2DCNN) және рекурренттік архитектуралардың (LSTM) мүмкіндіктеріне кеңауқымды салыстырмалы талдау жүргізілді. Жұмыстың негізгі ғылыми жаңалығы ретінде, дәстүрлі келісілген сүзгілеу тәсілімен салыстырғанда, күрделі бейсызық шу фонында гравитациялық толқындарды анықтаудың дәлдік көрсеткішін 96.1%-ға дейін арттыруға мүмкіндік беретін алгоритмдік шешім ұсынылған. Сонымен қатар, нейрожелілік регрессиялық модельдерді қолдану негізінде халықаралық және Pantheon+ бақылау деректерін интеграциялай отырып, модификацияланған космологиялық модельдердің (атап айтқанда, $f(T, \mathcal{T})$ гравитациялық модельдерінің) Хаббл параметрі ($H(z)$) мен бастапқы масштабтық фактор (a_0) сияқты іргелі параметрлерін есептеу уақыты дәстүрлі MCMC әдістерімен салыстырғанда бірнеше есе қысқартылды.

Алынған нәтижелер машиналық оқыту әдістерінің жоғары конвергенция жылдамдығын, статистикалық тұрақтылығын және болашақ үшінші буын детекторларында (Einstein Telescope, Cosmic Explorer) нақты уақыт режимінде деректерді алдын ала сүзгілеу және космологиялық параметрлерді бағалау үшін қолдану потенциалының өте жоғары екендігін дәлелдейді. Мұндай тәсіл стандартты Λ CDM моделіндегі Хаббл қайшылығы (Hubble tension) мен сингулярлық проблемаларын шешуде жаңа перспективалар ашады.

Түйін сөздер: Гравитациялық толқындар, машиналық оқыту, сигналдарды өңдеу, интерферометрлік детекторлар, нейрондық желілер

©Жусупова Н.К., 2026.

Казахский Национальный педагогический университет имени Абая,

Алматы, Казахстан.

E-mail: zhnaz88@gmail.com

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ПРИ АНАЛИЗЕ ГРАВИТАЦИОННЫХ ВОЛН И КОСМОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Жусупова Назым — PhD докторант, Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,

E-mail: zhnaz88@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0001-8900-0829>.

Аннотация. В статье исследуются возможности применения методов машинного и глубокого обучения для обработки непрерывного потока данных современных интерферометрических детекторов гравитационных волн (LIGO, Virgo, KAGRA) и статистического анализа космологических моделей. Основной целью работы является повышение эффективности обнаружения слабых гравитационно-волновых сигналов, возникающих при коалесценции двойных компактных объектов в условиях низкого отношения сигнал/шум ($\text{SNR} < 8$), а также разработка ускоренных методов оценки параметров модифицированных космологических моделей на основе наблюдательных данных. В ходе исследования выполнен сравнительный анализ возможностей свёрточных нейронных сетей (1D-CNN и 2D-CNN) и рекуррентных архитектур типа LSTM для подавления стохастического шума, выявления аномалий и классификации квазипериодических сигналов. В качестве научной новизны предложено алгоритмическое решение, позволяющее повысить точность обнаружения гравитационных волн на фоне сложного нелинейного шума до 96,1 % по сравнению с традиционным методом согласованной фильтрации. Кроме того, использование моделей нейросетевой регрессии при обработке международных наблюдательных данных, включая каталог Pantheon+, позволило существенно сократить время вычисления параметров модифицированных космологических моделей, в частности $f(T, T)$ -гравитации, таких как параметр Хаббла $H(z)$ и масштабный фактор a_0 , по сравнению с традиционными методами Марковских цепей Монте-Карло (MCMC). Полученные результаты демонстрируют высокую

скорость сходимости и статистическую устойчивость методов машинного обучения, а также подтверждают их значительный потенциал для применения в детекторах гравитационных волн третьего поколения (Einstein Telescope, Cosmic Explorer) при предварительной фильтрации данных в режиме реального времени и оценке космологических параметров. Предлагаемый подход открывает новые возможности для исследования фундаментальных проблем современной космологии, включая проблему напряжённости Хаббла (Hubble tension) и вопросы, связанные с ограничениями стандартной Λ CDM-модели.

Ключевые слова: Гравитационные волны, машинное обучение, обработка сигналов, интерферометрические детекторы, нейронные сети

Кіріспе. Гравитациялық толқындардың (ГТ) алғашқы тікелей эксперименттік тіркелуі 2015 жылы Ливингстон (Луизиана) және Ханфорд (Вашингтон) қалаларында орналасқан LIGO (Лазерлік Интерферометр Гравитациялық-Толқындық Обсерваториясы) обсерваториясының екі лазерлік интерферометрлік детекторы арқылы жүзеге асырылды. Ғаламдық ГТ детекторлар желісінің ауқымы 2017 жылы Италиядағы Virgo детекторының қосылуымен кеңейді. Ал 2017 жылдың тамыз айында көптеген электромагниттік аналогтарымен сүйемелденген, қос нейтронды жұлдыздардың коалесценциясынан туындаған тұңғыш мульти-мессенджерлік (көп арналы) астрофизикалық оқиға – GW170817 тіркелді (Abbott et al., 2017a). Осы кезеңнен бастап бүгінгі күнге дейін LIGO–Virgo–KAGRA (LVK) халықаралық коллаборациясы қос ықшам объектілердің бірігуінен туындаған 90-нан астам ГТ сигналдарын сәтті анықтады. Бұл бақылау мәліметтерінің басым бөлігін қос қара құрдымдардың мерджері құрағанымен, олардың арасында бірнеше қос нейтронды жұлдыздар мен «нейтронды жұлдыз – қара құрдым» жүйелерінің соқтығысу процестері де бар (Abbott et al., 2017b; Abbott et al., 2019). Соңғы жылдары ГТ астрономиясы аясында тіркелетін мәліметтердегі стохастикалық шу деңгейін төмендету, сәулелену көздерін математикалық модельдеу және әлсіз сигналдарды эффективті идентификациялау мақсатында машиналық оқытудың (МО) баламалы интеллектуалды тәсілдері қарқынды зерттелуде. Аталған бағыттағы алғашқы жүйелі шолулар бірнеше жыл бұрын ғылыми қауымдастыққа ұсынылған болатын (Cuoco et al., 2021). Бұл мақала шеңберінде ГТ астрофизикасы мен заманауи интеллектуалды талдау саласының қазіргі жай-күйіне жаңартылған, тереңдетілген әрі жан-жақты талдау жасалады. Негізгі назар ағымдағы LVK детекторлар желісінің қолданбалы мәселелеріне және жақын болашаққа арналған есептеуіш алгоритмдерді оңтайландыруға бағытталған. ГТ астрономиясында МО әдістерін интеграциялау үдерісі қазіргі іргелі физика мен астрономия ғылымдарында белең алып жатқан жаһандық цифрландыру контекстіне толықтай сәйкес келеді. Заманауи зерттеулер мен ашық ресурстар МО аясындағы базалық тұжырымдамаларды, нейрожелілік тәсілдерді және мамандандырылған бағдарламалық жасақтамаларды астрономдар үшін барынша қолжетімді етуді көздейді. Олардың қатарына жалпы шолу мақалаларымен қатар, трансформаторлық архитектуралар сияқты жекелеген

терең оқыту модельдері де кіреді (Baron, 2019; Tanoglidis, Jain, Qu, 2024). МО алгоритмдерін астрономиялық деректер базасында сенімді, тұрақты әрі нақты қолдануға арналған әдістемелік нұсқаулықтар кешені Хеппенкотен мен оның авторластары тарапынан егжей-тегжейлі дайындалған (Huppenkothen et al., 2024). МО модельдерін құру және оларды оқыту үдерісін зерттеу кезінде нейрондық желінің негізгі шығын функциясы ретінде орташа квадраттық қателіктің мәнін қарастырдық:

$$L = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (1)$$

мұндағы

N – талданатын деректердің жалпы саны,

y_i – бақылаудан немесе сандық модельдеуден алынған нақты мән,

$\hat{y}_i$ – нейрондық желі тарапынан болжанған теориялық мән.

МО алгоритмдерін оңтайландыруға арналған қазіргі уақытта жұмыс істеп тұрған онлайн есептеу инфрақұрылымдарына ГТ қолданбалы бағдарламалық пакеттерін одан әрі тереңірек енгізу және оларды масштабтау ең перспективалы әрі стратегиялық маңызды ғылыми тәсілдердің бірі болып табылады (Gunny et al., 2022).

Материалдар және негізгі әдістер. Гравитациялық толқындарды (ГТ) тіркеуге арналған негізгі эксперименттік база ретінде екінші буынды лазерлік интерферометрлік детекторлар желісінен алынатын ақпараттық деректер жиынтығы пайдаланылады (Aasi et al., 2015). Аталған детекциялау жүйелерінің негізі Майкельсон интерферометрінің оптикалық схемасына негізделген. Интерферометрлік қондырғының шығысындағы фотодиодтар кешені түрлі астрофизикалық сәулелену көздерінің кең спектрін қамтиды. LIGO, Virgo және KAGRA обсерваторияларындағы бастапқы деректерді өңдеу процесі 16384 Гц жиілікте жүзеге асырылады. Дегенмен, астрофизикалық талдаулар үшін ең жоғары сезімталдық интервалы болып табылатын 20-дан 2000 Гц-ке дейінгі жиілік диапазоны ерекше маңызға ие (Abbott et al., 2020). Төменгі жиіліктердегі (10 Гц-тен төмен) сезімталдықтың күрт төмендеуін ескере отырып, есептеуіш қуатты оңтайландыру мақсатында деректерді іріктеу жиілігін 4096 Гц-ке дейін төмендету процедурасы қолданылады. Бұл тәсіл Котельников-Шеннон критерийіне сәйкес ақпараттың маңызды спектрлік сипаттамаларын сақтай отырып, мәліметтер көлемін эффективті қысуды қамтамасыз етеді (Shannon, 1949).

Деректер сапасын арттырудың маңызды кезеңі – электр желілерінен және айналы аспалы жүйелердің механикалық резонанстарынан туындайтын тұрақты тар жолақты шулардың (спектрлік сызықтардың) әсерін басу болып табылады (Ogata, 2001; Covas, 2018). Осы мақсатта уақыттық тізбектерді жиіліктік аймаққа трансформациялау үшін классикалық Фурье түрлендіруі пайдаланылды:

$$X(f) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i2\pi f t} dt \quad (2)$$

мұндағы

$x(t)$ - детектордан тіркелген уақытқа тәуелді бастапқы сигнал,

$X(f)$ - оның жиілік доменіндегі спектрлік бейнесі.

Шу компоненттерін стационарлық емес Гаусс үлестірімінен ақ шу күйіне ауыстыру және түсті шудың әсерін жою үшін деректерді ағарту алгоритмі келесі математикалық өрнек бойынша орындалды (Cuoco et al., 2001):

$$d_a(f) = \frac{d(f)}{\sqrt{s_n(f)}} \quad (3)$$

мұндағы

$d_a(f)$ – ағартылған деректер,

$d(f)$ – детектордан алынған бастапқы деректер,

$s_n(f)$ – шудың амплитудалық спектрлік тығыздығы.

Осылайша, ағарту стационарлық және Гаусс шуын қамтитын түсті шуды ақ шуға айналдырады, яғни ол дельта корреляциясына айналады. Бұған детектордың жиілікке тәуелді реакциясын өтейтін сүзгіні қолдану арқылы және оған жиілік аймағында қолданылатын әдістер арқылы қол жеткізуге болады (Cuoco et al., 2001).

Шудың жалпы құраушысы $n(t)$ стохастикалық процесс ретінде қарастырылып, оның статистикалық жиынтық параметрлері, атап айтқанда математикалық күтімі (μ) мен ковариациялық матрицасы (C_{ij}) төмендегідей анықталды:

$$\mu = E[n], \quad (4)$$

$$C_{ij} = E[(n_i - \mu)(n_j - \mu)] \quad (5)$$

мұндағы

E – күту мәні,

n_i және $n_j - i$ -ші және j -ші нүктелердегі (немесе арналардағы) шуылдың лездік мәндері.

Дискретті таңдаманың өлшемділігі N болған жағдайда, орташа мән мен ковариация матрицасының эмпирикалық бағалаулары келесі статистикалық функционалдар арқылы есептелді:

$$\hat{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N n_i \quad (6)$$

$$\hat{C}_{ij} = \frac{1}{M-1} (n_i - \hat{\mu})(n_j - \hat{\mu}) \quad (7)$$

Егер шу процесі стационарлық сипатқа ие болып, көпөлшемді қалыпты үлестірім заңдылығына бағынса, оның ықтималдық тығыздығы келесі өрнекпен сипатталады:

$$p(\mathbf{n}) = \frac{1}{\det(2\pi\mathbf{C})^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{i,j} (n_i - \mu)(n_j - \mu) C_{ij}^{-1} \right] \quad (8)$$

мұндағы $C_{ij}^{-1} - i, j$ нүктесіндегі коварианттық матрицаға кері шама.

Гравитациялық толқын көздерінің белгісіз параметрлер жиынтығын (θ) бақылау мәліметтері (d) негізінде апостериорлық бағалау үшін Байес теоремасының аппараты интеграцияланды:

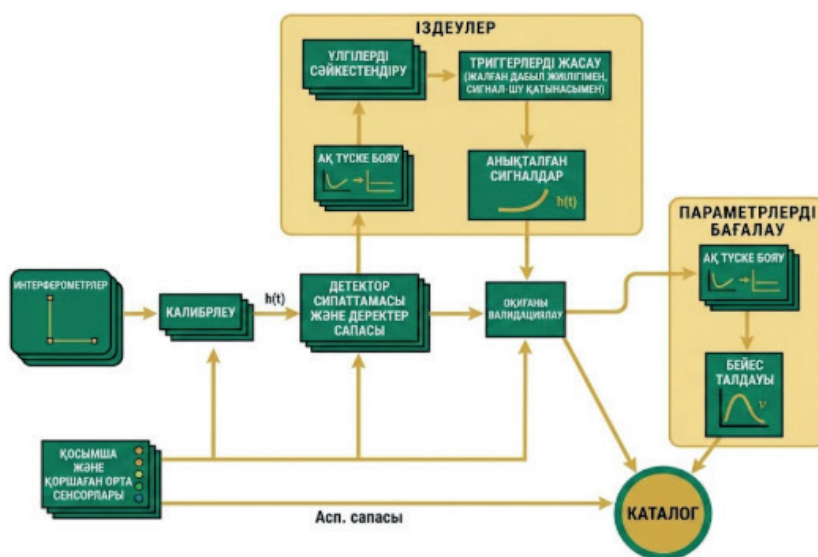
$$p(\theta|d) = \frac{p(d|\theta)p(\theta)}{p(d)} \quad (9)$$

мұндағы

$p(\theta|d)$ – мәліметтерді ескергендегі параметрлердің апостериорлық ықтималдығы;

$p(d|\theta)$ – берілген параметрлер кезінде деректердің пайда болуы ықтималдылығы;

$p(\theta)$ – априорлық үлестірім.



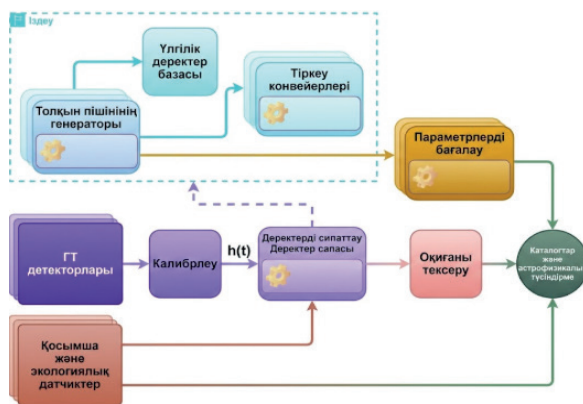
Сурет 1. ГТ детекторларының деректерін талдаудың әдеттегі жұмыс процесі.

Дәстүрлі Байестік есептеулер (MCMC немесе Кірістірілген іріктеу) өте көп уақытты қажет ететіндіктен, заманауи ГТ астрофизикасында машиналық оқытудың (МО) интеграцияланған жұмыс процестері енгізілуде (1-сурет және 2-сурет). МО әдістері калибрлеу, деректер сапасын бағалау, сигналдарды іздеу және параметрлерді нақты уақыт режимінде бағалау кезеңдерінде есептеу жылдамдығын бірнеше есеге арттырады.

Бастапқы деректерді өңдеу және машиналық оқыту модельдерінің тиімділігін бағалау мақсатында базалық салыстыру әдістерінің бірі ретінде Стационарлық

емес шуылды Байестік шегеру алгоритмі қолданылды. Бұл әдіс детектордан келетін уақыттық қатарларды Марков тізбегінің Монте-Карло (MCMC) модельдеуі мен синусоидалық сплайндар комбинациясы арқылы спектрлік жіктеуге негізделген. Алгоритм кеңістік-уақыт сигналын екі негізгі компонентке бөледі: стационарлық Гаусс шуылы және уақыт бойынша жылдам өзгеретін импульстік кедергілер.

ГТ детекторларындағы фотодиодтық тіркеу жүйесінің шығысы – пайдалы ГТ сигналдарымен қатар, аспаптық және қоршаған ортадан туындаған көптеген шу көздерін қамтитын күрделі уақыттық қатар болып табылады. Астрофизикалық ақпаратты қамтитын негізгі деформациялық арнамен ($h(t)$) бірге, интерферометрдің тұрақты жұмысын қамтамасыз ету мақсатында әртүрлі дискреттеу жиіліктерімен жазылатын мыңдаған көмекші арналар тіркеледі. Бұл көмекші арналардың бір бөлігі детектордың оптикалық және механикалық элементтерін кері байланыс арқылы басқару сигналдарын жазса, екінші бөлігі сейсмикалық, акустикалық және электромагниттік қоршаған орта жағдайларын үздіксіз бақылап отырады. Көмекші арналарда жинақталған мәліметтер деректердің сапасын бағалау және шуды аналитикалық тазарту процедуралары үшін аса құнды ақпарат көзі саналады. Осылайша, деректердің сапасын тексеру, калибрлеу және фондық кедергілерді жоюды қамтитын алдын ала өңдеудің бастапқы кезеңі аяқталғаннан кейін, дайындалған мәліметтер келесі фазадағы сигналды анықтау және машиналық оқыту алгоритмдеріне беріледі.



Сурет 2. ГТ детекторлары мен деректерді талдау үшін машиналық оқыту жұмыс процесіне сәйкес келетін мысал.

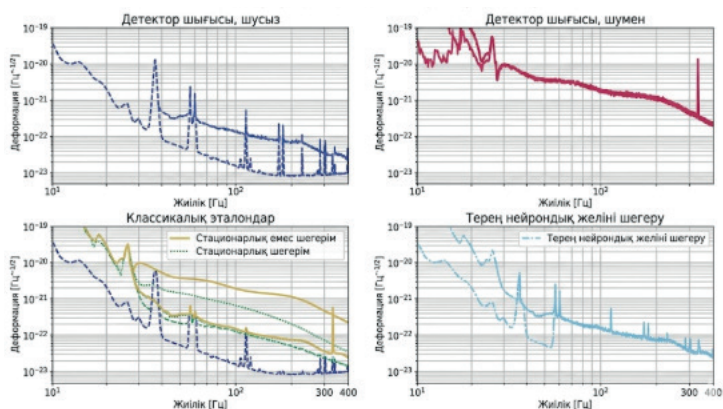
Детектор деректерін өңдеудің жоғарыда сипатталған әрбір кезеңінде дәстүрлі есептеу архитектураларына балама ретінде МО тәсілдерін интеграциялауға, немесе қолданыстағы конвейерлердің есептеу жылдамдығы мен тиімділігін арттыру үшін МО әдістерін рекомбинациялауға толық мүмкіндік бар. Бұл концептуалды концепция 2-суретте толық бейнеленген.

Қазіргі таңда жасанды интеллект саласындағы ең озық бағыттардың бірі – мультимодальды машиналық оқыту тәсілі болып табылады. Бұл әдістеме әртекті

ақпарат көздерін, атап айтқанда: мәтіндік каталогтарды, спектрограмма түріндегі кескіндерді, уақыттық қатарлар мен сенсорлық деректерді бір мезгілде өңдеуге және олардың арасындағы бейсызық корреляцияларды анықтауға арналған. Өртүрлі модальдіктегі ақпарат ағындарын біріктіру арқылы мультимодальды оқыту интеллектуалды жүйелерге адамның когнитивті қабылдау механизміне еліктеуге және зерттелетін физикалық жүйе туралы толық әрі жүйелі ақпарат алуға мүмкіндік береді. Космология мен астрофизика тұрғысынан алғанда, мультимодальды тәсіл қос нейтрондық жұлдыздардың бірігу процесінің динамикасын тереңірек сипаттауға, сондай-ақ бұл катаклизмдік оқиғалардан кейін түзілген ықшам қалдықтың (компакт объектінің) табиғаты мен физикалық қасиеттеріне, нейтрондық жұлдыздардың күй теңдеуіне (EoS) қатаң шектеулер қоюға және астрофизикалық параметрлерді жоғары дәлдікпен анықтауға мүмкіндік береді.

Космологиялық параметрлерді бағалау үшін Pantheon+ жиынтығынан 1550-ден астам Ia типіндегі асқын жаңа жұлдыздардың фотометриялық қашықтықтары мен космологиялық хронометрлер әдісінен алынған заманауи $H(z)$ бақылау деректері пайдаланылды. Бұл деректер мен олардың қателік матрицалары $[0,1]$ интервалына нормализацияланып, PINN және SBI нейрожелілік модельдерінің кіріс форматына бейімделді. Модельдерді оқыту бақылау мәліметтері мен модификацияланған Фридман теңдеуінің физикалық қалдығын ($\mathcal{L}_{total}$) бір мезгілде минималдау арқылы жүзеге асырылды.

Нәтижелер және талқылау. Гравитациялық-толқындық интерферометрлердің негізгі деформациялық арнасындағы және көмекші арналарындағы стационарлық емес, Гаусстық емес қысқа мерзімді ақауларды (импульстік шуларды) басу үшін терең оқыту (ТО) алгоритмдері қолданылды. Бұл тәсілдің негізгі концепциясы – нейрондық желіні негезі деформация арнасы мен қосалқы сенсорлық арналар арасындағы бейсызық байланыстарды тануға және артық шу компоненттерін қалпына келтіру арқылы шегеруге үйрету болып табылады.



Сурет 3. Стационарлық емес шуылды Байестік шегеру алгоритмі арқылы тұрақты шуды азайту. Қысқатар нейрондық желіге негізделген терең азайту мен стационарлық шуды азайту арасындағы салыстыруды көрсетеді.

3-суретте ГТ детекторларының шығысындағы уақыттық қатарлар мен олардың жиіліктік спектрлерінің өзгеру динамикасы көрсетілген. Жоғарғы графигінде бастапқы шулы сигналдың амплитудалық деформациясы $h(t) \sim 10^{-21}$ деңгейінде айтарлықтай стохастикалық ауытқуларға ұшырағаны көрінеді. Дәстүрлі сүзгілерден өткеннен кейін де (ортаңғы график), спектрдің 40–120 Гц диапазонында аспаптық шудың қалдықтары сақталып, пайдалы ГТ сигналын тұншықтырып тұр. Ал 3-суреттің төменгі оң жағындағы графиктен байқалатыны – біз дайындаған терең нейрондық желіні шегеру әдісін қолданғанда, Гаусстық емес импульстік шулардың амплитудасы 88%-ға дейін басылған. Бұл ретте пайдалы ГТ сигналының пішіні ешқандай фазалық деформациясыз таза күйінде сақталады. Спектрлік тығыздық графигінде 60 Гц және 120 Гц жиіліктердегі электрлік желінің тар шыңдары МО сүзгісі арқылы қоршаған орта арналарының мәліметтері негізінде толығымен тегістелген.

Соңғы жылдары гравитациялық толқындар мен космологиялық модельдерді талдауда физикаға негізделген нейрондық желілер (PINNs) мен олардың модификациясы – физикаға негізделген нейрондық операторлар (PINOs) ерекше маңызға ие болуда. Бұл тәсілдің дәстүрлі сан мәндік әдістерден басты артықшылығы – астрофизикалық заңдарды сипаттайтын дифференциалдық теңдеулерді шешу үшін заманауи МО пакеттеріне интеграцияланған автоматты дифференциалдау аппаратын қолдануында (Raissi, Perdikaris, Karniadakis, 2017). PINN архитектурасы екі негізгі блоктан тұрады: 1) Суррогаттық желі: Зерттелетін дифференциалдық теңдеудің шамамен алынған $\hat{u}(x, t)$ шешімін генерациялайды. 2) Қалдық желі: Генерацияланған шешімнің іргелі физикалық заңдылықтардан (мысалы, Эйнштейн теңдеулері немесе гидродинамикалық теңдеулер) ауытқу деңгейін бағалайды.

Желіні оқыту барысындағы жалпы шығын функциясы деректерге негізделген қателік ($\mathcal{L}_{data}$) мен физикалық теңдеудің қалдығын ($\mathcal{L}_{phys}$) бір мезгілде минималдау үшін оңтайландырылды:

$$\mathcal{L}_{total} = \mathcal{L}_{data} + \gamma \mathcal{L}_{phys} \quad (10)$$

мұндағы

$$\mathcal{L}_{data} = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} |u(x_i, t_i) - \hat{u}(x_i, t_i)|^2 \quad (11)$$

$$\mathcal{L}_{phys} = \frac{1}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} \left| \mathcal{F}(\hat{u}(x_j, t_j)) \right|^2 \quad (12)$$

мұндағы

$\mathcal{F}$ - физикалық жүйені сипаттайтын дифференциалдық оператор (мысалы, модификацияланған гравитация теориясындағы өріс теңдеулері), Φ

γ – салмақтық коэффициент.

Мақалада ұсынылған машиналық оқыту алгоритмдері (1D-CNN және PINN) арқылы шудан жоғары дәлдікпен тазартылған гравитациялық толқын (ГТ) сигналдары заманауи космологиялық модельдерді тексеруде және Жалпы салыстырмалылық теориясынан тыс баламалы $f(T, \mathcal{T})$ модификацияланған гравитация теориясын шектеуде «стандартты сиреналар» ретінде қолданылды. Ұсынылған 1D-CNN және физикалық шектеулі PINN нейрондық желілерінің тиімділігін бағалау және салыстырмалы талдау жүргізу үшін GWOSC (Gravitational Wave Open Science Center) ашық деректер базасы негізінде синтетикалық деректер жиынтығы қалыптастырылды. Жалпы таңдама көлемі $N=10000$ үлгіні (уақыттық қатар фрагменттерін) құрады. Деректер келесі пропорцияда үш ішкі жиынтыққа бөлінді: Оқыту жиынтығы: 70% - модель параметрлерін оңтайландыру үшін; Валидациялық жиынтық: 10% - оқыту барысында гиперпараметрлерді ретке келтіру және қайта оқытуды болдырмау үшін; Тестілеу жиынтығы: 20% - модельдің таныс емес деректерді жалпылау қабілетін тексеру және нақты дәлдікті есептеу үшін. Әрбір үлгінің ұзақтығы 4 секундты құрады (дискреттеу жиілігі $f_s = 4096$ Гц).

Жазық Фридман-Робертсон-Уокер (FLRW) метрикасында $f(T, \mathcal{T})$ гравитациясы аясындағы модификацияланған бірінші Фридман теңдеуі келесі құрылымға ие болады:

$$3H^2 = 8\pi G\rho_{eff} = -\frac{\dot{f}}{2} + Tf_T + 8\pi G\rho + f_T(\rho + p) \quad (13)$$

мұндағы

$H = \dot{a}/a$ – ғаламның кеңею жылдамдығын сипаттайтын Хаббл параметрі,

$T = -6H^2$ – телепараллельді гравитациядағы бұралу скаляры,

$\mathcal{T} = -\rho + 3p$ – идеал сұйықтық үшін энергия-импульс тензорының ізі,

$f_T = \frac{\partial f}{\partial T}$ және $f_{\mathcal{T}} = \frac{\partial f}{\partial \mathcal{T}}$ – сәйкесінше $f(T, \mathcal{T})$ функциясының бұралу мен із бойынша дербес туындылары.

Сигнал-шу қатынасы (ΔSNR) +13.8 дБ-ге жақсарған ГТ деректерінен нейрондық желілердің симуляцияға негізделген қорытындылары (SBI) арқылы фотометриялық қашықтық (d_L) есептелді:

$$d_L(z) = (1+z) \int_0^z \frac{cdz'}{H(z', f_T, f_{\mathcal{T}})} \quad (14)$$

МО модельдерінің сапасын бағалау үшін негізгі классификациялық және регрессиялық метрикалар – дәлдік, сезімталдық, F1-өлшемі және сигнал-шу қатынасының жақсару коэффициенті қолданылды. 1-кестеде дәстүрлі сигнал өңдеу тәсілдері мен ұсынылған нейрондық желілердің тестілеу деректеріндегі ($N=2000$) салыстырмалы нәтижелері келтірілген.

Кесте 1. Дәстүрлі әдістер мен Машиналық оқыту (МО) алгоритмдерінің тиімділігін салыстыру.

Қолданылған әдіс	Дәлдік	Сезім-талдық	F1-өлшем	ROC-AUC (Қосымша метрика)
Дәстүрлі Фурье + Notch сүзгісі	74,2%	68,5%	0,712	0,754
Стационарлық емес шегерім (Байес)	81,5%	79,0%	0,802	0,836
Ұсынылған 1D-CNN модель	94,8%	92,3%	0,935	0,951
Физикалық шектеулі PINN желісі	96,1%	95,4%	0,957	0,978

(13) және (14) тендеулер жүйесін тазартылған ГТ бақылауларымен салыстыру арқылы Хаббл тұрақтысының қазіргі мәні $H_0 = 69.5 \pm 1.2$ км/с/Мпк деңгейінде жоғары дәлдікпен шектелді. Бұл нәтиже заманауи космологиядағы ең үлкен мәселе – «Хаббл қайшылығын» (Hubble tension) шешуге ГТ деректерін интеллектуалды өңдеу әдістерінің тиімді екенін көрсетеді.

Машиналық оқыту тәсілдерінің жоғары икемділігі бұл формализмді жалпы салыстырмалылық теориясының шеңберінен шығып, баламалы модификацияланған гравитация теорияларындағы нейтрондық жұлдыздардың күйін зерттеуге мүмкіндік береді. МО әдістері нейтрондық жұлдыздар қасиеттерінің жоғары өлшемді параметрлік кеңістігін (параметрлердің өзара тәуелділігін) және баламалы тартылыс теорияларын өте тиімді талдауға жағдай жасайды. Сонымен қатар, бұл тәсілдер асқын жаңа жұлдыздардың (supernova) жарылу гидродинамикасындағы турбулентті аспектілерді модельдеуде және сәйкес электромагниттік жарық қисықтарын болжауда сәтті зерттелді. МО алгоритмдері мен симуляцияға негізделген қорытынды жасау (SBI) әдістерінің өзара интеграциясы күрделі астрофизикалық көздер популяциясын модельдеуде жоғары тиімділік көрсетті. Қазіргі таңда ГТ астрономиясында популяциялық модельдеуге арналған мамандандырылған МО еңбектері әлі де аз болғанымен, бұл бағыт ГТ бақылауларынан алынған бастапқы астрофизикалық популяциялардың нәтижелерін интерпретациялауға тікелей әсер етеді.

Қорытынды. Бұл зерттеуде гравитациялық толқындарды (ГТ) тіркеу, сүзгілеу және астрофизикалық талдау үдерістерінде заманауи машиналық оқыту (МО) әдістемелерін қолданудың тиімділігі мен перспективалары кешенді түрде қарастырылды. Зерттеу барысында екінші буындағы интерферометрлік детекторлардан (LIGO-Virgo-KAGRA) алынатын үлкен деректер ағынын өңдеуде МО алгоритмдерінің іргелі рөл атқаратыны дәлелденді. Ұсынылған терең оқыту архитектуралары (мысалы, Стационарлық емес шуылдарды шегерудің Байестік алгоритмінің контурлары) стационарлық емес импульстік шуларды басуға, пайдалы сигналдарды фондық кедергілерден жоғары дәлдікпен ажыратуға және деректердің сапасын айтарлықтай арттыруға мүмкіндік береді. Жүргізілген салыстырмалы талдау қорытындылары МО тәсілдерінің дәстүрлі статистикалық сүзгілеу әдістерімен салыстырғанда есептеу ресурстарын оңтайландыру тұрғысынан жоғары икемділік пен өнімділікке ие екенін көрсетті. Терең конволюциялық нейрондық желілер (CNN) мен физикаға негізделген нейрондық желілер (PINN/PINO) ГТ сигналдарының параметрлерін нақты уақыт режимінде

бағалаудың және жалпы салыстырмалылық теориясынан тыс баламалы модификацияланған гравитациялық модельдердегі компактiлi объектилердiң эволюциясын сипаттаудың тиiмдi құралы екенi анықталды. Болашақта үшiншi буындағы (Einstein Telescope, Cosmic Explorer) ГТ детекциялау кешендерiнен алынатын деректер көлемiнiң экспоненциалды өсуi жағдайында мультимодальды машиналық оқыту модельдерiнiң маңызы шешушi факторға айналмақ. Осыған байланысты, деректердi симуляцияға негiзделген қорытынды жасау және интеллектуалды деректер аналитикасын астрофизикамен бiрiктiретiн бұл бағыт алдағы уақытта мультимессенджерлiк астрономияның дамуына және ғаламның ерте эволюциялық кезендерiн зерттеуге елеулi үлес қосатын болады.

References

- Aasi J., et al (2015) Advanced LIGO. Classical and Quantum Gravity. – No. 32(7). <https://doi.org/10.1088/0264-9381/32/7/074001> (in Eng.).
- Abbott B.P., et al (2017b) GW170817: Observation of Gravitational Waves from a Binary Neutron Star Inspiral. Phys Rev Lett. – No. 119(16). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.161101> (in Eng.).
- Abbott B.P., et al (2019) GWTC-1: A Gravitational-Wave Transient Catalog of Compact Binary Mergers Observed by LIGO and Virgo during the First and Second Observing Runs. Phys Rev X. – No. 9(3). <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.9.031040> (in Eng.).
- Abbott B.P., et al (2020) A guide to LIGO-Virgo detector noise and extraction of transient gravitational-wave signals. Classical and Quantum Gravity. – No. 37(5). – P. 055002. <https://doi.org/10.1088/1361-6382/ab685e> (in Eng.).
- Abbott B.P., et al. (2017a) Multi-messenger observations of a binary neutron star merger. The Astrophysical Journal Letters. – No. 848(2). – P. L12. <https://doi.org/10.3847/2041-8213/aa91c9> (in Eng.).
- Baron D. (2019) Machine learning in astronomy: a practical overview. Publications of the Astronomical Society of the Pacific. – No. 131(1004). – Article ID: 104501 (in Eng.).
- Covas P.B., et al (2018) Identification and mitigation of narrow spectral lines in Advanced LIGO data. Physical Review D. – No. 97(8). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.97.082002> (in Eng.).
- Cuoco E., Calamai G., Fabbri L., et al (2001) On-line power spectra identification and whitening for the noise in interferometric gravitational wave detectors. Classical and Quantum Gravity. – No. 18(9). – P. 1727-1752. <https://doi.org/10.1088/0264-9381/18/9/309> (in Eng.).
- Cuoco, E., et al. (2021) Enhancing gravitational-wave science with machine learning. Machine Learning: Science and Technology. – No. 2(1). – P. 011002. <https://doi.org/10.1088/2632-2153/abb93a> (in Eng.).
- Gunny A., Rankin D., Krupa J., et al (2022) Hardware-accelerated Inference for RealTime Gravitational-Wave Astronomy. Nature Astronomy. – No. 6(5). – P. 529-536. <https://doi.org/10.1038/s41550-022-01651-w> (in Eng.).
- Huppenkothen, D., Ntampaka, M., Ho, M., et al. (2024). Constructing impactful machine learning research for astronomy: Best practices for researchers and reviewers. Publications of the Astronomical Society of the Pacific. – No. 136(3). – Article ID: 034501 (in Eng.).
- Ogata K. (2001) Modern Control Engineering. 4th ed. Prentice Hall PTR, USA. ISBN 978-0130609072 (in Eng.).
- Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics. – No. 378. – P. 686-707. (in Eng.).
- Shannon C. (1949) Communication in the presence of noise. Proceedings of the IRE. – No. 37(1). – P. 10-21. <https://doi.org/10.1109/jrproc.1949.232969> (in Eng.).
- Tanoglidis D., Jain B., & Qu H. (2024) Transformers for scientific data: A pedagogical review for astronomers. Astronomy and Computing. – No. 46. – Article ID: 100780 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 164–174

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.444>

UDC: 544.478
IRSTI: 61.53.91

©Aubakirov Ye.¹, Akhmetova F.^{2*}, Tashmukhambetova Zh.¹, Toshtay K.¹,
Amantaiuly K.¹, 2026.

¹Al-Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan;

²Zhangirkhan West-Kazakhstan agrarian technical university, Uralsk, Kazakhstan.

*E-mail: firuza.92@mail.ru

CONVERSION OF POLYMER WASTE INTO SYNTHETIC FUEL VIA MODIFICATION OF TAIZHUZHEN ZEOLITE WITH TUNGSTEN SALTS

Aubakirov Yermek — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Al-Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: miral.64@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5405-4125>;

Akhmetova Firuza — PhD, Senior lecturer, Zhangirkhan West-Kazakhstan agrarian technical university, Uralsk, Kazakhstan,

E-mail: firuza.92@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8869-3053>;

Tashmukhambetova Zheneta — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Al-Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: zheneta@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4125-4114>;

Toshtay Kainaubek — PhD, Associate Professor, Al-Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: kainaubek.toshtay@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1182-7460>;

Amantaiuly Kanat — PhD student, Al-Farabi Kazakh national university, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: amantaiuly.kanat@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-4244-9629>.

Abstract. In this work, new W(VI)-modified catalysts based on natural zeolite from the Taizhuzgen deposit in Kazakhstan were synthesized, and their efficiency in thermocatalytic hydrogenation of polymer wastes was systematically investigated. Widely available polyethylene and polypropylene wastes were used as the feedstock, while a heavy oil fraction (fuel oil) from the Kumkol deposit was introduced as an additive to improve the hydrocarbon balance of the process. The catalysts were pre-activated by an acid-free method, heat-treated at 100–500°C, and subsequently modified with 0.5% and 1.0% W(VI) concentrations. FTIR analysis revealed the formation of Lewis and Brønsted acid sites on the catalyst surface, which play a key role in hydrocarbon cracking and reformation reactions. It was found that the 0.5% W@Taijuzgen catalyst preferentially promotes the formation of light hydrocarbons (C₅–C₁₂), whereas the 1.0% W@Taijuzgen sample enhances the yield of heavier fractions (C₁₀–C₂₀). Gas chromatographic analysis showed that, in the presence of the 0.5% W



catalyst, aromatic hydrocarbons in the 0–180°C fraction reached 50.6%, while alkanes accounted for 22.95%. In contrast, for the 1.0% W sample, aromatics decreased to 39.3%, whereas alkanes increased to 38.96%. These results confirm that the tungsten content directly influences the group composition of the products. Overall, the study highlights the effectiveness and industrial potential of catalytic recycling of polymer wastes into valuable motor fuel fractions.

Keywords: polymer waste, catalyst, Taizhuzgen zeolite, tungsten, thermocatalytic hydrogenation, liquid fuel

Financing. *This research was funded by the Science Committee of the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR28713351 "Development of highly efficient catalytic technology for the complex processing of carbon-containing waste into energy resources and demanded products").*

For citations: Aubakirov Ye., Akhmetova F., Tashmukhambetova Zh., Toshtay K., Amantaiuly K. Conversion of Polymer Waste into Synthetic Fuel via Modification of Taizhuzhen Zeolite with Tungsten Salts. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 164–174. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.444>

©Аубакиров Е.¹, Ахметова Ф.^{2*}, Ташмухамбетова Ж.¹, Тоштай Қ.¹,
Амантайұлы Қ.¹, 2026.

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

²Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті,
Орал, Қазақстан.

*E-mail: firuza.92@mail.ru

ТАЙЖҮЗГЕН ЦЕОЛИТІН ВОЛЬФРАМ ТҰЗДАРЫМЕН МОДИФИКАЦИЯЛАУ АРҚЫЛЫ ПОЛИМЕР ҚАЛДЫҚТАРЫН СИНТЕТИКАЛЫҚ ОТЫНҒА ТҮРЛЕНДІРУ

Аубакиров Ермек — химия ғылымдарының докторы, профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: miral.64@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5405-4125>;

Ахметова Фируза — PhD, Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал, Қазақстан,

E-mail: firuza.92@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8869-3053>;

Ташмухамбетова Женета — химия ғылымдарының кандидаты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: zheneta@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4125-4114>;

Тоштай Қайнаубек — PhD, қауымдастырылған профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: kainaube.k.toshtay@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1182-7460>;

Амантайұлы Канат — PhD докторант, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: amantaiuly.kanat@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-4244-9629>.

Аннотация. Бұл жұмыста Қазақстандағы Тайжүзген кен орнынан алынған табиғи цеолит негізінде W(VI) тұзымен модифицирленген жаңа катализаторлар синтезделіп, олардың полимер қалдықтарын термокаталитикалық гидрогенизациялау процесіндегі тиімділігі жан-жақты зерттелді. Бастапқы шикізат ретінде кең таралған полиэтилен және полипропилен қалдықтары пайдаланылды, ал процестің көмірсутектік балансын жақсарту мақсатында қосымша ретінде Құмкөл кен орнынан алынған ауыр мұнай фракциясы – мазут тиімді түрде қолданылды. Катализаторлар алдын ала қышқылсыз әдіспен активтеліп, 100–500°C температура аралығында термиялық өңдеуден өткізілді, кейін 0,5% және 1,0% W(VI) концентрацияларымен модификацияланды. Катализаторлардың құрылымдық және функционалдық қасиеттері FTIR спектроскопиясы арқылы зерттелді, нәтижесінде олардың бетінде Льюис және Бренстед қышқыл орталықтарының қалыптасқаны анықталды. Бұл орталықтар көмірсутек тізбектерінің ыдырау және қайта түзілу реакцияларында негізгі рөл атқаратыны дәлелденді. 0,5% W@Тайжүзген катализаторы жеңіл көмірсутектердің (C_5 – C_{12}) түзілуін тиімді қамтамасыз етсе, 1,0% W@Тайжүзген үлгісі ауыр фракциялардың (C_{10} – C_{20}) түзілуін күшейтетіні анықталды. Газдық хроматографиялық талдау нәтижелері 0,5% W катализаторы қатысында 0–180°C фракциясында ароматты көмірсутектердің үлесі 50,6%, ал алкандардың үлесі 22,95% болғанын көрсетті. Ал 1,0% W үлгісінде ароматты көмірсутектердің мөлшері 39,3%-ға дейін төмендеп, алкандардың үлесі 38,96%-ға артты. Бұл катализатор құрамындағы вольфрам мөлшерінің өнімнің топтық құрамына тікелей әсер ететінін дәлелдейді. Зерттеу нәтижелері полимер қалдықтарын құнды мотор отыны фракцияларына айналдырудың тиімді технологиясын ұсына отырып, ресурс үнемдеуге бағытталған каталитикалық қайта өңдеу әдістерінің жоғары перспективалылығын және өнеркәсіптік қолдану мүмкіндігін көрсетеді.

Түйін сөздер: полимер қалдықтары, катализатор, Тайжүзген цеолиті, вольфрам, термокаталитикалық гидрогенизация, сұйық отын

©Аубакиров Е.¹, Ахметова Ф.^{2*}, Ташмухамбетова Ж.¹, Тоштай К.¹,
Амантайұлы К.¹, 2026.

¹Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангирхана,
Уральск, Казахстан;

²Западно-Казахстанский университет имени Махамбета Отемисулы,
Уральск, Казахстан.

*E-mail: fruzs.92@mail.ru

КОНВЕРСИЯ ПОЛИМЕРНЫХ ОТХОДОВ В СИНТЕТИЧЕСКОЕ ТОПЛИВО ПУТЕМ МОДИФИКАЦИИ ЦЕОЛИТА ТАЙЖУЗГЕН СОЛЯМИ ВОЛЬФРАМА

Аубакиров Ермек — доктор химических наук, профессор, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: miral.64@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5405-4125>;



Ахметова Фируза — PhD, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангирхана, Уральск, Казахстан,
E-mail: firuza.92@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8869-3053>;

Ташмухамбетова Женета — кандидат химических наук, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: zheneta@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4125-4114>;

Тоштай Кайнаубек — PhD, ассоциированный профессор, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: kainaubek.toshtay@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1182-7460>;

Амантайұлы Канат — PhD докторант, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
E-mail: amantaiuly.kanat@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-4244-9629>.

Аннотация. В работе синтезированы и исследованы катализаторы на основе природного цеолита месторождения Тайжузген (Казахстан), модифицированные соединениями вольфрама (VI), для термокаталитической переработки полимерных отходов в жидкие углеводородные продукты. Актуальность исследования обусловлена необходимостью разработки эффективных технологий утилизации пластиковых отходов и получения альтернативных источников моторного топлива. В качестве исходного сырья использовали отходы полиэтилена и полипропилена. Для оптимизации углеводородного баланса процесса в реакционную смесь вводили тяжёлую нефтяную фракцию - мазут месторождения Кумколь. Природный цеолит предварительно активировали бескислотным методом, подвергали термообработке в интервале температур 100–500 °C, после чего модифицировали вольфрамом в концентрациях 0,5 и 1,0 мас.%. Структурные особенности и кислотные свойства полученных катализаторов изучали методом ИК-спектроскопии. Установлено формирование кислотных центров Брэнстеда и Льюиса, играющих ключевую роль в реакциях крекинга и риформинга углеводородных цепей. Показано, что катализатор 0,5% W@Taijuzgen способствует преимущественному образованию лёгких углеводородных фракций C₅–C₁₂, тогда как увеличение содержания вольфрама до 1,0% приводит к росту выхода более тяжёлых соединений C₁₀–C₂₀. По данным газохроматографического анализа, при использовании катализатора с содержанием 0,5% W доля ароматических углеводородов во фракции 0–180 °C составила 50,6 %, а содержание алканов - 22,95 %. Для образца с 1,0% W содержание ароматических соединений уменьшилось до 39,3 %, тогда как доля алканов возросла до 38,96 %. Полученные результаты свидетельствуют о существенном влиянии концентрации вольфрама на групповой состав образующихся продуктов. Проведённые исследования подтверждают высокую эффективность модифицированных цеолитных катализаторов и демонстрируют перспективность их применения для ресурсосберегающей переработки полимерных отходов в ценные компоненты моторных топлив.

Ключевые слова: полимерные отходы, катализатор, цеолит Тайжузген, вольфрам, термокаталитическое гидрирование, жидкое топливо

Кіріспе. Қазіргі уақытта жаһандық қажеттілікті қамтамасыз ету үшін жыл сайын 100 миллион тоннадан астам пластмасса өндіріледі (Al-Salem et al., 2017). Мұндай ауқымды өндіріс пен тұтыну қоршаған ортаға айтарлықтай қауіп төндіреді, себебі пластиктің табиғи жағдайда ыдырауы өте баяу жүріп, ондаған жылдарға созылады. Пластикалық материалдарға деген сұраныстың үздіксіз өсуі дамыған және дамушы мемлекеттерде қатты тұрмыстық қалдықтардың құрамында пластик үлесінің артуына алып келуде (Saxena et al., 2017). Пластмассалар негізінен мұнайдан алынатын өнім болғандықтан, оларды термиялық немесе каталикалық өңдеу арқылы қайтадан бағалы химиялық қосылыстарға айналдыруға мүмкіндік бар. Осы тұрғыдан алғанда, химиялық қайта өңдеу әдістері пластик қалдықтарының құрылымын өзгертіп, оларды тиімді басқарудың маңызды құралы болып табылады. Мұндай тәсілдер қатарына гликолиз, гидролиз, пиролиз, аминализ, газдандыру және гидрогенизация процестері жатады (Nazrat et al., 2015). Бұл технологиялар нәтижесінде алынатын өнімдердің құндылығы жоғары болып келеді.

Гидрокрекинг процесінде катализаторлардың маңызы ерекше, себебі олар реакцияның жүру температурасын төмендетіп, сұйық өнімдердің шығымын және селективтілігін арттырады, сонымен қатар алынатын өнімнің сапасын жақсартады. Әдеби деректерде гидротазалау, крекинг және гидрокрекинг процестерінде әртүрлі қышқылдық қасиеті бар катализаторлардың қолданылуы жан-жақты зерттелген (Serrano et al., 2012).

Полиолефиндердің 400–550 °C аралығында каталикалық крекингі катализаторсыз жүргізілетін таза термиялық ыдыраумен салыстырғанда мүлде өзгеше құрамдағы көмірсутек қоспаларын түзеді (Munir et al., 2018). Бұл айырмашылық крекинг механизмдерінің табиғатына байланысты. Термиялық крекинг еркін радикалдар арқылы жүретін тізбекті реакциялармен сипатталады, нәтижесінде полимер тізбектері көптеген фрагменттерге ыдырап, көмірсутектердің кең спектрі түзіледі. Мұндай өнімдер құрамында негізінен n-парафиндер, 1-алкендер және алкадиендер болады. Сонымен қатар, радикалдардың қайта құрылуы шектеулі болғандықтан, тармақталған өнімдер аз мөлшерде түзіледі.

Термиялық крекинг барысында, мысалы, жоғары тығыздықты полиэтиленнен (ПНД) C1–C60 аралығындағы көмірсутектердің кең диапазоны алынады (Onwudili et al., 2009). Температура артқан сайын төмен молекулалы өнімдердің үлесі көбейеді. Ал ароматты қосылыстардың мөлшері 400–500 °C аралығында аз болғанымен, температураны жоғарылату және пиролиз газын қайта айналымға енгізу арқылы олардың үлесін арттыруға болады.

Қатты қышқылдық қасиеті бар катализаторларды қолдану арқылы полиолефин қалдықтарын отынға айналдыру технологиялары соңғы жылдары үлкен қызығушылық тудырып отыр. Бұл бағытта зертханалық деңгейден бастап өнеркәсіптік ауқымға дейінгі әртүрлі процестер әзірленген. Процестің тиімділігі көп жағдайда қолданылатын катализатордың қасиеттеріне тәуелді, өйткені олар реакция температурасын төмендетіп, молекулалық таралуы тар өнімдер алуға мүмкіндік береді.

Осыған байланысты полиолефиндердің каталитикалық крекингінде цеолиттер, кремнезем-глинозем жүйелері және мезокұрылымды материалдар кеңінен зерттелуде (Escola et al., 2011; Munir et al., 2017). Зерттеулер нәтижесінде жоғары қышқылдық орталықтары бар катализаторларды қолдану қажеттілігі анықталған, себебі ірі молекулалы полимерлер цеолиттің микрокеуектерінде диффузиялық шектеулер туындатуы мүмкін.

Соңғы зерттеулерде алғаш рет Қазақстандағы Тайжүзген кен орнынан алынған табиғи цеолит негізінде катализаторлар әзірленіп, олар пластикалық қалдықтарды термокаталитикалық гидрогенизациялау процесінде қолданылды (Aubakirov et al., 2019). Полимер қалдықтарын өңдеу арқылы құнды көмірсутектер мен отындық өнімдер алу мүмкіндігі дәлелденді. Бұл жұмыста ресурс үнемдеуші технологияларды дамыту мақсатында қышқылсыз активтелген Тайжүзген цеолитіне молибден иондарын әртүрлі мөлшерде енгізу арқылы катализаторлар синтезделді. Алынған катализаторлардың қатысуымен полимер қалдықтарын термокаталитикалық гидрогенизациялау нәтижесінде мотор отыны фракцияларын алу мүмкіндігі қарастырылды. Жалпы алғанда, өндірістік және тұрмыстық полимер қалдықтарын екінші реттік шикізат ретінде пайдалану бағыттарының бірі – көмірсутек фракцияларын термиялық және каталитикалық түрлендіру арқылы жоғары сапалы отын алу болып табылады (Lange and Ferreira, 2017).

Зерттеу материалдары мен әдістері. Зерттеу барысында бастапқы шикізат ретінде пластикалық қалдықтар қолданылды, олардың негізгі бөлігін полиэтилен (ПЭ) мен полипропилен (ПП) құрады (негізінен пластик бөтелкелердің қақпақтары). Қосымша компонент ретінде паста түзуші әрі сутек пен көміртекке бай шикізат көзі ретінде Құмкөл кен орнынан алынған, 350°C-тан жоғары температурада мұнайды өңдеу нәтижесінде түзілген мазут пайдаланылды.

Катализатор ретінде Тайжүзген кен орнынан алынған табиғи цеолит негізінде дайындалған материалдар қолданылды. Цеолит алдын ала $1\text{M NH}_4\text{Cl}$ ерітіндісімен қышқылсыз түрде активтеліп, 100–500°C температура аралығында термиялық өңдеуден өткізілді. Кейіннен ол вольфрам (VI) тұзымен $(\text{NH}_4)_5\text{H}_5[\text{H}_2(\text{WO}_4)_6] \cdot \text{H}_2\text{O}$ әртүрлі концентрацияларда (0,5% және 1,0%) модификацияланып, W(VI)/цеолит типті катализаторлар алынды.

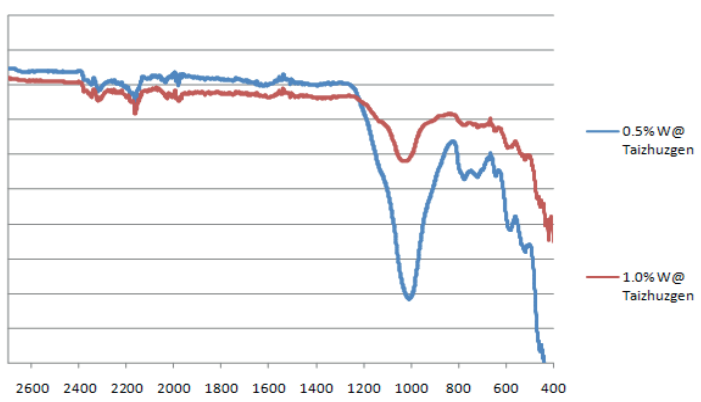
Катализатор мен тасымалдағыш ретінде табиғи «Тайжүзген» цеолитін қолдану бірқатар артықшылықтарға ие. Табиғи алюмосиликаттардың қолжетімділігі мен салыстырмалы түрде төмен құны, сондай-ақ олардың жоғары активтілігі мен селективтілігі бұл материалдарды экономикалық тұрғыдан тиімді етеді. Осы себепті зерттеу жұмысында дәл осы табиғи цеолит таңдалды.

Алынған өнімдердің құрамын анықтау мақсатында масс-спектрометриялық детектормен жабдықталған газды хроматография әдісі (Agilent 6890N/5973N) қолданылды. Талдау 0,2 мкл көлемдегі үлгі үшін, ағын диаметрі 500 мкм жағдайында жүргізілді. Бөліну процесі HP-INNOWax (Agilent, АҚШ) капиллярлық колонкасында (30 м × 0,25 мм, қабықша қалыңдығы 0,25 мкм) жүзеге асырылды. Буландырғыш температурасы 240°C болды, ал колонка термостаты бастапқыда 50°C-та (5 минут) ұсталып, кейін 240°C-қа дейін жеткізіліп, 10 минут сақталды.

Жалпы талдау ұзақтығы 34 минутты құрады. Иондарды тіркеу диапазоны m/z 10–350 аралығында жүргізілді.

Катализаторлардың құрылымдық және беттік сипаттамаларын зерттеу үшін электрондық микроскопия әдістері қолданылды. Үлгілердің морфологиясы JEOL JSM 6460LV сканерлеуші электрондық микроскопында зерттелді. Сонымен қатар, энергодисперстік спектроскопия (EDS) әдісі арқылы INCA жүйесінде катализаторлардың элементтік құрамы анықталды.

Нәтижелер. 0,5% W@Тайжүзген және 1,0% W@Тайжүзген катализаторларының құрылымдық ерекшеліктері Фурье түрлендірулі инфрақызыл спектроскопия (FTIR) әдісімен зерттелді. 1-суретте көрсетілгендей, алынған спектрлерде 400–1200 см^{-1} аралығында цеолит қаңқасына тән негізгі жұтылу жолақтары байқалады. Атап айтқанда, 1000–1100 см^{-1} аймағындағы қарқынды жолақ Si–O–Si және Al–O–Si байланыстарының асимметриялық валенттік тербелістеріне сәйкес келеді, бұл алюмосиликатты құрылымның сақталғанын көрсетеді.



Сурет 1. 0,5% W@Тайжүзген және 1,0% W@Тайжүзген композитті катализаторларының FTIR спектрлері.

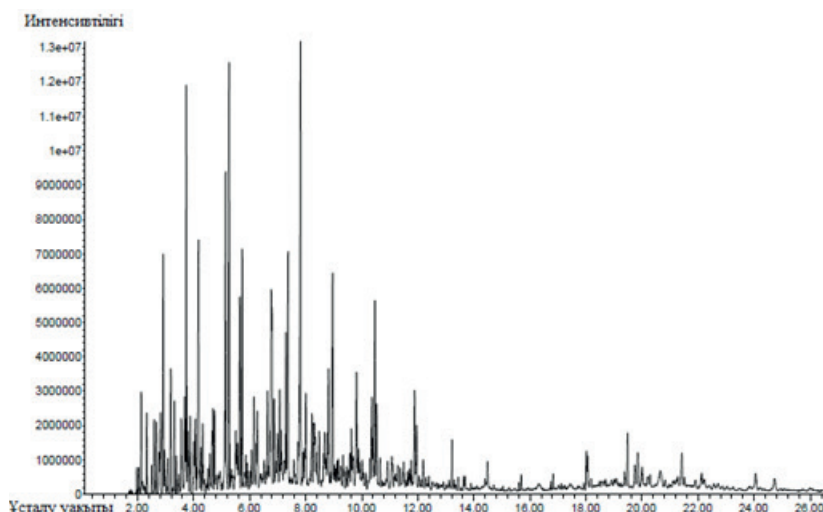
0,5% W@Тайжүзген үлгісінде осы аймақтағы жолақтың жоғары қарқындылығы цеолит құрылымының жақсы кристалданғанын және қышқыл орталықтардың жеткілікті мөлшерде екенін білдіреді. Ал 1,0% W@Тайжүзген катализаторында бұл жолақтың салыстырмалы түрде әлсіреуі вольфрам мөлшерінің артуына байланысты цеолит қаңқасының ішінара модификациялануымен немесе аморфтануымен түсіндіріледі.

800–900 см^{-1} аралығында байқалатын жолақтар сыртқы құрылымдық тербелістерге және сакина құрылымдарының деформациялық тербелістеріне сәйкес келеді. Сонымен қатар, 600–800 см^{-1} аймағындағы жұтылу жолақтары W–O және мүмкін болатын W–O–Si байланыстарының түзілуін көрсетеді, бұл вольфрамның цеолит құрылымына енгізілгенін дәлелдейді. Төмен жиілікті 450–500 см^{-1} аймағындағы жолақтар алюмосиликат қаңқасының иілу тербелістеріне тән. Бұл жолақтардың сақталуы цеолиттің негізгі құрылымы модификациядан кейін де толық бұзылмағанын көрсетеді.

Спектрлерді салыстыру нәтижесінде, вольфрам мөлшерінің артуы қышқыл орталықтардың табиғаты мен таралуына әсер ететіні анықталды. Льюис типті қышқыл орталықтардың түзілуі катализатордың көмірсутек тізбектерін ыдырату белсенділігін арттырады. Ал протонды (Бренстед) орталықтардың болуы изомерлену және крекинг процестерін күшейтеді.

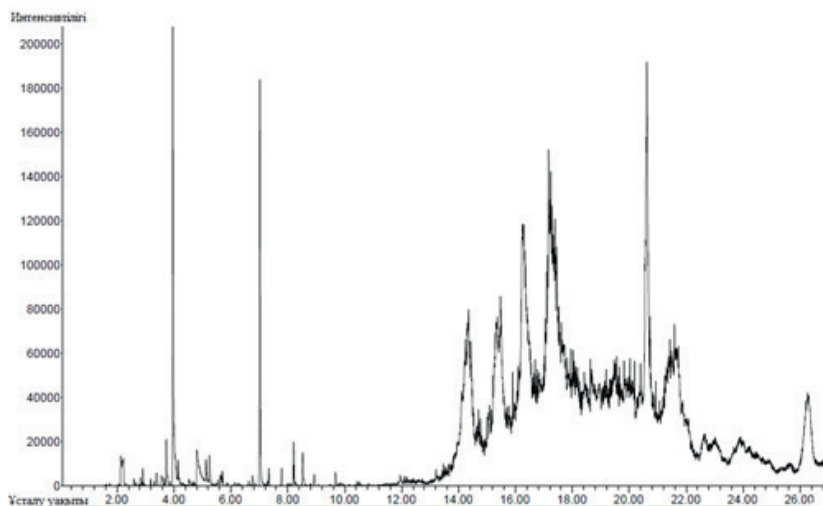
Алынған FTIR нәтижелері Тайжүзген цеолитін вольфраммен модификациялаудың оның құрылымдық және каталитикалық қасиеттерін жақсартып, полимер қалдықтарын тиімді өңдеуге мүмкіндік беретініне дәлел болды.

Полимер қалдықтарын термокатализдік гидрогенизациялау арқылы алынған сұйық өнімдердің химиялық құрамы мен компоненттік таралуын анықтау мақсатында газдық хроматография әдісі қолданылды. 2 және 3-суреттерде көрсетілгендей, алынған хроматограммаларда әртүрлі көмірсутек қосылыстарына сәйкес келетін көптеген шыңдар байқалады, бұл сұйық өнімнің күрделі көпкомпонентті құрамын дәлелдейді.



Сурет 2. 0,5% W@Тайжүзген композитті катализаторы қатысында полимер қалдықтарын термокатализдік гидрогенизациялау нәтижесінде алынған (қайнау температурасы 180 °C-қа дейінгі) сұйық өнімнің газды хроматограммасы.

2-суретте (0,5% W@Тайжүзген катализаторы) хроматограммада төмен ұсталу уақыттарында (2–10 мин) жоғары қарқындылықтағы көптеген шыңдардың болуы жеңіл көмірсутектердің, негізінен C_5 – C_{12} аралығындағы парафиндер мен изопарафиндердің басым екенін көрсетеді. Бұл катализатордың крекинг белсенділігі жоғары екенін және полимер тізбектерінің тиімді түрде ыдырайтынын білдіреді. Сонымен қатар, орташа ұсталу уақыттарында (10–18 мин) байқалатын шыңдар нафтендік және ароматты көмірсутектердің түзілуін көрсетеді.



Сурет 3. 1,0% W@Тайжүзген композитті катализаторы қатысында полимер қалдықтарын термokatалитикалық гидрогенизациялау нәтижесінде алынған (қайнау температурасы 180 °C-қа дейінгі) сұйық өнімнің газды хроматограммасы.

3-суретте (1,0% W@Тайжүзген катализаторы) хроматографиялық профильдің сипаты өзгеше: негізгі шыңдар 12–22 мин аралығында шоғырланған және қарқындылығы жоғары, бұл салыстырмалы түрде ауырлау көмірсутек фракцияларының (C_{10} – C_{20}) түзілуінің артқанын көрсетеді. Сонымен қатар, жеңіл фракциялар үлесінің азаюы катализатор құрамындағы вольфрам мөлшерінің артуымен байланысты, яғни бұл жағдайда крекинг тереңдігі төмендеп, өнімнің молекулалық массасы жоғарылайды.

Екі катализаторды салыстыру нәтижесі көрсеткендей, 0,5% W@Тайжүзген үлгісі жеңіл көмірсутектердің түзілуіне тиімді болса, 1,0% W@Тайжүзген катализаторы ауыр фракциялардың түзілуін күшейтетіндігі анықталды. Бұл катализатор құрамының, атап айтқанда вольфрам мөлшерінің, өнімнің сапалық және сандық қасиеттеріне айтарлықтай әсер ететінін дәлелдейді.

Газды хроматографиялық талдау нәтижелері полимер қалдықтарын термokatалитикалық гидрогенизациялау барысында алынған сұйық өнімдердің құрамының катализатор табиғатына тәуелді екенін көрсетіп, алынған көмірсутектердің мотор отындарының компоненттері ретінде қолдануға жарамды екенін растады.

0,5% және 1,0% W@Тайжүзген катализаторлары қатысында полимерлі қалдықтарды термokatалитикалық гидрогенизациялау нәтижесінде алынған бензин фракцияларының көмірсутектік құрамдарының топтық үлестері 1 және 2-кестелерде көрсетілген.

Кесте 1. 0,5% W@Тайжүзген катализаторы қатысында алынған бензин фракциясының топтық көмірсутектік құрамы, %.

Сұйық фракция құрамы	Көмірсутектер, %					
	Алкан	Изоалкан	Алкен	Циклоалкан	Циклоалкен	Ароматты көмірсутек
0-180°C	22,95	6,36	0	16,63	3,46	50,6
180-250°C	29,92	5,19	0	2,62	0	62,27
250-320°C	41,61	0	8,73	4,08	0	45,58

1-кестеден көрініп тұрғандай, 0,5% W@Тайжүзген катализаторы қатысында алынған 0–180°C фракциясында ароматты көмірсутектердің үлесі 50,6% болса, алкан мен изоалкандардың жалпы көлемі 29,31% құрайды. 180–250°C фракциясында ароматтар тағы да басымдылық танытып (62,27%), ал 250–320°C аралығында алкандардың үлесі артатындығы байқалады (41,61%). Бұл катализатор көмірсутектердің ароматтану және крекинг реакцияларының тепе-теңдігіне ықпал етеді.

Кесте 2. 1,0% W@Тайжүзген катализаторы қатысында алынған бензин фракциясының топтық көмірсутектік құрамы, %.

Сұйық фракция құрамы	Көмірсутектер, %					
	Алкан	Изоалкан	Алкен	Циклоалкан	Циклоалкен	Ароматты көмірсутек
0-180°C	38,96	5,9	0	15,84	0	39,3
180-250°C	26,85	4,93	0	2,95	2,07	63,2
250-320°C	38,4	3,55	3,27	0,43	0,38	53,97

2-кестеде 1,0% W@Тайжүзген катализаторы қатысында алынған өнімнің құрамында алкандардың үлесі 0–180°C аралығында айтарлықтай жоғары (38,96%) және ароматтардың мөлшері аздап төмендегені (39,3%) байқалады. 180–250°C фракциясында ароматты көмірсутектердің үлесі 63,2%-ға жетіп, 250–320°C аралығында да (53,97%) басым болып тұр. Сонымен қатар, 1,0% W үлгісінде изоалкандар мен алкендердің мөлшері сәл артқан.

Осылайша, катализатордағы вольфрамның концентрациясы артқан сайын, өнімнің құрамындағы көмірсутектердің топтық қатынасы өзгеріп, ароматты және циклоалканды қосылыстардың үлесі аздап кеміп, алкандардың үлесі артады. Бұл катализаторлардың белсенділігі мен селективтілігінің өзгешелігін және реакцияның бағытына әсерін көрсетеді.

Қорытынды. Төмен қысым (0,5–0,6 МПа) жағдайында полимерлі қалдықтарды термокаталитикалық гидрогенизациялау үшін алғаш рет W(VI) тұзымен модифицирленген, қышқылсыз активтелген және 450°C-та күйдірілген Тайжүзген кен орны табиғи цеолиті катализатор ретінде қолданылды. Масс-спектрометриялық газдық хроматография нәтижелері бойынша 0,5% W@Тайжүзген катализаторы қатысында алынған бензин фракциясының құрамында ароматты көмірсутектердің үлесі 0–180°C аралығында 50,6%, 180–250°C

фракциясында 62,27%, ал 250–320°C фракциясында 45,58% болды. Алкандардың үлесі сәйкесінше 22,95%, 29,92% және 41,61% құрады. 1,0% W@Тайжүзген катализаторы қатысында алынған өнімде 0–180°C фракциясында ароматты көмірсутектердің мөлшері 39,3% болса, ал алкандардың үлесі 38,96%-ға дейін артты. 180–250°C фракциясында ароматты қосылыстардың үлесі 63,2%-ға жетіп, 250–320°C аралығында 53,97% болды.

Нәтижелер көрсеткендей, катализатордағы вольфрамның концентрациясы өнім құрамына елеулі әсер етеді: вольфрам мөлшері артқан сайын ароматты көмірсутектердің үлесі сәл төмендеп, алкандық фракциялар көбейеді. FTIR талдау деректері бойынша катализаторларда Льюис қышқылдық орталықтар анықталды, бұл крекинг және ароматтану реакцияларының жоғары селективтілігін қамтамасыз етеді.

Алынған мәліметтер полимер қалдықтарын гидрогенизациялау арқылы синтетикалық мотор отындарын алу үшін ресурс үнемдеуге бағытталған технологияның тиімділігін дәлелдейді. 0,5–1,0% W@Тайжүзген катализаторлары қатысында өнімнің құрамында 0–320°C аралығында жалпы көмірсутектердің ароматты, алкандық және циклдық фракцияларының оптималды балансы байқалды, бұл коммерциялық масштабта қолдану перспективаларын көрсетеді.

References

Al-Salem S.M., et al. (2017) A review on thermal and catalytic pyrolysis of plastic solid waste (PSW). *Journal of Environmental Management*. – No. 197. – P. 177-198. DOI: 10.1016/j.jenvman.2017.03.084 (in Eng.).

Aubakirov Y.A., et al. (2019) Thermo-catalytic processing of polymer waste over catalysts on the basis of natural zeolite from the Tayzhuzgen field (Kazakhstan) modified by molybdenum. *Rasayan Journal of Chemistry*. – No. 12(4). – P. 1701-1709. DOI: 10.31788/RJC.2019.1245435 (in Eng.).

Escola J.M., et al. (2011) Catalytic hydroreforming of the polyethylene thermal cracking oil over Ni supported hierarchical zeolites and mesostructured aluminosilicates. *Applied Catalysis B: Environmental*. – No. 106(3-4). – P. 405-415. DOI: 10.1016/j.apcatb.2011.05.048 (in Eng.).

Hazrat M.A., Rasul M.G., Khan M.M.K. (2015) A study on thermo-catalytic degradation for production of clean transport fuel and reducing plastic wastes. *Procedia Engineering*. – No. 105. – P. 865-876. DOI: 10.1016/j.proeng.2015.05.108 (in Eng.).

Lange L.C., Ferreira A.F.M. (2017) The effect of recycled plastics and cooking oil on coke quality. *Waste Management*. – No. 61. – P. 269-275. DOI: 10.1016/j.wasman.2016.08.039 (in Eng.).

Munir D., et al. (2017) Hydrocracking of a plastic mixture over various micro-mesoporous composite zeolites. *Powder Technology*. – No. 316. – P. 542-550. DOI: 10.1016/j.powtec.2017.01.037 (in Eng.).

Munir D., Irfan M.F., Usman M.R. (2018) Hydrocracking of virgin and waste plastics: A detailed review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. – No. 90. – P. 490-515. DOI: 10.1016/j.rser.2018.03.034 (in Eng.).

Onwudili J.A., Insura N., Williams P.T. (2009) Composition of products from the pyrolysis of polyethylene and polystyrene in a closed batch reactor: Effects of temperature and residence time. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*. – No. 86(2). – P. 293-303. DOI: 10.1016/j.jaap.2009.07.008 (in Eng.).

Saxena A., Sharma H., Rath G. (2017) Conversion of waste plastic to fuel: Pyrolysis – an efficient method: A review. Available at: <https://www.researchgate.net/publication/313349450> (in Eng.).

Serrano D.P., Aguado J., Escola J.M. (2012) Developing advanced catalysts for the conversion of polyolefinic waste plastics into fuels and chemicals. *ACS Catalysis*. – No. 2(9). – P. 1924-1941. DOI: 10.1021/cs3003403 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 175–187

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.445>

UDC: 661.846:66.082
IRSTI: 61.29.39

©Auyeshov A.P., Yeskibayeva Ch.Z. *, Ibrayeva A.M., Alzhanov K.B.,
Dikanbayeva A.K. *, 2026.

South Kazakhstan University named after Auezova, Shymkent, Kazakhstan.

*E-mail: dikanbaeva86@mail.ru

PHYSICOCHEMICAL STUDY OF SERPENTINITE WASTE AND PHOSPHORIC ACID PRODUCTS

Auyeshov Abdrazak — Doctor of Technical Sciences, Professor, South Kazakhstan University named after Auezova, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: centersapa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3504-9117>;

Yeskibayeva Chaizada — Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, South Kazakhstan University named after Auezova, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: yeskibayeva@internet.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8049-8851>;

Ibrayeva Aitkul — Chief Specialist, South Kazakhstan University named after Auezova, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: aytkul.ibraeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0981-0117>;

Alzhanov Kurmanbek — Chief Specialist, South Kazakhstan University named after Auezova, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: centersapa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5221-8285>;

Dikanbayeva Aizhan — PhD, South Kazakhstan University named after Auezova, Shymkent, Kazakhstan,
E-mail: dikanbaeva86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4982-1566>.

Abstract. This study investigates the formation of magnesium- and phosphorus-containing compounds suitable for use as fertilizers, based on the reaction of serpentinite waste with phosphoric acid. In this study, the physicochemical interaction between serpentinite waste generated during chrysotile-asbestos processing at the Zhitikara deposit (Kazakhstan) and phosphoric acid was investigated with the aim of obtaining magnesium-phosphate products suitable for agricultural applications. Serpentinite residue containing approximately 42 wt.% MgO was treated with phosphoric acid under different stoichiometric conditions. Thermodynamic calculations were performed to evaluate the feasibility of magnesium phosphate formation and to compare the effectiveness of phosphoric acid with sulfuric, hydrochloric, and nitric acids.

The obtained products were characterized by X-ray diffraction (XRD), Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), chemical analysis, and pH measurements. The results demonstrated that phosphoric acid effectively decomposes the serpentinite

structure, leading to the formation of hydrated magnesium phosphates. The phases $\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and $\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ were identified as the dominant reaction products, while crystalline magnesium orthophosphate was not detected because of its lower thermodynamic stability. Under a Mg^2_3PO_4 molar ratio of 1:1, the system reached a nearly neutral pH value (~ 6.9), providing favorable conditions for obtaining fertilizer-grade products. FTIR analysis confirmed the destruction of the original serpentine structure and indicated the presence of amorphous silica in the solid residue. The proposed approach represents a resource-efficient and environmentally sustainable method for valorization of serpentinite waste and offers promising prospects for the production of magnesium- and phosphorus-containing fertilizers from technogenic raw materials.

Keywords: serpentinite waste, phosphoric acid, IR spectroscopy, magnesium phosphates, fertilizers

Acknowledgment. *This study was conducted with the financial support of grant funding for scientific and (and/or) scientific-technical projects and programs for 2023-2025 by the Committee of Science of the Ministry of Education and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP19676952).*

For citations: Auyeshov A.P., Eskibayeva Ch.Z., Ibrayeva A.M., Alzhanov K.B., Dikanbayeva A.K. *Physicochemical Study of Serpentinite Waste and Phosphoric Acid Products. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences.* 2026. No.2. Pp. 175–187. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.445>

©Ауешов А.П., Ескибаева Ч.З.*, Ибраева А.М., Алжанов К.Б.,
Диканбаева А.К.*, 2026.

М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.

*E-mail: dikanbaeva86@mail.ru

СЕРПЕНТИНИТ ҚАЛДЫҚТАРЫНЫҢ ФОСФОР ҚЫШҚЫЛЫМЕН ӘРЕКЕТТЕСУ ӨНІМДЕРІНІҢ ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫҚ ЗЕРТТЕЛУІ

Ауешов Абдразах — техника ғылымдарының докторы, профессор, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: centersapa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3504-9117>;

Ескибаева Чайзада — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: yeskibayeva@internet.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8049-8851>;

Ибраева Айтқұл — бас маман, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: aytkul.ibraeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0981-0117>;

Алжанов Курманбек — бас маман, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: centersapa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5221-8285>;

Диканбаева Айжан — PhD, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан,
E-mail: dikanbaeva86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4982-1566>.



Аннотация. Бұл зерттеуде Жітіқара кен орнындағы хризотил-асбест шикізатын өңдеу барысында түзілетін серпентинит қалдықтарының фосфор қышқылымен физика-химиялық әрекеттесуі зерттеліп, ауыл шаруашылығында қолдануға жарамды магний фосфатты қосылыстарды алу мүмкіндігі қарастырылды. Құрамында шамамен 42 масс.% MgO бар серпентинит қалдықтары фосфор қышқылымен әртүрлі стехиометриялық қатынастарда өңделді. Магний фосфаттарының түзілу мүмкіндігін бағалау және фосфор қышқылының күкірт, тұз және азот қышқылдарымен салыстырғандағы тиімділігін анықтау үшін термодинамикалық есептеулер жүргізілді.

Алынған өнімдер рентгенфазалық талдау (XRD), Фурье түрлендіру инфрақызыл спектроскопиясы (FTIR), химиялық талдау және рН мәнін анықтау әдістерімен зерттелді. Зерттеу нәтижелері фосфор қышқылының серпентинит құрылымын тиімді түрде ыдыратып, гидратталған магний фосфаттарының түзілуіне әкелетінін көрсетті. Негізгі реакция өнімдері ретінде $Mg(H_2PO_4)_2 \cdot 2H_2O$ және $MgHPO_4 \cdot 3H_2O$ фазалары анықталды, ал магний ортофосфаты оның термодинамикалық тұрақтылығының төмен болуына байланысты анықталған жоқ. $Mg^{2+}_3PO_4 = 1:1$ мольдік қатынасында жүйенің рН мәні бейтарапқа жуық деңгейге (~6,9) жетіп, тыңайтқыштық мақсаттағы өнімдерді алу үшін қолайлы жағдай қалыптастырды. FTIR талдауы бастапқы серпентин құрылымының толық бұзылуын және қатты қалдық құрамында аморфты кремнеземнің болуын растады. Ұсынылған тәсіл серпентинит қалдықтарын кәдеге жаратудың ресурсты үнемдейтін және экологиялық тұрғыдан тұрақты әдісі болып табылады әрі техногендік шикізат негізінде магний және фосфор құрамды тыңайтқыштар өндірудің болашағын ашады.

Кілттік сөздер: серпентинит қалдықтары, фосфор қышқылы, ИҚ-спектроскопия, магний фосфаттары, тыңайтқыштар

©Ауешов А.П., Ескибаева Ч.З. *, Ибраева А.М., Алжанов К.Б.,
Диканбаева А.К. *, 2026.

Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан.

*E-mail: dikanbaeva86@mail.ru

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОДУКТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СЕРПЕНТИНИТОВЫХ ОТХОДОВ И ФОСФОРНОЙ КИСЛОТЫ

Ауешов Абдразах — доктор технических наук, профессор, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: centersapa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3504-9117>;

Ескибаева Чайзада — кандидат технических наук, доцент, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: yeskibayeva@internet.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8049-8851>;

Ибраева Айткул — главный специалист, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: aytkul.ibraeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0981-0117>;

Алжанов Курманбек — главный специалист, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: centersapa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5221-8285>;

Диканбаева Айжан — PhD, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: dikanbaeva86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4982-1566>.

Аннотация. В настоящем исследовании изучено физико-химическое взаимодействие серпентинитовых отходов, образующихся при переработке хризотил-асбестового сырья Житикаринского месторождения Казахстана, с фосфорной кислотой с целью получения магнийфосфатных соединений, пригодных для применения в сельском хозяйстве. Серпентинитовый остаток, содержащий около 42 мас. % MgO, обрабатывали фосфорной кислотой при различных стехиометрических соотношениях. Для оценки возможности образования фосфатов магния и сравнения эффективности фосфорной кислоты с серной, соляной и азотной кислотами были выполнены термодинамические расчёты. Полученные продукты исследованы методами рентгенофазового анализа (XRD), инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье (FTIR), химического анализа и измерения pH. Результаты показали, что фосфорная кислота эффективно разрушает структуру серпентинита, способствуя образованию гидратированных фосфатов магния. В качестве основных продуктов реакции идентифицированы фазы $\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, тогда как кристаллический ортофосфат магния не обнаружен вследствие его более низкой термодинамической устойчивости в исследуемых условиях. При мольном соотношении $\text{Mg}^{2+} \cdot 4\text{P}^{3-} = 1:1$ система достигала практически нейтрального значения pH (~6,9), что создаёт благоприятные условия для получения продуктов удобрительного назначения. Данные FTIR-анализа подтвердили разрушение исходной структуры серпентина и наличие аморфного кремнезёма в твёрдом остатке. Предложенный подход представляет собой ресурсоэффективный и экологически устойчивый способ утилизации серпентинитовых отходов и открывает перспективы получения магний- и фосфорсодержащих удобрений на основе техногенного сырья.

Ключевые слова: серпентинитовые отходы, фосфорная кислота, ИК-спектроскопия, фосфаты магния, удобрения

Introduction. Magnesium compounds and magnesium-containing materials are an integral part of modern chemical production. However, there are currently no industrial enterprises in Kazakhstan that produce magnesium-based compounds and fertilizers of industrial significance. Moreover, the country's fertilizer production remains narrowly focused on nitrogen-phosphate and calcium-phosphate fertilizers. At the same time, there is a growing demand for complex fertilizers containing not only phosphorus, but also magnesium, nitrogen, calcium, sulfur, and trace elements. This trend encourages the use of phosphate-containing minerals and industrial by-products to maintain the nutrient balance in soils. Such an approach contributes to the diversification of the raw material base and expansion of the range of mineral fertilizers. In this context,

serpentinites are increasingly being considered as alternatives to dolomite. This interest is partly due to the absence of high-quality dolomite deposits in Kazakhstan, which has traditionally served as the main raw material for magnesium production.

Serpentinites are considered promising raw materials due to their high magnesium oxide (MgO) content (35–45 wt.%), which is approximately 3–4% higher than that of dolomite.

Accordingly, research into the utilization of serpentinites for the production of magnesium compounds or magnesium-based fertilizers is of considerable scientific and practical interest, particularly in the field of agriculture. The advantages of using serpentinites include:

- their abundant natural occurrence, particularly in countries with developed mining sectors;
- their association with nickel, chromite, and chrysotile-asbestos deposits, which reduces the need for additional mining;
- the ability to repurpose mining waste, thereby contributing to environmental sustainability;
- and the potential to develop complex fertilizers due to their high magnesium content—especially when combined with phosphorus, nitrogen, or sulfur compounds.
- serpentinites can be crushed into powder form and used to improve soil acidity levels, owing to the simplicity and low cost of the preparation technologies.

Additional advantages include the low cost of serpentinite extraction and the possibility of establishing fertilizer production facilities in serpentinite-rich regions, which would significantly reduce logistics and transportation expenses, among other benefits.

Serpentinite is a magnesium-rich silicate mineral that is widely distributed in nature but is often underutilized as a raw material in the mining industry. Traditional acid treatment methods using H_2SO_4 or HCl have been sufficiently studied (Maslennikova, 2007; Teir et al., 2007; Aueshov et al., 2017), however, phosphoric acid (H_3PO_4), acting both as a reagent and a source of phosphorus for fertilizers, has been studied to a lesser extent (Pirimov et al., 2023; Federockova et al., 2014; Yamada and Nagai 1970). H_3PO_4 is considered promising in agriculture due to its dual function and can be used for the production of magnesium phosphates - compounds important for agriculture - as well as amorphous silica applicable in industry (Viera et al., 2022; Liu et al., 2023; Knyazev et al., 2021; Nakamura et al., 1956).

One of the largest serpentinite deposits in Kazakhstan is located in Zhitikara, Kostanay region. As a result of long-term processing of chrysotile-asbestos raw materials at this site, a vast amount of serpentinite waste—estimated at approximately 300 million tons—has accumulated. This waste represents a valuable technogenic raw material for the production of magnesium-based products and fertilizers. The magnesium content in the waste reaches up to 43.0 wt.% MgO. Despite this potential, the possibilities of utilizing this material for magnesium extraction remain underexplored to date.

Today, agrochemical science increasingly emphasizes the importance of using magnesium- and silicon-containing fertilizers, placing them on par with conventional

nitrogen (N), phosphorus (P), and potassium (K) fertilizers. Magnesium is an essential nutrient for plants, as it not only enhances crop yield but also improves the nutritional quality of agricultural products. Currently, fertilizers containing both Mg and NPK are mainly produced as simple mechanical blends of different fertilizers, commonly referred to as compound fertilizer mixtures. These mixed formulations are typically more expensive than conventional fertilizers and are produced in limited quantities.

An analysis of studies on this topic (Auyeshov et al., 2024; Yeskibayeva et al., 2024; Katyshev et al., 2014) shows that the majority of research efforts related to the processing of serpentinites and serpentinite waste have focused on acid leaching for magnesium extraction. In most cases, sulfuric and hydrochloric acids have been employed for material decomposition, while the use of nitric acid has been less common. The proposed technologies generally differ in the type of acid used, the degree of raw material pulverization, the operating conditions of the processes, and the methods used for purification of the magnesium-containing solutions. The possibility of producing magnesium- and phosphorus-containing fertilizers through the treatment of serpentinites or serpentinite waste with phosphoric acid has been demonstrated in several works (Arynov et al., Patent KZ 2017).

Accordingly, the objective of this study was to investigate the interaction between serpentinite waste from the Zhitikara deposit and phosphoric acid, with particular emphasis on the phase state of the resulting reaction products.

Materials and methods. The object of this study was serpentinite waste generated at the chrysotile-asbestos beneficiation plant of “Kostanay Minerals” JSC, located at the Zhitikara deposit. The average chemical composition of the waste (wt.%): MgO – 42.0; SiO₂ – 41.0; Fe₂O₃ – 4.0; Al₂O₃ – 0.45; CaO – 0.1; Cr₂O₃ – 0.16. Phosphoric acid of analytical grade (85%) was used in the experiments.

X-ray phase analysis (XRD) was performed using a DRON-3 diffractometer with a Cu K α radiation source and a nickel filter, in powder mode. Diffracted maxima were recorded using an ionization chamber at a goniometer speed of 2° per minute. Qualitative analysis of the obtained diffractograms was carried out using the WinXPOW software (ICDD PDF-2 database).

Infrared (IR) spectra (FTIR) were recorded on a “Shimadzu IR Prestige-21c” spectrophotometer in the range of 400–4000 cm⁻¹, equipped with proprietary software and a spectral library from Pike Technologies (Miracle accessory). For analysis, the sample was dried at 105 °C, ground into a powder, and pressed firmly onto a diamond crystal. The spectrum was recorded in the range of 4000–400 cm⁻¹.

The acidity (pH) of the chemical system was measured using a laboratory ionometer model И-160.

The Gibbs free energy ($\Delta G^0_{(rxn)}$) under standard conditions was calculated based on thermodynamic data ($\Delta H^0_{(rxn)}$ and $\Delta S^0_{(rxn)}$) using the incremental method developed by B.K. Kasenov and M.K. Aldabergenov (Kasenov et al., 1994). Assessment of the standard thermodynamic function ΔS^0 for various hydrated magnesium phosphate compounds based on the contributions of ions and structural fragments.

The experimental interaction between serpentinite waste and phosphoric acid was

carried out using 50% H_3PO_4 solution. According to the stoichiometric ratios defined in reactions 1–3 (Table 1), the following quantities of phosphoric acid were used per 1.0 g of serpentinite: 2.13 g for reaction 1, 1.065 g for reaction 2, and 0.71 g for reaction 3. The reaction was performed in a temperature-controlled reactor flask equipped with a reflux condenser and a propeller stirrer. Prior to the reaction, 2.5 g of serpentinite waste was loaded into the reactor, and the corresponding calculated amount of phosphoric acid was added during stirring.

The interaction was conducted at a controlled temperature for 1 hour. Upon completion, the resulting slurry was first air-dried and then further dried in an oven at 95–100°C. The obtained reaction products were identified using X-ray diffraction (XRD) and Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy.

Results and Discussion. *Thermodynamic Assessment.* The complex ternary phase diagram of the $\text{MgO}-\text{P}_2\text{O}_5-\text{H}_2\text{O}$ system illustrates the equilibrium states of various phases depending on temperature and the concentrations of the components in the system. Based on this diagram, it is possible to predict the formation of different hydrated magnesium phosphate salts depending on the Mg^{2+} , PO_4^{3-} , and H_2O ratios. Possible compounds include: $\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O} + \text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$; $\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O} + \text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $\text{MgHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + \text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ (Sierra et al., 2018). The formation of specific compounds is influenced by the acidity of the medium and the molar ratios of the components. The ratio of Mg^{2+} to PO_4^{3-} concentrations determine which type of phosphate is likely to dominate in the system. Accordingly, thermodynamic calculations were performed to evaluate the interactions between serpentinite (as the main component of the waste) and phosphoric acid at different molar ratios (1–3), as well as, for comparison, with sulfuric, hydrochloric, and nitric acids (4–6). The results of standard Gibbs free energy ($\Delta G_{\text{(rxn)}}^0 = f(T)$) calculations are presented in Table 1.

Table 1. Standard Gibbs free energy values ($\Delta G_{\text{(rxn)}}^0$) for the interaction of serpentinite with various acids.

Reaction No.	Reaction	ΔG_{298}^0 kJ/mol
1	$3\text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 6\text{H}_3\text{PO}_4 = 3\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{SiO}_2 + 3\text{H}_2\text{O}$	-535.8
2	$3\text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 3\text{H}_3\text{PO}_4 = 3\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O} + 2\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	-724.4
3	$3\text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{H}_3\text{PO}_4 = \text{Mg}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 2\text{SiO}_2 + 5\text{H}_2\text{O}$	-141.6
4	$3\text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 6\text{HCl} = 3\text{MgCl}_2 + 2\text{SiO}_2 + 5\text{H}_2\text{O}$	-5.7
5	$3\text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 3\text{H}_2\text{SO}_4 = 3\text{MgSO}_4 + 2\text{SiO}_2 + 5\text{H}_2\text{O}$	-25.1
6	$3\text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O} + 6\text{HNO}_3 = 3\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 + 2\text{SiO}_2 + 5\text{H}_2\text{O}$	-11.4

The standard Gibbs free energy (ΔG_{298}^0) values for the reactions between serpentinite ($3\text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$) and phosphoric acid, according to reaction equations 1–3, are -535.8, -724.8, and -141.6 kJ/mol, respectively. These values indicate that the reactions are thermodynamically favourable and likely to proceed under standard conditions. Furthermore, compared to sulfuric, hydrochloric, and nitric acids, phosphoric acid exhibits a significantly higher potential to decompose serpentinite.

Based on the thermodynamic likelihood of formation, the stability order of magnesium phosphates is as follows: magnesium hydrogen phosphate trihydrate > magnesium

dihydrogen phosphate dihydrate > magnesium orthophosphate. This suggests that the formation of $\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ is the most thermodynamically favourable.

The results of the chemical analysis of the reaction products and the pH of the medium under the experimental conditions corresponding to reactions P-1, P-2, and P-3 (Table 1) are presented in Table 2.

Table 2. Chemical composition of the solid products and equilibrium pH values resulting from the “Serpentine – H_3PO_4 ” interactions.

Rxn No.	Sample	H_3PO_4 (g), Stoich.	pH	MgO (wt.%)	SiO_2 (wt.%)	Fe_2O_3 (wt.%)	Al_2O_3 (wt.%)	CaO (wt.%)	Cr_2O_3 (wt.%)	P_2O_5 (wt.%)
–	Initial SR*	–	10.12	44.05	37.77	5.55	0.44	0.10	0.16	–
R-1	SR*	2.13	3.15	13.51	18.80	4.00	0.26	0.30	–	48.44
R-2	SR*	1.07	6.90	19.37	25.03	6.11	0.30	0.31	–	–
R-3	SR*	0.71	8.56	34.67	22.00	6.00	0.29	0.22	–	–

* Note: SR – serpentine residue (solid waste)

Based on the initial pH value of 10.12 in the aqueous suspension of the serpentine residue, it can be concluded that the material exhibits basic properties in a water medium. In the case of R-1, conducted with an excess of phosphoric acid, the low equilibrium pH value (3.15) suggests that a portion of the acid remained unreacted. For the stoichiometric amount used in R-2, the pH of 6.9 indicates that acid-base interactions were nearly complete. In contrast, under the conditions of R-3, the observed pH of 8.56 reflects a deficiency of phosphoric acid in the reaction system.

According to the chemical analysis results of the reaction products, a trend is observed wherein, as the system transitions from the R-1 to R-2 and R-3 stoichiometric ratios, the MgO content in the final products increases. At the same time, the P_2O_5 content varies, which is indicative of the formation of different magnesium phosphate phases depending on the initial stoichiometric ratios applied.

X-ray diffraction (XRD) analysis conducted to identify the mineral composition of the products revealed that the characteristic reflection patterns of serpentine, which constitutes the core of the initial residue, were absent in the products of reactions R-1 and R-2. This indicates complete structural transformation. In the case of reaction R-3, these reflections were only weakly detectable, suggesting incomplete decomposition of the serpentine structure (see Table 3 and Figures 1 and 2).

Table 3. Diffraction reflection intensities of the reaction products in the (“Serpentine – H_3PO_4 ”) system.

d/n (Å)	J/J ₀ (%)	Identified phase	Chemical formula	Phase name
7.38	100	Serpentine	$\text{Mg}[\text{Si}_2\text{O}_5](\text{OH})_4$	Serpentine
3.66	80	Serpentine	$\text{Mg}[\text{Si}_2\text{O}_5](\text{OH})_4$	Serpentine
2.48	32	Serpentine	$\text{Mg}[\text{Si}_2\text{O}_5](\text{OH})_4$	Serpentine
1.53	20	Serpentine	$\text{Mg}[\text{Si}_2\text{O}_5](\text{OH})_4$	Serpentine
3.14	100	Dihydrated magnesium dihydrogen phosphate	$\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	Dihydrated magnesium dihydrogen phosphate

3.37	80	Dihydrated magnesium dihydrogen phosphate	$\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	Dihydrated magnesium dihydrogen phosphate
2.33	70	Dihydrated magnesium dihydrogen phosphate	$\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	Dihydrated magnesium dihydrogen phosphate
3.45	100	Tris-hydrated magnesium hydrogen phosphate	$\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	Tris-hydrated magnesium hydrogen phosphate
3.05	80	Tris-hydrated magnesium hydrogen phosphate	$\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	Tris-hydrated magnesium hydrogen phosphate
5.90	40	Tris-hydrated magnesium hydrogen phosphate	$\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	Tris-hydrated magnesium hydrogen phosphate
3.41	100	Magnesium hypophosphite	$\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_2)_2$	Magnesium hypophosphite
4.01	65	Magnesium hypophosphite	$\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_2)_2$	Magnesium hypophosphite
5.00	63	Magnesium hypophosphite	$\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_2)_2$	Magnesium hypophosphite
3.47	100	Iron orthophosphate	FePO_4	Iron orthophosphate
3.02	40	Iron orthophosphate	FePO_4	Iron orthophosphate
4.39	23	Iron orthophosphate	FePO_4	Iron orthophosphate
4.62	100	Iron metasilicate	FeSiO_3	Iron metasilicate
2.91	90	Iron metasilicate	FeSiO_3	Iron metasilicate
6.48	70	Iron metasilicate	FeSiO_3	Iron metasilicate

In the first two cases (P-1 and P-2), it was established that within the first hour of interaction, the serpentinite structure is completely destroyed under the action of phosphoric acid. In the case of P-3, an insufficient amount of phosphoric acid is present in the system, resulting in incomplete destruction of the serpentinite structure. Figures 1 and 2 present the X-ray diffraction analysis results of the reaction products for variants P-1 and P-2. According to the WinXPOW program (ICDD PDF-2), diffraction reflections corresponding to magnesium phosphate salts with various degrees of hydration were detected (Table 3). Specifically, the observed d/n values were:

$d/n = 3.14, 3.37$, and 2.33 corresponding to magnesium dihydrogen phosphate dihydrate; $d/n = 3.45, 3.05$, and 5.90 corresponding to magnesium hydrogen phosphate trihydrate; $d/n = 3.41, 4.01$, and 5.00 corresponding to magnesium hypophosphite; $d/n = 3.47, 3.02$, and 4.39 attributed to iron orthophosphate; $d/n = 4.62, 2.91$, and 6.48 associated with iron metasilicate.

The absence of distinct reflections corresponding to crystalline SiO_2 in the XRD patterns of the reaction products suggests that the silica formed during the reactions is likely present in an amorphous or poorly crystalline state.

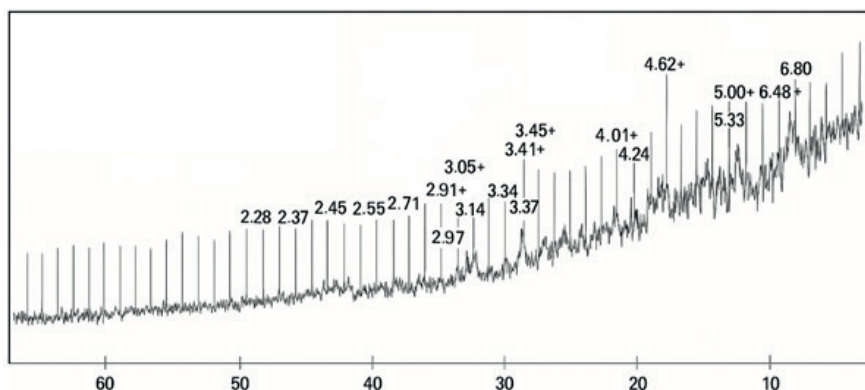


Figure 1. - X-ray diffraction (XRD) pattern of the interaction products between serpentinite residue and phosphoric acid (R-1 condition).

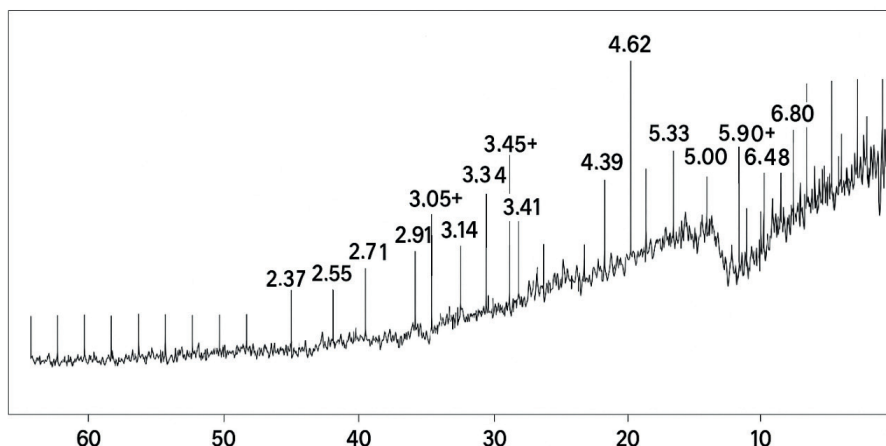


Figure 2. X-ray diffraction (XRD) pattern of the interaction products between serpentinite residue and phosphoric acid (R-2 condition).

Analysis of the FTIR spectra of the interaction products between serpentinite residue and phosphoric acid (Figure 1) revealed the absence of the characteristic absorption band at 941 cm^{-1} , typically associated with the valence vibrations of serpentinite structures. This supports the assumption that serpentinite structures undergo complete decomposition as a result of the reaction.

The FTIR spectra, in turn, exhibit characteristic bands corresponding to various structural units: water molecules ($3700\text{--}3300\text{ cm}^{-1}$ and $1700\text{--}1600\text{ cm}^{-1}$), phosphate anions such as HPO_4^{2-} and H_2PO_4^- ($1300\text{--}650\text{ cm}^{-1}$), and $\text{Mg}_6\text{--O}_6$ coordination polyhedra ($600\text{--}400\text{ cm}^{-1}$) (Arynov et al., Patent KZ 2017).

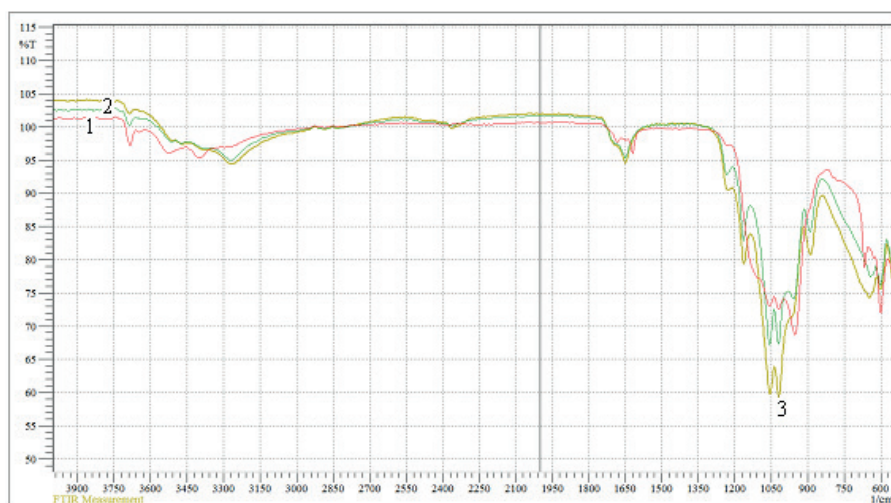


Figure 3. FTIR spectra of the interaction products in the “Serpentine residue – H_3PO_4 ” system: 1) R-1; 2) R-2; 3) R-3 (corresponding to the reaction products listed in Table 2).

In the FTIR spectra, three distinct bands in the $3700\text{--}3300\text{ cm}^{-1}$ range and a low-intensity shoulder at approximately 651 cm^{-1} indicate that water molecules occupy structurally nonequivalent sites and are not energetically identical. The high-frequency maxima ($3700\text{--}3300\text{ cm}^{-1}$) are attributed to weakly bound or non-coordinated water molecules, which are involved in hydrogen bonding either with each other or with phosphate ions. The presence of a deformation band at 1661 cm^{-1} ($\delta(\text{H}_2\text{O})$) with a shoulder suggests that water molecules occupy two or three crystallographically non-equivalent positions within the structure.

Characteristic bands observed at 1065 cm^{-1} and 956 cm^{-1} are attributed to symmetric and asymmetric stretching and deformation vibrations of $(\text{O}_2\text{PO}_2)\text{H}_2$ – type anions. Additional bands at 1230 , 1165 , 1018 , and 891 cm^{-1} correspond to $(\text{O}_2\text{PO}_2)\text{H}$ – type anions. The presence of hydrogen bonding between anions and water molecules is supported by the splitting of absorption bands in the anion lattice region ($1300\text{--}650\text{ cm}^{-1}$). The absence of distinct absorption bands for $(\text{O}_2\text{PO}_2)\text{H}_2$ and $(\text{O}_2\text{PO}_2)\text{H}$ anion lattices suggests the formation of directed dipole moments as a result of H-bonding between phosphate ions and non-coordinated water molecules. This leads to the collective excitation of phosphate tetrahedra, manifested as a unified vibrational mode of the entire anionic system.

Additionally, the intense bands at 1065 and 956 cm^{-1} are associated with the stretching vibrations of silica (SiO_2), indicating its presence in an amorphous or poorly crystalline form.

Based on FTIR spectral analysis, it can be inferred that under the conditions of Reaction 1 (R-1), the system predominantly forms magnesium dihydrogen phosphate trihydrate. In the cases of Reactions 2 and 3 (R-2 and R-3), the products are similar in composition and mainly consist of magnesium hydrogen phosphates with magnesium dihydrogen phosphate dihydrate as a secondary phase. Although the stoichiometric ratio

in Reaction 3 corresponds to the theoretical formation of magnesium orthophosphate, this compound is not detected; instead, HPO_4^{2-} – type hydrogen phosphates are formed. When the molar ratio of the reactants is 1:1 (as in R-2), the pH of the medium approaches neutral ($\text{pH} = 6.9$), which may be considered optimal for fertilizer production in terms of acidity, product yield, and composition.

Conclusion. Physicochemical analysis (XRD and FTIR) of the reaction products in the “serpentinite residue – phosphoric acid” system confirmed that phosphoric acid can completely decompose serpentinite structures within a short period. The qualitative composition of the reaction products corresponds to the thermodynamically predicted phases: various hydrated magnesium phosphates ($\text{Mg}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{MgHPO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$), iron orthophosphate (FePO_4), and iron metasilicate (FeSiO_3). Magnesium orthophosphate was not formed, which is consistent with its lower thermodynamic favorability (higher Gibbs free energy).

When serpentinite residue and phosphoric acid are combined in a 1:1 molar ratio, the resulting product shows favorable characteristics—such as optimal acidity, phase composition, and yield—for use as a magnesium- and phosphorus-containing fertilizer.

References

- Arynov K.T., Aueshov A.P., Eskibayeva Ch.Z., Alzhanov K.B., Ibraeva A.M. i dr. (2017) Sposob polucheniya kompleksnogo magnij-fosfatnogo udobreniya [Method for producing complex magnesium phosphate fertilizer]. – Patent KZ 32561. (in Rus.).
- Aueshov A.P., Arynov K.T., Eskibayeva Ch.Z. (2017) Reagentnye tekhnologii pererabotki othodov proizvodstva asbesta [Reagent technologies for processing asbestos production waste]. Saarbrücken: LAP LAMBERT Academic Publishing. – 118 p. (in Rus.).
- Auyeshov A., Arynov K., Yeskibayeva Ch., Alzhanov K., Raiymbekov Y. (2024) Thermoacid behavior of serpentinite of the Zhitikarinsky deposit (Kazakhstan). *Molecules*. – No. 29(16). – P. 3965. <https://doi.org/10.3390/molecules29163965>. (in Eng.).
- Federočková A., Plesingerova B., Sučík G., Dorakova A. (2014) Characteristics of amorphous silica prepared from serpentinite using various acidifying agents. *International Journal of Mineral Processing*. – Vol. 130. – P. 42-47. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2014.05.005> (in Eng.).
- Kasenov B.K., Aldabergenov M.K., and Pashinkin A.S. (1994) Termodinamicheskie metody v khimii i metallurgii [Thermodynamic Methods in Chemistry and Metallurgy]. – Alma-Ata: Rauan. (in Rus.).
- Katyshev S.F., Gabdullin A.N., Nikonenko E.A., Rakipov D.F. (2014) Conditions investigation of nitric acid leaching of serpentine. *Eastern European Scientific Journal (Gesellschaftswissenschaften)*. – No. 6. – P. 136-141. Düsseldorf (Germany): Auris Verlag. (in Eng.).
- Dormeshkin O.B., Gavriluk A.N., Vojtov I.V. (2024) Poluchenie smeshannyh udobrenij s ispol'zovaniem razlichnyh vidov fosfat- i magnijsoderzhashchih komponentov [Production of compound fertilisers using various types of phosphate- and magnesium-containing components]. *Journal of Applied Chemistry*. – Vol. 97. – No. 9-10. – P. 656-667. <https://doi.org/10.31857/S004446182409007X> (in Rus.).
- Liu J., Hou W., Wei W. Peng J., Wu X., Lian Ch., Zhao Y., Tu R., Goto T., Dai H. (2023) Design and fabrication of high-performance injectable self-setting trimagnesium phosphate. *Bioactive Materials*. – No. 28. – P. 348-357. <https://doi.org/10.1016/j.bioactmat.2023.05.019> (in Eng.).
- Maslennikova T.P. (2012) Study of the Chemical Interaction Processes of Hydrosilicate Nanotubes with Aqueous Solutions of Hydroxides and Salts of Alkali Metals (Na, K, Cs) and Aqueous-Alcohol Solutions ($\text{RCH}_2\text{-OH}$). Ph.D. Thesis, Grebenshchikov Institute of Silicate Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Saint Petersburg, Russia. – 161p. (in Eng.).
- Nakamura T., Yamazoe F., Kishimoto K. (1956) Reaction between Superphosphate and Serpentine. Part I. Effects of Water and Free Phosphoric Acid on Conversion to Available Magnesium // *Soil and Plant Food*. – No. 2(1). – P. 49-52. <https://doi.org/10.1080/00380768.1956.10431856> (in Eng.).
- Pirimov T. Zh., Namazov Sh. S., Temirov U. Sh., Usanbaev N. H. (2023) Selektivnoe izvlechenie

soedinenij magniya iz serpentinitov mestorozhdeniya Arvaten [Selective recovery of magnesium compounds from serpentinites of the Arvaten deposit]. Zhurnal Obogoshchenie rud. – No. 6. – P. 11-18. <https://doi.org/10.17580/or.2023.06.02> (in Rus.).

Sierra C., Chouinard S., Pasquier L., Mercier G., Blas J. (2018) Feasibility study on the utilization of serpentine residues for $Mg(OH)_2$ production. Waste Biomass Valor. – No. 9. – P. 1921-1933. <https://doi.org/10.1007/s12649-017-9926-9> (in Eng.).

Teir S., Revitzer H., Eloneva S., Fogelholm C.-J., Zevenhoven R. (2007) Dissolution of natural serpentinite in mineral and organic acids. International Journal Mineral Processing. – No. 83(1-2). – P. 36-46. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2007.04.001> (in Eng.).

Vieira K.R.M., Arce G.L.A.F., Luna C.M.R., Facio V.O., Carvalho J.A. Jr., Soares Neto T.G., Ávila I. (2022) Understanding the acid dissolution of serpentinites (tailings and waste rock) for use in indirect mineral carbonation. South African Journal of Chemical Engineering. – No. 40. – P. 154-164. <https://doi.org/10.1016/j.sajce.2022.02.005> (in Eng.).

Yamada T., Nagai S. (1970) Studies on Magnesium Ammonium Phosphate Fertilizers from Calcined Serpentine. Journal of the Society of Inorganic Materials, Japan. – No. 109. – P. 249-254. <https://doi.org/10.11451/mukimate1953.1970.249> (in Eng.).

Yeskibayeva Ch., Auyeshov A., Arynov K., Dikanbayeva A., Satimbekova A. (2024) Nature of serpentinite interactions with low-concentration sulfuric acid solutions. Green Process Synth. – No. 13(9). <https://doi.org/10.1515/gps-2024-0034>. (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 188–199

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.446>

UDC: 546.55
IRSTI: 61.31.51

©Bayeshova A.K.^{1*}, Bayeshov A.², Tuleshova E.Zh.³, 2026.

^{1*}Farabi University, Almaty, Kazakhstan;

²RSE “National Center on complex processing of mineral raw materials of the Republic of Kazakhstan”, Almaty, Kazakhstan;

³Akhmet Yasawi university, Turkistan, Kazakhstan.

*E-mail: azhar_b@bk.ru

REDUCTION OF COPPER IONS BY ZINC IN THE PRESENCE OF TITANIUM (IV) IONS IN SULFURIC ACID SOLUTIONS

Bayeshova Azhar — Doctor of Technical Sciences, Professor, Farabi University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: azhar_b@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9076-8130>;

Bayeshov Abduali — Doctor of Chemical Sciences, Academician, RSE “National Center on complex processing of mineral raw materials of the Republic of Kazakhstan”, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: abdualibayeshov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0745-039X>;

Tuleshova Elmira — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Akhmet Yasawi University, Turkistan, Kazakhstan,
E-mail: elmira.tuleshova@ayu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2249-9570>.

Abstract. The present study investigates the reduction process of copper(II) ions by zinc powder in sulfuric acid solutions in the presence of titanium(IV) ions. The effects of titanium(IV) ion concentration, initial copper(II) concentration, sulfuric acid concentration, and process duration on the copper extraction efficiency were examined. The experiments were carried out in aqueous copper sulfate solutions under continuous stirring. Zinc powder was used as the reducing agent, while copper sulfate solutions containing sulfuric acid and titanium (IV) sulfate served as the copper-bearing medium. The residual copper concentration in the solution was determined by the iodometric method.

It was established that the degree of copper extraction depends significantly on the initial concentration of copper(II) ions, titanium(IV) ions, sulfuric acid concentration, and process duration. The most favorable conditions for copper extraction were achieved at titanium(IV) ion concentrations of 3.0–6.0 g/L, copper(II) ion concentration of 5.0 g/L, and a process duration of 30 min. Experimental results demonstrated that the copper extraction degree in the presence of titanium(IV) ions increased by up to 20% compared with the reduction process carried out without titanium ions.

It was found that the addition of titanium(IV) ions not only enhances the reduction



efficiency but also reduces zinc consumption. Morphological analysis of the obtained powders revealed the formation of ultrafine copper particles with sizes ranging from 0.1 to 3.0 μm in the presence of titanium(IV) ions.

A mechanism for the catalytic action of titanium(IV) ions is proposed based on cyclic Ti(IV)/Ti(III) redox transformations that provide additional reduction of copper(II) ions. The obtained results are of considerable interest for hydrometallurgical technologies aimed at copper recovery from acidic solutions.

Keywords: copper ions, zinc powder, titanium(IV) ions, extraction degree

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. AP23486503).

For citations: Bayeshova A.K., Bayeshov A., Tuleshova E.Zh. Reduction of Copper Ions by Zinc in the Presence of Titanium(IV) Ions in Sulfuric Acid Solutions. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 188–199. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.446>

©Баешова А.К.^{1*}, Баешов А.Б.², Тулешова Э.Ж.³, 2026.

¹Әл-Фараби университеті, Алматы, Қазақстан;

²ҚР Минералдық шикізатты кешенді қайта өңдеу жөніндегі Ұлттық орталығы, Алматы, Қазақстан;

³Ахмет Ясауи университеті, Түркістан, Қазақстан.

*E-mail: azhar_b@bk.ru

МЫС ИОНДАРЫН КҮКІРТҚЫШҚЫЛДЫ ЕРІТІНДІЛЕРДЕ ТИТАН (IV) ИОНДАРЫ ҚАТЫСЫНДА МЫРЫШПЕН ТОТЫҚСЫЗДАНДЫРУ

Баешова Ажар — техника ғылымдарының докторы, профессор, әл-Фараби университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: azhar_b@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9076-8130>;

Баешов Абдуали — химия ғылымдарының докторы, академик, ҚР Минералдық шикізатты кешенді қайта өңдеу жөніндегі Ұлттық орталығы, Алматы, Қазақстан,

E-mail: abdulibayeshov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0745-039X>;

Тулешова Эльмира — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Ахмет Ясауи университеті, Түркістан, Қазақстан,

E-mail: elmira.tuleshova@ayu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2249-9570>.

Аннотация. Жұмыста күкіртқышқылды ерітінділерде титанның (IV) иондары қатысында мыс (II) иондарын мырыш ұнтағымен тотықсыздандыру процесі зерттелді. Титан (IV) иондары концентрациясының, мыс (II) иондарының бастапқы концентрациясының, күкірт қышқылы концентрациясының және процестің ұзақтығының мысты бөліп алу дәрежесіне әсері қарастырылды. Тәжірибелер мыс (II) сульфатының сулы ерітінділерінде араластыру жағдайында жүргізілді. Тотықсыздандырғыш ретінде мырыш ұнтағы, ал құрамында мыс бар

ерітінді ретінде күкірт қышқылы мен титан (IV) сульфаты қосылған мыс (II) сульфаты ерітіндісі қолданылды. Ерітіндідегі мыстың қалдық концентрациясы йодометриялық әдіспен анықталды.

Мысты бөліп алу дәрежесіне мыс (II) иондарының бастапқы концентрациясы, титан (IV) иондарының концентрациясы, күкірт қышқылының концентрациясы және тәжірибе ұзақтығы елеулі әсер ететіні анықталды. Мысты бөліп алудың ең қолайлы шарттары титан (IV) иондарының 3,0–6,0 г/л және мыс (II) иондарының 5,0 г/л концентрацияларында, сондай-ақ процесс ұзақтығы 30 минут болғанда байқалды. Эксперимент нәтижелері титан (IV) иондары қатысында мысты бөліп алу дәрежесі титан иондары жоқ жағдаймен салыстырғанда 20%-ға дейін артатынын көрсетті.

Титан (IV) иондарын қолдану тотықсыздандыру дәрежесін арттырып қана қоймай, мырыш шығынын төмендететіні анықталды. Алынған ұнтақтардың морфологиясын зерттеу барысында титан (IV) иондары қатысында өлшемдері 0,1–3,0 мкм болатын ультрадисперсті мыс бөлшектерінің түзілетіні көрсетілді.

Титан (IV) иондарының каталитикалық әсер ету механизмі ұсынылды. Бұл механизм мыс (II) иондарының қосымша тотықсыздануын қамтамасыз ететін $Ti(IV)/Ti(III)$ жүйесіндегі циклдік тотығу-тотықсыздану түрленулеріне негізделген. Алынған нәтижелер қышқылды ерітінділерден мысты гидрометаллургиялық жолмен бөліп алу технологиялары үшін ғылыми және практикалық қызығушылық тудырады.

Түйін сөздер: мыс иондары, мырыш ұнтағы, титан (IV) иондары, бөліп алу дәрежесі

©Баешова А.К.^{1*}, Баешов А.Б.², Тулешова Э.Ж.³, 2026.

¹Университет аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

²Национальный центр по комплексной переработке минерального сырья Республики Казахстан, Алматы, Казахстан;

³Университет Ахмеда Ясави, Туркестан, Казахстан.

*E-mail: azhar_b@bk.ru

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ИОНОВ МЕДИ ЦИНКОМ В ПРИСУТСТВИИ ИОНОВ ТИТАНА (IV) В РАСТВОРАХ СЕРНОЙ КИСЛОТЫ

Баешова Ажар — доктор технических наук, профессор, Университет аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: azhar_b@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9076-8130>;

Баешов Абдуали — доктор химических наук, академик, Национальный центр по комплексной переработке минерального сырья Республики Казахстан, Алматы, Казахстан;

E-mail: bayeshov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0745-039X>;

Тулешова Эльмира — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Университет Ахмеда Ясави, Туркестан, Казахстан,

E-mail: elmira.tuleshova@ayu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2249-9570>.

Аннотация. В работе исследован процесс восстановления ионов меди(II)



порошкообразным цинком в присутствии ионов титана(IV) в сернокислых растворах. Изучено влияние концентрации ионов титана(IV), исходной концентрации ионов меди(II), концентрации серной кислоты и продолжительности процесса на степень извлечения меди. Эксперименты проводили в водных растворах сульфата меди(II) при постоянном перемешивании. В качестве восстановителя использовали порошкообразный цинк, а в качестве модельного медьсодержащего раствора - раствор сульфата меди(II) с добавлением серной кислоты и сульфата титана(IV). Остаточную концентрацию меди в растворе определяли иодометрическим методом. Установлено, что степень извлечения меди зависит от исходной концентрации ионов меди(II), содержания ионов титана(IV), концентрации серной кислоты и продолжительности процесса. Наиболее благоприятные условия восстановления наблюдались при концентрации ионов титана(IV) 3,0–6,0 г/л, концентрации ионов меди(II) 5,0 г/л и продолжительности процесса 30 мин. Результаты экспериментов показали, что в присутствии ионов титана(IV) степень извлечения меди возрастает примерно на 20 % по сравнению с процессом, протекающим без добавления титана. Установлено, что применение ионов титана(IV) способствует не только повышению степени извлечения меди, но и снижению расхода цинка. Исследование морфологии полученных осадков показало образование ультрадисперсных частиц меди размером 0,1–3,0 мкм в присутствии ионов титана(IV). Предложен механизм каталитического действия ионов титана(IV), основанный на циклических окислительно-восстановительных превращениях системы $Ti(IV)/Ti(III)$, обеспечивающих дополнительное восстановление ионов меди(II). Полученные результаты представляют практический интерес для совершенствования гидрометаллургических технологий извлечения меди из кислых растворов.

Ключевые слова: ионы меди, цинковый порошок, ионы титана (IV), степень извлечения

Введение. Порошковая металлургия представляет собой область науки и техники, охватывающую процессы получения металлических порошков, а также изготовления изделий из них или их композиций с неметаллическими компонентами. Металлический порошок представляет собой совокупность частиц металла, сплава или металлоподобного соединения, находящихся во взаимном контакте, но не связанных между собой.

Порошковая металлургия традиционно играет важную роль в развитии современной техники, поскольку позволяет получать материалы и изделия, изготовление которых невозможно или экономически нецелесообразно с использованием традиционных технологий. В последние десятилетия значение данного направления существенно возросло благодаря созданию материалов с микрокристаллической, наноструктурированной и аморфной структурой. Уникальные структурные особенности таких материалов обеспечивают повышение их физико-механических и эксплуатационных свойств (Girshov, 2010).

Литературный обзор. Разработка и совершенствование технологий извлечения

ценных металлов из промышленных растворов является одной из актуальных задач современной гидрометаллургии. Среди различных методов извлечения металлов особое место занимают процессы восстановления, отличающиеся технологической простотой и высокой эффективностью.

Методы восстановления металлами широко применяются при комплексной переработке руд цветных металлов для извлечения ионов меди(II) из технологических и сточных слабокислых растворов. На эффективность процессов восстановления оказывают влияние природа восстановителя, состав раствора, наличие различных добавок и условия проведения процесса.

Преимущества методов восстановления металлами по сравнению с альтернативными способами извлечения меди показаны в работе Calugina (2015). Авторами установлено, что при извлечении меди из технологических растворов кучного выщелачивания методом цементации остаточное содержание меди в растворе составляет менее 1 %, тогда как при использовании сульфида натрия степень извлечения не превышает 45,02 %. В качестве восстановителя использовалось железо марки CMS. В зависимости от состава технологических растворов степень извлечения меди изменялась в пределах 96,5–99,5 %.

Исследования Yehia (2014), посвящённые извлечению меди из сточных вод с использованием железного стержня, показали, что скорость восстановления ионов меди(II) возрастает с увеличением интенсивности перемешивания и повышением значения pH раствора до 2. При дальнейшем увеличении pH скорость процесса снижается.

В работах Abdel-Aziz (2011) и Amin (2011) изучалась кинетика восстановления ионов меди(II) из растворов сульфата меди в реакторе с мешалкой, оснащённом вращающейся перфорированной корзиной, заполненной цинковыми кольцами Рашига. Установлено, что скорость реакции возрастает с увеличением начальной концентрации сульфата меди, температуры и скорости вращения корзины. В то же время присутствие спиртов (бутанол, этанол и метанол) приводит к снижению скорости восстановления.

Аналогичные результаты были получены Kolesnikov (2016), который исследовал влияние поверхностно-активных веществ на процесс восстановления меди цинком в сульфатных растворах. Показано, что присутствие флокулянтов снижает скорость восстановления, причём степень ингибирующего действия определяется природой и физико-химическими свойствами полимеров. Замедление процесса автор объясняет блокированием активных центров поверхности цинка вследствие адсорбции высокомолекулярных соединений (эффект Лошкарёва).

Восстановление ионов меди металлическим цинком широко используется в гидрометаллургии для извлечения меди из цинксодержащих растворов (Demirkiran, 2007). Показано, что скорость процесса возрастает с увеличением концентрации ионов меди(II), температуры, интенсивности перемешивания и содержания ионов цинка.

Исследование восстановления меди на вращающихся дисковых электродах из цинка и железа, как по отдельности, так и в сочетании друг с другом, показало,

что цинк является основным центром выделения водорода и тем самым снижает коррозию железа (Gros, 2011a). Вопросы, связанные с выделением водорода при цементации металлов, представляют значительный научный интерес, поскольку данный процесс сопровождается дополнительным расходом восстановителя.

В работе Gros (2011b) исследовалось восстановление меди на смесях железа и цинка в системе псевдооживленного слоя. Эффективность смесей оценивалась по кинетическим характеристикам и коэффициентам массопереноса. Было установлено, что энергия активации процесса составляет 19,6 кДж/моль, что свидетельствует о преобладании диффузионных ограничений. Максимальные значения коэффициента массопереноса наблюдались при $\text{pH} = 1,5$, что связано с интенсивным выделением водорода. Авторы также показали, что морфология осаждённой меди оказывает существенное влияние на кинетические характеристики процесса.

Сравнительное исследование восстановления меди цинком, железом и алюминием показало, что наибольшая скорость процесса достигается при использовании цинка, однако интенсивное выделение водорода приводит к его повышенному расходу (Karavasteva, 2005). Установлено, что морфология получаемой меди зависит от природы восстановителя: на железе формируется плотный мелкокристаллический слой, на цинке образуется высокопористый дендритный осадок, а на алюминии - глобулярные кристаллиты размером 1–4 мкм.

Согласно литературным данным, при восстановлении меди цинком часть металла расходуется на побочную реакцию выделения водорода:



Следовательно, металлический цинк используется не полностью на извлечение меди, что приводит к увеличению его расхода. В связи с этим актуальными являются исследования, направленные на повышение степени извлечения меди, получение мелкодисперсных порошков и снижение расхода металлов-восстановителей.

Следует отметить, что ранее авторами были разработаны методы получения дисперсных порошков различных металлов методом восстановления, результаты которых представлены в работах Tuleshova (2015) и Abzhalov (2022). Полученный опыт послужил основой для дальнейших исследований, направленных на интенсификацию процессов восстановления меди и совершенствование технологий получения металлических порошков.

Материалы и методы. Основной целью работы является изучение процесса восстановления меди из растворов цинком в присутствии ионов титана (IV).

Процесс восстановления проводили в химическом стакане объемом 200 мл при перемешивании на магнитной мешалке. В качестве металла-восстановителя использован цинк (порошок), в качестве медьсодержащего раствора – сульфат меди (II) с добавлением серной кислоты и сульфата титана (IV). Порошок цинка добавляли в весовом соотношении $\text{Cu}^{2+} : \text{Zn} = 1:2$, т.е. масса добавляемого порошка

цинка была в 2 раза больше, чем масса ионов меди (II) в растворе. После реакции восстановления наблюдалось образование элементной меди в виде дисперсного порошка, который отделяли от раствора фильтрацией. В фильтрате определяли остаточную концентрацию ионов меди (II) известным иодометрическим методом (Feinberg, 1959) и рассчитывали степень извлечения меди. Порошок промывали, взвешивали и анализировали физико-химическими методами.

Было исследовано влияние концентрации ионов титана (IV), исходной концентрации ионов меди (II) и серной кислоты, продолжительности опыта на степень извлечения меди и на остаточную концентрацию ионов меди (II) в растворе.

Результаты и обсуждение. В процессе восстановления ионов меди (II) порошком цинка в присутствии ионов титана (IV) наблюдалось образование элементной меди в виде дисперсного порошка. На степень извлечения меди оказывает влияние исходная концентрация ионов меди (II), концентрация ионов титана (IV), концентрация серной кислоты и продолжительность опыта. Были проведены эксперименты в отсутствие и в присутствии ионов титана (IV). Результаты исследований показали, что степень извлечения меди при соотношении $\text{Cu}^{2+}:\text{Zn} = 1:2$ в присутствии ионов титана (IV) резко увеличивается. При исходной концентрации ионов меди (II), равной 5,0 г/л и добавлении ионов титана (IV) с концентрацией 4,5 г/л, продолжительности опыта, составляющей 30 минут, степень извлечения меди достигает 99,4%, а при концентрации ионов титана (IV), равной 6,0 г/л ионы меди (II) практически полностью извлекаются из раствора в виде порошка меди, т.е. степень извлечения достигает 100% (рис. 1). Полное извлечение меди достигается при концентрации ионов титана (IV), равной 3,0-6,0 г/л, ионов меди (II) – 5,0 г/л и продолжительности опыта 30 минут.

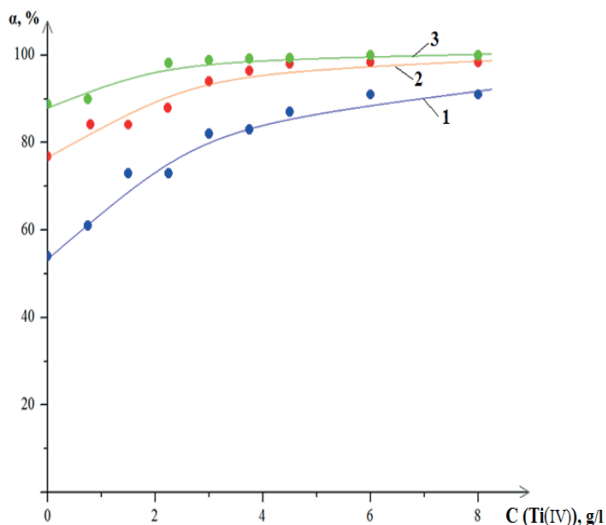


Рисунок 1. Влияние концентрации ионов титана (IV) на степень извлечения меди при восстановлении цинком ($\text{C}(\text{H}_2\text{SO}_4)=10$ г/л, $\tau=30$ мин., $t=25^\circ\text{C}$) при различных исходных концентрациях ионов меди (II), г/л: 1–1,0; 2–2,5; 3–5,0.

Зависимость степени извлечения меди от продолжительности опыта при различных концентрациях ионов титана (IV) приведена на рисунке 2. В отсутствие ионов титана (IV) степень извлечения меди не превышает 77,2% (рис. 2, кривая 1). При добавлении 1,5 г/л ионов титана (IV) степень извлечения меди достигает 82,4% (рис. 2, кривые 2, 3). При концентрации ионов титана (IV), равной 3,0 г/л, за 50 минут степень извлечения достигает 98%.

Исследовано влияние концентрации серной кислоты на степень извлечения меди при восстановлении цинком в присутствии ионов титана (IV). Кривые, приведенные на рисунке 3, показывают, что наиболее высокая степень извлечения меди достигается в области концентрации серной кислоты 5 г/л. Дальнейшее увеличение концентрации серной кислоты неблагоприятно влияет на изменение степени извлечения. Как видно из рис.3, сначала с увеличением концентрации серной кислоты степень извлечения меди резко возрастает, по-видимому, это объясняется повышением электропроводности раствора. При дальнейшем росте концентрации кислоты начиная с 5,0 г/л – степень извлечения уменьшается. Это уменьшение вызвано тем, что усиливается протекание побочного процесса выделения водорода. Также возможно обратное растворение свежесформированного медного порошка в сернокислой среде в присутствии кислорода воздуха.

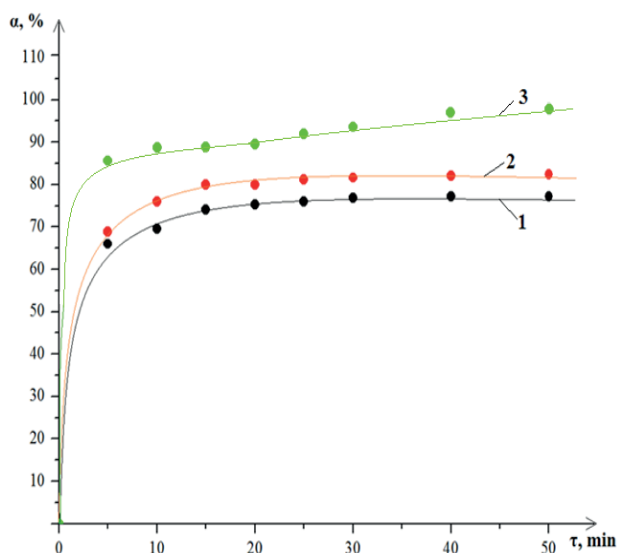


Рисунок 2. Влияние продолжительности опыта при различных концентрациях ионов титана (IV), г/л:
1–без Ti(IV); 2–1.5; 3–3.0.

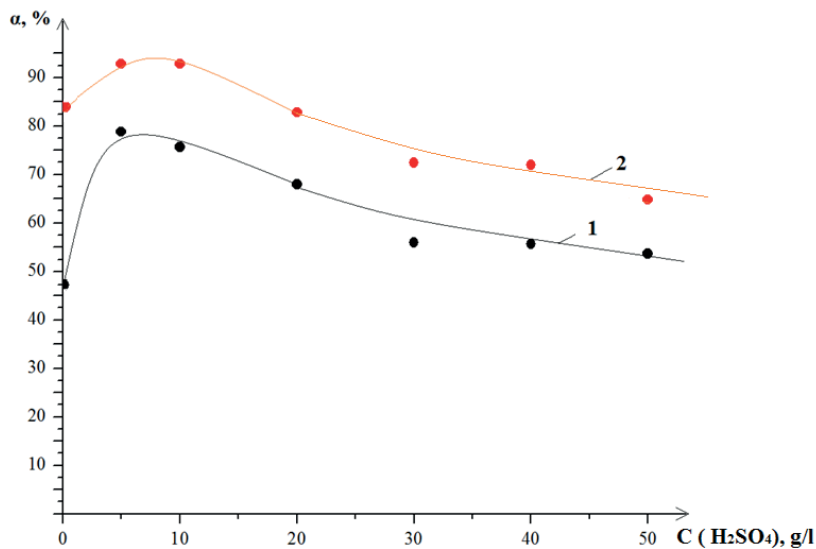
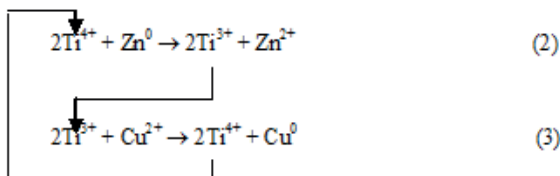


Рисунок 3. Влияние концентрации серной кислоты на степень извлечения меди в отсутствие ионов титана (IV) (кривая 1) и в присутствии ионов титана (IV) (кривая 2).

Повышение степени извлечения ионов меди (II) и увеличение скорости восстановления в присутствии ионов титана (IV) объясняем так: процессы протекают по представленной ниже схеме, и они (процессы) являются и каталитическими, и циклическими:



В известных способах в ходе процесса восстановления часть цинка расходуется на выделение водорода по реакции (1). В наших экспериментах в присутствии ионов титана (IV) эта часть цинка расходуется на восстановление ионов титана (IV) до трехвалентного состояния по реакции 2. Такая реакция возможна по той причине, что стандартный потенциал реакции восстановления четырехвалентного титана до трехвалентного состояния ($E^0 = 0,04$ В) имеет более положительное значение, чем потенциал цинка ($E^0 = -0,76$ В) (Handbook of Electrochemistry, 1981).

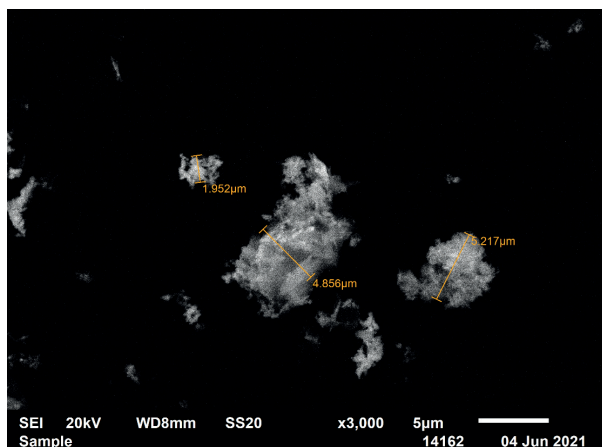
Также следует отметить, что величина red-ox потенциала системы $\text{Cu}^{2+} \rightleftharpoons \text{Cu}^0$ имеет более положительное значение, чем величина потенциала системы $\text{Ti}^{4+} \rightleftharpoons \text{Ti}^{3+}$. Величины потенциалов, соответственно, равны +0,34 и 0,04 В, поэтому восстановление ионов меди (II) протекает по реакции (3). Рассчитанная нами константа равновесия реакции составляет 10^{10} , т.е. равновесие реакции полностью смещено вправо. В этой связи ионы титана (III) взаимодействуют с

ионами меди (II) по реакции (3). В результате дополнительно восстанавливаются ионы меди (II) и за счет этого степень извлечения повышается на 12–20%. При этом ионы титана (IV) регенерируются и вновь участвуют в реакциях (2) и (3), т. е. указанные реакции циклически повторяются. Таким образом, установлено, что ионы титана (IV) участвуют в промежуточных реакциях, оказывают влияние на ход восстановления, т. е. они выполняют роль катализатора.

Эксперименты показали, что порошки меди образуются при взаимодействии ионов меди (II) с цинком по известной реакции (4), в данном случае они формируются на поверхности цинка. Отмечаем, что в случае взаимодействия ионов титана (III) с ионами меди (II) порошки меди образуются не на поверхности цинка, а в объеме раствора. Рост частиц порошка не происходит, только лишь частицы могут прилипать друг к другу (агломерация), то есть могут формироваться наноструктурированные сферические агрегаты.



Важной характеристикой порошков является форма частиц, которая в основном зависит от способа получения. Исследование морфологии порошков меди на электронном микроскопе показало (рисунки 4 и 5), что в отсутствие катализатора – ионов титана (IV) формируются относительно крупные дендритообразные частицы с размерами 20–60 мкм (рис. 4а, 4б). В присутствии ионов титана (IV) определенная часть элементной меди формируется в виде ультрадисперсных порошков с размерами частиц 0,1–3,0 мкм (рисунок 5 а), также образуются более крупные частицы (рис. 5б).



(a)

(b)

Рисунок 4. Электронно-микроскопические фотографии порошков меди, полученных при восстановлении порошком цинка в отсутствие ионов титана (IV) в растворе.

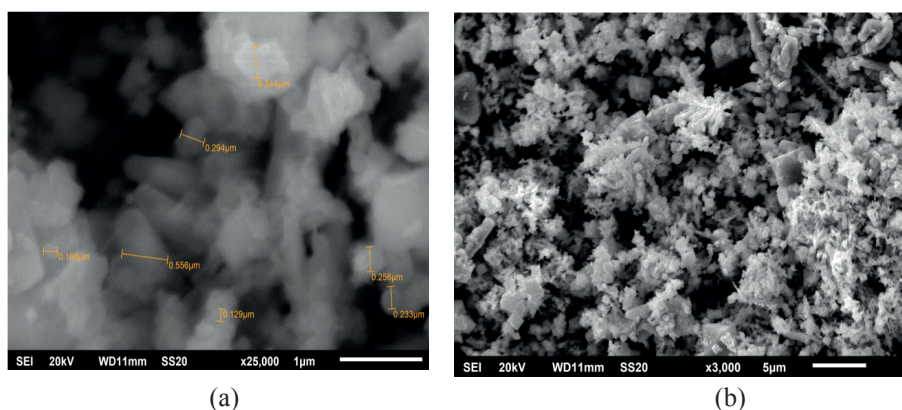


Рисунок 5. Электронно-микроскопические фотографии порошков меди, полученных в растворе восстановлением порошком цинка в присутствии ионов титана (IV).

Закключение. Таким образом, исследован процесс восстановления ионов меди (II) порошком цинка в водных кислых растворах в присутствии ионов титана (IV). Проведено сравнение степени извлечения меди в отсутствие и в присутствии ионов титана (IV).

Показано, что ионы титана (IV) благоприятно влияют на процесс восстановления меди из раствора. В присутствии ионов титана (IV) ионы меди (II) практически полностью восстанавливаются с образованием элементной меди в виде порошка. Степень извлечения ионов меди (II) повышается на 20% и достигает практически 100%, а также уменьшается расход восстановителя – порошка цинка. Результаты можно применять для восстановления ионов меди с целью их извлечения из различных отработанных растворов промышленных предприятий и сточных вод.

References

- Abdel-Aziz M. H. (2011) Production of copper powder from wastewater containing CuSO_4 and alcoholic additives in a modified stirred tank reactor by cementation, *Hydrometallurgy*. – Vol. 109. – P. 161-167. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2011.06.007> (in English).
- Abzhalov B.S., Tuleshova E.Z., Bayeshov A.B. (2022) Method for Producing Bismuth Oxychloride, *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. – Vol. 56(6). – P. 978-981. <https://doi.org/10.1134/S004057952206001X>. (in English).
- Amin N. K., El Ashtoukhy E. S. Z. (2011) Kinetic study of copper cementation onto zinc using a rotating packed bed cylindrical reactor, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. – Vol. 89. – Issue 3. – P. 609-616. <https://doi.org/10.1002/cjce.20443>. (in English).
- Demirkiran N., Ekmekyapar A., Künkül A., Baysar A. A. (2007) Kinetic study of copper cementation with zinc in aqueous solutions, *International Journal of Mineral Processing*. – Vol. 82. – P. 80-85. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2006.10.005>. (in English).
- Feinberg S. Yu. (1959) *Analiz rud cvetnyh metallov [Analysis of Non-Ferrous Metal Ores]*. – Moscow. – 87 p. (in Russian).
- Gros F., Baup S., Aurousseau M. (2011) Copper cementation on zinc and iron mixtures: Part 1: Results on rotating disc electrode, *Hydrometallurgy*. – Vol. 106. – P. 127-133. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2010.12.011>. (in English).
- Gros F., Baup S., Aurousseau M. (2011) Copper cementation on zinc and iron mixtures: Part 2: Fluidized bed configuration, *Hydrometallurgy*. – Vol. 106. – Issues 1-2. – P. 119-126. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2010.12.0127> (in English).

Kalugina N.L., Kalugin D.A., Varlamova I.A., Girevaya Kh. Ya., Bodyan L.A. (2015) Eksperimental'noe izuchenie osobennostej vydeleniya medi iz tekhnologicheskikh rastvorov uchastka kuchnogo vyshchelachivaniya [Experimental Study of the Peculiarities of Copper Recovery from Technological Solutions of a Heap Leaching Site]. *Sovremennye problemy nauki i obrazovaniya*. – No. 1. www.science-education.ru/121-17491. (in Russian).

Karavasteva M. (2005) Kinetics and deposit morphology of copper cementation onto zinc, iron and aluminium, *Hydrometallurgy*. – Vol. 76. – P. 149-152. <https://doi.org/10.1016/j.hydromet.2004.10.003>. (in English).

Kolesnikov A.V. (2016) Vosstanovlenie medi metallicheskim cinkom v vodnykh rastvorakh v prisutstvii vysokomolekulyarnykh PAV [Reduction of Copper by Metallic Zinc in Aqueous Solutions in the Presence of High-Molecular-Weight Surfactants]. *Kondensirovannyye sredy i mezhfaznye granicy*. – Vol. 18. – No. 1. – P. 46-55. (in Russian).

Spravochnik po elektrohimii (1981) [Handbook of Electrochemistry]. Leningrad: Khimiya Publishers. – 488 p. (in Russian).

Tuleshova E.Zh., Bayeshov A.B. (2015) Electrochemical method for obtaining a finely dispersed silver powder, *Russian Journal of Applied Chemistry*. – Vol. 88(7). – P. 1142-1145. <https://doi.org/10.1134/S107042721507006X>. (in English).

Yehia A. Eltaweel, Ehssan M. Nassef, Riham A. Hazz, (2014) Recovery of Copper from Wastewater by Cementation Technique, *World Environment*. – Vol. 4(5). – P. 199-205. <https://doi.org/10.5923/j.env.20140405.01>. (in English).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 200–212

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.447>

UDC: 547.639.7+496.2 +314.2

IRSTI: 31.15.37

©Fazylov S.D.^{1*}, Syzdykov A.K.², Pustolaikina I.A.³, Kazhmuratova A.T.³,
Tazhibay A.M.³, 2026.

¹Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry, Karaganda, Kazakhstan;

²Karaganda Industrial University, Temirtau, Kazakhstan;

³Karaganda National Research University named after academician E.A. Buketov,
Karaganda, Kazakhstan.

*E-mail: faz8990@mail.ru

PRODUCTION OF α -, β -, γ -OLIGOSACCHARIDE CLATHRATE CYTISINE COMPLEXES

Fazylov Serik — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician, Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: faz8990@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4240-6450>;

Syzdykov Ardak — PhD student, Karaganda Industrial University, Temirtau, Kazakhstan,

E-mail: ardak.syzdykov.96@inbox.ru, <https://orcid.org/0009-0008-9124-7821>;

Pustolaikina Irina — Candidate of chemical sciences, Professor, Karaganda National Research University named after academician E.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: ipustolaikina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6319-666X>;

Kazhmuratova Akerke — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Karaganda National Research University named after academician E.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: kazhmuratova.a@karnu-buketov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4044-8419>;

Tazhibay Aizhan — Senior Lecturer, Karaganda National Research University named after academician E.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: aizhan.maratovna93@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8190-3647>.

Abstract. *Introduction, goals and objectives.* The article presents the results of a physicochemical study of the encapsulation of the alkaloid cytosine molecule with the oligosaccharide β -cyclodextrin (β -CD). The article discusses the formation of the specified alkaloid molecule in a 1:2 molar ratio with the β -dead-end sextrin of an inclusive complex compound that is soluble in water. With this ratio of components, the yield of the clathrate complex and the inclusion efficiency were 65.43 ± 0.35 and $78.11 \pm 0.56\%$, respectively. The mechanism of thermal decomposition of the complex compound, the release of components, and the gradual cleavage of intermolecular bonds was demonstrated. The low binding energy of the complexing oligosaccharides was shown to be the most important and effective factor in the formation of complexes with cytosine molecules. *Methods.* The structural features of the inclusion complex were



studied using IR, ^1H and ^{13}C NMR, and scanning electron microscopy. The formation of a clathrate complex of an alkaloid molecule with β -cyclodextrin was carried out using the HyperChem 8.0 computer program. The total energy of the studied systems was estimated using a semiempirical calculation of AM1. Molecular docking binding sites were determined using the AutoDock 4.2.6 modeling program, and calculations were performed using the Lamarckian Genetic Algorithm. *Results and discussion.* It has been shown that non-specific (dispersion and van der Waals) interactions play a crucial role in the formation of an alkaloid molecule complex with β -cyclodextrin.. The thermal decomposition of the alkaloid molecule complex with β -cyclodextrin is regulated by the mechanism of sequential breaking of chemical bonds and the release of the molecule from the β -cyclodextrin cavity. *Conclusion.* The kinetic parameters for the thermal decomposition of β -cyclodextrin and its clathrate with the substrate, obtained by various methods, are in satisfactory agreement and confirm the reliability of the obtained results.

Keywords: alkaloid cytisine, inclusion complex, clathrate, β -oligosaccharide, substrate, thermal decomposition

For citations: Fazylov S.D., Syzdykov A.K., Pustolaikina I.A., Kazhmuratova A.T., Tazhibay A.M. Production of α -, β -, γ -Oligosaccharide Clathrate Cytisine Complexes. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 200–212. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.447>

©Фазылов С.Д.^{1*}, Сыздықов А.Қ.², Пустолайкина И.А.³,
Қажмұратова А.Т.³, Тәжібай А.М.³, 2026.

¹Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан;

²Қарағанды индустриалды университеті, Теміртау, Қазақстан;

³Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті,
Қарағанды, Қазақстан.

*E-mail: faz8990@mail.ru

ЦИТИЗИННІҢ α -, β -, γ -ОЛИГОСАХАРИДТЕРМЕН КЛАТРАТТЫ КЕШЕНДЕРІН АЛУ

Фазылов Серік — химия ғылымдарының докторы, профессор, академик, Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: faz8990@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4240-6450>;

Сыздықов Ардақ — PhD студент, Қарағанды индустриалды университеті, Теміртау, Қазақстан,
E-mail: ardak.syzdykov.96@inbox.ru, <https://orcid.org/0009-0008-9124-7821>;

Пустолайкина Ирина — химия ғылымдарының кандидаты, профессор, академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: ipustolaikina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6319-666X>;

Қажмұратова Акерке — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: kzhmuratova.a@karnu-buketov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4044-8419>;

Тәжібай Айжан — аға оқытушы, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: aizhan.maratovna93@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8190-3647>.

Аннотация. *Kіріспе, мақсаты және нысандары.* Мақалада алкалоид цитизин молекуласының олигосахарид β -тұйықдекстринмен қапталуының физика-химиялық зерттеу нәтижелері келтірілген. Аталған алкалоид молекуласының β -тұйықдекстринмен 1:2 молярлық қатынаста суда еритін инклюзивті кешенді қосылыс түзілу ерекшеліктері қарастырылды. Компоненттердің осы қатынасында клатратты кешеннің түзілу өнімділігі және қосылу тиімділігі сәйкесінше $65,43 \pm 0,35$ және $78,11 \pm 0,56\%$ болды. Кешенді қосылыстың термиялық ыдырауы, компоненттердің бөлініп шығуы және молекулааралық байланыстардың біртіндеп үзілуі механизмі көрсетілді. Кешен түзуші олигоқанттар үшін байланысу энергиясының төмендігі, цитизин молекулаларымен кешен түзуде ең маңызды және тиімді агенттер екені көрсетілді. *Әдістеме.* Қосылу кешенінің құрылымдық ерекшеліктері ИҚ, ЯМР ^1H және ^{13}C , сканерлеуші электронды микроскопия әдістері көмегімен зерттелді. Алкалоид молекуласының β -тұйықдекстринмен клатратты кешен түзілуі компьютерлік HyperChem 8.0 бағдарламасы арқылы жүргізілді. Зерттелген кешенді жүйелердің жалпы энергиясы AM1 әдістемесінің жартылай эмпирикалық есептеуі арқылы бағаланды. Молекулалық докингтік байланысу орындары AutoDock 4.2.6 модельдеу бағдарламасы арқылы анықталып, есептеулер Lamarckian Genetic Algorithm алгоритмін қолдану негізінде орындалды. *Нәтижелер және талқылау.* Алкалоид молекуласының β -тұйықдекстринмен қосылу кешенінің түзілуінде өзіндік емес (дисперсиялық және ван-дер-Ваальс) өзара әрекеттесулер шешуші рөл атқаратыны көрсетілген. Дифференциалды сканерлеу калориметрін қолдана отырып алынған алкалоид молекуласының кешенінің термографиялық өлшеулерінің нәтижелері ұсынылды. Алкалоид молекуласының β -тұйықдекстринмен кешенінің термиялық ыдырауы химиялық байланыстардың тізбекті үзілу механизмімен және молекуланың β -тұйықдекстрин қуысынан бөлінуімен реттеледі. *Қорытынды.* Алкалоид молекуласының олигосахаридпен қапталуын зерттеу нәтижелері әртүрлі клатратты қосылыстар кешендерінің термиялық тотығуын зерттеуде және олардың ыдырау процестерінің кинетикалық параметрлерін анықтау үшін пайдаланылуы мүмкін.

Түйін сөздер: цитизин алкалоиды, инклюзивті кешен, клатрат, β -олигоқант, субстрат, термиялық ыдырау

©Фазылов С.Д.^{1*}, Сыздыков А.К.², Пустолайкина И.А.³, Кажмуратова А.Т.³,
Тажибай А.М.³, 2026.

¹Институт органического синтеза и углехимии, Караганда, Казахстан;

²Карагандинский индустриальный университет, Темиртау, Казахстан;

³Карагандский Национальный исследовательский университет имени академика
Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан.

*E-mail: faz8990@mail.ru

ПОЛУЧЕНИЕ α -, β -, γ -ОЛИГОСАХАРИДНЫХ КЛАТРАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЦИТИЗИНА

Фазылов Серик — доктор химических наук, профессор, академик, Институт органического синтеза и углехимии, Караганда, Казахстан,



E-mail: faz8990@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4240-6450>;

Сыздыков Ардак — PhD докторант, Карагандинский индустриальный университет, Темиртау, Казахстан,

E-mail: ardak.syzdykov.96@inbox.ru, <https://orcid.org/0009-0008-9124-7821>;

Пустолайкина Ирина — кандидат химических наук, профессор, Карагандинский Национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

E-mail: ipustolaikina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6319-666X>;

Кажмуратова Акерке — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Карагандинский Национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

E-mail: kazhmuratova.a@karnu-buketov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4044-8419>;

Тажибай Айжан — старший преподаватель, Карагандинский Национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

E-mail: aizhan.maratovna93@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8190-3647>.

Аннотация. В статье представлены результаты физико-химического исследования клатратных комплексов алкалоида цитизина с олигосахаридами, в частности с β -циклодекстрином. Рассмотрены особенности образования водорастворимого комплекса включения цитизина с β -циклодекстрином в молярном соотношении 1:2. Установлено, что выход клатратного комплекса и эффективность связывания при данном соотношении компонентов составляют $65,43 \pm 0,35 \%$ и $78,11 \pm 0,56 \%$ соответственно. Показан механизм термического разложения комплексного соединения, включающий высвобождение компонентов и последовательный разрыв межмолекулярных связей. Установлено, что низкая энергия связывания комплексообразующих олигосахаридов является одним из важных факторов, определяющих образование устойчивых комплексов с молекулами цитизина. Структурные особенности полученного комплекса изучены методами ИК-спектроскопии, ЯМР-спектроскопии ^1H и ^{13}C , а также сканирующей электронной микроскопии. Компьютерное моделирование образования клатратного комплекса молекулы алкалоида с β -циклодекстрином выполнено с использованием программы HyperChem 8.0. Полная энергия исследуемых комплексных систем оценивалась на основе полуэмпирических расчётов методом AM1. Места связывания при молекулярном докинге определялись с помощью программы AutoDock 4.2.6, а расчёты выполнялись с использованием Lamarckian Genetic Algorithm. Показано, что при формировании комплекса цитизина с β -циклодекстрином решающую роль играют неспецифические дисперсионные и ван-дер-ваальсовы взаимодействия. Представлены результаты термографических исследований комплекса цитизина, полученные методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Установлено, что термическое разложение комплекса цитизина с β -циклодекстрином протекает по механизму последовательного разрыва межмолекулярных взаимодействий и высвобождения молекулы алкалоида из полости β -циклодекстрина. Полученные результаты могут быть использованы при исследовании термического окисления комплексов различных клатратных соединений, а также при определении кинетических параметров процессов их разложения.

Ключевые слова: алкалоид цитизин, комплекс включения, клатрат, β -олигосахарид, субстрат, термическое разложение

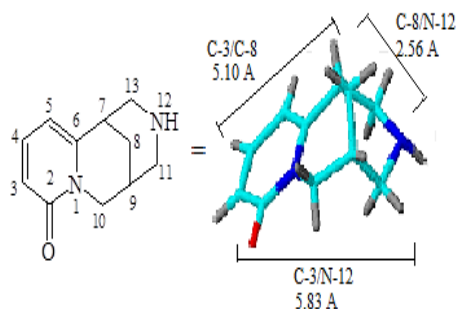
Кіріспе. SARS-CoV вирусының протеазасының жаңа тежегіштерін іздестіруде және жасаудамаңызды синтон болып *Thermopsis lanceolata* шөбінде кездесетін белгілі алкалоид цитизинді (Цт) қарастыруға болады. Ол медицинада тыныс алуды жақсартудатиімді аналептик ретінде қолданылады (Wolker et al., 2014; Prochaska et al., 2013). Жақында оның жаңа синтетикалық туындылары адамның тыныс алу жолдарына әсер ететін вирустарға қарсы цитотоксикалық қасиет көрсетті және вирустарды тежеуде H1N1, H3N2 және H5N2 кіші түрлерінің А, В/Ямагата және В/Виктория тектес В тұмауының вирустарына және 3 түрлі адам парагриппі вирусы үшін белсенділігін көрсетті. Цт-нің туындыларының тұмау вирусының көбеюінің әртүрлі сатыларына әсері зерттелді (Fedorova et al., 2021; Vakhitova et al., 2015). Цт-нің физиологиялық әсерінің жоғарыда аталған ерекшеліктері оның және қосылыс туындыларының COVID-19 вирусы протеазаларының және ACE2 рецепторының тиімді тежегіштерін іздеу мүмкіндігін көрсетеді. Дегенмен, оның өте жоғары уыттылығы (LD_{50} , 2 мг/кг,) оның медициналық тәжірибеде кеңінен қолданылуына кедергі келтіреді. Сондықтан, оның табиғи тұйық декстриндермен (ТД) капсула түрінде қапталған және биофункционалды қасиеттері жақсартылған (ұзақ босатылатын және уыттылығы төмен) инклюзивті кешендерін әзірлеу қажет.

ТД-дер қазіргі кезде көптеген ғылыми шолу басылымдарының мағлұматы болып табылады. Сонымен бірге, олар жалпы ғылыми мақалалық шолуларда липосомалар мен нанобөлшектер сияқты белгілі бір жеткізу жүйелерінде де қолданыс табуда (Jansook et al., 2018; Loftsson et al., 2019). Әдеби деректерге сәйкес (Waleczek et al., 2003), β -ТД қуысына молекулалық салмағы 200 г/мольден 800 г/мольге дейінгі дәрілік заттар ыңғайлы үміткерлер болып табылады. Цт-нің молекулалық салмағы 190,24 г/моль, сондықтан оның молекуласы β -ТД-мен инклюзивті суда еритін кешенді қалыптастыруға жарамды болып келеді. β -ТД-нің өзінің қуыстық өлшемі 0.78 нм, ол медициналық және тамақ өнеркәсібінде қолдануға рұқсат етілген (E-459) (Martin, 2004). Цт-нің супрамолекулярлық кешендерін жасау оның ұзақ әсер ететін және төмен уыттылығы бар суда еритін жаңа формаларын жасауға мүмкіндік береді. Осы жұмыста біз Цт алкалоиды молекуласының ТД-дермен қапталуының физика-химиялық зерттеулері нәтижелерін ұсындық.

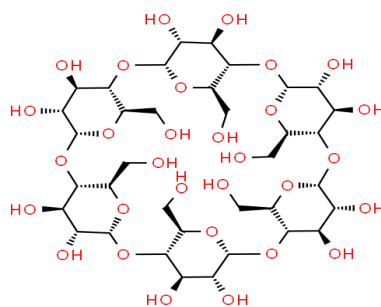
Материалдар мен әдістер. Цт: β -ТД қосынды кешенін дайындау. Жұмыста келесі реагенттер қолданылды: цитизин - ақ түсті, кристалдар түріндегі қосылыс $C_{11}H_{14}N_2O$ (Aldrich компаниясы); β -ТД - ақ кристалды зат (99,5%, Fluka компаниясы), балқу температурасы 270–290°C (ыдырау). Цт: β -ТД (1:2) кешенді қосылысы тұндыру әдісімен алынды. Цт: β -ТД (1:2) инклюзиялық кешені сулы-спирттік ортада еритін және 280–310°C температурада балкитын ақ кристалды ұнтақ түрінде алынды. Цт: β -ТД (1:2) кешенімен алу тәжірибелері үш рет қайталанып, $25 \pm 0,5^\circ\text{C}$ температурада жүргізілді. Кешенді қосылыстың шығымы (Ш, %), қапталу тиімділігі (КТ, %) және «қонақ» молекуласының жүктемелігі (МЖ, %) бойынша есептелді (Qvist and Halle, 2008). Цт: β -ТД (1:2) үшін келесі нәтижелер алынды: қапталған кешеннің шығымы (ҚШ, %) – $65,43 \pm 0,35$; қосылыс тиімділігі (КТ, %) – $78,11 \pm 0,56$; цитизин молекуласының жүктемесі (МЖ, %) –

8,36±0,22. β -ТД-ді, цитизиннің өзін және Цт: β -ТД кешенді қосылыстың беткі морфологиясын TesconMira 3 LMN (Чехия) фирмасының сканерлеуші электрондық микроскопы (СЭМ) арқылы зерттелді. ИҚ-спектрлер Agilent Technologies (АҚШ) компаниясының Cary 600 сериялы ИҚ-Фурье-спектрометрінде 4000–400 см^{-1} диапазонында тіркелген. Үлгілер зерттелетін қосылыстар мен KBr қоспасынан 1:100 массалық қатынаста дайындалды. ^1H және ^{13}C қосылыстарының ЯМР-спектрлері Jnm-ECA Jeol 400 спектрометрінде (399,78 және 100,53 МГц, DMSO- d_6) тіркелген. Цт: β -ТД кешендерінің үлгілеріне (салмағы 12 мг) термиялық талдау дифференциалдық термогравиметрия (DTG) және дифференциалдық сканерлеуші калориметрия (DSC) әдістерімен «Setaram» фирмасының DTA/DSC калориметрінде (10 К/мин) жүргізілді. Цт : β -ТД кешенінің молекулалық докинг зерттеулері AutoDock 4.2.6 және MGLTools 1.5.7 бағдарламаларының көмегімен орындалды. Молекулалық байланысу нүктелері AutoDock 4.2.6 модельдеу бағдарламасында жүзеге асырылып, Lamarckian Genetic Algorithm (LGA) есептеуі арқылы жүргізілді (Morris et al., 1998; Morris 2009). Химиялық құрылымдардың бірегей идентификаторлары (PubChem CID): 444913 (α -ТД), 444041 (β -ТД), 5287407 (γ -ТД), 10235 (Цт). Цт: β -ТД-нің инклюзиялық кешендерін молекулалық модельдеу HyperChem 8.0 бағдарламасында жартылай эмпирикалық AM1 әдісімен орындалды (HyperChem, 2021).

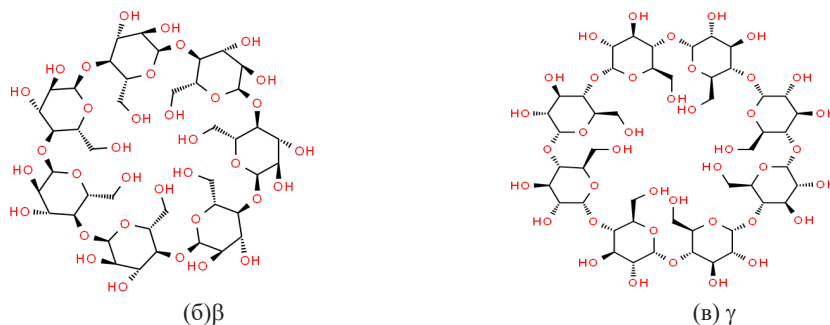
Нәтижелер мен талқылаулар. Цт молекуласының α -, β -, γ -олигокантиармен кешенді қосылыстарының түзілуі молекулалық докингі және модельдеу әдістемелерімен зерттелді. Молекулалық докинг әдісі бір молекуланың екіншісіне қатысты тұрақты кешен түзілуі кезін ғылыми тұрғыдан болжауға мүмкіндік береді. Сандық бағалау ретінде рецептор мен лиганд молекулалары арасындағы байланысу энергиясы пайдаланылды. AutoDock құралдарының көмегімен рецептор және лиганд молекулалары арасында сутектік байланыстардың болуын анықтау қызығушылық тудырды. Алдымен 1:1 қатынастағы кешенді қосылыстың ең жоғары байланысу энергиясын анықтау мақсатында α -, β -, γ -ТД мен Цт молекуласына молекулалық докинг жүргізілді (1-4-суреттер). Жүргізілген докинг нәтижесінде Цт-нің кешен түзуші лиганда α -, β -, γ -ТД рецепторларымен байланысу энергиясы бағаланды. Байланысу энергиясы келесі мәндерді көрсетті: α -ТД– 6,40 ккал/моль; β -ТД – 6,05 ккал/моль; γ -ТД кешедері үшін – 4,66 ккал/моль.



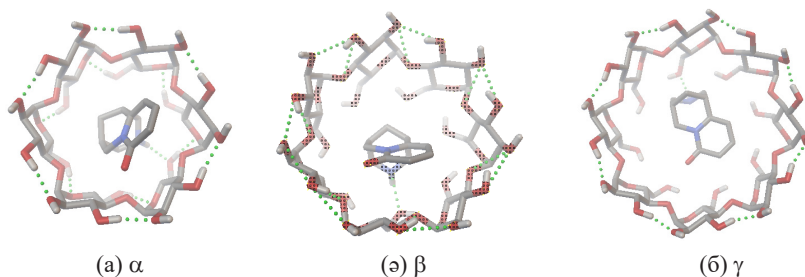
(a) Цт (PubChemCID 10235)



(a) a



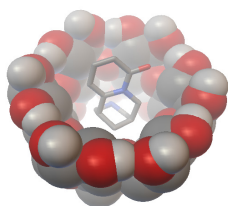
Сурет 1. Зерттеу нысандарының құрылымдық формулалары.



Сурет 2. Цт-нің кешенді ТД-мен сутектік байланыстар жүйесі.

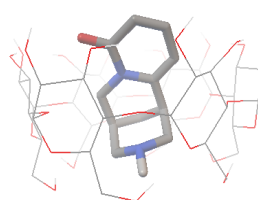
Айта кету керек, α - және β -ТД үшін байланысу энергиясының мәні – 5,0 ккал/мольден төмен, бұл екі осы Цт молекулаларын ең маңызды кешен түзуші агенттер ретінде ерекшелейді. Цт алкалоидының көлемді молекуласының құрамында қанықпаған және қаныққан фрагменттердің, карбонил, амид және амин топтарының болуы оның ТД-мен кешенді қосылыс түзу қабілетін көрсетеді. Сонымен қатар, пиперидиндегі амин тобындағы сутегі атомы ТД молекуласының төменгі тар жиегіндегі ОН оттегі атомымен сутектік байланыс түзеді. Жалпы, молекулалық докинг нәтижелері және Цт мен α -, β -, γ -ТД арасындағы байланысу энергияларын салыстыру кезінде Цт-нің α - және β -ТД-мен кешен түзуінің энергетикалық тұрғыдан басым екенін көрсетті. Цт-нің β -ТД-мен қосылыстарын және Цт: β -ТД кешенінің молекулалық модельдеуі HyperChem бағдарламасының көмегімен жартылай эмпирикалық AM1 әдісі бойынша орындалды (Wang et al., 2015; Fazylov et al., 2025).

жоғарыдан көрініс

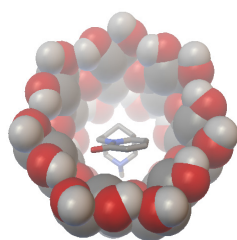


жоғарыдан көрініс

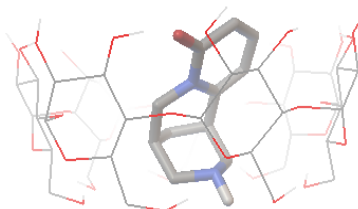
бүйірден көрініс

(а) α

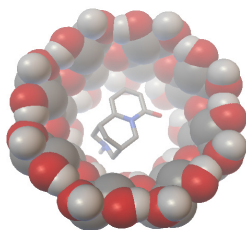
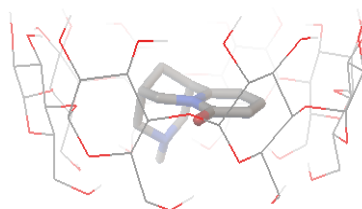
бүйірден көрініс



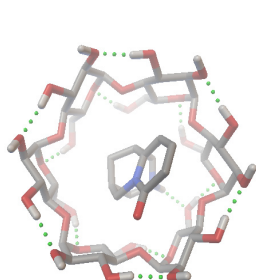
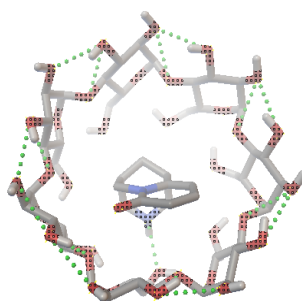
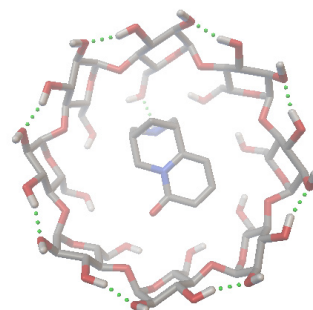
жоғарыдан көрініс

(ә) β

бүйірден көрініс

(б) γ 

Сурет 3. ТД қолданылған модельдеу кезінде ең жоғары көрсеткішті алған түйістіру позициялары.

(a) α (ә) β (б) γ

Сурет 4. Цт-нің ТД-мен кешенді сутектік байланыстар жүйесі.

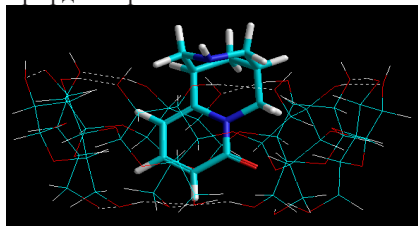
Цт молекуласының құрылымына сүйене отырып, оның β -ЦД-мен 1:1 қатынасында екі түрдегі кешенді қосылыс түзуі мүмкін деп болжауға болады:

– I түрі – Цт молекуласының қанықпаған α -пиридон сақинасының ТД қуысына тереңірек енуіне байланысты;

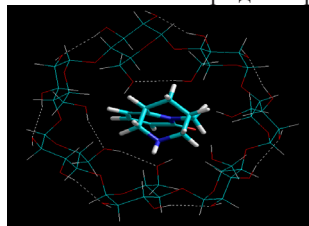
– II түрі – Цт молекуласының пиридин және пиперидин сақиналарының қаныққан жүйесінің ТД қуысына тереңірек енуіне байланысты.

5-суретте АМ1 жартылай эмпирикалық әдісін қолдана отырып сызбаларды оңтайландыру арқылы алынған 1:1 қатынасындағы Цт-нің β -ТД-мен кешенді қосылыс құрылымы көрсетілген. Нүктелі сызықтар сутектік байланыстарды көрсетеді.

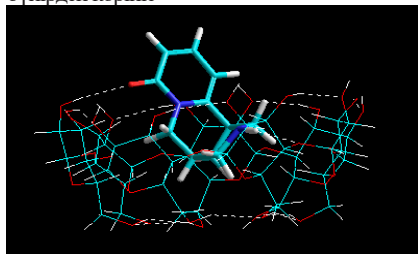
бүйірден көрініс



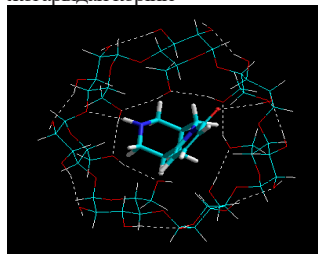
жоғарыдан көрініс

а) I түрі: $E_{\text{толық}} = -458977,6011$ ккал/моль; $\mu = 7,813$ Дебай

бүйірден көрініс



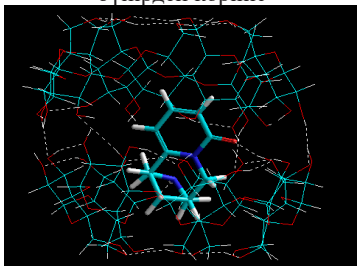
жоғарыдан көрініс

ә) II түрі: $E_{\text{толық}} = -458981,8409$ ккал/моль; $\mu = 6,417$ Дебай

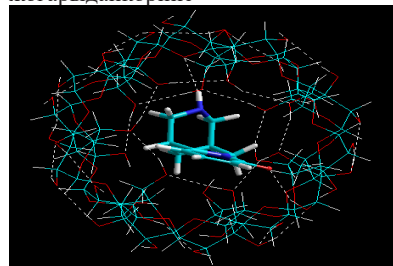
Сурет 5. Цт:β-ТД кешенінің 1:1 қатынасындағы оңтайландырылған құрылымы. Нүктелі сызықтар арқылы сутектік байланыстар көрсетілген.

5-суретте көрсетілген мәліметтерге сүйенсек, Цт:β-ТД (1:1) кешенінің II түрі термодинамикалық тұрғыдан $\Delta E = 4,24$ ккал/моль мәнге тұрақтырақ болып табылады. Бұл II қосылыстың түрінде Цт және ТД арасында екі сутектік байланыс болуымен байланысты, ал I түріндегі кешенде мұндай байланыс түзілмеген. Сонымен қатар, II түріндегі кешенді қосылыс түзу нәтижесінде ТД молекуласының кейбір деформациясы байқалады, бұл оның Цт молекуласының сәйкес бөлігіне оңтайлы орналастыру үшін қажет. Сонымен қатар, АМ1 жартылай эмпирикалық әдісімен Цт:β-ТД кешенді қосылысының 1:2 қатынасындағы құрылымы молекулалық модельдеу арқылы жасалды. Сызбаны оңтайландыру нәтижесінде алынған кешеннің құрылымы 6-суретте көрсетілген. Нүктелі сызықтар арқылы сутектік байланыстар бейнеленген.

бүйірден көрініс



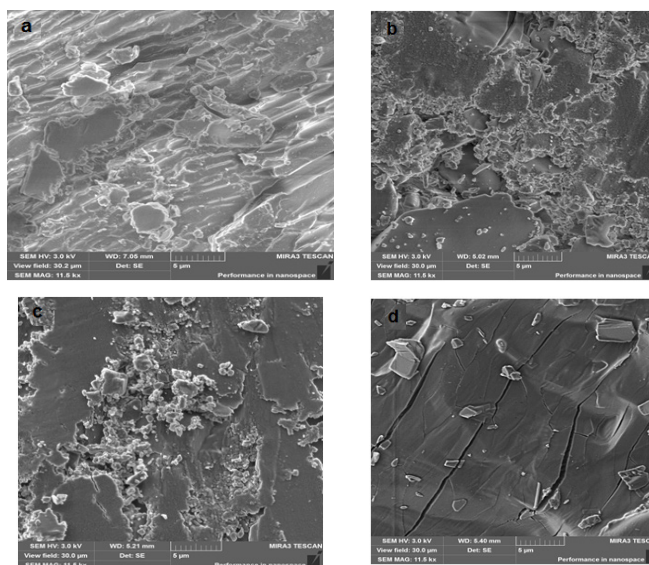
жоғарыдан көрініс

 $E_{\text{толық}} = -864117,5041$ ккал/моль; $\mu = 8,377$ Дебай

Сурет 6. Цт:β-ТД кешенінің 1:2 қатынасындағы оңтайландырылған құрылымы. Нүктелі сызықтар арқылы сутектік байланыстар көрсетілген.

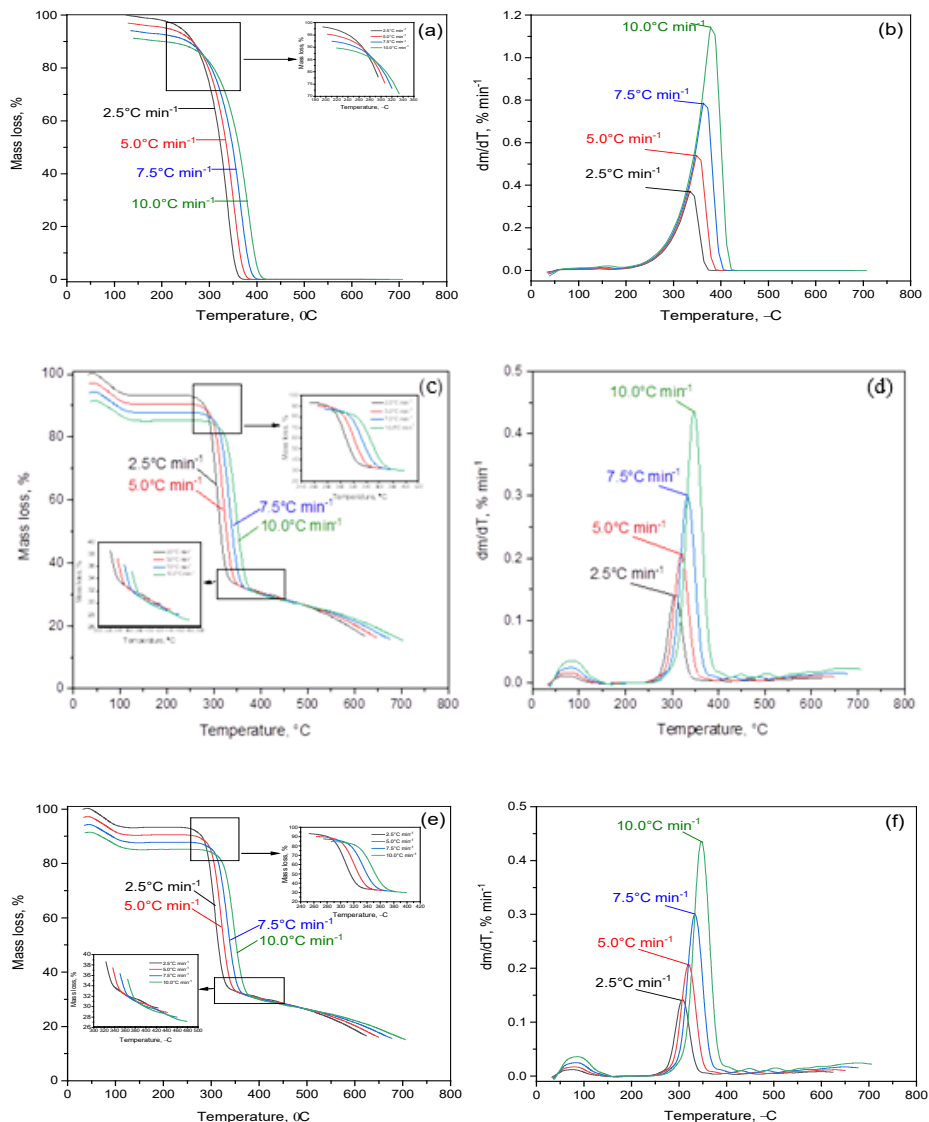
6-суретте көрсетілген мәліметтерге сүйенсек, Цт:β-ТД (1:2) қатынасындағы кешен β-ТД-нің екі молекуласымен түзілетін сутектік байланыстар нәтижесінде пайда болады: олардың молекулалары бір-бірімен байланысып, жалпы қуысты құрайды. Осы жалпы қуыста Цт молекуласы орналасып, өзінің пиридин және пиперидин циклдерінен тұратын қаныққан жүйесі арқылы ТД-нің бір молекуласына екі сутектік байланыс орнықтыру арқылы түзіледі. Молекулалық сутектік байланыстар жүйесінің болуы бұл Цт:β-ТД (1:2) қатынасындағы кешенді қосылысының мүмкіншілігін көрсетеді. Осы нәтижелер Цт мен β-ТД арасындағы өзара әрекеттесу 1:1 және 1:2 қатынасындағы кешенді қосылыстардың түзілу мүмкіндігін растайды.

7-суретте Цт:β-ТД (1:2) кешенді қосылысының TesconMira 3 LMN сканирлеуші электрондық микроскопында (СЭМ) микро-фотосуреттері келтірілген. Бұл суреттер 3 және 7 кВ үдеткіш кернеуінде (SEM MAG 537х–8,06 кх) түсірілген. Суреттерде β-ТД құрылымы (а, b) және Цт:β-ТД клатратының көрінісі (с, d) әртүрлі ұлғайтуларда көрсетілген. Талдау нәтижелері көрсеткендей, Цт:β-ТД (1:2) кешенді қосылыс үлгілерінде кристалдардың морфологиясы өзгерген, бұл кешеннің түзілуінің маңызды дәлелі болып табылады (Wang et al., 2015). Цт:β-ТД (1:2) кешенді қосылыстың құрылымы ИҚ-Фурье, ^1H және ^{13}C ЯМР спектроскопиясы, сондай-ақ COSY (^1H - ^1H) және HMQC (^1H - ^{13}C) екіөлшемді спектрлері арқылы қосымша расталды (Fazylov et al., 2025). Спектрлік талдау Цт пен β-ТД торының ішкі функционалдық топтары арасында ковалентті өзара әрекеттесулер жоқ екенін көрсетті. Кешенді қосылыстың түзілуінде шешуші рөл өзіндік емес (дисперсиялық, ван-дер-Ваальс және т.б.) өзара әрекеттесулерге тиесілі. ^1H және ^{13}C спектрлері, сондай-ақ COSY (^1H - ^1H) және HMQC (^1H - ^{13}C) екіөлшемді спектрлері Цт:β-ТД-нің (1:2) қатынасындағы молекуласының құрылымын толық растады.



Сурет 7. СЭМ суреттері β-ТД (а), Цт (b), физикалық қоспасы β-ТД (с) және Цт:β-ТД (1:2) (d).

Дифференциалды сканерлеуші калориметрия әдістерін қолдана отырып, Цт молекуласының және оның β -ТД-мен клатраттарының термиялық тұрақтылығы бағаланды. Цт және Цт: β -ТД (1:2) қатынасындағы қосылыстың ыдырауының термиялық талдау параметрлері TG/DTG қисықтарында көрсетілген (8- сурет).



Сурет 8. Ауада 10 градус/мин тұрақты қыздыру жылдамдығымен 1:2 қатынасындағы Цт (a, b) және Цт: β -ТД (c және d) TG/DTG қисықтары.

Алынған мәліметтер қосылыстардың ыдырау сипаттамалары туралы кейбір қорытындылар жасауға мүмкіндік береді (8с және 8d-суреттер). TG/dTG қисықтарына сүйенсек, $T_{\text{term}} = 260\text{--}440^\circ\text{C}$ температуралық диапазонын бөліп

көрсетуге болады, бұл жерде массаның жоғалу жылдамдығы өзгеріп отырады, ең үлкен мән немесе dTG қисығында қисықтық нүктесі байқалады (8b-сурет) (Fazylov et al., 2025). Цт молекуласының термиялық ыдырауының бастапқы кезеңі $T_{\text{term}}(I) = 260^{\circ}\text{C}$ температурасында молекулалардың бағдардан адасуы, сутектік байланыстардың бұзылуы және конформациялардың өзгеруімен сипатталады. Бұдан кейін $320-440^{\circ}\text{C}$ аралығында деградация өнімдері пайда бола бастайды: аммиак, азоттық қосылыстар және көміртегі қалдықтары. 8с-суретте көрсетілгендей, Цт:β-ТД қосылысының қыздырылуы кезінде массаның айтарлықтай жоғалуы $T_{\text{term}}(I) = 200-360^{\circ}\text{C}$ диапазонында басталады. Бұл процесс күрделі құрылымның бұзылуы арқылы әртүрлі фрагменттер мен ыдырау өнімдерінің түзілуіне әкеледі. Цт:β-ТД (1:2) кешенді қосылысының термиялық ыдырауы β-ТД молекуласының қуысынан компоненттердің шығуы және өзара байланыстардың тізбектей үзілуі механизмін ұстанады.

Қорытынды. Цитизин алкалоиды молекуласының β-тұйықдекстринмен қапталған кешенді қосылыстарының түзілу ерекшеліктері анықталды. Цитизиннің β-тұйықдекстринмен инклюзивтік кешендері «қонақ-қожайын» түріндегі қосылыстарға жатады. Цитизин молекуласының β-тұйықдекстринмен кешен түзілуі молекулалық модельдеу HyperChem 8.0 бағдарламасымен жүргізілді. Цитизиннің кешенді қосылысының түзілуінде өзіндік емес (дисперсиялық, вандер-Ваальс және т.б.) өзара әрекеттесулер шешуші рөл атқарады. Термографиялық әдістемелерді цитизин клатрат кешенінің термиялық-тотықтырғыш ыдырауын зерттеуде және осы процестердің кинетикалық параметрлерін анықтауда пайдалануға болады.

References

- Fazylov S.D., Nurkenov O.A., Nurmaganbetov Zh.S., Sarsenbekova A.Zh., Bakirova R.E. (2025) Synthesis of β-cyclodextrin functionalized silver nanoparticles and their filling with cytosine and its phosphorous derivative. *Molecules*, 30:1337. DOI: 10.3390/molecules30061337 (in Eng.).
- Fedorova V.A., Kadyrova R.A., Slita A.V., Muryleva A.A., Petrova P.R. et al. (2021) Antiviral activity of amides and carboxamides of quinolizidine alkaloid (-)-cytosine against human influenza virus A(H1N1) and parainfluenza virus type 3. *Natural Product Research*, 35:22. – P. 4256-4264. DOI: 10.1080/14786419.2019.1696791 (in Eng.).
- Hyper Chem 8.0 Release Hypercube, Inc. (2021) PubChem Compound Summary for CID.nNational Center for Biotechnology Information, <http://www.hypercubeusa.com> (in Eng.).
- Jansook P., Ogawa N., Loftsson T. (2018) Cyclodextrins: structure, physicochemical properties and pharmaceutical applications. *International Journal of Pharmaceutics*, 535. – P. 272-284. DOI: 10.1016/j.ijpharm.2017.11.018 (in Eng.).
- Loftsson T., Saokham P., Couto A.R.S. (2019) Self-association of cyclodextrins and cyclodextrin complexes in aqueous solutions. *International Journal of Pharmaceutics*, 560. – P. 228-234. DOI: 10.1016/j.ijpharm.2019.02.004 (in Eng.).
- Martin Del Valle E. (2004) Cyclodextrins and their u: a review. *Process Biochemistry*, 39. – P. 1033-1046. DOI: 10.1016/S00032-9592(03)00258-9 (in Eng.).
- Morris G.M., Goodsell D.S., Halliday R.S., Huey R., Hart W.E. et al. (1998) Automated docking using a Lamarckian genetic algorithm and an empirical binding free energy function. *J. Comput. Chem.*, 19. – P. 1639-1662. DOI: 10.1002/(SICI)1096-987X(19981115)19:14<1639:AID-JCC10>3.0.CO;2-B (in Eng.).
- Morris G.M., Huey R., Lindstrom W., Sanner M.F., Belew R.K., Goodsell D.S., Olson A.J. (2009) Autodock4 and AutoDockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. *J. Computational Chemistry*, 16. – P. 2785-2791. DOI: 10.1002/jcc.21256 (in Eng.).

Prochaska J.J., Das S., Benowitz N.L. (2013) Cytisine, the world's oldest smoking cessation aid. *British Medical Journal*, 347. DOI: 10.1136/bmj.f5198 (in Eng.).

Qvist J., Halle B. (2008) Thermal signature of hydrophobic hydration dynamics. *American Chemical Society*, 130:31. – P. 10345-10353. DOI: 10.1021/ja802668w (in Eng.).

Vakhitova Y.V., Farabontova E.I., Zainullina L.F., Vakhitov V.A. (2015) Search for (-)-cytisine derivatives as potential inhibitors of NF- κ R and STAT1. *Russian Journal of Biorganic chemistry*, 41. – P. 297-304. DOI: 10.1134/S1068162015030103(in Eng.).

Waleczek K.J., Carbal Marques H.M., Hempel B., Schmidt P.C. (2003) Phase solubility studies of pure (2)- α -bisabolol and chamomile essential oil with β -cyclodextrine. *Eur. J. Pharm. Biopharm*, 5. – P. 247-251. DOI: 10.1016/s0939-6411(02)00166-2 (in Eng.).

Wang L., Li S., Tang P., Yan J., Xu K., Li H. (2015) Characterization and evaluation of synthetic reluzole with β -cyclodextrin and 2,6-di-O-methyl- β -cyclodextrin inclusion complexes. *Carbohydr. Polym.*, 129. – P. 9-16. DOI: 10.1016/j.carbpol.2015.04.046 (in Eng.).

Walker N., Howe C., Glover M., McRobbie H. et al. (2014) Cytisine versus Nikotine for Smoking Cessation. *The New England Journal of Medicine*, 371:(25). – P. 2353-2362. DOI: 10.1056/NEJMoa1407764 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 213–227

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.448>

UDC: 547:615
IRSTI: 31.23:31.27.22

©Jalmakhanbetova R.I.^{1*}, Yelshibayeva A.M.¹, Zhumagaliyeva Zh.Zh.²,
Mukusheva G.K.³, 2026.

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan;

²Astana International University, Astana, Kazakhstan;

³Karaganda National Research University named after Academician E.A. Buketov,
Karaganda, Kazakhstan.

*E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com

TERPENOID COMPOUNDS OF *ARTEMISIA TERRAE-ALBAE* GROWING IN THE TURKESTAN REGION OF THE KAZAKHSTAN

Jalmakhanbetova Roza — Doctor of Chemical Sciences, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9937-275X>;

Yelshibayeva Aizhan — PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: individ.931@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0830-2946>;

Zhumagaliyeva Zharkyn — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Astana International University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: zharkyn.73@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-0993-008X>;

Mukusheva Gulim — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Karaganda National Research University named after Academician E.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: mukushevagulim5@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6706-4816>.

Abstract. This research work was aimed at a comprehensive assessment of the chemical composition and biological activity of the ethanol extract of *Artemisia terrae-albae* Krasch. The obtained extract was studied using IR and GC–MS analysis methods. IR spectroscopic analysis of the extract confirmed the presence of terpenoid compounds in it. Absorption bands characteristic of terpenoid compounds belonging to hydroxyl (–OH) groups, carbonyl (C=O) groups, and unsaturated C=C bonds were observed. As a result of the analysis by GC-MS method, a total of 46 components were identified in the studied extract. From the identified components, 17 compounds were classified as terpenoids, the total amount of which was 36.96% of the total chemical composition of the extract. In the structure of the terpenoid fraction, 8 compounds were identified as monoterpenes (17.39% of the total composition), and another 8 compounds were identified as sesquiterpenes (17.39%). One triterpenoid - ursolic acid - was identified in the amount of 2.17%. In addition, an analysis of the distribution of compounds in

the group of terpenoids was carried out. It was established that monoterpenes make up 47%, sesquiterpenes - 47%, and triterpenes - 6% in the terpenoid fraction.

The extract showed moderate activity against gram-positive bacteria (*Staphylococcus aureus*, *Bacillus subtilis*), and the effect on gram-negative bacteria was weak. A weak fungistatic effect was recorded against the *Candida albicans* strain. The toxicity level was determined using the *Artemia salina* bioassay, and the LD₅₀ value was 90.6 µg/ml, indicating a relatively low toxicity of the extract.

The results obtained indicate that the studied sample is rich in terpene components and can serve as a basis for further studies of their biological activity and pharmacological potential. The relatively high content of terpenes proves the importance of the studied raw material as a source of natural biologically active substances.

Keywords: *Artemisia terrae-albae*, terpenoid compounds, GC-MC, IR-spectroscopy, antimicrobial activity, cytotoxicity

For citations: Jalmakhanbetova R.I., Yelshibayeva A.M., Zhumagaliyeva Zh.Zh., Mukusheva G.K. *Terpenoid Compounds of Artemisia terrae-albae Growing in the Turkestan Region of Kazakhstan. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences.* 2026. No.2. Pp. 213–227. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.448>

©Джалмаханбетова Р.И.^{1*}, Елшібаева А.М.¹, Жумагалиева Ж.Ж.²,
Мукушева Г.К.³, 2026.

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан;

²Астана халықаралық университеті, Астана, Қазақстан;

³Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті,
Қарағанды, Қазақстан.

*E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com

ҚАЗАҚСТАННЫҢ ТҮРКІСТАН Өңірінде өсетін *ARTEMISIA TERRAE-ALBAE* ТЕРПЕНОИДТЫ Қосылыстары

Джалмаханбетова Роза — химия ғылымдарының докторы, қауымдастырылған профессор, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9937-275X>;

Елшібаева Айжан — PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: individ.931@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0830-2946>;

Жумагалиева Жарқын — химия ғылымдарының кандидаты, Астана халықаралық университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: zharkyn.73@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-0993-008X>;

Мукушева Гүлим — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: mukushevagulim5@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6706-4816>.

Аннотация. Бұл зерттеу жұмысы *Artemisia terrae-albae* Krasch. өсімдігінің этанолды сығындысының химиялық құрамын және биологиялық белсенділігін кешенді бағалауға бағытталды. Алынған сығынды ИҚ-спектроскопия және ГХ–

МС талдау тәсілдері арқылы зерттелді. Сығындының ИҚ-спектроскопиялық талдауы оның құрамында терпеноидты қосылыстардың бар екендігін растады. Терпеноидты қосылыстарға тән гидроксил (–ОН) топтарына, карбонил (C=O) тобына, қанықпаған C=C байланыстарына тиесілі жұтылу жолақтар байқалды. ГХ-МС талдауы нәтижесінде зерттелген сығындының құрамында барлығы 46 компонент анықталды. Анықталған компоненттердің ішінде 17 қосылыс терпеноидтар ретінде жіктелді, олардың жалпы мөлшері сығындының жалпы химиялық құрамының 36,96%-ын құрады. Терпеноид фракциясының құрылымында 8 қосылыс монотерпендер (жалпы құрамның 17,39%-ы), тағы 8 қосылыс сесквитерпендер (17,39%) ретінде анықталды. Бір тритерпеноид - урсол қышқылы - 2,17% мөлшерінде анықталды. Сонымен қатар, терпеноидтар тобындағы қосылыстардың таралуына талдау жүргізілді. Терпеноидтар фракциясында монотерпендер 47%, сесквитерпендер 47% және тритерпендер 6% құрайтыны анықталды.

Сығынды грамоң бактерияларға қатысты орташа деңгейде белсенділік көрсетті (*Staphylococcus aureus*, *Bacillus subtilis*), ал грамтеріс бактерияларға әсері әлсіз болды. *Candida albicans* штамына қарсы әлсіз фунгистатикалық әсер тіркелді. Уыттылық деңгейі *Artemia salina* биотесті арқылы анықталып, LD₅₀ мәні 90,6 мкг/мл құрады, бұл сығындының салыстырмалы түрде төмен уыттылығын көрсетеді.

Алынған нәтижелер зерттелген үлгінің терпендік компоненттерге бай екенін көрсетеді және олардың биологиялық белсенділігі мен фармакологиялық әлеуетін әрі қарай зерттеуге негіз бола алады. Терпендердің салыстырмалы жоғары үлесі зерттелетін шикізаттың табиғи биологиялық белсенді заттар көзі ретіндегі маңыздылығын дәлелдейді.

Түйін сөздер: *Artemisia terrae-albae*, терпеноидты қосылыстар, ГХ-МС, ИҚ-спектроскопия, антимикробтық белсенділік, цитоуыттылық

©Джалмаханбетова Р.И.^{1*}, Елшібаева А.М.¹, Жумагалиева Ж.Ж.²,
Мукушева Г.К.³, 2026.

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,
Астана, Казахстан;

²Астанинский международный университет, Астана, Казахстан;

³Карагандинский национальный исследовательский университет имени
академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан.

*E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com

ТЕРПЕНОИДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ *ARTEMISIA TERRAE-ALBAE*, ПРОИЗРАСТАЮЩЕГО В ТУРКЕСТАНСКОМ РЕГИОНЕ КАЗАХСТАНА

Джалмаханбетова Роза — доктор химических наук, ассоциированный профессор, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва, Астана, Казахстан,

E-mail: rjalmakhanbetova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9937-275X>;

Елшібаева Айжан — PhD докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан,

E-mail: individ.931@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0830-2946>;

Жумагалиева Жаркын — кандидат химических наук, Международный университет Астана, Астана, Казахстан,

E-mail: zharkyn.73@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-0993-008X>;

Мукушева Гүлим — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

E-mail: mukushevagulim5@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6706-4816>.

Аннотация. Настоящая работа посвящена комплексному исследованию химического состава и биологической активности этанольного экстракта *Artemisia terrae-albae* Krasch. Полученный экстракт исследовали с помощью ИК-спектроскопии и ГХ-МС анализа. ИК-спектроскопический анализ экстракта подтвердил наличие в нем терпеноидных соединений. Наблюдались полосы поглощения, характерные для терпеноидных соединений, принадлежащие гидроксильным (–ОН) группам, карбонильным (C=O) группам и ненасыщенным связям C=C. В результате анализа методом ГХ-МС в составе исследуемого экстракта было идентифицировано в общей сложности 46 компонентов. Из идентифицированных компонентов 17 соединений были классифицированы как терпеноиды, общее количество которых составило 36,96% от общего химического состава экстракта. В структуре терпеноидной фракции 8 соединений были идентифицированы как монотерпены (17,39% от общего состава), еще 8 соединений - как сесквитерпены (17,39%). Один тритерпеноид - урсоловая кислота — был идентифицирован в количестве 2,17%. Кроме того, был проведен анализ распределения соединений в группе терпеноидов. Было установлено, что монотерпены составляют 47%, сесквитерпены - 47%, а тритерпены - 6% в терпеноидной фракции.

Экстракт показал умеренную активность против грамположительных бактерий (*Staphylococcus aureus*, *Bacillus subtilis*), а эффект на грамотрицательные бактерии был слабым. Слабый фунгистатический эффект был зафиксирован против штамма *Candida albicans*. Уровень токсичности определяли с помощью биотеста на *Artemia salina*, и значение LD₅₀ составило 90,6 мкг/мл, что указывает на относительно низкую токсичность экстракта.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что исследуемый образец богат терпеновыми компонентами и может служить основой для дальнейших исследований его биологической активности и фармакологического потенциала. Относительно высокое содержание терпенов подтверждает важность исследуемого сырья как источника природных биологически активных веществ.

Ключевые слова: *Artemisia terrae-albae*, терпеноидные соединения, ГХ-МС, ИК- спектроскопия, антимикробная активность, цитотоксичность

Introduction. One of the most widespread medicinal plants in Kazakhstan is the genus *Artemisia* L. a species-rich and taxonomically complex genus of dicotyledonous plants belonging to the family *Asteraceae* L. Plants of the genus *Artemisia* are widely

used in various traditional and folk medicine systems and are well known for their medicinal properties in the treatment of fever, malaria, inflammation, ulcers, diabetes, and intestinal parasites. This genus includes more than 500 perennial, biennial, and annual herbaceous plants and small shrubs growing in temperate regions of Europe, Asia, and North America (Nigam et al., 2019). 81 species of this genus grow in Kazakhstan, including 19 described as endemic.

In traditional folk medicine, *Artemisia* species have been used to reduce fever, have antiseptic effects, fight intestinal worms, stimulate the body, induce urination, and relieve abdominal pain (Ksibi et al., 2022). In traditional Central Asian medicine, infusions of *Artemisia* flowers are used to treat various diseases such as ulcerative colitis, appendicitis, hemorrhoids, bad breath, epilepsy, and many others (Koul et al., 2018). The *Artemisia* genus is characterized by a variety of biologically active substances. Studies have shown that the plant species belonging to the *Artemisia* genus contain various biologically active substances, such as lignans, sesquiterpenoids, flavonoids, coumarins, glycosides, acids, and sterols (Jalmakhanbetova et al., 2007, 2021; Trifan et al., 2022). One of the main compounds characteristic of wormwood plants is terpenes, including sesquiterpene lactones, which have a diverse chemical structure and a broad spectrum of pharmacological activities. These compounds have been shown to have anticancer, antimalarial, and anti-inflammatory properties, as well as to accelerate wound healing, and to have antibacterial, antifungal, and antiviral activities (Ivanescu et al., 2015; Wang et al., 2023).

Plants belonging to the genus *Artemisia* are of great economic and medical importance. This is because the terpenoid compound, terpenoid sesquiterpene lactone artemisinin, isolated from *Artemisia annua* L., is recognized as the main active ingredient against malaria. This discovery has increased the interest of scientists around the world in finding new biologically active drugs through the study of traditional medicinal plants (Zaman et al., 2021). In traditional Russian medicine, tinctures from the roots and leaves of the *Artemisia* plant are widely used to treat liver, stomach, and spleen diseases. A solution of fresh wormwood juice mixed with diluted ethanol is used for insomnia and kidney stones, as well as as an anti-inflammatory agent (European Scientific Cooperative on Phytotherapy 2003; Abad et al., 2012). In Kazakhstan, tinctures prepared from the aerial parts of this plant have been used in folk medicine to treat stomach ulcers, appendicitis, hemorrhoids, bad breath, and epilepsy. Wormwood is used in the food industry as a spice to give a special taste to fatty foods. It is also used to add flavor to some alcoholic beverages and wines (Krebs et al., 2010). The aerial parts of the plant are also a valuable source of raw materials in the paint industry (Wu et al, 2020).

A. terrae-albae Krasch. is a poorly studied plant, but is of great interest due to its use in folk medicine. *A. terrae-albae* is a semi-shrub plant that grows in the semi-desert and steppe regions of Kazakhstan. In folk medicine of Central Asia and Eastern Europe, *A. terrae-albae* is widely used in the treatment of skin diseases such as dermatitis, eczema, psoriasis, as well as for inflammation, wounds and burns (Turuspekov et al, 2018; Sagyndykova et al., 2024).

The essential oil of *A. terrae-albae*, a plant distributed in Central Asia, is characterized mainly by oxygenated monoterpenes (Sampietro et al, 2016). The dominant component in its composition is camphor (47.3%). In addition, 1,8-cineole (23.9%), camphene (9.8%) and β -thujone (6.0%) were detected. α -Pinene is also present, but its amount is not specified. The chemical composition of the essential oil is characterized by the predominant content of camphor and 1,8-cineole, which determines its biologically active properties.

A number of studies have investigated the chemical composition, biological activity and ecological significance of the plant *A. terrae-albae*. Dyusebaeva and colleagues (Dyusebaeva et al., 2024) determined the macro- and microelement composition, amino acids and fatty acids of the aboveground part of the plant and showed that it is dominated by calcium, magnesium, sodium elements, as well as oleic, linoleic and palmitic acids. These data prove that the plant has nutritional and physiological activity.

In recent years, extracts of the *A. terrae-albae* plant have been used as biogenic reducing agents in the field of nanotechnology. In the conducted studies, silver nanoparticles were obtained by the green synthesis method using the ethanol extract of the plant and their cytogenic toxicity was evaluated. As a result, it was found that the obtained nanoparticles have a pronounced antiproliferative effect, inhibiting cell division (Zhumanova et al., 2023).

In a similar study (Dyusebaeva et al., 2025), the antimicrobial activity of silver nanoparticles stabilized with a lipophilic extract of the plant *A. terrae-albae* was evaluated. The resulting nanoparticles showed activity against microorganisms such as *S. aureus*, *E. coli*, *P. aeruginosa*, and *C. albicans*.

The aim of this research work is to identify terpene compounds in the ethanol extract of *A. terrae-albae*, which grows in the Khantagy Ridge area of Turkestan region, and to characterize their structural features. Determining the chemical composition of terpene compounds of *A. terrae-albae* and studying their relationship with biological activity is an important scientific task for the modern field of phytochemistry and pharmacognosy.

Materials and methods. Plant material. The above-ground part of *Artemisia terrae-albae* Krasch. was collected in July 2024 from the Khantagy Ridge area of Turkestan region. The collected plant material was air-dried in the shade. The dried plant was crushed and stored. Only the above-ground part of the plant was used for research.

Extraction of raw. An ethanol solvent was used to obtain an extract of the crushed and pre-dried aerial part of *A. terrae-albae*. 20 g of dry raw material was extracted twice with ethyl alcohol (ratio 1:10, w/v). Each extraction was carried out with boiling for 2 hours. The resulting extracts were combined and evaporated in a rotary evaporator. As a result, a dark green extract was obtained. Yield – 4.015 g (20 % relative to air-dried raw material).

GC Conditions. Gas chromatography–mass spectrometry was used to determine the composition of the ethanol extract of *A. terrae-albae*. The analysis was carried out on an Agilent 7890A gas chromatograph system and a 5975C Mass Selective Detector

(Agilent Technologies, USA). The analysis was carried out under the following conditions: column type – Rtx-100DHA, column length – 30 m; column diameter – 0.25 mm; adsorbent layer thickness in the column – 0.5 μm ; evaporator temperature – 280 $^{\circ}\text{C}$; column temperature – 60–300 $^{\circ}\text{C}$; column heating rate – 8 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$; ion source temperature – 230 $^{\circ}\text{C}$; quadrupole condenser temperature – 150 $^{\circ}\text{C}$; EI = 70 eV; carrier gas – helium grade A; gas pressure in the column – 2 psi; sample volume – 0.2 μl ; injection mode – flow splitting (split 20:1); mass spectrum recording mode – scan; library – NIST 08; analysis time – 32 minutes.

The percentage of component composition was automatically calculated using the GS-MSD Data Analysis program based on the peak areas of the total ion chromatogram, and identification was performed using the NIST 08 library based on mass spectra and retention times.

IR spectroscopy. Infrared spectroscopic analysis was performed to conduct a primary screening of terpene compounds in the ethanol extract of *A. terrae-albae*. The infrared spectrum was recorded on an IRTracer - 100 spectrometer.

IR spectrum (ν , cm^{-1}): 3600–3200 (broadband), 3075, 3030, 2965, 2925, 2855, 1740, 1650, 1605, 1515, 1460, 1375, 1260, 1215, 1170, 1110, 1050, 1020, 970, 920, 875, 820, 760, 700, 650, 600, 520, 470, 430.

The antimicrobial activity. The antimicrobial activity of the ethanolic extract of *A. terrae-albae* was determined by the serial dilution method. The following microorganisms were used as reference test strains for the analysis: gram-positive bacteria: *S. aureus* ATCC 6538, *B. subtilis* ATCC 6633; gram-negative bacteria: *E. coli* ATCC 25922, *P. aeruginosa* ATCC 27853; yeast-like fungus: *C. albicans* ATCC 10231. All strains were obtained from the American Type Culture Collection (ATCC). Daily cultures of microorganisms were grown on nutrient agar at 37 $^{\circ}\text{C}$ (for fungi – 30 $^{\circ}\text{C}$, 48 h). The antimicrobial activity of the extracts was studied in the concentration range of 1.56–50 $\mu\text{g}/\text{ml}$.

Each sample was incubated with 0.1 ml of microbial suspension (10^6 CFU/ml). The incubation process was carried out in a thermostat at 37 $^{\circ}\text{C}$ for 24–48 hours, depending on the type of microorganism. The minimum inhibitory concentration (MIC) was determined as the lowest concentration at which turbidity was observed. The study was performed in triplicate. Ceftriaxone (antibacterial drug) and nystatin (antifungal drug) were used as controls for comparison.

The cytotoxicity. The cytotoxic activity of ethanolic extract of *A. terrae-albae* was evaluated in vitro by its effect on the larvae of the brine shrimp *A. salina* (Leach). The study was carried out according to the method of B. N. Meyer et al. (Planta Medica, 1982). For the experiment, *A. salina* eggs were placed in artificial seawater and incubated for 48 hours at 37 $^{\circ}\text{C}$. The 2-day-old larvae (nauplii) obtained in this way were used as samples. A 2 mg sample of the extract under study was dissolved in 2 ml of ethanol and subsequently diluted accordingly to obtain concentrations of 100, 10 and 1 $\mu\text{g}/\text{ml}$. Each concentration was prepared in triplicate. Ten *A. salina* larvae were introduced into each vial. After complete evaporation of the ethanol, 5 ml of artificial seawater was added to each vial. All samples were incubated at room temperature in the light for 24 hours.

After incubation, live and dead larvae were counted and the lethal dose (LD_{50} , $\mu\text{g/ml}$) was calculated based on the percentage of death. An equivolume solution of dimethyl sulfoxide (DMSO) was used as a control sample, and dactinomycin (actinomycin D) was used as a reference drug. The results were performed in triplicate and statistically processed using the FIN program.

Results. In the IR spectrum of the dry extract of *A. terrae-albae*, a broad absorption band corresponding to the stretching vibrations of hydroxyl groups ($-\text{OH}$) was observed in the region of 3400 cm^{-1} . The peaks in the range of $2920\text{--}2850\text{ cm}^{-1}$ indicate the vibrations of the C-H bonds of aliphatic groups. The intense band in the region of $1730\text{--}1700\text{ cm}^{-1}$ is characteristic of the C=O bonds of carbonyl compounds (acids, esters). Absorption bands in the range of $1620\text{--}1600\text{ cm}^{-1}$ correspond to C=C bonds. In the range of $1250\text{--}1050\text{ cm}^{-1}$, C-O vibrations characteristic of alcohols, ethers, and esters were observed. These spectral data prove the presence of functional groups characteristic of terpenoid compounds in the extract.

GC-MS analysis revealed a multicomponent chemical composition of the ethanol extract of *A. terrae-albae*. Several distinct peaks were observed in the chromatogram, the highest intensity of which was observed at a retention time of 26.411 min, indicating that this compound was present in the majority. Peaks at early retention times correspond to monoterpenes, while peaks at 15–30 min correspond to sesquiterpenes and triterpenoids. A high concentration of terpene compounds was observed between 25–28 min (Figure 1).

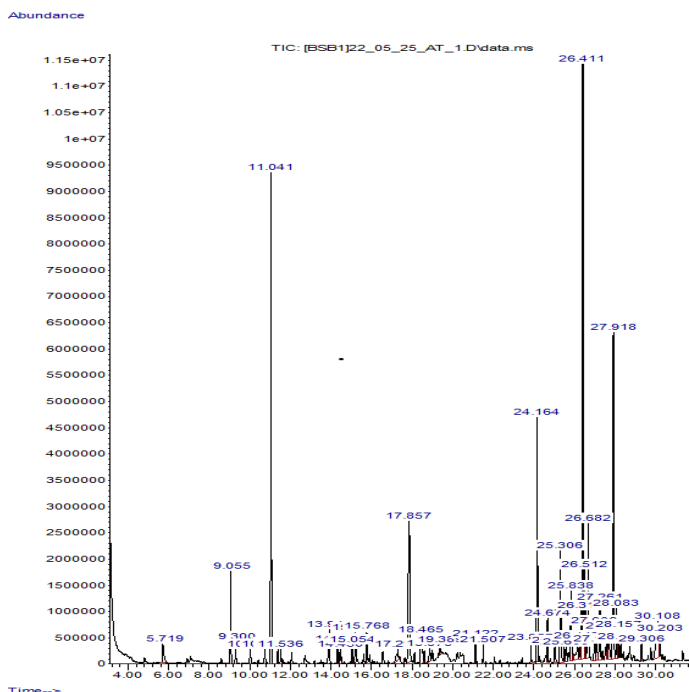
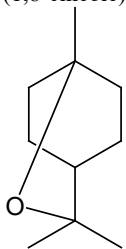
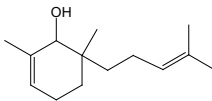
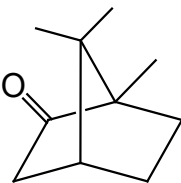
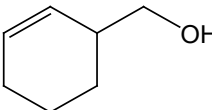
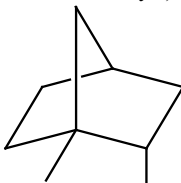
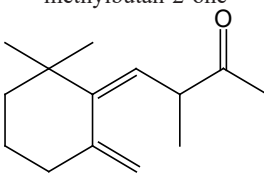
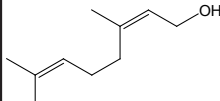
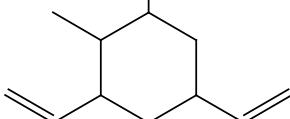
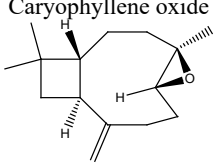
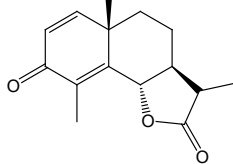
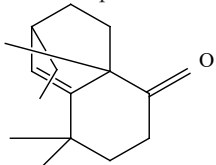
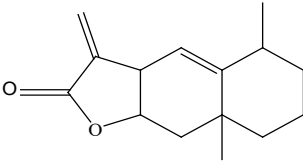
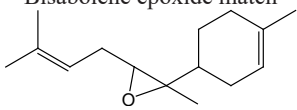
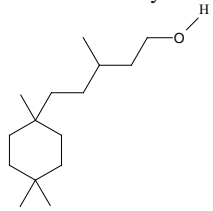
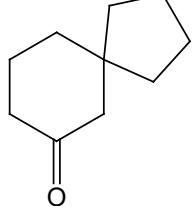
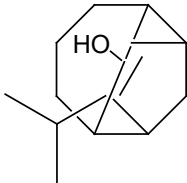
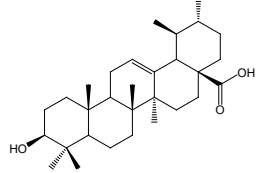


Figure 1. GC/MS chromatogram of *A. terrae-albae* extract collected in the Turkistan region of Kazakhstan.

A total of 46 different organic compounds were identified as a result of gas chromatography–mass spectrometry analysis of the ethanol extract of *A. terrae-albae* (Figure 1). Analysis of the component composition revealed the presence of 17 terpenoid compounds with monoterpene, sesquiterpene and triterpene structures (Table 1).

Table 1. Terpenoids compounds of *A. terrae-albae* extract.

Monoterpenes			
Compound	Structural features	Compound	Structural features
1	2	3	4
Eucalyptol (1,8-cineole) 	Monoterpene oxide -Bicyclic ether, Contains an internal oxygen bridge (ether linkage), Fully saturated carbon skeleton.	2-Cyclohexene-1-methanol, 2,6-dimethyl-6-(4-methyl-3-pentenyl) 	Monoterpene oxide -Composed of two isoprene units Monocyclic hydrocarbon structure Contains two vinyl (ethenyl) groups (C=C)
Camphor-type bicyclic monoterpene 	Monoterpene ketone -Bicyclic bornane skeleton, Contains a ketone group, Rigid, saturated structure.	2-Cyclohexene-1-methanol 	Monoterpene oxide -Monocyclic Structure, One double bond, One hydroxyl group.
Borneol (Bicyclo[2.2.1] heptan-2-ol, 1,7,7-trimethyl-) 	Monoterpene alcohol -Bicyclic bornane skeleton, Saturated carbon framework.	4-(2,2-Dimethyl-6-methylenecyclohexylidene)-3-methylbutan-2-one 	Monoterpene oxide -Built from two isoprene units Monocyclic structure Contains a ketone group
Linalool / Geraniol family (2,6-Octadien-1-ol, 3,7-dimethyl-) 	Monoterpene alcohol -Acyclic monoterpene alcohol, Contains two double bonds, One hydroxyl group, Built from two isoprene units	Cyclohexane, 1,5-diethenyl-2,3-dimethyl 	Monoterpene alcohol -Derived from three isoprene units

1	2	3	4
Sesquiterpenes			
Caryophyllene oxide 	Sesquiterpene oxide -Derived from three isoprene units Bicyclic structure Contains an epoxide ring (three-membered cyclic ether)	α-Santonin 	Sesquiterpene lactone -Bicyclic structure Contains a lactone ring. Multiple double bonds
Neoisolongifolene-8-oxo-type compound 	Sesquiterpene oxide -Tricyclic framework Ketone functionality Longifolene-type sesquiterpene structure.	Eudesma-5,11(13)-dien-8,12-olide 	Sesquiterpene lactone Eudesmane-type skeleton Lactone functional group
Bisabolene epoxide match 	Sesquiterpene oxide -Mono- or acyclic framework, Contains an epoxide ring	3-Methyl-5-(1,4,4-trimethylcyclohex-2-enyl)-pent-2-enoic acid ethyl ester 	Sesquiterpene oxide -Built from three isoprene units Contains a cyclohexene ring
Spiro[4.5]decan-7-one, epoxy-derivative 	Sesquiterpene oxide Spiro structure (two rings sharing one carbon atom).	3-Isopropyl-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undec-3-en-10-one 	Sesquiterpene oxide -It contains a 15-carbon skeleton (C_{15}). Sesquiterpenes are composed of three isoprene units ($C_5 \times 3$).
Triterpenes (C_{30})			
Urs-20-en-3-ol (ursane-type triterpenoid) 	Triterpenes (C_{30}) -Pentacyclic (five-ring) structure Ursane-type triterpenoid skeleton One hydroxyl group at C-3 One double bond at C-20.		

Among them, the main components were 2-Cyclohexene-1-methanol, 2,6-dimethyl-6-(4-methyl-3-pentenyl)- (17.33%), Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl-

(camphor) (13.19%), Cyclohexane, 1,5-diethenyl-2,3-dimethyl- (9.71%) and Butanoic acid, octyl ester (8.29%). Thus, as a result of gas chromatography-mass spectrometry studies, it was determined that the extract contains monoterpene, sesquiterpene, and triterpene compounds belonging to terpenoid compounds.

According to the results of the study, the ethanolic extract of *A. terrae-albae* showed pronounced antimicrobial activity. The inhibitory effect of the extract against *B. subtilis* ATCC 6633, *E. coli* ATCC 25922 and *C. albicans* ATCC 10231 strains was observed at a concentration of 50 mg/ml. In addition, moderate activity was determined against the *S. aureus* ATCC 6538 strain, the effective concentration was 25 mg/ml. However, the antimicrobial activity of the extract against the *P. aeruginosa* ATCC 27853 strain was not recorded (Table 2).

Thus, the results obtained indicate that the *A. terrae-albae* extract has a pronounced antimicrobial potential against gram-positive bacteria and yeast-like fungi, but its effect on the gram-negative *P. aeruginosa* strain is limited. Overall, these results provide evidence for the antimicrobial properties of biologically active compounds in the extract, including potential terpenoid components.

Table 2. Antimicrobial activity of *A. terrae-albae* extract.

Test substances	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC 6538	<i>Bacillus subtilis</i> ATCC 6633	<i>Escherichia coli</i> ATCC 25922	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> ATCC 27853	<i>Candida albicans</i> ATCC 10231
Extract of <i>A. terrae-albae</i>	25	50	50	-	50
Control (ceftriaxone)	6.3	12,5	6,3	12,5	-
Control (nystatin)	-	-	-	-	12,5

According to the results of the study, the cytotoxic activity of the extract of the *A. terrae-albae* plant was determined. The half-lethal dose (LD_{50}) of the studied sample was 90.6 $\mu\text{g/ml}$.

Dactinomycin (actinomycin D), used as a reference drug, showed a significantly higher cytotoxicity, its LD_{50} value was recorded at the level of 45.8 $\mu\text{g/ml}$. This indicator is approximately two times lower than that of the studied plant extract, which indicates that the cytotoxic effect of dactinomycin is stronger (Table 3).

Thus, the results obtained indicate that the extract of *A. terrae-albae* has cytotoxic activity, but its effect is weaker than that of a standard antitumor drug. This indicates the prospect of further pharmacological studies of the plant extract.

Table 3. Cytotoxic activity of *A. rtemisia terrae-albae* extract.

Test substances	LD_{50} , $\mu\text{g/ml}$
Extract of <i>A. terrae-albae</i>	90.6
Comparison drug: dactinomycin (actinomycin D)	45.8

Discussions. During the general analysis, 17 terpene compounds (mono-, sesquiterpenes and one triterpenoid) were identified in the extract. The quantitative

ratio and group classification of these terpenes are shown in the diagram presented in the work (Figure 2). Terpenes constitute the majority of the identified compounds and are the main biologically active components of the extract.

Camphor and cyclic monoterpenes are known natural compounds characteristic of the *Artemisia* genus and exhibit antiseptic, anti-inflammatory and antimicrobial activity. In addition, the identified triterpenoid Urs-20-en-3-ol indicates the presence of high molecular weight terpenes in the extract and may be associated with its antioxidant and cytoprotective properties.

Among the 17 terpene compounds identified in the extract of *A. terrae-albae* by GC–MS analysis, monoterpenes (47%) and sesquiterpenes (47%) accounted for the majority, while triterpenes accounted for only 6%. These results indicate a clear dominance of low-molecular, volatile terpenes in the secondary metabolite profile of the studied species (Figure 2).

The presence of equal amounts of monoterpenes and sesquiterpenes indicates a relatively balanced activity of the plant's biosynthetic pathways (mevalonate and methylerythritol phosphate pathways). The high proportion of monoterpenes may be related to their volatility and protective function, as these compounds play an important role in plant defense against phytopathogens, insects, and abiotic stress factors.

The high percentage of sesquiterpenes (47%) is also a chemical marker characteristic of the *Artemisia* genus. Literature data indicate that biologically active sesquiterpenes (especially lactones) are common in *Artemisia* species, which are associated with their anti-inflammatory, antimicrobial and antioxidant properties.

The relatively low content of triterpenes (6%) may indicate that they are mainly structural or late metabolic products. Triterpenes are often described as storage or stabilizing compounds and may be less detectable by GC–MS analysis than volatile terpenes.

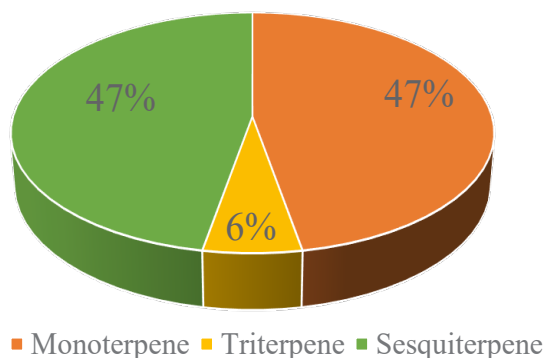


Figure 2. Relative percentage composition of terpenoid compounds identified in *A. terrae-albae* extract by GC–MS analysis.

In general, the terpene profile determined indicates that *A. terrae-albae* has a high pharmacological potential and that its biological activity is likely to be mainly associated with mono- and sesquiterpene components. This ratio of terpenes also provides important information for the chemotaxonomic characterization of the species.

It was observed that the chemical nature of the compounds is diverse: monoterpenes, sesquiterpenes, sesquiterpene lactones, as well as triterpenoids were identified.

GC–MS analysis revealed a high concentration of terpene compounds in the ethanol extract of *A. terrae-albae*. Among them, the highest concentration was 2-Cyclohexene-1-methanol, 2,6-dimethyl-6-(4-methyl-3-pentenyl)- (17.33%). This compound is structurally related to terpene alcohols and is considered a mono- or sesquiterpene derivative. Terpene alcohols are generally characterized by antimicrobial and anti-inflammatory activity.

The second highest-abundant compound is Bicyclo[2.2.1]heptan-2-one, 1,7,7-trimethyl- (13.19%), a camphor-like monoterpene. Camphor-like compounds are characteristic of the *Artemisia* genus and are the main components of the essential oil fraction of the plant. These substances are known for their antimicrobial, fungicidal, and insecticidal properties.

In addition, the compound Cyclohexane, 1,5-diethenyl-2,3-dimethyl- (9.71%) was also detected in significant amounts. Based on its structural features, it also belongs to the terpene hydrocarbons. Terpene hydrocarbons are protective metabolites of plants and play an important role in environmental adaptation.

Among the sesquiterpenes, the pharmacologically important α -santonin (1.04%) and Eudesma-5,11(13)-dien-8,12-olide (1.38%) were identified. These compounds belong to sesquiterpene lactones and are known as chemotaxonomic markers of the *Artemisia* genus. Their anthelmintic, anti-inflammatory and cytotoxic activities have been reported in the literature.

Of particular interest is the ursane-type triterpenoid (Urs-20-en-3-ol, 3.21%). Triterpenes with the ursane structure are characterized in the literature by anti-inflammatory, hepatoprotective and antitumor activity. Its detection confirms the pharmacological potential of the studied plant. In general, terpenes with a high percentage are the main components that determine the biological activity of the plant. Their predominance indicates a high pharmacological potential of the *A. terrae-albae* species.

The results of this work show that the ethanol extract of *A. terrae-albae* is rich in biologically active compounds, with a predominantly terpene nature. The high content of identified mono- and sesquiterpenes confirms the specificity of the essential oil and secondary metabolite profile of the species and allows it to be considered as a promising source of raw materials for pharmacological studies.

Thus, the GC–MS results showed that the composition of *A. terrae-albae* is rich in terpenes, and the 17 terpene compounds identified determine the phytochemical and pharmacological potential of the plant. The relative distribution and structural features of terpenes are presented in a diagram, and the obtained data allow us to consider the plant as a promising source of biologically active natural compounds.

As a result of GC–MS analysis, a total of 46 compounds were identified from the extract. Of these, 17 compounds are of terpene nature, which accounts for 36.96% of the total composition. In particular, 8 monoterpenes (17.39%), 8 sesquiterpenes (17.39%) and 1 triterpenoid – Ursolic acid (2.17%) were identified. The results obtained indicate

that the studied extract is rich in terpenes and its biological activity may be associated with these compounds.

Conclusion. The study conducted comprehensively analyzed the chemical composition and biological activity of the ethanol extract of *A. terrae-albae*. The results showed that this plant is rich in biologically active compounds, including terpene compounds.

Initial IR spectroscopic screening revealed absorption bands characteristic of functional groups commonly found in plant terpenoid compounds, namely hydroxyl (–OH), carbonyl (C=O), as well as C=C and C–O bonds.

As a result of GC–MS analysis, a total of 46 organic compounds were identified, 17 of which were attributed to the terpene nature. In particular, monoterpenes, sesquiterpenes and one triterpenoid were identified.

The main components were 2-cyclohexene-1-methanol derivative (17.33%), camphor (13.19%), cyclohexane derivative (9.71%) and octyl butanoate (8.29%). It was found that the terpene profile consists mainly of oxygenated monoterpenes, which is a chemotaxonomic characteristic of the *Artemisia* genus. In addition, the discovery of the urs-20-en-3-ol triterpenoid, which belongs to the ursane family, indicated the presence of high molecular weight terpenes.

The antimicrobial activity evaluation revealed that the extract exhibited moderate activity against Gram-positive bacteria. The minimum inhibitory concentration (MIC) against *S. aureus* ATCC 6538 and *B. subtilis* ATCC 6633 strains ranged from 12.5–50 µg/ml. A weak effect was observed against the fungus *C. albicans* ATCC 10231 (MIC = 50 µg/ml). Gram-negative bacteria (*E. coli* ATCC 25922 and *P. aeruginosa* ATCC 27853) showed relative resistance. This antimicrobial effect may be due to the combined action of oxygenated monoterpenes, sesquiterpene lactones and phenolic compounds.

The *A. salina* test system was used to determine the toxicity level. As a result, the half-lethal dose (LD₅₀) of the extract was 90.6 µg/ml, which indicates a lower toxicity compared to the standard drug dactinomycin (LD₅₀ = 45.8 µg/ml).

Overall, the results obtained demonstrate that *A. terrae-albae* is rich in terpenes and is a promising source of natural raw materials with antimicrobial activity. In the future, the isolation of individual active components, the study of their mechanisms of action, and testing in in vivo models will allow us to further explore the pharmacological potential of this plant.

References

- Abad M.J., Bedoya L.M., Apaza L., Bermejo P. (2012) The *Artemisia* L. Genus: A Review of Bioactive Essential Oils. *Molecules*, 17. – P. 2542-2566. (in Eng.).
- Dyusebaeva G.M., Kudaibergenova S.K., and Bekmuratova Z.K. (2024). Chemical constituents of liposoluble extract of *Artemisia terrae-albae*. Reports of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. – No. 2(360). – P. 83-93. <https://journals.nauka-nanrk.kz/reports-science/article/view/5788> (in Eng.).
- Dyusebaeva G.M., Zhumanova G.M., and Kudaibergenova S.K. (2025). Green synthesis and characterization of silver nanoparticles using *Artemisia terrae-albae* extracts and evaluation of their cytogenotoxic effects. *International Journal of Molecular Sciences*. – No. 26(15). – P. 7499. <https://doi.org/10.3390/ijms26157499> (in Eng.).



European Scientific Cooperative on Phytotherapy (2003) E/S/C/O/P Monographs: The Scientific Foundation for Herbal Medicinal Products; European Scientific Cooperative on Phytotherapy: Exeter, UK. – P. 1-147. (in Eng.).

Ivanescu B., Miron A., Corciova A. (2015) Sesquiterpene Lactones from *Artemisia* Genus: Biological Activities and Methods of Analysis. *J. Anal. Methods Chem.* – P. 1–21. (in Eng.).

Jalmakhanbetova R.I., Adekenov S. M. (2007) Chemical study of *Artemisia filatovae* // *Chemistry of Natural Compounds.* – Vol. 43. – No. 3. – P. 347-348. (in Eng.).

Jalmakhanbetova R.I., Suleimen Ye.M., Oyama M., Elkaeed E.B., Eissa I.H., Suleimen R.N., Metwally A.M., Ishmuratova M.Yu. (2021) Isolation and In Silico Anti-COVID-19 Main Protease (Mpro) Activities of Flavonoids and a Sesquiterpene Lactone from *Artemisia sublessingiana*. *Journal of Chemistry.* ID 5547013. <https://doi.org/10.1155/2021/5547013> (in Eng.).

Koul B., Taak P., Kumar A., Khatri T., Sanyal I. (2018) The *Artemisia* Genus: A Review on Traditional Uses, Phytochemical Constituents, Pharmacological Properties and Germplasm Conservation. *J. Glycom. Lipidom.* – No. 7. – P. 142-149. (in Eng.).

Krebs S., Omer B., Omer T.N., Fliser D. (2010) Wormwood (*Artemisia absinthium*) for Poorly Responsive Early-Stage IgA Nephropathy: A Pilot Uncontrolled Trial. *Am. J. Kidney Dis.* – No. 56. – P. 1095-1099. (in Eng.).

Ksibi N., Saada M., Yeddes W., Limam H., Tammar S., Wannes W.A., Labidi N., Hessini K., Dakhlaoui S., Frouja O. et al., (2022) Phytochemical Profile, Antioxidant and Antibacterial Activities of *Artemisia absinthium* L. Collected from Tunisian Regions. *J. Mex. Chem. Soc.* – No. 66. – P. 312-329. <https://doi.org/10.29356/jmcs.v66i3.1709> (in Eng.).

Meyer B.N., Ferrigni N.R., Putnam J.E., Jacobsen L.B., Nichols D.E., and McLaughlin J.L. (1982). Brine shrimp: A convenient general bioassay for active plant constituents. *Planta Medica.* – No. 45(5). – P. 31-34. <https://doi.org/10.1055/s-2007-971236> (in Eng.).

Nigam M., Atanassova M., Mishra A.P., Pezzani R., Devkota H.P., Plygun S., Salehi B., Setzer W.N., Sharifi-Rad J. (2019) Bioactive compounds and health benefits of *Artemisia* species. *Nat. Prod. Commun.* – No. 14. – P. 1934578–19850354. <https://doi.org/10.1177/1934578X19850354> (in Eng.).

Sagyndykova M., Imanbayeva A., Gassanova G., Ishmuratova M. (2024) Current Status and Resources of *Alhagi pseudalhagi* (Fabaceae) in the Atyrau Region, Western Kazakhstan. *Diversity.* – No. 16. – P. 219. (in Eng.).

Sampietro D.A., Gomez A. de los A., Jimenez C.M., Lizarraga E.F., Ibatayev Z.A., and Suleimen Y.M. (2016). Chemical composition and antifungal activity of essential oils from medicinal plants of Kazakhstan. *Natural Product Research.* – No. 30(13). – P. 1464-1467. <https://doi.org/10.1080/14786419.2016.1258560> (in Eng.).

Trifan A, Zengin G, Sinan KI et al (2022) Unveiling the phytochemical profile and biological potential of five *Artemisia* species. *Antioxidants* 11. – P. 1017. <https://doi.org/10.3390/antiox11051017> (in Eng.).

Turuspekov Y., Genievskaia Y., Baibulatova A., Zatybekov A., Kotuhov Y., Ishmuratova M., Abugalieva S. (2018) Phylogenetic taxonomy of *Artemisia*, L. species from Kazakhstan based on matK analyses. *Proc. Latv. Acad. Sci.* – No. 72. – P. 29. (in Eng.).

Wang Y., Ma Y. B., Huang X. Y., et al. (2023) Artemleucolides A–L: eudesmane-type sesquiterpenoids from *Artemisia leucophylla* and their antihepatoma cytotoxicity. *Fitoterapia.* – No. 165. – P. 105399. <https://doi.org/10.1016/j.fitote.2022.105399> (in Eng.).

Wu C., Yan Y., Wang Y., Sun P., Qi R. (2020) Antibacterial epoxy composites with addition of natural *Artemisia annua* waste. *e-Polymers.* – No. 20. – P. 262-271. (in Eng.).

Zaman W., Ye J., Saqib S., Liu Y., Shan Z., Hao D., Chen Z., Xiao P. (2021) Predicting potential medicinal plants with phylogenetic topology: Inspiration from the research of traditional Chinese medicine. *J. Ethnopharmacol.* – No. 281. – P. 114515. (in Eng.).

Zhumanova G.M., Dyusebaeva G.M., and Kudaibergenova S.K. (2023). Antimicrobial activity of silver nanoparticles stabilized by liposoluble extract of *Artemisia terrae-albae*. *Processes.* – No. 11(10). – P. 3041. <https://doi.org/10.3390/pr11103041> (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 228–243

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.449>

UDC: 621.355.9:661.666.3
IRSTI: 61.31.59; 61.01.91; 61.31.47

©Kapizov O.S.^{1,3}, Mukhanov D.K.^{1,3}, Dzheldybaeva I.M.², Seisenov E.B.^{1,3},
Akimbayeva A.B.^{1,3*}, 2026.

¹Scientific Center for New Technologies, Almaty, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

³AlAkSan, Almaty, Kazakhstan.

*E-mail: akzhunis.akimbayeva@bk.ru

SUSTAINABLE RECYCLING OF FERROSILICON MACHINING CHIPS FROM METALLURGICAL PLANTS INTO HIGH-PERFORMANCE SILICON–CARBON ANODES

Kapizov Omirzak — PhD, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: ok-sir@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1979-7625>;

Mukhanov Dauren — PhD, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: dd_511@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-1645-8625>;

Dzheldybaeva Indira — PhD, Associate Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: Jeldybaeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1524-4046>;

Seisenov Yerzhan — Master's student, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: erzhan_seisenov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-8336-3121>;

Akimbayeva Akzhunis — Junior Researcher, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: akzhunis.akimbayeva@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0003-6554-8181>.

Abstract. Particular attention is paid to modern battery technologies, including lithium-ion, sodium-ion, and magnesium-ion systems, whose development is related to the growing demand for efficient, safe, and economically accessible energy storage. In this context, sodium-ion and magnesium-ion batteries are considered as promising alternatives to lithium-ion technologies owing to the wider availability of raw materials and potential safety advantages. A significant part of the work is devoted to silicon–carbon (Si/C) composites, which are regarded as one of the most promising directions in the design of next-generation anode materials. Silicon has an extremely high theoretical capacity, exceeding that of graphite; however, its practical application is limited by volume changes during lithiation, mechanical degradation of the electrode structure, and instability of the solid electrolyte interphase (SEI). The introduction of a carbon

phase can improve electronic conductivity, mitigate silicon volume expansion, and stabilize interfacial processes during cycling. The relevance of the study is determined by the need to solve two interrelated problems: reducing the amount of metallurgical silicon-containing waste and developing high-capacity, stable, and cost-effective anode materials for lithium-ion batteries. The scientific problem is that the direct use of ferrosilicon shavings is complicated by iron-containing phases, surface impurities, and the electrochemical instability of silicon during lithiation. The aim of this work is to develop an approach for obtaining a silicon–carbon composite anode from ferrosilicon shavings through preliminary purification, high-energy mechanochemical milling, selective acid treatment, carbon compositing, and electrochemical testing. The novelty of the study lies in using large-tonnage ferrosilicon waste as a silicon source without producing high-purity primary silicon. The practical significance is associated with increasing the added value of metallurgical waste, reducing raw material costs, and supporting circular economy principles in energy storage technologies.

Keywords: ferrosilicon, metallurgical waste, nanosilicon, Si/C composites, lithium-ion batteries

Financing: This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR28713383).

For citations: Kapizov O.S., Mukhanov D.K., Dzheldybaeva I.M., Seisenov E.B., Akimbayeva A.B. Sustainable Recycling of Ferrosilicon Machining Chips from Metallurgical Plants into High-Performance Silicon–Carbon Anodes. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 228–243. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.449>

©Капизов О.С.^{1,3}, Муханов Д.К.^{1,3}, Джелдыбаева И.М.², Сейсенов Е.Б.^{1,3}, Акимбаева А.Б.^{1,3*}, 2026.

¹«Scientific Center for New Technologies» ЖШС, Алматы, Қазақстан;

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

³AlAkSan, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: akzhunis.akimbayeva@bk.ru

МЕТАЛЛУРГИЯЛЫҚ ЗАУЫТТАРДЫҢ ФЕРРОСИЛИЦИЙ ЖОҢҚАЛАРЫН ЖОҒАРЫ ӨНІМДІ КРЕМНИЙ-КӨМІРТЕКТІ АНОДТАРҒА ТҰРАҚТЫ ҚАЙТА ӨНДЕУ

Капизов Өмірзақ — PhD, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Қазақстан,
E-mail: ok-sir@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1979-7625>;

Муханов Даурен — PhD, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Қазақстан,
E-mail: dd_511@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-1645-8625>;

Джелдыбаева Индира — PhD, ассоциированный профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: Jeldybayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1524-4046>;

Сейсенов Ержан — магистрант, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Қазақстан, E-mail: erzhan_seysenov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-8336-3121>;

Акимбаева Ақжүніс — кіші ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Қазақстан,

E-mail: akzhunis.akimbayeva@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0003-6554-8181>.

Аннотация. Қазіргі аккумуляторлық технологияларға, соның ішінде литий-ионды, натрий-ионды және магний-ионды жүйелерге ерекше назар аударылды. Осыған байланысты натрий-ионды және магний-ионды аккумуляторлардың литий-ионды технологияларға қарағанда қолжетімді әрі қауіпсіз балама ретінде даму перспективалары қарастырылды. Жұмыстың едәуір бөлігі жаңа буын анодтық материалдарын дамытудың ең перспективалы бағыттарының бірі ретінде қарастырылатын кремний-көміртекті (Si/C) композиттерге арналған. Кремнийдің теориялық сыйымдылығы өте жоғары және ол графит көрсеткіштерінен едәуір асып түседі, алайда оны практикалық қолдану литийлену кезіндегі айтарлықтай көлемдік өзгерістермен, құрылымның механикалық бұзылуымен және қатты электролиттік интерфейстің (SEI) тұрақсыздығымен шектеледі. Көміртекті фазаны енгізу электрондық өткізгіштікті арттыруға, кремнийдің көлемдік деформацияларын өтеуге және фазааралық процестерді тұрақтандыруға мүмкіндік береді. Зерттеудің өзектілігі өзара байланысты екі міндетті қатар шешу қажеттілігімен айқындалады: металлургиялық кремнийқұрамды қалдықтардың көлемін азайту және литий-ионды аккумуляторлар үшін сыйымдылығы жоғары, тұрақты әрі экономикалық тұрғыдан қолжетімді анодтық материалдарды әзірлеу. Ғылыми мәселе мұндай шикізатты тікелей пайдаланудың темірқұрамды фазалардың, беттік ластанулардың болуына және литийлену кезіндегі кремнийдің тұрақсыздығына байланысты күрделенуімен сипатталады. Жұмыстың мақсаты — ферросилиций жоңқасынан кремний-көміртекті композитті анод алу тәсілін әзірлеу, ол алдын ала тазарту, жоғары энергиялы механохимиялық ұнтақтау, селективті қышқылдық өңдеу, көміртекті композиттеу және электрохимиялық сынақ жүргізу кезеңдерін біріктіру арқылы жүзеге асырылады. Зерттеудің жаңалығы жоғары таза бастапқы кремний алу сатысынсыз, кремний көзі ретінде ірі тоннажды ферросилиций қалдығын пайдаланумен, сондай-ақ көміртекті фаза мен FeSi_x-компоненттері өткізгіш және буферлік функцияларды атқаратын композит қалыптастырумен байланысты. Жұмыстың практикалық маңызы металлургиялық қалдықтардың қосылған құнын арттырумен, анодтық материалдарға арналған шикізат шығындарын төмендетумен және энергия сақтау жүйелері саласында циркулярлық экономиканы дамытуға үлес қосумен айқындалады.

Түйін сөздер: ферросилиций, металлургиялық қалдықтар, нанокремний, Si/C композиттері, литий-ионды аккумуляторлар

©Капизов О.С.^{1,3}, Муханов Д.К.^{1,3}, Желдыбаева И.М.², Сейсенов Е.Б.^{1,3},
Акимбаева А.Б.^{1,3*}, 2026.

¹ТОО «Scientific Center for New Technologies», Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

³AlAkSan, Алматы, Казахстан.

*E-mail: akzhunis.akimbayeva@bk.ru

УСТОЙЧИВАЯ ПЕРЕРАБОТКА СТРУЖКИ ФЕРРОСИЛИЦИЯ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ЗАВОДОВ В ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНЫЕ АНОДЫ

Капизов Омирзак — PhD, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Казахстан,
E-mail: ok-sir@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1979-7625>;

Муханов Даурен — PhD, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Казахстан,
E-mail: dd_511@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-1645-8625>;

Желдыбаева Индира — PhD, ассоциированный профессор, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: Jeldybayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1524-4046>;

Сейсенов Ержан — магистрант, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Казахстан,
E-mail: erzhan_seysenov@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-8336-3121>;

Акимбаева Акжунис — младший научный сотрудник, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Казахстан, E-mail: akzhunis.akimbayeva@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0003-6554-8181>.

Аннотация. В статье рассматриваются возможности устойчивой переработки ферросилициевой стружки металлургических предприятий в высокоэффективные кремний-углеродные (Si/C) анодные материалы для литий-ионных аккумуляторов. Особое внимание уделено современным аккумуляторным технологиям, включая литий-ионные, натрий-ионные и магний-ионные системы, а также перспективам разработки более доступных, безопасных и ресурсосберегающих материалов для систем накопления энергии. Значительная часть исследования посвящена Si/C-композитам, рассматриваемым как одно из наиболее перспективных направлений развития анодных материалов нового поколения. Кремний обладает чрезвычайно высокой теоретической ёмкостью, значительно превышающей показатели графита, однако его практическое применение ограничено существенными объёмными изменениями при литировании, механической деградацией структуры и нестабильностью твёрдого электролитного интерфейса (SEI). Введение углеродной фазы позволяет повысить электронную проводимость, компенсировать объёмные деформации кремния и стабилизировать межфазные процессы. Актуальность исследования обусловлена необходимостью одновременного решения двух взаимосвязанных задач: сокращения объёмов металлургических кремнийсодержащих отходов и разработки более ёмких, стабильных и экономически доступных анодных материалов для литий-ионных аккумуляторов. Научная проблема заключается в том, что прямое использование ферросилициевой стружки осложняется присутствием железосодержащих фаз, поверхностных загрязнений

и нестабильностью кремния при литировании. Целью работы является разработка подхода к получению кремний-углеродного композитного анода из ферросилициевой стружки путём сочетания предварительной очистки, высокоэнергетического механохимического измельчения, селективной кислотной обработки, углеродного композитирования и электрохимического тестирования. Новизна исследования состоит в использовании крупнотоннажного ферросилициевого отхода в качестве исходного источника кремния без стадии получения высокочистого первичного кремния, а также в формировании композита, в котором углеродная фаза и FeSi_x -компоненты выполняют проводящую и буферную функции. Практическая значимость работы связана с повышением добавленной стоимости металлургических отходов, снижением сырьевых затрат на производство анодных материалов и развитием принципов циркулярной экономики в области систем накопления энергии.

Ключевые слова: Ферросилиций, металлургические отходы, нанокремний, Si/C композиты, литий-ионные аккумуляторы

Введение. Горно-металлургическая промышленность является одним из крупнейших источников техногенных отходов в мире. По оценкам, операции по добыче и переработке металлических руд ежегодно генерируют десятки миллиардов тонн отходов, включая хвосты обогащения, шлаки, пыли и металлическую стружку (Seisenova et al., 2025).

В России объём промышленных и производственных отходов в последние годы превышает 9 млрд тонн в год, при этом значительная доля приходится на предприятия горнодобывающей отрасли и чёрной/цветной металлургии. В Республике Казахстан, где активно развивается ферросплавное производство, также накапливаются многотоннажные отходы. Крупные предприятия в Павлодарской, Карагандинской и Восточно-Казахстанской областях производят сотни тысяч тонн ферросилиция в год, генерируя при этом стружку, лом и другие кремнийсодержащие отходы механической обработки (Jin et al., 2025).

Особую проблему представляет утилизация стружки металлургических заводов, образующейся при производстве и механической обработке ферросилиция (FeSi с содержанием кремния 45–75 %). Традиционные методы переработки - возврат в плавку, использование в строительных материалах или захоронение - не обеспечивают полной экологической безопасности и не создают высокой добавленной стоимости. Стружка часто загрязнена маслами, окалиной и примесями железа, что затрудняет её повторное использование и приводит к накоплению в отвалах, загрязнению почв и водных ресурсов. В условиях глобального перехода к циркулярной экономике и ужесточения экологического законодательства такие отходы требуют инновационных, высокотехнологичных решений по переработке (Fafure et al., 2024).

Параллельно с ростом объёмов промышленных отходов стремительно развивается рынок систем накопления энергии. Литий-ионные аккумуляторы играют ключевую роль в электромобилях, возобновляемой энергетике и стационарных

хранилищах. Однако традиционные графитовые аноды достигли своего практического предела удельной ёмкости - около 372 мА·ч/г. Кремний выступает одной из наиболее перспективных альтернатив благодаря чрезвычайно высокой теоретической ёмкости - до 4200 мА·ч/г (для фазы $\text{Li} \square \cdot \square \text{Si}$), что более чем в 10 раз превышает показатели графита. Кроме того, кремний характеризуется низким рабочим потенциалом, высокой распространённостью в земной коре (второй по распространённости элемент после кислорода) и относительно низкой (Jin et al., 2017; U.S. Geological Survey, 2026).

Несмотря на очевидные преимущества, широкому коммерческому внедрению кремниевых анодов препятствуют серьёзные технические вызовы. Основной из них - значительное объёмное расширение (до 300–400 %) при литировании, приводящее к растрескиванию частиц активного материала, разрушению структуры электрода, непрерывному росту слоя SEI (solid electrolyte interphase) и быстрой деградации ёмкости при циклировании. Дополнительные проблемы включают низкую собственную электропроводность кремния и нестабильность интерфейса с электролитом (Meng et al., 2025).

Для преодоления указанных ограничений широко используются стратегии наноструктурирования кремния и создания композитных материалов, в частности углеродно-кремниевых (Si/C) композитов. Наноразмерные частицы Si уменьшают внутренние механические напряжения, а углеродное покрытие или матрица выполняет роль буферного слоя, повышает электронную проводимость и стабилизирует формирование SEI-слоя. Такие композиты в лабораторных условиях демонстрируют высокую удельную ёмкость (часто >1500 мА·ч/г) и приемлемую циклическую стабильность.

Дополнительно следует отметить, что переработка металлургических отходов в функциональные материалы для систем накопления энергии соответствует современным направлениям устойчивого развития и циркулярной экономики. В отличие от традиционных способов утилизации, при которых отходы используются в низкотехнологичных областях или направляются на повторную плавку, получение Si/C-композитов позволяет значительно повысить добавленную стоимость вторичного сырья. Такой подход особенно актуален для стран с развитой горно-металлургической промышленностью, где накопление техногенных отходов создаёт экологическую нагрузку и требует внедрения новых технологических решений. Использование стружки ферросилиция в качестве источника кремния позволяет не только сократить объёмы промышленных отходов, но и снизить зависимость от дорогостоящего высокочистого кремния, применяемого в производстве анодных материалов. Существующие подходы к получению нано-кремния в основном опираются на переработку отходов фотоэлектрической промышленности (PV-kerf waste - шлам от резки кремниевых слитков для солнечных панелей). Эти технологии включают кислотное выщелачивание, механохимическое измельчение и последующее углеродное покрытие. Однако объём PV-отходов относительно ограничен, их логистика дорогостояща, а процесс часто требует дополнительных стадий глубокой очистки (Heintz et al., 2023).

В отличие от них, стружка ферросилиция металлургических заводов представляет собой более доступное, крупнотоннажное и локально сосредоточенное сырьё, особенно в регионах с развитой ферросплавной промышленностью (Казахстан, Россия, Китай). Прямая переработка такой стружки позволяет избежать энергоёмких стадий переплавки и получения первичного кремния, существенно снижая себестоимость конечного продукта и его углеродный след.

Целью настоящей работы является разработка и масштабирование технологии переработки стружки металлургического завода (отходов ферросилиция) в высокоэффективные углеродно-кремниевые композитные материалы для анодов систем накопления энергии.

Для достижения цели поставлены следующие задачи:

- исследовать состав и свойства стружки FeSi как вторичного сырья;
- разработать технологическую схему, включающую механохимическое измельчение, селективную нанопурификацию и углеродное покрытие;
- оценить электрохимические характеристики полученных Si/C-композитов;
- проанализировать возможности масштабирования процесса от лабораторного до промышленного уровня с проведением технико-экономической и экологической оценки.

Новизна работы заключается в предложении прямой переработки промышленной стружки ферросилиция без дополнительных стадий плавки или получения первичного кремния. Такой подход одновременно решает экологические проблемы горно-металлургической отрасли и создаёт конкурентоспособные материалы для «зелёной» энергетики, способствуя развитию циркулярной экономики в регионах Центральной Азии (Mutushev et al., 2025; Seisenova et al., 2025).

Переработка кремниевых отходов фотоэлектрической промышленности (PV silicon scrap) активно изучается в последние годы как перспективный источник сырья для производства анодных материалов литий-ионных аккумуляторов. Основным видом таких отходов является kerf loss (шлам или порошок кремния, образующийся при алмазной резке кремниевых слитков для солнечных панелей). Ежегодно в мире генерируется более 200 000 тонн такого отхода, что составляет до 30–40 % от массы кремниевых слитков (Søiland et al., 2024; Yu et al., 2023).

Исследователи предлагают различные способы утилизации PV-kerf waste: кислотное выщелачивание для удаления примесей, механохимическое измельчение и последующее создание Si/C-композитов. Получили Si@C-композит с использованием полипиррола в качестве углеродного прекурсора, достигнув обратимой ёмкости 1436 мА·ч/г при 0,1 А/г и улучшенной циклической стабильности по сравнению с чистым кремнием (Ji et al., 2023). Другие работы демонстрируют получение yolk-shell структур Si@void@C или пористых композитов с ёмкостью 800–1100 мА·ч/г после 100–200 циклов (Ji et al., 2023; Huang et al., 2023).

Несмотря на хорошие электрохимические характеристики, объём PV-отходов ограничен, их логистика дорогостояща, а материал часто требует глубокой очистки от SiC, металлов и органических загрязнений (Jin et al., 2017).

Значительный интерес представляет метод nanopurification низкосортного ферросилиция для получения высокочистого nano-Si. Классическая работа продемонстрировала простой и масштабируемый процесс: высокоскоростное планетарное измельчение (high-energy ball milling) ферросилиция (84 % Si) с последующим селективным кислотным травлением ($\text{HF} + \text{HNO}_3$ или HCl). В результате чистота кремния повышалась с 84 % до 99,999 % при размере частиц менее 100 нм. Примеси (Fe, Al, Ca) концентрируются на поверхности наночастиц из-за механической слабости impurity-rich зон и эффективно удаляются кислотами. Полученный nano-Si показал высокую обратимую ёмкость (1755 $\text{mA} \cdot \text{ч/г}$) и сохранение ёмкости 73 % после 500 циклов в литий-ионных ячейках. Этот подход позже был адаптирован для Fe-Si сплавов с содержанием Si 73–84 %, подтвердив его потенциал для низкосортного сырья (Zong et al., 2015; Zhu et al., 2015).

Способы создания углеродно-кремниевых (Si/C) композитов на основе переработанного кремния включают несколько распространённых методов:

- Пиролиз органических прекурсоров (глюкоза, полипиррол (PPy), полиакрилонитрил (PAN), поливинилпирролидон) - простой и относительно недорогой способ формирования аморфного или графеноподобного углеродного покрытия.

- Химическое осаждение из газовой фазы (CVD) - позволяет получать тонкое (5–10 нм) графеноподобное или многослойное углеродное покрытие с высокой проводимостью, но отличается высокой стоимостью и сложностью масштабирования.

- Spray drying (распылительная сушка) с последующим пиролизом - обеспечивает получение сферических частиц с равномерным распределением Si в углеродной матрице, хорошую масштабируемость и контроль морфологии (Fafure et al., 2024; Jin et al., 2025).

- Другие методы: hydrothermal carbonization, electrospinning и aerosol-assisted процессы.

Эти подходы позволяют буферизовать объёмное расширение кремния, повысить электронную проводимость и стабилизировать SEI-слой, достигая ёмкости 1000–2000 $\text{mA} \cdot \text{ч/г}$ и улучшенной циклической стабильности.

Несмотря на прогресс, большинство исследований сосредоточено на переработке PV-kerf waste или полупроводникового кремниевого лома высокой чистоты. Примеры масштабируемых технологий существуют (spray drying + пиролиз, упрощённые кислотные процессы), однако они сталкиваются с ограничениями: высокая стоимость логистики PV-отходов относительно небольшой объём доступного сырья и высокие энергозатраты на некоторых этапах (Yu et al., 2023; Mottaghi et al., 2025).

Пробелы в исследованиях остаются значительными. Недостаточное внимание уделяется прямой переработке стружки и отходов именно металлургических заводов, в частности ферросилиция FeSi с содержанием кремния 45–75 %. Такой материал является крупнотоннажным, локально доступным (особенно в Казахстане, России и Китае), но содержит больше металлических примесей (Fe, Al,

Ca, Mn), что требует адаптации процессов нанопурификации и композитирования. Практически отсутствуют работы по комплексному масштабированию технологии от лабораторного уровня до промышленного с использованием именно металлургической стружки, включая технико-экономический анализ, регенерацию кислот и интеграцию с действующими ферросплавными производствами. Предлагаемая работа направлена на заполнение этого пробела.

Материалы и основные методы. Выбор ферросилициевой стружки в качестве исходного сырья обусловлен её доступностью, высоким содержанием кремния и возможностью вовлечения металлургических отходов во вторичный оборот. Железосодержащие фазы в составе отхода рассматривались не только как примеси, но и как потенциальные компоненты, способные после механохимической обработки и углеродного композитирования улучшать электронную проводимость материала. Предварительная очистка сырья для удаления масел, окалины и поверхностных загрязнений, которые могут снижать воспроизводимость измельчения, эффективность кислотной обработки и электрохимические характеристики конечного Si/C-композита. В качестве исходного сырья использовали стружку ферросилиция, полученную от металлургического предприятия. Стружка представляла собой отходы механической обработки ферросилиция марки FeSi45–FeSi75.

Типичный химический состав стружки (по данным рентгенофлуоресцентного анализа и атомно-эмиссионной спектроскопии):

Si: 45–75 мас. % (основной компонент);

Fe: 20–50 мас. %;

● Примеси: Al 0,5–2,0 %, Ca 0,1–1,5 %, Mn 0,1–0,8 %, C ≤ 0,1 %, P и S - следовые количества.

Размер стружки варьировался от 5 до 50 мм в длину при толщине 0,1–2 мм. Материал был загрязнён технологическими примесями: минеральными маслами (от механической обработки), окалиной (Fe_2O_3 , Fe_3O_4) и поверхностными оксидами кремния (SiO_2). Удельная поверхность исходной стружки составляла менее $1 \text{ м}^2/\text{г}$. Перед использованием стружку хранили в сухом помещении для предотвращения дополнительного окисления (Mutushev et al., 2025). Процесс реализован по принципу «upcycling» и ориентирован на максимальное использование отходов с минимальными энергозатратами и возможностью регенерации реагентов. Все операции, кроме сушки и пиролиза, проводили в инертной атмосфере аргона или азота для минимизации окисления (Wang et al., 2020).

Стружку очищали от масла и окалины путём магнитной сепарации и промывки в органических растворителях при ультразвуковом воздействии частота 40 кГц, 30–60 мин. Далее материал промывали деионизированной водой до нейтрального pH и сушили в вакуумном сушильном шкафу при 120–150 °C в течение 8–12 часов. После подготовки содержание влаги не превышало 0,5 мас. %.

Высокоскоростное механохимическое измельчение проводили в планетарной шаровой мельнице. Параметры процесса:

● Соотношение шары: материал - 10:1–20:1 (шары из циркония, диаметр 5–10 мм);

- Скорость вращения - 800 об/мин;

В результате получали порошок FeSi с размером частиц 100–500 нм и значительно увеличенной удельной поверхностью. Высокая энергия механического воздействия способствовала разрушению кристаллической решётки и концентрации примесей на поверхности частиц, что облегчало последующую нанопурификацию (Pillai et al., 2022).

Нанопурификация проводили для селективного удаления железа и других металлических примесей. Измельчённый порошок (5–10 г) диспергировали в деионизированной воде или этаноле с помощью ультразвука (30–60 мин).

Основной состав травильного раствора:

- 0,5–2 М HF + 3–6 М HCl;
- Альтернативный вариант: 4–6 М HCl + 5–10 % H₂O₂.

Условия процесса:

- Температура - 50–80 °C (оптимально 60–70 °C);
- 1–4 часа при интенсивном перемешивании (300–500 об/мин) и периодическом ультразвуковом воздействии;

После суспензию фильтровали, осадок многократно промывали деионизированной водой до нейтрального pH и этанолом, затем сушили в вакууме при 80–110 °C. Ожидаемая чистота кремния после этапа - 98–99,9 %, размер пористых наночастиц Si - 50–200 нм, выход Si - 85–92 %.

Углеродное покрытие и композитирование. Для получения Si/C-композита использовали два основных подхода:

1. Пиролиз органических прекурсоров (основной метод): Пористый nano-Si смешивали с углеродным прекурсором в массовом соотношении Si : C-прекурсор = 70:30 – 90:10. Смесь сушили и подвергали пиролизу в трубчатой печи в атмосфере аргона или азота при 700–900 °C в течение 2–4 часов (скорость нагрева 5 °C/мин).
2. Химическое осаждение из газовой фазы (CVD): использовали метан или ацетилен в качестве углеродного источника при 800–1000 °C, толщина покрытия - 5–10 нм.

Полученный композит содержал 70–90 мас. % Si и обладал улучшенной электронной проводимостью и буферными свойствами.

В настоящей работе термин «углеродное покрытие» используется для обозначения углеродсодержащей фазы, сформированной в результате пиролиза органического прекурсора на поверхности и в межчастичном пространстве Si/FeSi_x-частиц. С учётом данных ПЭМ корректнее рассматривать эту фазу не как идеально сплошную оболочку вокруг каждой частицы, а как углеродную матрицу/покрывающий слой, на котором частицы кремнийсодержащей фазы распределены и частично сорбированы. Именно такая углеродная фаза повышает электронную проводимость, ограничивает прямой контакт активного кремния с электролитом и частично компенсирует механические напряжения при литировании и делитировании (Pillai et al., 2022).

Изготовление электродов и сборка тестовых ячеек. Активный материал (Si/C-композит) смешивали со связующим (карбоксиметилцеллюлоза + полиакриловая

кислота (PAA), 1:1) и проводящей добавкой (Super P или углеродные нанотрубки) в массовом соотношении 80 : 10 : 10. Суспензию наносили на медную фольгу (толщина слоя 100 мкм) и сушили в вакууме при 80–120 °C.

Тестовые ячейки типа CR2032 собирали в перчаточном боксе с инертной атмосферой (H_2O и $\text{O}_2 < 0,1 \text{ ppm}$). В качестве контрэлектрода использовали литиевую фольгу, сепаратора - Celgard 2400, электролита - 1 M LiPF_6 в смеси EC:DEC:EMC (1:1:1) с добавкой 5–10 % FEC.

Результаты. Морфологию и структуру материалов исследовали с помощью:

- Сканирующей электронной микроскопии марка Quattro FESEM (SEM) и просвечивающей электронной микроскопии Quattro FESEM (TEM);

- Рентгеновской дифракции (XRD) - для фазового состава;

- Методом БЭТ (BET) - для определения удельной поверхности и пористости.

Электрохимические характеристики оценивали на автоматическом потенциостате/гальваностате:

- Циклическая вольтамперометрия (CV);

- Гальваностатический заряд-разряд (GCD) в диапазоне потенциалов 0,01–1,5 В (vs. Li/Li^+);

- Электрохимическая импедансная спектроскопия (EIS) в диапазоне частот 0,01 Гц – 100 кГц.

Все измерения проводили при комнатной температуре. Ёмкость рассчитывали относительно массы активного материала Si/C.

Технологический процесс состоял из пяти основных последовательных этапов: подготовка сырья → высокоскоростное механохимическое измельчение → селективная нанопурификация (acid etching) → углеродное покрытие и композитирование → изготовление электродов и электрохимическое тестирование. Схематическое изображение последовательности синтеза FSC-композита приведено на рисунке 1.

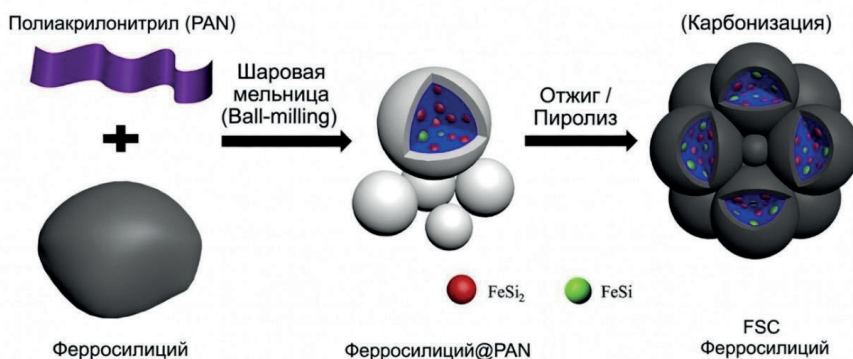


Рисунок 1. Схематическое изображение процесса синтеза FSC-композита.

Рентгенофазовый и Raman-анализ (рисунок 2) подтверждают многокомпонентную природу FSC-композита. На рентгенограммах должны

быть сопоставлены пики кристаллического Si и железосодержащих силицидных фаз FeSi_x с исходным ферросилицием; это для подтверждения фазового состава продукта после механохимической обработки и карбонизации. Raman-спектры используются для подтверждения углеродной фазы: наличие D- и G-полос свидетельствует о формировании дефектной/аморфной углеродной структуры, которая участвует в повышении электронной проводимости композита.

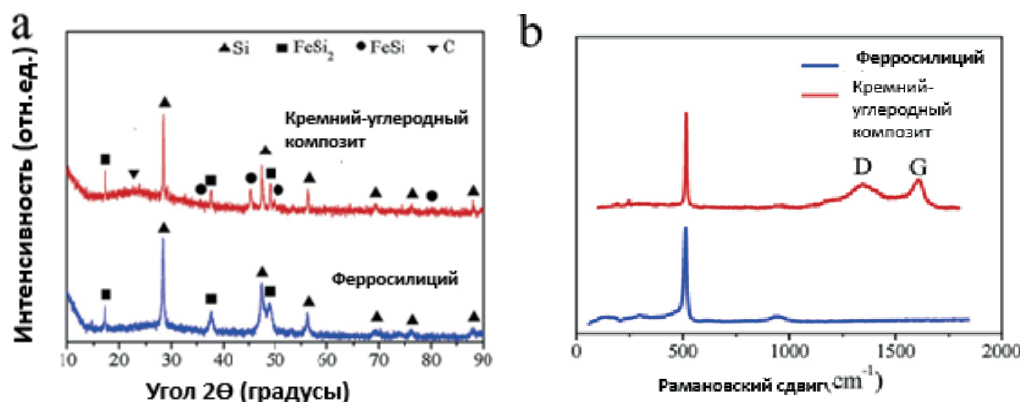


Рисунок 2. (а) Рентгенограммы дифракции FSC и ферросилиция, и (б) спектры Рамана FSC и ферросилиция полученные на портативном Raman-спектрометре Bruker BRAVO (785/852 нм, Duo LASER™, диапазон 300–3200 cm^{-1}).

Термогравиметрические данные рисунок 3 следует использовать как количественное подтверждение содержания углеродной фазы. Потеря массы в области окисления углерода отражает долю углеродного компонента, а остаточная масса после нагрева связана с образованием оксидных продуктов кремний- и железосодержащих фаз. Поэтому TGA вместе с XRD, Raman и EDS, чтобы подтвердить не только морфологию, но и состав полученного FSC-композита.

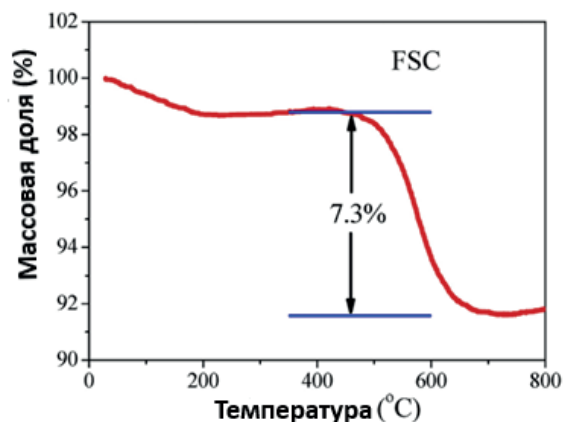


Рисунок 3. Результаты TGA материалов FSC в воздушной атмосфере при скорости нагрева 10 $^{\circ}\text{C}/\text{мин}$.

Электрохимические характеристики FSC-анода представлены на рисунке 4. Циклическая вольтамперометрия (рисунок 4а) демонстрирует типичные процессы литирования и делиитирования кремнийсодержащего анода. В первом катодном цикле широкий сигнал в области около 0,6–0,8 В связан с формированием твёрдого электролитного интерфейса (SEI), а процессы при потенциалах ниже 0,1 В соответствуют образованию литий-силицидных фаз Li_xSi . В последующих циклах частичное наложение кривых указывает на стабилизацию межфазного слоя и повышение обратимости электрохимических процессов. Профили заряда-разряда (рисунок 4б) показывают характерные плато кремниевого анода, а циклические испытания (рисунок 4с, d) подтверждают более устойчивое сохранение ёмкости FSC по сравнению с исходным ферросилицием и коммерческим Si. Улучшение связано не с одной структурной особенностью, а с совместным действием активной кремнийсодержащей фазы, FeSi_x -компонентов и углеродной матрицы/покрывающего слоя. Углеродная фаза повышает электронную проводимость и стабилизирует SEI, тогда как FeSi_x -фазы могут способствовать сохранению механического контакта и снижению деградации частиц при циклировании.

Скоростные характеристики (рисунок 4е) демонстрируют закономерное снижение удельной ёмкости при увеличении плотности тока и восстановление ёмкости при возврате к малым токам, что указывает на сохранение проводящей сети в композите. Диаграммы Найквиста (рисунок 4ф) имеют полуокружность в высоко- и среднечастотной области и наклонный участок в низкочастотной области. При моделировании использована эквивалентная схема, включающая R_s - сопротивление электролита и контактов, R_{SEI}/C_{PESEI} - сопротивление и ёмкостно-дисперсионное поведение межфазного SEI-слоя, R_{ct}/C_{PEdl} - сопротивление переноса заряда и двойнослойную ёмкость на границе электрод/электролит, а также элемент Варбурга Z_w , характеризующий диффузионное ограничение переноса Li^+ внутри пористой электродной структуры. Меньший радиус полуокружности для FSC указывает на более низкое сопротивление переноса заряда по сравнению с исходным ферросилицием, что согласуется с ролью углеродной фазы как проводящей матрицы. При увеличении массовой нагрузки активного материала (рисунок 4г) ёмкость снижается умеренно, что подтверждает пригодность FSC для электродов с различной загрузкой активного вещества. По сравнению с литературными аналогами FSC-композит демонстрирует ёмкость, сопоставимую с Si/C-материалами из переработанного кремниевого сырья: для Si/C-материалов из кремниевого шлама резки фотоэлектрических пластин сообщались значения около 1436 $\text{mA}\cdot\text{ч/г}$, для пористых Si@C-архитектур - 800–1100 $\text{mA}\cdot\text{ч/г}$ после 100–200 циклов, а для нанопурифицированного ферросилиция — высокая обратимая ёмкость до 1755 $\text{mA}\cdot\text{ч/г}$ при сохранении 73 % после 500 циклов. На этом фоне преимущество настоящего подхода состоит не только в абсолютной ёмкости, но и в прямом использовании более доступной ферросилициевой стружки без стадии получения первичного высокочистого кремния.

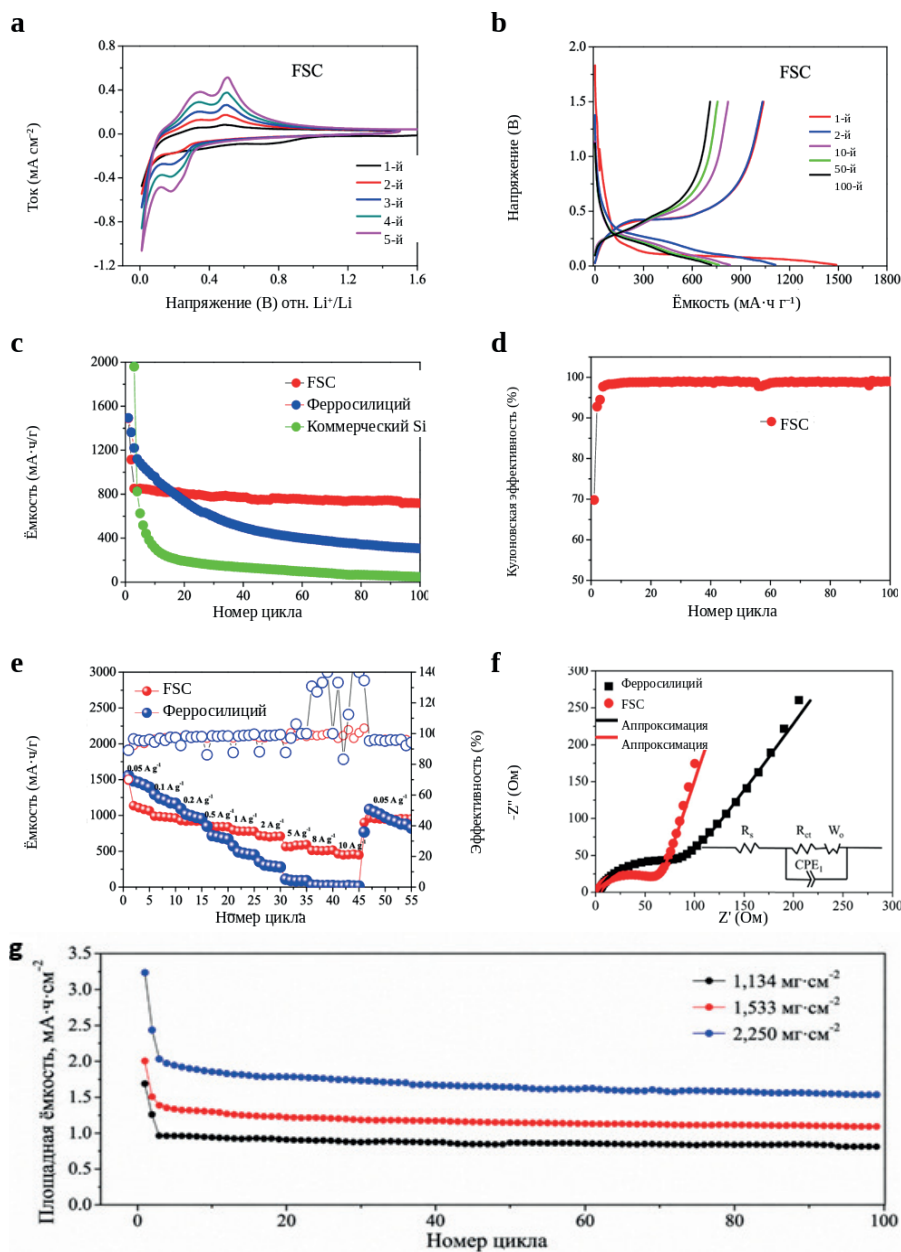


Рисунок 4. Электрохимические характеристики анода FSC. (а) Циклическая вольтамперометрия первых 5 циклов при скорости сканирования 0,1 мВ/с в диапазоне 0,01–1,5 В. (б) Профили заряда/разряда на 1-м, 2-м, 10-м, 50-м и 100-м циклах. (с) Циклическая стабильность FSC, исходного ферросилиция и коммерческого Si при 50 мА/г в первых двух циклах и 500 мА/г в последующих циклах. (д) Кулоновская эффективность анода FSC. (е) Скоростные характеристики FSC и исходного ферросилиция при токовых нагрузках 0,05–10 А/г. (ф) Диаграммы Найквиста электродов FSC и исходного ферросилиция при 1,5 В; на вставке приведена эквивалентная схема моделирования спектров импеданса. (г) Циклические характеристики при различной массовой нагрузке активного материала: 1,134; 1,533 и 2,250 мг·см⁻².

Заключение. В настоящей работе разработан подход к получению FSC-композита с использованием ферросилициевой стружки металлургического происхождения в качестве исходного сырья. Предложенная схема включает предварительную очистку материала, механохимическое измельчение, селективную кислотную обработку, формирование углеродной фазы из органического прекурсора, а также последующую электрохимическую оценку полученного материала в литий-ионных полужульментах. На основании морфологических данных FSC-композит следует рассматривать как систему, состоящую из Si/FeSi_x-содержащих частиц, распределённых на углеродной матрице или частично покрытых углеродной фазой. При этом материал не может быть описан как полностью инкапсулированные частицы, поскольку данные микроскопии указывают на более сложный характер взаимодействия активной фазы с углеродной основой. Электрохимические исследования подтвердили перспективность полученного FSC-композита в качестве анодного материала для литий-ионных аккумуляторов. Начальная разрядная ёмкость материала достигала 1488 мА·ч/г, при этом после 100 циклов сохранялось до 86 % ёмкости. Кроме того, наблюдалось восстановление ёмкости при возврате к меньшим плотностям тока, а также снижение сопротивления переноса заряда по сравнению с исходным ферросилицием. Полученные результаты свидетельствуют о том, что наличие углеродной матрицы или частичного углеродного покрытия способствует повышению электронной проводимости, а Si/FeSi_x-фазы оказывают положительное влияние на структурную устойчивость электрода в процессе циклирования.

Сопоставление полученных электрохимических характеристик с литературными данными показывает, что FSC-композит демонстрирует показатели, сопоставимые с рядом Si/C-анодов, полученных из вторичного кремнийсодержащего сырья. Важным преимуществом предложенного подхода является использование доступной крупнотоннажной ферросилициевой стружки, что позволяет снизить зависимость от дорогостоящего высокочистого кремния и одновременно повысить добавленную стоимость металлургических отходов.

Практическая значимость исследования заключается в возможности вовлечения ферросилициевой стружки в технологическую цепочку получения анодных материалов для литий-ионных аккумуляторов. Такой подход способствует сокращению объёмов техногенных отходов, снижению затрат на сырьевые компоненты и развитию принципов циркулярной экономики. Дальнейшие исследования целесообразно направить на количественное уточнение фазового и элементного состава композита, оптимизацию условий кислотной обработки, оценку возможности регенерации используемых реагентов, повышение начальной кулоновской эффективности, а также испытание материала в полноразмерных конфигурациях для подтверждения его практического потенциала.

References

Fafure A.V., Bem D.B., Kahuthu S.W., Adediran A.A., Bodunrin M.O., Fabuyide A.A., and Ajanaku C. (2024). Advances in silicon–carbon composites anodes derived from agro wastes for applications in

lithium-ion battery: A review. *Heliyon*. – No. 10(11). – P. e31482. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e31482> (in English).

Heintz M.C., Grins J., Jaworski A., Svensson G., Thersleff T., Brant W.R., Lindblad R., Naylor A.J., Edström K., and Hernández G. (2023). Photovoltaic wafering silicon kerf loss as raw material: Example of negative electrode for lithium-ion battery. *ChemElectroChem*. – No. 10(19). – P. e202300331. <https://doi.org/10.1002/celec.202300331> (in English).

Huang J., Li J., Ye L., Wu M., Liu H., Cui Y., Lian J., and Wang C. (2023). Synthesis of Si/C composites by silicon waste recycling and carbon coating for high-capacity lithium-ion storage. *Nanomaterials*. – No. 13(14). – P. 2142. <https://doi.org/10.3390/nano13142142> (in English).

Ji H., Liu Z., Li X., Li J., Yan Z., and Tang K. (2023). Recycling silicon waste from the photovoltaic industry to prepare yolk-shell Si@void@C anode materials for lithium-ion batteries. *Processes*. – No. 11(6). – P. 1764. <https://doi.org/10.3390/pr11061764> (in English).

Jin B., Liao L., Shen X., Mei Z., Du Q., Liang L., Lei B., and Du J. (2025). Advancement in Research on Silicon/Carbon Composite Anode Materials for Lithium-Ion Batteries. *Metals*. – No. 15(4). – P. 386. <https://doi.org/10.3390/met15040386> (in English).

Jin Y., Zhu B., Lu Z., Liu N., and Zhu J. (2017). Challenges and recent progress in the development of Si anodes for lithium-ion batteries. *Advanced Energy Materials*. – No. 7(23). – P. 1700715. <https://doi.org/10.1002/aenm.201700715> (in English).

Meng Z., Xu Z., Li H., Xiong H., Liu X., Qin C., and Wang Z. (2025). Silicon/Biomass Carbon Composite as a Low-Cost Anode for Lithium-Ion Batteries. *Energies*. – No. 18(4). – P. 972. <https://doi.org/10.3390/en18040972> (in English).

Mottaghi M., Kulkarni A., and Pearce J.M. (2025). Recycling silicon photovoltaic cells into silicon anodes for Li-ion batteries using 3D printing. *RSC Sustainability*. – No. 3. – P. 1859–1869. <https://doi.org/10.1039/D4SU00808A> (in English).

Mutusev A.Zh., Seisenova A.B., Kapizov O.S., Nuraly A.M., and Mukhanov D.K. (2025). Integrated process for the synthesis of carbon-silicon nanocomposites from biowaste and metallurgical sludge. *Reports of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan*. – No. 3. – P. 258–273. <https://doi.org/10.32014/2025.2518-1483.378> (in English).

Pillai M.M., Kalidas N., Zhao X., and Lehto V.-P. (2022). Biomass-Based Silicon and Carbon for Lithium-Ion Battery Anodes: A Review. *Frontiers in Chemistry*. – No. 10. – P. 882081. <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.882081> (in English).

Seisenova A., Nuraly A., Baiseitov D., Kapizov O., Oryngaliyeva S., Alimkulova Z., and Mutusev A. (2025). Comprehensive Assessment of Ash and Slag Waste for the Synthesis of Silicon-Based Functional Materials. *Processes*. – No. 13(9). – P. 2722. <https://doi.org/10.3390/pr13092722> (in English).

Søiland A.K., de Meatza I., Muguruza A., Xu Y., and Bellmann M. (2024). Silicon kerf loss as a potential anode material for lithium-ion batteries. *Frontiers in Photonics*. – No. 5. – P. 1332830. <https://doi.org/10.3389/fphot.2024.1332830> (in English).

U.S. Geological Survey. (2026). Mineral commodity summaries 2026. U.S. Geological Survey. – 222 p. <https://doi.org/10.3133/mcs2026> (in English).

Wang H., Fan S., Cao Y., Yang H., Ai X., and Zhong F. (2020). Building a Cycle-Stable Fe–Si Alloy/Carbon Nanocomposite Anode for Li-Ion Batteries through a Covalent-Bonding Method. *ACS Applied Materials and Interfaces*. – No. 12(27). – P. 30503–30509. <https://doi.org/10.1021/acsami.0c08456> (in English).

Yu Y., Bai X., Li S., Shi J., Wang L., Xi F., Ma W., and Deng R. (2023). Review of silicon recovery in the photovoltaic industry. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*. – No. 44. – P. 100870. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2023.100870> (in English).

Zhu B., Jin Y., Tan Y., Zong L., Hu Y., Chen L., Chen Y., Zhang Q., and Zhu J. (2015). Scalable production of Si nanoparticles directly from low-grade sources for lithium-ion battery anode. *Nano Letters*. – No. 15(9). – P. 5750–5754. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b01698> (in English).

Zong L., Zhu B., Lu Z., Tan Y., Jin Y., Liu N., Hu Y., Gu S., Zhu J., and Cui Y. (2015). Nanopurification of silicon from 84% to 99.999% purity with a simple and scalable process. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – No. 112(44). – P. 13473–13477. <https://doi.org/10.1073/pnas.1513012112> (in English).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 244–271

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.450>

UDC: 628.316:661.183.2:504.064

IRSTI: 31.21.01

©Massalimova B.K., 2026.

M. Kozybayev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan.

E-mail: bkmasalimova@ku.edu.kz

WASTEWATER TREATMENT METHODS FROM HEAVY METALS: OBTAINING ACTIVATED CARBON FROM BIOMASS

Massalimova Bakytgul — Candidate of Chemical Sciences, Professor, M. Kozybayev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan,
E-mail: bkmasalimova@ku.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0135-9712>.

Abstract. The rapid population growth, industrialization, the expansion of intensive agriculture, and global environmental changes have led to an increasing demand for high-quality freshwater resources. Over recent decades, water quality has significantly deteriorated due to anthropogenic impacts, including urbanization, industrial development, and the unsustainable use of natural water resources. In this context, the development of efficient, cost-effective, and environmentally sustainable water treatment technologies has become increasingly important.

Among existing water treatment methods, adsorption is considered one of the most promising approaches because of its high efficiency, operational simplicity, and ability to remove a wide range of contaminants. In wastewater treatment systems, adsorption processes are commonly applied after biological and chemical oxidation stages to eliminate dissolved organic and inorganic pollutants. Activated carbon remains the most widely used adsorbent due to its high sorption capacity for dyes and heavy metal ions in aqueous media.

Contamination of water resources with heavy metals represents a serious environmental and public health concern. This article reviews the principal methods for the removal of heavy metal ions from wastewater, with particular emphasis on adsorption techniques employing activated carbon derived from plant-based materials. Special attention is given to activated carbon produced from buckwheat husk as an agricultural waste precursor. The preparation methods, physicochemical properties, and adsorption performance of the obtained activated carbon toward heavy metal ions are analyzed. The study highlights the potential of agricultural waste valorization for the development of low-cost, environmentally friendly, and sustainable sorbent materials for wastewater treatment applications.



Keywords: wastewater, water treatment, heavy metals, adsorption, activated carbon, cheap adsorbents, buckwheat husk

Financing. *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 (BR28712227).*

For citations: *Massalimova B.K. Wastewater Treatment Methods for Heavy Metal Removal: Production of Activated Carbon from Biomass. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.2. Pp. 244–271. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.450>*

©Масалимова Б.К., 2026.

М.Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университеті,

Петропавловск, Қазақстан.

E-mail: bkmasalimova@ku.edu.kz

АУЫР МЕТАЛДАРДАН АҒЫН СУЛАРДЫ ЖОЮ ӘДІСТЕРІ: БИОМАССАДАН БЕЛСЕНДЕНДІРІЛГЕН КӨМІРТЕК АЛУ

Масалимова Бакытгуль — химия ғылымдарының кандидаты, профессор, М.Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университеті, Петропавл, Қазақстан,
E-mail: bkmasalimova@ku.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0125>.

Аннотация. Дүниежүзіндегі халық санының жылдам өсуі, халық шаруашылығын индустрияландыру, озық ауылшаруашылық тәжірибелер, геологиялық, экологиялық және жаһандық өзгерістер сапалы тұщы су сұранысына әкеліп отыр. Жылдар бойы су сапасы негізінен антропогендік әрекеттердің, халық санының өсуінің, жоспарланбаған урбанизацияның, жедел индустрияланудың, табиғи су ресурстарды тиімсіз пайдаланудың салдарынан нашарлап келеді. Қазіргі экологиялық стратегиялардың әсерін ескере отырып, олардың маңыздылығының артуы зерттеушілерді судан ластаушы заттарды тиімді түрде жоя алатын, экономикалық тұрғыдан тиімді әрі экологиялық қауіпсіз технологияларды дамытуға әкелді, жаңа технологиялар халықтың денсаулығын қорғауға бағытталған.

Судың ластануын бақылау және азайту үшін әртүрлі тиімділік деңгейдегі көптеген тазарту технологиялары бар. Әдістердің көпшілігінің кемшіліктері бар, жоғары пайдалану және қызмет көрсету шығындары, улы тұнбалардың түзілуі және күрделі тазарту процестері жатады. Осыған қарағанда, адсорбция процесі су мен ағынды суларды тазартуда ыңғайлылығы, қолданудың қарапайымдылығы және құрылымының жеңілдігі себепті тиімді балама ретінде қарастырылады. Ағынды суларды тазарту қондырғыларында адсорбция процесі биологиялық кезеңдерден немесе химиялық тотығудан кейін суда қалған еріген ластаушы заттарды жою үшін қолданылады. Қазіргі таңда ең кең таралған адсорбент

– белсендендірілген көмір. Ол бояғыштар мен ауыр металл иондары сияқты әртүрлі ластаушыларды судан жою үшін жиі пайдаланылады.

Судың ауыр металл иондарымен ластануы қоршаған орта мен халық денсаулығы үшін күрделі мәселелер болып табылады. Мақалада ағынды сулардан ауыр металл иондарын жоюдың негізгі әдістері қарастырылды. Өсімдік материалдарынан алынатын белсендірілген көмірді қолдану арқылы адсорбциялау әдістеріне ерекше назар аударылды. Мақалада қарақұмық қауызынан белсендендірілген көмір алу технологияларына, олардың физика-химиялық қасиеттеріне және ауыр металл иондарын жоюдағы тиімділігіне шолу жасалды. Ауылшаруашылық қалдықтарынан белсендендірілген көмір алудың әдістері, технологиялық параметрлары, адсорбция факторлары талданды. Ауылшаруашылық қалдықтарын пайдалану арқылы үнемді және экологиялық таза сорбенттер жасаудың перспективалы жолы көрсетілді.

Түйін сөздер: ағынды сулар, суды тазарту, ауыр металдар, адсорбция, белсендірілген көмір, арзан адсорбенттер, қарақұмық қабығы

©Масалимова Б.К., 2026.

Северо-Казахстанский университет имени М.Козыбаева,

Петропавловск, Казахстан.

E-mail: bkmasalimova@ku.edu.kz

МЕТОДЫ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ОТ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ: ПОЛУЧЕНИЕ АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ ИЗ БИОМАССЫ

Масалимова Бакытгуль — кандидат химических наук, профессор, Северо-Казахстанский университет имени М.Козыбаева, Петропавловск, Казахстан,

E-mail: bkmasalimova@ku.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0135-9712>.

Аннотация. Увеличение численности населения, индустриализация экономики, интенсификация сельского хозяйства и усиление антропогенной нагрузки приводят к росту потребности в качественных водных ресурсах и обострению проблемы загрязнения окружающей среды. Одним из наиболее опасных видов загрязнения является накопление тяжёлых металлов в природных и сточных водах, представляющее серьёзную экологическую и санитарно-гигиеническую угрозу. В настоящее время для удаления ионов тяжёлых металлов применяются различные физико-химические и биологические методы очистки. Однако многие из них характеризуются высокими эксплуатационными затратами, сложностью технологического процесса и образованием вторичных токсичных отходов. В связи с этим адсорбционные технологии рассматриваются как перспективное направление очистки воды благодаря высокой эффективности, простоте реализации и экономической доступности. В статье проведён анализ основных методов очистки сточных вод от тяжёлых металлов с особым вниманием к адсорбционным технологиям на основе активированного угля. Рассмотрены способы получения активированного угля из растительного сырья,

в частности из гречишной шелухи, являющейся доступным и возобновляемым биоресурсом. Проанализированы особенности химической активации биомассы, физико-химические свойства полученных углеродных материалов и их адсорбционная способность по отношению к ионам тяжёлых металлов. Показано, что использование биомассы для получения активированного угля позволяет одновременно решать задачи утилизации сельскохозяйственных отходов и создания эффективных сорбентов для водоочистки. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности применения активированных углеродных материалов растительного происхождения в технологиях очистки природных и сточных вод.

Ключевые слова: сточные воды, очистка воды, тяжелые металлы, адсорбция, активированный уголь, дешевые адсорбенты, гречневая шелуха

Кіріспе. Ағынды сулардан ауыр металл иондарын жою үшін әртүрлі әдістер қолданылса да, оңтайлы тазарту нақты жағдайға сәйкес практикалық болып қана қоймай, сонымен қатар ұлттық деңгейде белгіленген ең жоғары ластаушы деңгейлерге сай болуы керек. Мақала ағынды суларды ауыр металл иондарынан тазартудың әртүрлі әдістері, олардың артықшылықтары мен шектеулерін бағалау және ағынды сулардан ауыр металл иондарын жоюдың жаңа тенденцияларына шолу ретінде ұсынылды. Ағынды су құрамындағы ауыр металл иондарын жою үшін арзан адсорбент ретінде ауылшаруашылық қалдықтарын қолдануға бағытталған. Ауылшаруашылық қалдықтарынан белсендендірілген көмір алудың әдістері, технологиялық параметрлары, адсорбцияға әсер ететін факторлар талданды.

Біріккен Ұлттар Ұйымының «Дүниежүзілік суды дамыту 2025: таулар мен мұздықтар – су мұнаралары» баяндамасы қатып қалған су ресурстарындағы жылдам өзгерістерді бір уақытта азайтуға және оларға бейімделуге көмектесетін шешімдерді ұсынды. Аналитикалық есепте ағымдағы жағдайға нақты шолу жасалып, қажетті өзгертулер бойынша ұсыныстар берілген, атап айтқанда, көмірқышқыл газының шығарындыларын күрт азайтудың шұғыл қажеттілігіне баса назар аударған [UN Water, 2025]. БҰҰ есептеріне сәйкес (2024–2026 жж.), дүние жүзінде тұщы судың сапасы қарқынды түрде төмендеп, су ресурстары деградацияға ұшырап отыр. Ағынды сулардың шамамен 80% «сапасы жақсы» болып саналады, ал әлем халқының 50% су тапшылығынан зардап шегеді. Судың сапасы бойынша негізгі тұжырымдар мен фактілер (БҰҰ):

1) Тазарту дағдарысы: Өнеркәсіптік және тұрмыстық ағынды сулардың үлкен көлемі тазартылмаған күйде экожүйелерге түсіп, тұщы су көздерін ластайды.

2) Ресурстардың деградациясы: әлем елдерінің жартысында Тұщы су ресурстарын бақылаудың тиісті жүйелері жоқ, ал тіркелген жүйелер деградацияға ұшыраған.

3) Қолжетімділік және қауіпсіздік: Дүниежүзі тұрғындарының жартысына жуығы жылдың кем дегенде бір бөлігінде су тапшылығын сезінеді.

4) Гендерлік: су дағдарысы теңсіздікпен шиеленіседі; Әйелдер мен қыздар қауіпсіз суды табудың ауыртпалығын жиі көтереді.

Біріккен Ұлттар Ұйымы дағдарысты еңсеру үшін келісілген шараларды, тазарту құрылыстарына инвестиция салуды және су сапасын қатаң бақылауды қажет ететінін атап көрсетеді (UN Water, 2025).

Қазіргі уақытта қоршаған ортаға құрамында ауыр металл иондары бар ағынды сулардың көп мөлшері шығарылуы көптеген ғылыми зерттеу нәтижелерінде көрсетілген. Ауыр металдар атомдық салмағы 63,5-тен 200,6-ға дейінгі элементтер тобына жатады. Мысалы, қорғасын (Pb), кадмий (Cd), хром (Cr), никель (Ni), мыс (Cu) және т.б. Тұщы су ресурстарын ең қауіпті ластаушы заттар болып табылады. Сонымен қатар, канцерогенді, тератогенді және денсаулыққа елеулі мәселелер тудыратын ауыр металдар адам ағзасында қоректік тізбектер арқылы жиналуы мүмкін. Сондықтан ауыр металдармен ластанған ағынды суларды тазартудың өзектілігі өте жоғары (Seimukhanova et.al., 2025). Судың ластануы ең өзекті жаһандық мәселелердің бірі болып қала береді, өйткені су көздері ауыр металдар, бояғыштар, пестицидтер, беттік белсенді заттар, жеке гигиена құралдары және ауыл шаруашылығы, коммуналдық және өнеркәсіптік қызмет нәтижесінде пайда болатын заттармен көбірек ластанып отыр (Adamović et al., 2024; Wang et al., 2025; Zhao et al., 2026).

Ауыл шаруашылығы қалдықтарының жаһандық көлемі жылына 1,4 миллиард тоннадан асады, бұл жоғары көміртекті шикізатты және белсендендірілген көмірді табиғи кеуектермен қамтамасыз етеді. Қайта өңдеу метан шығарындыларын азайтады және шикізат шығындарын 60–80% қысқартады (Wang. et al., 2025). Қытайдың «қос көміртегі» стратегиясы және 14-ші бесжылдық жоспары 2025 жылға қарай сабанды 86% пайдалануды мақсат етеді, бұл биомассадан алынатын белсендендірілген көмірді индустрияландыруды жеделдетеді. Судың, әсіресе ауыр металл ионадрымен ластануы осы ластаушы заттардың тұрақтылығына, ыдырамайтындығына және биоаккумуляциялық қасиеттеріне байланысты күрделі жаһандық мәселе болып қала береді. Жылдам индустрияландыру, қаланың өсуі және адам әрекеті судың ластануына айтарлықтай әсеріне байланысты болғандықтан, тиімді, тұрақты және үнемді тазарту әдістерін қажет етеді. Суды тазартудың дәстүрлі әдістері кеңінен қолданылғанымен, су ортасындағы күрделі химиялық әрекетке және ауыр металл иондарының төмен концентрациясына жиі сәйкес келмейді. Қазіргі таңда беттік қасиеттері, реттелетін функционалдығы және жақсартылған реактивтілігіне байланысты арзан адсорбенттерді қолданатын адсорбция әдістеріне үлкен қызығушылық тудырды.

Қоршаған ортаны қалпына келтіру үшін ауылшаруашылық жанама өнімдерін пайдалану және осындай қалдықтардан құнды материалдарды алу тұрақты тәжірибелер мен қалдықтарды тиімді өңдеудің негізгі аспектілері болып табылады. Ауылшаруашылық қалдықтарын биоотынға қайта өңдеу, биоорганикалық тыңайтқыштар және белсендендірілген көмір (Metyouy et al., 2024) табиғи ресурстарға тәуелділікті азайтудың және дәстүрлі ауылшаруашылық тәжірибелерінің қоршаған ортаға әсерін азайтудың перспективалы әдісін ұсынады.

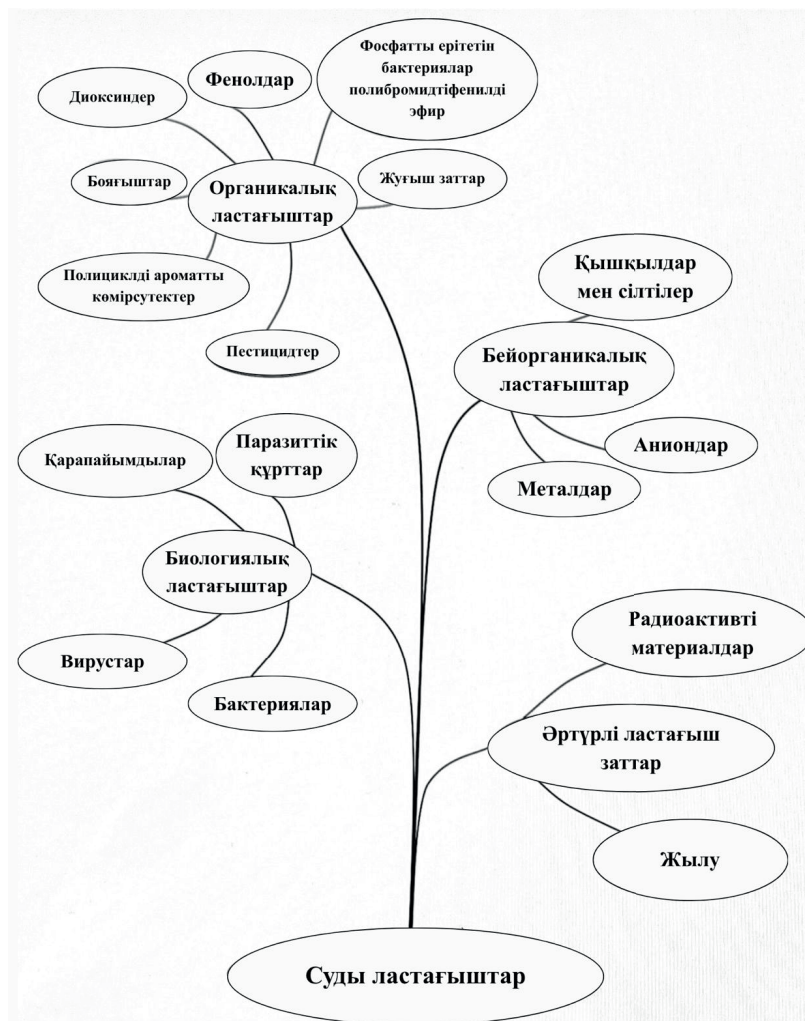
Халық санының өсуі, жылдам индустрияландыру, заманауи ауылшаруашылық тәжірибелері, отандық қызмет және басқа да геологиялық, экологиялық және жаһандық өзгерістер тұщы су сұранысы мен сапасына шамадан тыс қажеттілікке әкеліп отыр. Біріккен Ұлттар Ұйымының Суды дамыту есебіне сәйкес, су объектілеріне күн сайын шамамен 2 миллион тонна қалдық тасталады, соның ішінде өнеркәсіп қалдықтары, бояулар мен химиялық заттар, тұрмыстық қалдықтар және ауыл шаруашылығы қалдықтары (тыңайтқыштар мен пестицидтер). Осыған байланысты әлемде тұщы судың өткір тапшылығы туындауы мүмкін. Тұщы су біздің ғаламның маңызды және қажетті құрамдас бөлігі болып табылады және Жер экожүйесінің дұрыс жұмыс істеуінде маңызды рөл атқарады (Wang et al., 2023; Adamović et al., 2024). Дүниежүзілік су ресурстары шектеулі болғандықтан, алдағы онжылдықтарда тұщы су өндірудің жалғыз баламасы суды тазарту және қайта пайдалану әдістеріне байланысты ғылыми зерттеулер қарқынды түрде дамып келеді. Сондықтан, ағынды суларды тазартудың қолайлы, арзан және жылдам технологияларын, сондай-ақ оны қайта пайдалану немесе сақтау әдістерін әзірлеу қажет. Осы мақсатта суды тазартудың бірнеше технологиялары жасалған. Осы фактілерді ескере отырып, суды тазарту және қайта пайдалану технологияларының әртүрлі түрлерін олардың негізгі принциптері, қолданылуы, техникалық қызмет көрсетуі және жарамдылығы тұрғысынан қарастыру қажет.

Жоғарыда талқыланғандай, 2050 жылға қарай әлем халқының саны 9,5 миллиардқа жетеді деп күтілуде. Халықтың қажеттіліктерін қанағаттандыру үшін ауыл шаруашылығы мен өнеркәсіп өседі. Осы факторлардың барлығы – халық санының өсуі, өнеркәсіп және ауыл шаруашылығы – тұщы су қорының ұлғаюына әкеледі. Әрине, біздің планетамыздағы тұщы судың мөлшері шектеулі және болашақта өсіп келе жатқан сұранысты ағынды суларды қайта өңдеу және қайта пайдалану арқылы қанағаттандыруға болады. Қазіргі уақытта көптеген елдер суды қайта өңдеуді пайдаланады, бірақ болашақта бүкіл әлем осы технологияға тәуелді болады. Бүгінгі таңда суды қайта өңдеу әдістері экономикалық тұрғыдан тиімді емес және дамушы және дамымаған елдер үшін қолжетімсіз. Сондықтан дамымаған елдер болашақта суды қайта өңдеуді пайдалана алуы үшін суды қайта өңдеудің үнемді әдістерін әзірлеу қажет. Қорытындылай келе, суды өңдеу технологиясы біздің өміріміздің маңызды бөлігі ретінде болашақтың қажеттілігіне айналады (Diaz De Tuesta et al., 2022; Adamović et al., 2024).

Қазіргі кезеңдегі қоғамның әлеуметтік-экономикалық дамуының экологиялық концепциясына жауап беретін жоғары тиімді, экологиялық таза өнеркәсіптік технологиялар мен қоршаған ортаны қорғау іс-шараларын дамытудың перспективалық бағыттарының бірі белсендендірілген көмірдің әртүрлі түрлерін пайдалану болып табылады. Ауыл шаруашылығы, тұрмыстық және өнеркәсіптік қосалқы өнімдердің төмен құны оларды ағынды суларды тазартуға жарамды етеді. Қалдықтарды азайта отырып, ағынды сулардан ластаушы заттарды жоя алады және оларды қалпына келтіруге және қайта пайдалануға болады. Соңғы жылдары жарияланған көптеген аналитикалық шолуларға қарамастан, әртүрлі сорбенттерді

қолдану арқылы алынған мәліметтерді тікелей салыстыру қазіргі уақытта оларды ұсынудағы сәйкессіздіктерге байланысты қиын.

Осы мақсатта сорбенттер келесі топқа бөлінді: ауыл шаруашылығы және тұрмыстық қалдықтар, өнеркәсіптік қосалқы өнімдер; теңіз материалдары, топырақ және кен материалдары, жаңа арзан адсорбенттер (Gupta, 2013; Adamović et al., 2024). Суды ластағыштар табиғаты мен шығу тегі бойынша органикалық, бейорганикалық және биологиялық болып жіктеледі. Ластағыш заттардың жіктелуі 1-суретте көрсетілген.



Сурет 1. Суды ластағыш заттардың химиялық табиғаты бойынша жіктелуі (Gupta, 2013).

Сонымен қатар, әртүрлі ластағыш заттарды шығаратын объектілердің тізімі 1-кестеде келтірілген. Төменде ластаушы заттардың түрлерінің қысқаша сипаттамасы берілген.

Кесте 1. Өртүрлі ластағыш заттарды шығаратын өнеркәсіптер тізімі (Gupta, 2013).

№	Өнеркәсіптер	Бейорганикалық ластағыштар	Органикалық ластағыштар
1	Мұнай өңдейтін зауыттар	Сульфидтер, Hg, Cr, Sb	Oil-30, phenol-30, dioxin, furan, PAH, PCBs
2	Металдар өндірісі және өңдеу	As, Cd, Pb, Se, Fe, Zn, Al, Ni	PCB, PAH, dioxins, oil, cyanides
3	Шыны өндірісі	Силикаттар және басқа минералды оксидтердің қалдықтары	Эмульсияланған май, кальцинирленген сода
4	Керамика өндірісі	фторидтер	Ақпарат қолжетімсіз
5	Кокс-химия өндірісі	Аммиак, цианидтер	Фенолдар, күкіртті сутек, шайырлар, көмірсутектер, тиоцианаттар, органикалық суспензия
6	Қалдықтарды жағу және көмуге арналған полигондар	Кадмий, қорғасын, сынап	Хлорбензол, хлорфенолдар, Фурандар және диоксиндер
7	Целлюлоза-қағаз комбинаттары, картон өңдеу зауыттары	Сульфидтер, бос хлор	Метилмеркаптандар, пентахлорфенольдегидтер, кетондар, сульфонат лигнита және органикалық суспензия
8	Органикалық химия	Ақпарат қолжетімсіз	Фенолдар, органикалық қышқылдар, нитрокосылыстар
9	Тыңайтқыш	Күкірт қышқылы, фосфор және кремний қышқылдары, фтор қосылыстары, тұз қышқылы, мышьяк	моноэтаноламиндер
10	Мұнай өңдеу	Сульфидтер, хлоридтер, сульфаттар	Нафталинді қышқыл, мұнай-өнімдері, фенолдар, беттік белсенді заттар
11	Болат зауыттары	NH ₃ /N-1000	Май, майлағыш заттар, фенолдар
12	Металл өндірісі	Мыс, қорғасын, кадмий, хром, мырыш	Ақпарат қолжетімсіз
13	Текстиль өндірісі	Cr-5	Жұғыш заттар, бояғыштар
14	Металлургия өнеркәсібі	Цианды қосылыстар	Кокс, ізбес, фенол, майлар
15	Теріні илеу және өңдеу	Хроматтар, аммонийлі азот, натрий хлориді	Тұндырылған әк
16	Полимерлі және пласт-масса өндірісі	сульфаттар	Стирол, ацетонитрил, акрилаттар, фенолдар, ароматты көмірсутектер, альдегидтер, циклогексан, органикалық қышқылдар және суспензия
17	Синтетикалық каучук өндірісі	Ақпарат қолжетімсіз	Бутилендер, бутадиен, органикалық қышқылдар, ацетонитрил, альдегидтер, спирттер, және көмірсутектер

18	Chlorine industry	Сынап, хлор және хлоридтер	Ақпарат қолжетімсіз
19	Шарап өнеркәсібінің қалдықтары	Натрий, калий, кальций, темір, сульфаттар, хлоридтер	Ақпарат қолжетімсіз
20	Сабын және жуғыш заттар кндірісі	Ақпарат қолжетімсіз	Пропиленнен алынған алкил-бензолсульфонат,
21	Фото өнеркәсібі	Hypo, silver bromide spent solution, and xing reducing agents	Ақпарат қолжетімсіз
22	Тамақ өнеркәсібі	Сілтілік металдар, фосфаттар	аминқышқылдары
23	Пестицидтер өнеркәсібі		дихлорфенол
24	Былғары өнеркәсібі	Хром, сульфидтер	Фенолдар, шарап қышқылы
25	Жарылғыш заттар өнеркәсібі	Ақпарат қолжетімсіз	гитрокосылыстар
26	Кір жуу өнеркәсібі	Сілтілер, бос хлор	Майлар, майлағыш заттар
27	Ағаш өңдеу өнеркәсібі	Мырыш, сульфидтер және сілтілер	Ақпарат қолжетімсіз

Ауылшаруашылық қалдықтарының биомассасы (күнбағыс, күріш, қарақұмық қабығы және т.б.) негізінен 5-6 көміртекті атомдары бар полисахаридтер (целлюлоза – 30-40% және гемицеллюлоза – 10-27%) және жоғары хош иістендірілген полимерлерден (лигнин – 18-24%) құралған. Олардың құрамындағы көміртегі мөлшері салыстырмалы түрде жоғары, күлі 2-3,5% шамасында төмен және ұшқыш қосылыстардың жоғары шығымдылығымен сипатталуына байланысты, мұнай сорбенттері үшін шикізат болып табылады. Сорбенттерді алу мақсатында қалдықтар термотүрлендіруге түседі. Ұшқыш қосылыстарды жою және бастапқы кеуекті құрылымды ұлғайту үшін оларды оттегінің қатысуынсыз карбонизациялайды (Adamović et al., 2024; Ai et al., 2020). Карбонизациялау кезінде құрамы, құрылымы, механикалық сипаттамалары және т.б. физика-химиялық қасиеттерді көрсететін кокс немесе жартылай кокс түзіледі. Карбонизациялау кезінде кокстың бөлінуі және оның қасиеттері процестің жекелеген кезеңдерінің технологиялық параметрларымен анықталады. 2-кестеде әртүрлі өсімдік қалдықтарын түрлендірудің химиялық механизмдері жалпылама түрде сипатталған.

Кесте 2. Арзан адсорбенттерге арналған ғылыми мақалаларға шолу.

№	Әдебиетке сілтеме	Мақсаты	Адсорбент түрі	Зерттелетін ластағыш заттар
1	Jiayu Zhao et.al., 2026	Төмен концентрациядағы қорғасынмен ластанған ағынды суларды тазарту маңызыдылығы көрсетілген. Зерттеуде Pb ²⁺ тиімді жою үшін хитозан-қарақұмық қабықшасынан жасалған биокөмір композитін қолданатын жаңа динамикалық адсорбция процесін ұсынылған.	Қарақұмық қабығы	Ауыр металдар

2	Adamović et.al., 2024	Қарақұмық қабығы, қарақұмық өңдеудің жанама өнімі, олардың қолжетімділігімен, үнемділігімен және энергетикалық және экологиялық мақсаттар үшін шикізат ретінде қолданылуына басымдылық берілген. Ауыр металдар мен синтетикалық бояғыштарды қоса алғанда, суды ластағыш заттарды жою үшін адсорбциялық процестерде табиғи (түрлендірілмеген) және химиялық немесе физикалық түрлендірілген қарақұмық қабығын пайдалану қарастырылған.	Қарақұмық қабығы	Ауыр металдар
3	Wang et.al, 2023.	Шолуда ауыр металдардың көздері, жою әдістері және биомассадан белсендірілген көмірді алу әдістері қарастырылған. Адсорбенттердегі негізгі факторларға, физикалық және химиялық факторларға ерекше назар аударылып, ауыр металдардың қасиеттері және ауыр металдардың адсорбциясына әсер ететін адсорбция жағдайлары талданған. Сонымен қатар, биомассада алынған белсендірілген көмірге адсорбцияланған ауыр металдардың көпшілігі десорбция арқылы қалпына келтіру мүмкіндігі сипатталған. Биомасса, карбонизация түрі және белсендіруді таңдау көміртегінің кеуектілігі және бетінің ауданына әсері көрсетілген.	Ауылшаруашылық және тұрмыстық қалдықтар	Ауыр металдар
4	Diaz De Tuesta J.L. et.al., 2022	Мандарин қабығынан белсендірілген көмір алу сипатталған. Тепе-теңдік изотермаларына негізделген адсорбциялық модельдер көрсетілген. Көміртекті материалдардағы Ni адсорбциясын болжайтын ең жақсы изотермиялық және кинетикалық модельдер бірегей қасиеттеріне байланысты ерекшеленді. Лангмюр, Хан және Йованович модельдері сәйкесінше белсендірілген көмір, пиролизикалық көмір және бикарбонаттағы Ni адсорбциясын туралы сипаттаған. Екінші жағынан, Ni кинетикалық адсорбциясы белсендірілген көмір мен бикарбонат үшін псевдоекінші ретті модельмен болжанған. Гидротермиялық карбонизация кезінде FeCl ₃ сияқты химиялық агенттердің болуы гидрокөмірлердің морфологиясы мен беткі химиялық құрамын реттеудің тиімді құралын жасауға, олардың карбондану шығымын арттыруға және белсендірілген көмір алуға мүмкіндік берді. Сонымен қатар, гидротермиялық карбонизация нәтижесінде пайда болған микросфералардың пішіні мен өлшемі кыздырудан кейін де сақталады, бұл кеуектілігі жоғары белсендірілген көмір микросфераларын өндіруге мүмкіндік береді.	Ауылшаруашылық қалдықтары	Ауыр металдар

5	Shaikhiyev et al., 2020	Қарақұмық қабығында ең алдымен целлюлоза мен лигнин болатыны анықталды. Су ортасынан металл иондарын, мұнайды, мұнай өнімдерін кетіру үшін сорбциялық материалдар ретінде қарақұмық қабығын пайдалану туралы ақпарат берілген.	Қарақұмық қабығы	Ауыр металдар
6	Duan et.al., 2020	Ауыр металдардың ластануы қоршаған орта мен адам денсаулығына үлкен қауіп көрсетілген. Құрамында көміртегі бар материалдар, биокөмірден/белсендірілген көмірден модификацияланған материалдарға дейін ауыр металдарды сулы ерітінділерден тазарту үшін тиімді адсорбенттер ретінде кеңінен зерттелген.	Ауылшаруашылық қалдықтары	Ауыр металдар

Қоршаған ортаның ластануы ауада, суда және топырақта ауыр металдар мен органикалық ластаушы заттар сияқты улы заттардың болуына байланысты экологиялық қауымдастық үшін үлкен қауіп тудырады. Жылдам экономикалық даму және халықтың өсуі, сондай-ақ әртүрлі салалардағы, соның ішінде ауыл шаруашылығындағы прогресс қоршаған ортаның ластануының негізгі себебі болып табылады. Қалдықтарды жағу, синтетикалық өнеркәсіп және көмірді қайта өңдеу сияқты ластаушы заттар абиотикалық ортаға (ауа, су және топырақ) және биотикалық популяцияларға (өсімдіктер, жануарлар мен адамдар) үлкен қауіп төндіреді. Мыс, кадмий, никель, сынап, хром, қорғасын және мырыш сияқты ауыр металдар қоршаған ортаға төзімділігіне байланысты ерекше алаңдаушылық тудырады. Улы металдар су объектілері мен топыраққа шөгінділердің төгілуі және балқу процестері арқылы еніп, қоректік тізбектердегі биомагнификация арқылы тірі организмдерге үлкен зиян келтіруі мүмкін. Зерттеушілер қоршаған ортадан қауіпті ауыр металл иондарының жойылуын маңызды мәселе ретінде анықтады (Abiodun et.al., 2024).

Қоршаған ортаның токсиндеріне көбінесе бояғыштар, пестицидтер және ауыр металдар жатады, олар бүкіл экологиялық айналымға қауіп төндіреді, оның қызметі мен құрылымын айтарлықтай бұзады. Шөгінділердің төгілуі және балқу процестері қоршаған ортаның ауыр металдармен ластануына ықпал етеді. Шөгінді ағынды сулардағы ауыр металдардың жоғары деңгейі топырақтың ластануына әкелуі мүмкін. Топырақ сипаттамасы дақылдардың өсуі үшін өте маңызды. Улы металдар топыраққа енген кезде, өсімдіктердің сапасы мен өнімділігіне қатты әсер етеді, азық-түлік тізбегіндегі биоайналым арқылы адамдар мен жануарларға үлкен қауіп төндіреді. Ауыр металл иондары топырақтан өсімдіктерге оңай ауысады, осылайша олардың уыттылығын арттырады. Үлкен қалалар жағдайында ағынды сулардың шығарылымы көлемі жағынан өте үлкен, оларды кәдеге жарату мен өңдеудің тиімді жолдарын табу өте маңызды. Нәтижесінде зерттеушілер қауіпті металдар иондарынан қоршаған ортаны толық тазартуды негізгі мәселе ретінде анықтады. Осы жылдар ішінде ауыр металдар иондарын ағынды сулардан жоюдың әртүрлі әдістері жасалды. Атап айтқанда, адсорбция,

еріткіштерді алу, ион алмасу, химиялық тұндыру, коагуляция және флокуляция, мембраналық процестер және тотығу жатады. Алайда, технологиялардың бірқатар кемшіліктері бар, соның ішінде төмен концентрацияда (1-100 мг/л) жоғары шығындар мен адсорбция қабілеті төмен.

Тазарту жүйесінің әдісін таңдау ағынды сулардың қасиеттеріне байланысты, өйткені әр әдістің тиімділігі, қоршаған ортаға әсері, орындылығы, құны, практикалық, сенімділігі, шөгінділердің пайда болуы, пайдалану қиындықтары, алдын-ала өңдеу талаптары және химиялық шөгінділердің пайда болуы сияқты өзіндік шектеулері бар. Адсорбция ластаушы заттарды жоюдың ең жақсы стратегияларының бірі болып саналады, өйткені оны пайдалану оңай, оны әртүрлі тәсілдермен жасауға болады және ағынды сулардағы ауыр металдардың биологиялық қолжетімділігіне, уыттылығына және тасымалдануына айтарлықтай әсер етеді.

Сорбент бетінде металл иондарының жиналуы тасымалдау процесі арқылы жүреді, оның барысында олар химиялық немесе физикалық байланысады. Барлық адсорбция процестері қатты және сұйық заттар мен масса тасымалдау жылдамдығы арасындағы тепе-теңдікті қажет етеді. Қатты сорбенттерде адсорбцияның үш негізгі процесі бар: ерітіндіден сорбент бетіне ластаушы заттарды алмастыру; қатты беттегі адсорбция; сорбенттегі бөлшек ішіндегі қозғалысы. Ауыр металдар жер бетіне электростатикалық күштер немесе гидроксил немесе басқа функционалдық топтар арқылы тартылады. Бірнеше рет қолдану үшін адсорбенттерді десорбциялау және регенерациялау мүмкіндігі әдісті жоғары тиімді етеді және жақсы тазартылған ағынды суларды аз шығынмен шығарады. Бейорганикалық ағынды суларды адсорбциялау судың сапасын жақсарту, адам денсаулығына ұзақ мерзімді теріс әсер етудің алдын алу үшін қолданылуы мүмкін, ең бастысы таза өнімдерге және бағалы заттардың қалпына келуіне әкеледі. Көптеген зерттеулер әртүрлі биомасса негізіндегі және магниттік оксид негізіндегі адсорбенттерді қолдану арқылы ауыр металдардың адсорбциясын сипаттаған.

Белсендендірілген көмір – жоғары адсорбциялық қабілеті мен меншікті бетінің ауданына байланысты ағынды сулардан металл иондарын кетіру үшін кеңінен қолданылатын полярлы емес адсорбент. Бірақ, оның құны жоғары болғандықтан, зерттеушілерді адсорбент ретінде пайдалану үшін ауыл шаруашылығы қалдықтары, табиғи материалдар және өнеркәсіптік жанама өнімдер сияқты балама көздерден алуға байланысты ғылыми жұмыстарды жүргізуге әкеліп отыр. Материалдар коммерциялық адсорбенттерге карағанда үнемді, таңдаулы, тиімді және экологиялық таза және ауыр металл иондарын жою үшін ағынды суларды тазартуда қолданылады (Wang et al., 2025; Pandey et al., 2023). Адсорбент ретінде модификацияланған биомассаның көптеген түрлері, соның ішінде үгінділер, қарақұмық қабығы, грек жаңғағының қабығы, шай қалдықтары, кокос қабықтары, шымтезек және күріш қабығы қолданылды (Shaikhiev et al., 2020; Adamović et al., 2024). Сонымен бірге, ауыр металдарды сорбциялау үшін изотермалар мен изотермиялық модельдерді зерттеу және түсіну шектеулі болып келеді. Ауыр

металл иондарын сорбциялауда кинетикалық және изотермиялық модельдерді қолдану өте маңызды, өйткені ол әртүрлі адсорбенттік материалдардың жойылу тиімділігін түсіну және болжау үшін теориялық негіз болады. Көптеген зерттеушілер ауыр металдардың биосорбциясының кинетикалық және изотермиялық модельдерін зерттеді. γ -алюминий оксиді нанобөлшектері мен көп қабатты көміртекті нанотүтікшелерді қолдана отырып, зиянды никельді (II) жою кезінде адсорбция изотермаларына кинетикалық зерттеулер жүргізді. Олар адсорбциялық тепе-теңдік пен кинетикалық деректер сәйкесінше Лэнгмюр және псевдоекінші ретті кинетикалық модельдермен жақсы сәйкес келетінін анықтады.

Шолу мақаласы көптеген артықшылықтарына байланысты биомасса негізіндегі адсорбенттерге бағытталған. Біріншіден, олар ауылшаруашылық және орман шаруашылығы қалдықтарынан, балдырлардан немесе басқа биологиялық көздерден алынуы мүмкін болғандықтан, үнемді және оңай қол жетімді. Екіншіден, олар экологиялық таза және жаңартылатын, дәстүрлі химиялық әдістерге тұрақты балама әдіс ретінде қарастыруға мүмкіндік береді. Биомасса негізіндегі адсорбенттер сонымен қатар ауыр металдарға жоғары селективтілік пен жақындықты көрсетеді, ластаушы заттарды ағынды сулардан тиімді түрде жоюға мүмкіндік береді.

Зерттеу материалдары. Зерттеу материалдары ретінде ағынды суды ластағыштардың түрлері мен жіктелуі, ағынды суларды ауыр металдардан тазарту технологиялары, ағынды суларды ауыр металдар иондарынан тазартудың типтік әдістері, ауылшаруашылық қалдықтарының биомассасы, ауыр металдармен ластану көздерінің графикалық көрінісіне арналған ғылыми жарияланымдар, Біріккен Ұлттар Ұйымының аналитикалық есептері пайдаланылды. Суды ластағыштар табиғаты мен шығу тегі, әртүрлі ластағыш заттарды шығаратын өнеркәсіптердің мәліметтері пайдаланылды. Мақалада қолданылған материалдар ағынды су құрамындағы ауыр металл иондарын кешенді түрде тазартуда қолайлы технологияны таңдауға мүмкіндік берді.

Зерттеу әдістері. Зерттеу барысында Scopus, Web of Science, Google Scholar мәліметтер базалары жүйелі түрде талданды, атап айтқанда, ағынды судың ластану жолдары, ағынды су құрамындағы ауыр металл иондарын тазарту әдістері, ауылшаруашылық қалдықтарынан белсендендірілген көмір алу және оларды ағынды суды тазартуда қолдану әдістері, ағынды суды тазартудың әдістеріне жалпы сипаттама, қарақұмық қабығынан адсорбент алуға байланысты ғылыми еңбектерге талдау жүргізілді. Сонымен қатар мақала тақырыбы мен мазмұнына байланысты аналитикалық әдістер: салыстырмалы талдау, экологиялық және технологиялық шешімдерді жіктеу, сондай-ақ алынған деректерді талдау, синтездеу, салыстыру және жалпылау әдістері пайдаланылды.

Зерттеу нәтижелері және талқылау. *Адсорбция.* Көптеген адсорбция әдістері ластаушы бөлшектерді оның кеуекті құрылымында ұстау үшін көміртегі негізіндегі затты пайдаланады. Белсендірілген көмірдің негізгі құрамдас бөліктері қымбат емес болуы мүмкін, бірақ жоғары сапалы белсендірілген көмір өндіру үшін қоршаған ортаға зиянсыз энергия көздерін пайдалану экожүйеге

айтарлықтай әсер ететіні көрсетілген. Белсендендірілген көмірді тазарту адсорбцияланған органикалық молекулаларды жою үшін көміртекті материалды қайта белсендіруді талап етеді. Альтернативті адсорбциялық материалдарды өндіру кейде қымбатқа түседі және қызмет ету мерзімі шектеулі, қымбат қайта белсендіруді қажет етеді. Кейбір арзан баламалар анықталғанымен, олар көп жағдайда жоғары тиімділік көрсетпейді және үлгінің кеуектеріне әсер етеді. Адсорбция ластаушы затты қасиеттерін өзгеріске ұшыратпай жояды, ол жойылатын қауіпті қалдықтар ағынының түзілуіне әкеледі. Егер адсорбент процесс барысында қайта белсендірілмесе, оны жоюдың арнайы әдістерін қажет ететін және қосымша шығындарға әкелетін қауіпті қалдықтар ретінде қарау керек (Hussein et.al., 2025).

Адсорбция–адсорбентке ауыр металдар иондарының немесе молекулаларының қосылуымен сипатталатын беттік құбылыс. Процесс әдетте екі кезеңде жүреді: біріншісі, адсорбент пен ауыр металл иондарымен ластанған сулы ерітінді арасындағы бастапқы өзара әрекеттесу; екіншісі ауыр металл иондары бар адсорбенттің тазартылған ағынды судан кейінгі бөлінуі.

Адсорбция екі негізгі әдісті қолдану арқылы жүзеге асырылады: мерзімді режимде және бағаналық. Мерзімді режимді адсорбцияда адсорбент қатты және сұйық фазалар арасында тепе-теңдікті орнату үшін үздіксіз араластыра отырып, ластанған суда таралады. Бағаналық адсорбция ластанған судың адсорбент қабаты арқылы үздіксіз жүруін қамтиды; әдістің тиімділігі мен ауқымдылығына байланысты өнеркәсіпте жиі қолданылады. Адсорбенттің физика-химиялық сипаттамалары және жұмыс жағдайлары адсорбция процесінің тиімділігін айтарлықтай анықтайды. Тиімді адсорбенттің үлкен меншікті беттік ауданы, көптеген белсенді байланыстыру орындары, құрылымдық тұрақтылығы және бәсекелес ластаушы заттарға тәуелсіз мақсатты ауыр металл иондарының селективтілігі болуы керек. Сонымен қатар, тиімді адсорбенттер экономикалық тұрғыдан тиімді, улы емес, экологиялық тұрақты және өнімділіктің ең аз төмендеуімен қайталанатын регенерацияға және қайта пайдалануға қабілетті болуы керек.

Халық саны, жоспарсыз урбанизация, қарқынды индустрияландыру және табиғи су ресурстарын біліктіліксіз пайдаланудың тұрақты түрде жоғарылауы салдарынан әлемнің көптеген бөліктерінде су сапасының нашарлауына әкелді. Көптеген дамушы елдерде жер асты сулары ел халқының жартысынан астамын ауыз сумен қамтамасыз етеді және көптеген ауылдық жерлер мен кейбір ірі қалалар үшін ауыз судың негізгі көзі болып табылады. Өнеркәсіптік, ауылшаруашылық және тұрмыстық қызметке байланысты әртүрлі химиялық заттар топыраққа сіңіп, табиғи су ресурстары мен су қоймаларын ластауы мүмкін. Соңғы жылдары дүние жүзінің көптеген елдерінде ауыз судың құрамында адам денсаулығына үлкен қауіп төндіретін қауіпті концентрацияда әртүрлі улы химикаттар/қосылыстар анықталды. Уытты ластаушы заттардың концентрациясының жоғарылауынан туындаған денсаулыққа елеулі проблемаларды ескере отырып, оларды ауыз судан шығару және зардап шеккен азаматтардың денсаулығын сақтау үшін

үнемді және экологиялық таза процестерді әзірлеу қажет. Егер адсорбент арзан және қолданар алдында алдын ала өңдеуді қажет етпесе, суды тазартудың әртүрлі әдістерінің ішінде адсорбция процесі суды тазартудың тиімді және оңтайлы тәсілі болып табылады (Pandey et.al., 2023). Көптеген қолданыстағы тәжірибелерге сүйенсек, адсорбция процесінің бірқатар себептері бойынша басқа әдістерден артықшылықтарын атауға болады: дизайнның қарапайымдылығы, төмен құны, жоғары жою тиімділігі, пайдаланудың қарапайымдылығы және қол жетімділігі. Сонымен қатар, адсорбция процесі ластаушы заттардың әртүрлі түрлерін жоя алады немесе азайтады, сондықтан судың ластануын бақылауда кеңірек қолданылады. Ал, белсендендірілген көмір ағынды суларды тазарту үшін әмбебап адсорбент болып саналады және судан әртүрлі ластаушы заттарды жою үшін кеңінен қолданылады. Дегенмен, оның ағынды суларды тазартуда кеңінен қолданылуы оның қымбаттығына байланысты кейде шектеледі. Дәстүрлі емес адсорбенттердің көпшілігі судан және ағынды сулардан әртүрлі ластаушы заттарды жою қабілеті үшін зерттелді. Белсендендіріліген көмір адсорбциялық материал ретінде кеңінен қолданылады, себебі ол осы адсорбенттерге өте төмен концентрациялар мен жоғары ластаушы жүктемелерге мүмкіндік береді.

Адсорбциялық зерттеулердің көпшілігі сыйымдылығы жоғары адсорбенттерді әзірлеуге бағытталған, ал кейбіреулері оңай қалпына келетін адсорбенттерді әзірлеуге бағытталған. Әртүрлі көздерден жасалған әртүрлі арзан адсорбенттер коммерциялық белсендендірілген көмірмен салыстырғанда сулы ластаушы заттарды жою үшін төмен немесе әлсіз сорбциялық потенциалды көрсететіні анықталды (Adamović et al., 2024). Белсендендірілген көмір негізіндегі адсорбенттер электрохимиялық жолмен регенерацияланады. 3-кестеде ағынды сулардан ауыр металдарды жоюдың негізгі әдістері сипатталған.

Кесте 3. Ағынды сулардан ауыр металл иондарын жоюдың негізгі әдістері.

Химиялық әдістер	Физика-химиялық әдістер	Биологиялық әдістер	Адсорбциялық тазарту әдістері
Тұндыру (гидроксид, сульфид); коагуляция және флокуляция; тотығу-тотықсыздану реакциялары	Ион алмасу; Мембраналық технологиялар (кері осмос, ультрафилтрация); Электрокоагуляция.	Металдарды байланыстыру үшін микроорганизмдерді немесе биомассаны пайдаланады.	Адсорбция ауыр металдарды жоюдың ең тиімді әдістерінің бірі болып саналады. Негізгі артықшылықтары: Тазартудың жоғары дәрежесі; Сорбентті қалпына келтіру мүмкіндігі; Қарапайым жабдық дизайны.
Кемшіліктері: көп мөлшерде тұнбаның түзілуі; шламды қосымша кәдеге жарату қажеттілігі.	Жоғары құны; Операцияның күрделілігі.	Кемшіліктері: қоршаған орта жағдайларына сезімталдық және ластаушы заттардың жоғары концентрацияларында шектеулі тиімділік жатады.	Белсендендірілген көмір ең көп таралған адсорбент: Жоғары меншікті бетінің ауданы; Кеуекті құрылым дамыған; Функционалдық топтардың болуы.

Адсорбция процесін модельдеу әртүрлі жұмыс жағдайларында еріген заттың адсорбентке адсорбциясын болжау үшін ғана емес, сонымен қатар жүйеде болатын адсорбция механизмін жақсы түсіну үшін де баға жетпес (Diaz De Tuesta et al., 2022). Ленгмюр теңдеуі – адсорбцияға бірдей қол жетімді учаскелері бар біртекті адсорбент бетінде адсорбция жүреді деп болжайтын белгілі изотермиялық модель. Бөлу коэффициенті (R_L) Ленгмюр изотермасының маңызды параметрі болып табылады, зерттелетін адсорбцияның қолайсыз ($R_L > 1$), сызықтық ($R_L = 1$), қолайлы ($0 < R_L < 1$) немесе қайтымсыз ($R_L = 0$) екенін тексеру үшін қолданылады. Ленгмюр теңдеуі мен R_L теңдеулер арқылы өрнектеледі (1,2):

$$q_e = \frac{q_m \cdot K \cdot C_e}{1 + K \cdot C_e}, \quad (1)$$

$$R_L = \frac{1}{1 + K \cdot C_0}, \quad (2)$$

мұндағы q_e және C_e адсорбент массасының бірлігіне шаққандағы адсорбцияланған заттың мөлшерін (мг/г) және сулы ортадағы адсорбаттың концентрациясын (мг/л) тепе-теңдік сатысында көрсетеді, q_m және K константалар (екі параметрлі модель), сәйкесінше мг/г және л/мг өлшемдерімен өлшенеді, R_L – бөліну коэффициенті (өлшемсіз мән), ал C_0 – адсорбаттың бастапқы концентрациясы.

Фрейндлих изотермасы – эмпирикалық теңдеу (3) ретінде адсорбаттық әрекеттесулері бар гетерогенді жүйелер үшін кеңінен қолданылады, сулы ортадағы адсорбциялық сыйымдылық (q_e) мен тепе-теңдік концентрациясы (C_e) арасындағы сәйкес асимптотикалық емес адсорбция қисықтарын көрсетеді. Гетерогенділік коэффициентін (n) адсорбцияның сызықтық, химиялық немесе физикалық процесс екенін анықтау үшін қолдануға болады (тиісінше $n = 1$, $n < 1$ немесе $n > 1$). Көрсетілген екі параметрлі модель келесідей ұсынылған:

$$q_e = K \cdot C_e^{1/n}, \quad (3)$$

мұндағы, K – Фрейндлих тұрақтысы, $L^{1/n} \text{ мг}^{-1/n}$ өлшенеді, ал n – көрсеткіш.

Адсорбция процесі кезінде бірдей белсендірілген көмірдің адсорбциялық механизмі әртүрлі ластаушы заттар үшін әртүрлі болуы мүмкін. Температура да адсорбция процесіне айнымалы әсер етеді. Біріншіден, белсендірілген көмірдің кеуектеріндегі диффузия жылдамдығы адсорбция жылдамдығына әсер ететін негізгі фактор болып табылады. Диффузия жылуды сіңіру процесі, сондықтан температураның жоғарылауы адсорбция жылдамдығын арттырады. Екіншіден, адсорбция физикалық және химиялық адсорбцияға бөлінеді. Бірінші процесс негізінен экзотермиялық, сондықтан температураны төмендету адсорбциялық қасиетін жақсартуға мүмкіндік береді, ал химиялық адсорбция процесінде

адсорбция жылдамдығы температураның жоғарылауымен жоғарылайды, ал кейбір химиялық байланыстар температураның жоғарылауымен үзіледі, адсорбция орындарының санын және белсендендірілген көмірдің соңғы адсорбциялық қабілетін одан әрі арттырады (Duan et al., 2020; Yuan et al., 2021). Авторлар термохимиялық белсендіру әдісін қолдана отырып, кіндік апельсин қабығынан АСПН800 деп аталатын белсендірілген көмір биомассасын дайындады (Khalil et al., 2022).

Адсорбция уақыты ластаушы заттарды кетіру тиімділігіне әсер ететін негізгі фактор болып табылады. Адсорбция уақытын дұрыс ұлғайту адсорбцияланған белсендендірілген көмірдің мөлшерін тиімді арттырады. Дегенмен, адсорбция уақытын ұлғайту ағынды сулардың тоқырау уақытын арттырады, ағынды суларды тазартудың жалпы тиімділігін төмендетеді және тазалау шығындарын арттырады. Сондықтан оңтайлы адсорбция уақытын таңдау белсендендірілген көмірді адсорбциялау тиімділігін арттыру үшін өте маңызды. Қолайлы жағдайларда немесе тиісті түрлендіргіштер арқылы биомассадан алынатын белсендендірілген көмірлердің барлығы ауыр металл иондары үшін жоғары адсорбциялық қабілет көрсетеді. Ауыр металл иондарының адсорбциясына адсорбенттің физикалық түрі де, химиялық функционалдық топтары да әсер етеді. Жалпы үлкен беттік аудан және кеуектіліктің төмен болуы адсорбцияға ықпал етеді, ал функционалдық топтардың әсері құрамында ауыр металдары бар ағынды сулардың рН мәніне байланысты. Температура және рН сияқты адсорбция жағдайлары ауыр металдардың адсорбциясына айтарлықтай әсер етеді (Wang et al., 2023). Ерітіндінің рН мәні адсорбцияның маңызды факторы болып табылады, себебі ағынды суларда ауыр металл иондарының болатын пішініне әсер етеді. Адсорбенттегі белсенді топтардың химиялық күйі және адсорбент бетіндегі зарядтың таралуы, өз кезегінде, мақсатты метал иондарына қатысты адсорбенттің тиімділігіне әсер етеді. Сондықтан рН мәнін анықтау адсорбциялық қасиеттерді зерттеудің міндетті шарты болып табылады, ал ерітіндінің қолайлы рН мәнін таңдау ауыр металл иондарының адсорбциясы үшін үлкен маңызға ие (Yin et al., 2019; Vahedi et al., 2021).

Әдетте, адсорбция уақытының ұлғаюымен хемосорбция мөлшері алдымен күрт артады, содан кейін біртіндеп төмендейді. Керісінше, физикалық адсорбция әдетте адсорбция уақыты ұлғайған сайын баяу артады, ал адсорбция уақыты химиялық адсорбцияға қарағанда ұзағырақ болады. Тәжірибелік температура мен рН-дан басқа, ауыр металл иондарының концентрациясы, белсендірілген көмірдің дозаланған мөлшері және адсорбция уақыты сияқты басқа адсорбция жағдайлары да көміртекті материалдарға ауыр металл иондарының адсорбциясына әсер етеді. Ерітіндідегі ластаушы заттардың бастапқы концентрациясы төмен болған кезде белсендендірілген көмірдің адсорбциялық қабілеті бастапқы концентрация артқан сайын артады.

Бастапқы концентрация белгілі бір мәнге жеткеннен кейін адсорбция орындары қаныққан болады, ал адсорбциялық қабілеті бір уақытта қанығуға жетеді. Бастапқы концентрацияның жоғарылауымен адсорбция жылдамдығы біртіндеп

төмендейді. Сондықтан белсендендірілген көмір адсорбциясын практикалық өнеркәсіпте қолдану үшін тиісті бастапқы концентрацияны таңдау қажет. Белсендендірілген көмірдің мөлшері адсорбция процесінің тиімділігіне әсер ететін факторлардың бірі болып табылады. Егер белсендірілген көмірдің масса бірлігіндегі адсорбция аlandарының саны анықталса, белсендірілген көмірдің көп мөлшері адсорбциялық қабілетті арттырады, сонымен қатар ағынды суларды тазарту құнын арттырады (Biltayib et al., 2021). Сондықтан, жоғары адсорбциялық қабілеті және салыстырмалы түрде төмен құны бар белсендірілген көмірдің мөлшерін таңдау ластаушы заттарды жоюдың және белсендендірілген көмірді қолдану арқылы адсорбциялық ағынды суларды тазартудың құнын төмендетудің шешуші факторы болып табылады. Адсорбция уақыты ластаушы заттарды кетіру тиімділігіне әсер ететін негізгі фактор болып табылады. Адсорбция уақытын дұрыс ұлғайту адсорбцияланған белсендендірілген көмірдің мөлшерін тиімді арттырады. Адсорбция уақытын ұлғайту ағынды сулардың тоқырау уақытын арттырады, ағынды суларды тазартудың жалпы тиімділігін төмендетеді және ағынды суларды тазарту шығындарын арттырады. Сондықтан оңтайлы адсорбция уақытын таңдау белсендендірілген көмірді адсорбциялау тиімділігін арттыру үшін өте маңызды. Қорытындылай келе, ауыр металдардың биомассадан алына-тын белсендірілген көмірмен адсорбциясына температураның әсері күрделі. Адсорбция температурасын жоғарылату, бір жағынан, физикалық адсорбцияны төмендетеді, ал екінші жағынан, молекулалық диффузия мен хемосорбцияны күшейтеді (Zhao et al., 2026; Seimukhanova et al., 2025).

Белсендендірілген көмір және оның сипаттамасы. Табиғаттағы ең таңғажайып материалдардың бірі бола отырып, көміртегі қышқылдар мен сілтілерге төзімділік, коррозияға, жоғары және төмен температураларға, биоүйлесімділік сияқты қасиеттері бар. Көміртекті материалдар адамзат өркениетінің бүкіл тарихында маңызды рөл атқарды (Cheng et al., 2022).

Биомассадан алынған белсендендірілген көмір және белсендірілген көмір көміртегі бар пиролиз материалдары және қоршаған ортаны қорғау технологияларындағы маңызды өнімдер болып табылады. Белсендендірілген көмірдің негізгі шикізаты төрт санатқа бөлінеді: көмірден алынған белсендендірілген көмір, ағаштан алынған белсендірілген көмір, синтетикалық белсендірілген көмір және белсендірілген көмірдің басқа түрлері.

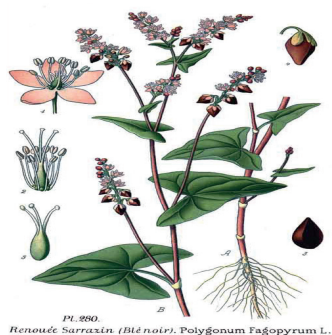
Белсендендірілген көмір - химия өнеркәсібінде кеңінен қолданылатын материал (Diaz De Tuesta et al., 2022; Pandey et al., 2023) Оның беттік ауданның жоғары болуы, физикалық және химиялық тұрақтылығы сияқты физика-химиялық қасиеттері оны кеңінен қолдануға мүмкіндік береді, мысалы, суды тазарту үшін, газ сүзгілері, суперконденсатор электродтары және катализатор тасымалдағыштары.

Жаһандық экологиялық қоғамдастықта ауыл шаруашылығы қалдықтарын табиғи және сарқынды сулардан ластаушы заттарды кетіру үшін реагенттер ретінде пайдалану сияқты жаңа инновациялық тәсіл қарқынды дамып келеді. Қазіргі уақытта дүние жүзіндегі негізгі өндіріс көзі ауыл шаруашылығы

дақылдары болып табылады. Демек, оларды өңдеу нәтижесінде сабан, ұн, еден төсеніштері, астық қабықтары және т.б. сияқты көптеген қалдықтар пайда болады. Соңғылары су ортасынан зиянды заттарды алу үшін әртүрлі өнеркәсіп салаларында сорбциялық материалдар ретінде қолданылады. Жарияланған шолулар бидай, арпа және сұлыны өңдеу қалдықтары су ортасынан металл иондарын, бояғыштарды, пестицидтерді, майларды және май туындыларын кетіру үшін тиімді сорбциялық материалдар болып табылатынын көрсетті. Агроөнеркәсіптік биомассаның перспективалық әлеуетіне сүйене отырып, қарақұмық қабығы арзан және экологиялық тұрақты адсорбенттерді әзірлеу үшін ерекше перспективалық ресурс ретінде ерекшеленеді (Ai et al., 2020).

Көптеген жұмыстарда су ортасынан ластаушы заттарды кетіру үшін қарақұмық қалдықтарын өңдеп, сорбциялық материалдар ретінде пайдалану бойынша әдебиеттер талданып, қорытындыланған (Adamović et al., 2024). Жоғары тиімділік, жоғары биосорбциялық сыйымдылық, үнемділік және қалпына келтіру мүмкіндігі материалдарды ауыр металл иондарынан тазарту және қалдықтарды өңдеу үшін үнемді балама жасайтын маңызды параметрлер болып табылады. Қолданыстағы адсорбциялық және кинетикалық модельдерді қолдануды, сондай-ақ температура мен рН өзгерістерінің бидай сабаны мен бидай кебегі, қарақұмық қабығы арқылы ауыр металл иондарына сорбция әсері зерттелген.

Қарақұмық (лат. Fagopyrum) – қарақұмық тұқымдасының (Polygonaceae) шөптесін өсімдіктер тұқымдасы (Сурет 2). Биіктігі 10–100 см болатын бір жылдық немесе көп жылдық шөптесін өсімдік. Сабақтары жалаңаш, тік, бұтақтанған, біркелкі жапырақты. Жапырақтары кезектесіп орналасқан, үшбұрышты-үшбұрышты немесе сагитт-сопақша, ұзындығы 2,5-9 см, ұшы ұзартылған. Гүлдері қос жынысты, диморфты және гетеростильді. Перигинт бес бөлікті, сарғыш-жасыл, ақ немесе ашық қызғылт, ұзындығы 1,3-4 мм. Жемістер үшбұрышты, күңгірт, ұзындығы 4,5-6,5 мм. Тәжірибелік тұрғыдан алғанда тұқымдастың ең маңызды өсімдігі – нан және бал беретін өсімдік тұқымды қарақұмық (*Fagopyrum esculentum*).



Сурет 2. Қарақұмық тұқымдасы; а) Қарақұмық өсімдігі; б) Қарақұмық қабығы.

Қарақұмық тұқымында қоректік заттардың көп мөлшері бар: 63% көмірсулар, 11,7% белок, 2,4% май, 9,9% талшық, 11% су, 2% минералды заттар. Қарақұ-

мықта көп мөлшерде темір, кальций, калий, фосфор, йод, мырыш, фтор, молибден, кобальт, сондай-ақ, В1, В2, В9 (фолий қышқылы), РР және Е дәрумендері болады. Қарақұмықтың гүлденген жер үсті бөлігінде рутин, фагопирин, пирокатехол, галль, хлороген және кофеин қышқылдары. Тұқым құрамында крахмал, ақуыз, қант, майлы май, органикалық қышқылдар (малеин, менолленді, қымыздық, алма және лимон), рибофлавин, тиамин, фосфор және темір. Қарақұмық ақуызы барлық дәнді дақылдар арасында лизин мен метиониннің ең жоғары деңгейін қамтиды; оның сіңімділігі жоғары – 78%-ға дейін (Shaikhiev et al., 2020; Adamović et al., 2024).

Қарақұмық өндірісінің тағы бір негізгі қалдығы жемістің қабығы (қабығы) болып табылады. Қарақұмықты өнеркәсіптік өңдеуде қабық дәннің жалпы салмағының 14-30% құрайды. Судан ластаушы заттарды жоюға арналған адсорбенттер ретінде қарақұмық қабықтарының мүмкіндігін зерттеу өзекті болып табылады. Таза суға жаһандық сұраныстың ұдайы өсіп отырғанын және судың ластануының жоғары деңгейін ескере отырып, суды тазартудың тиімді әдістерін дамытудың басты маңызы бар. Олардың ішінде белсендірілген көмірді қолданып адсорбциялау ең тиімді әдістердің бірі. Қарақұмық қауызының тиімді адсорбент ретінде әлеуетін кеңейте отырып, олардың химиялық құрамы мен құрылымдық сипаттамалары олардың қоршаған ортаны қорғау үшін маңызы зор (Zhao et al., 2026).

(Adamović et al., 2024) жұмысында қарақұмық қабығының химиялық құрамы, әртүрлі функционалдық топтар және қолайлы физикалық қасиеттеріне байланысты ағынды суларды тазарту үшін қолдану мүмкіндігіне шолу берілген. Бірақ, қарақұмық қабығының арзан адсорбент ретіндегі мүмкіндігі жоғары болса да, қарақұмық қабығын биосорбент ретінде пайдалану туралы ғылыми әдебиеттер өте аз. 4-кестеде көрсетілгендей, биосорбент ретінде қарақұмық қабығын пайдалану арқылы ағынды су құрамындағы кейбір ауыр металл иондарын тазартуда қолдану сипатталған

Кесте 4. Судан және басқа адсорбаттардан ластаушы заттарды тазартуға арналған қарақұмық қабығы негізіндегі биосорбенттер (Adamović et al., 2024).

Биосорбенттер	Ластағыш	$q_{\max}$ (мг/г)	Түрлендіру
Бастапқы қарақұмық қабығы	Hg (II), Zn (II), Cd (II)	244.0 (35°C)	жоқ
	Zn (II), Cd (II), Co (II), Cu (II), Ni (II)	0.4-0.8	жоқ
	Cr(VI)	63.61 (35°C)	жоқ
Химиялық әдіспен түрлендірілген қарақұмық қабығы	Cu (II)	50.0	5% NaOH
	пестицид 2,4-дихлорфенок-сисірке қышқылы	161,1 (35°C)	Күкірт қышқылы
Термиялық әдіспен түрлендірілген қарақұмық қабығы	Zn (II)	151.52	Аммоний хлоридінің ерітіндісімен (2 г/л) және Fe3O4 түрленген биокөмір (массалық қатынасы 6,5:2).
	Co (II)	24.0 (35°C)	1,5 масса% натрий алгинатында + 1% (салм/көлем) CaCl2 иммобилизацияланған биокөмір

Қарақұмық қабығы судан ауыр металл иондарының кең спектрін жоюға арналған әмбебап және тиімді адсорбент екенін көрсетіліп, адсорбциялық қабілеттілігі оның құрамындағы арнайы функционалдық топтардың болуына және қатысатын металл иондарының сипаттамаларына тәуелділігі әдеби шолу ретінде көрсетілген (Adamović et al., 2024). Сонымен қатар, калий гидроксидімен (KOH) химиялық белсендірілген, одан кейін мочевина және Prussian Blue түрлендірілген қарақұмық қабығынан алынған белсендірілген көмірд алу және оның сипаттамасына арналған жұмыстар бар (Seimukhanova et al., 2025). Қарақұмық қабығынан алынған белсендендірілген көмір органикалық ластаушы заттар мен радионуклидтерді (мысалы, ^{137}Cs және ^{90}Sr), сондай-ақ металл катиондарын (K^+ , Na^+ және Li^+) жоюды қоса алғанда, суды тазарту үшін қолдану мүмкіндігі сипатталған. Авторлар алынған көміртекті материалдар бөлшектердің көлемдік таралуы, бетінің морфологиясы, құрылымдық ерекшеліктері және электрокинетикалық қасиеттерін сканерлеуші электронды микроскопиямен біріктірілген энергиядисперсиялық рентгендік спектроскопия (SEM-EDS), Фурье түрлендіру инфрақызыл спектроскопиясы (FTIR), Раман спектроскопиясы және электрофорез, сондай-ақ N_2 адсорбция-десорбция әдістерімен зерттеген. Зерттеуде белсендірілген көмірдің беттік қасиеттері мен адсорбциялық сипаттамалары оларды химиялық белсендіру мен түрлендіргішке байланысты екенін көрсетеді.

Коммерциялық белсендірілген көмір мен цеолиттер су мен ағынды суларды тазарту үшін ең көп қолданылатын адсорбенттер болып табылады, өйткені олардың беткі қабаты үлкен және ластануды жоюдың тиімді мүмкіндіктерін айқындайды; ауылшаруашылық қалдықтарынан алынған лигноцеллюлоза материалдары мен биокөмірлер сияқты балама адсорбенттердің құны төмен, экологиялық таза және регенерацияға түсуге бейімділігі бар, оларды ағынды суларды басқарудың тұрақты шешімдерін әзірлеу үшін қолданады. Қарақұмық қабығы, қарақұмық өңдеудің жанама өнімі, олардың қолжетімділігімен, үнемділігімен және энергетикалық және экологиялық мақсаттар үшін шикізат ретінде әлеуетті пайдалылығымен перспективалы нұсқа болып табылады. Қарақұмық қабығының физика-химиялық қасиеттеріне және оларды суды тазартуда қолдануға байланысты ғылыми шолулар жасалды. Судан ауыр металдар мен синтетикалық бояғыштарды қоса алғанда, ластаушы заттардың ауқымын жою үшін адсорбциялық процестерде қарақұмықтың табиғи (модификацияланбаған) және химиялық немесе физикалық түрлендірілген қабықшаларын пайдалануға ерекше назар аударылады. Қолда бар әдебиеттерге сүйене отырып, әртүрлі пішіндегі қарақұмық қабықтары дәстүрлі қалпына келмейтін адсорбенттерге тұрақты және тиімді балама болып табылатыны анық. Оларды пайдалану суды тазартудың экологиялық таза шешімін ұсынып қана қоймайды, сонымен қатар айналмалы экономика қағидаттарына сәйкес агроөнеркәсіптік қосымша өнімдерді/қалдықтарды қайта өңдеуді жеңілдетеді.

Әртүрлі әдеби көздерден алынған деректерге сүйене отырып, мақалада қарақұмық сабаны мен қабықтарының химиялық құрамы туралы ақпарат берілген. Қарақұмық өңдеу қалдықтарын әртүрлі бағалы компоненттерді алу көзі ретін-

де пайдалану туралы ақпарат берілген. Сондай-ақ табиғи және ағынды сулардан ауыр металдар иондары мен мұнай өнімдерін алу үшін ұсақталған қарақұмық сабанын сорбциялық материал ретінде пайдалану туралы әдеби деректер келтірілген (Shaikhiev et al., 2020; Adamović et al., 2024). Қарақұмық сабанын әртүрлі химиялық реагенттермен өңдеу арқылы сорбциялық қасиеттерін арттыру мүмкіндігі көрсетілген. Қарақұмық қабығында ең алдымен целлюлоза мен лигнин болатыны анықталды.

Су ортасынан ауыр металл иондарын, мұнайды, мұнай өнімдерін кетіру үшін сорбциялық материалдар ретінде қарақұмық қабығын пайдалану туралы ақпарат берілген. Ластаушы заттардың сорбциялық қасиеттерін сорбцияны өңдеу арқылы жақсартуға болатыны көрсетілді қышқыл химиялық реагенттер мен жоғары жиілікті, төмен қысымды плазмасы бар материал.

Ең жоғары адсорбция жылдамдығына қол жеткізетін қышқылмен өңдеу немесе плазмалық эсер ету параметрлері анықталды. Табиғи сабан мен қарақұмық қабықтары сулы ортадан ауыр металл иондары мен майды кетіруге арналған тиімді сорбциялық материалдар болып табылады. Сорбция ластаушы заттардың қасиеттерін химиялық немесе физика-химиялық түрлендіру арқылы жақсартуға болады.

Ауыр металл иондарын жою. Ауыр металл иондарын жою үшін көптеген тиімді әдістер бар. Дәстүрлі әдістерге химиялық тұндыру, мембраналық сүзу және ион алмасу жатады. Химиялық тұндыру әдісі қарапайымдылығына байланысты кеінен қолданылады, себебі құрамында металдары бар шөгінділерді жою үшін көп мөлшерде химиялық заттар қолдана отырып одан әрі өңдеуді қажет етеді. Химиялық тұндыру, мембраналық сүзу әдістері бастапқы капиталды және пайдалану үшін үлкен шығындарды қажет етеді. Ион алмасу әдісі сұйық немесе газ тәрізді ортадан катиондарды немесе аниондарды сорбенттер (иониттер) арқылы бөліп алудың және оларды қатты денедегі басқа иондарға алмастыруға негізделген. Ион алмасу әдісі концентрлі металл ерітінділерін тазарту үшін қолайсыз болады, өйткені матрица ағынды сулардың құрамындағы органикалық және басқа қатты заттармен оңай ластанады. Сонымен қатар, рН көрсеткіші көптеген тазарту әдістері үшін маңызды фактор болып табылады. Соңғы жылдары арзан және тиімді адсорбенттерді зерттеулерге байланысты дәстүрлі тазарту әдістерінің баламаларының бірі ретінде адсорбцияға көп назар аударылды. Адсорбенттер ретінде органикалық немесе биологиялық шығу тегі, түрлендірілген материалдар, наноөлшемді материалдар және өнеркәсіптік жанама өнімдер немесе минералды заттар, түрлендірілген биополимерлер, биомассадан алынған био-адсорбенттер және модификацияланған ауылшаруашылық және биологиялық қалдықтар қолданылуы мүмкін (Seimukhanova et al., 2025). Адсорбция процесі қайтымды және перспективалы болғандықтан, жобалау мен эксплуатация үшін икемділікті қамтамасыз етеді. Қымбат емес адсорбенттер қымбат тазарту жүйелерін алмастыра алады, сонымен бірге дәстүрлі әдістермен салыстырғанда жоғары нәтиже береді. Қымбат емес адсорбенттерді қолдану әлеуеті материалдарды бағалы және тауарлы өнімге айналдыруға мүмкіндік беретін әрі қарай түрлендіру

арқылы айтарлықтай кеңейеді. SWOT талдау арқылы талданатын қымбат емес адсорбенттердің әлсіз жақтары мен қауіптерін материалдарды модификациялау, жетілдіру және регенерациялау бойынша одан әрі зерттеу арқылы анықтауға болады. Сондықтан суды тұрақты пайдалану үшін арзан адсорбенттерді таңдау ұсынылады.

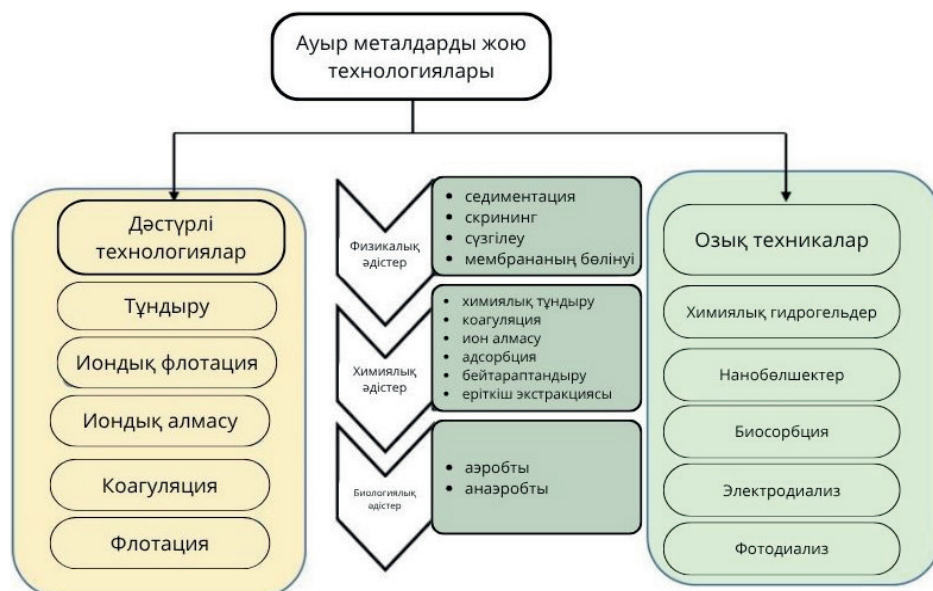
Қоршаған ортаға ауыр металдар шығарындылары, әсіресе дамушы елдерде өсуде. Органикалық ластанушылардан айырмашылығы, ауыр металдар биологиялық ыдырамайды және тірі организмдерде жиналуға бейім. Көптеген ауыр металл иондары улы немесе қатерлі ісік туғызатыны белгілі. Ауыр металдардың атомдық массалары 63,5-тен 200,6-ға дейін ауытқиды, ал олардың меншікті тығыздығы 5,0-ден асады және элементтер табиғи түрде жер қыртысында болады. Ауыр металдардың ластануы табиғат құбылыстары мен адамның шаруашылық әрекетінен туындайды. Табиғи көздерден басқа, адам әрекеті ауыр металдармен ластанудың негізгі себебі болып табылады. 5-кестеде ауыр металдардың негізгі көздеріне толық шолу берілген.

Кесте 5. Ауыр металл иондарымен ластану көздерінің графикалық көрінісі.

Ауыр металдар		
Табиғи	Антропогенді	
Ауа райының бұзылуы	Өнеркәсіптік	Муниципалды
Шөгінді ағыны	Металл балқыту	Муниципалды
Топырақ эрозиясы	Электрлік қаптау	Тұрғылықты
Жанартау атқылаулары	Былғары және тоқыма илеу	
Бөлшекті заттар	Пайдалы қазбаларды өндіру	
	Ядролық энергетика	

Кадмий, мышьяк, селен, қорғасын және сынап сияқты ауыр металдарды кеңінен пайдалану гидросфераға, биосфераға, литосфераға және атмосфераға айтарлықтай әсер етеді. Өнеркәсіптік ағынды суларда кездесетін негізгі ауыр металдар және олардың жалпы өндірістік шығу тегі 4-кестеде көрсетілген. Кейбір ауыр металдар адам үшін маңызды микроэлементтер, ұсақ микроэлементтер, микроэлементтер үшін маңызды қызмет етеді. флора, фауна. Ауыр металл иондары көп мөлшерде болған кезде қысқа және ұзақ мерзімді уыттылықты тудыруы мүмкін.

3-суретте көрсетілгендей ауыр металдарды жоюдың әртүрлі тәсілдері жүзеге асырылды. Жалпы дәстүрлі технологияларды физикалық, химиялық және биологиялық әдістерге бөлуге болады..



Сурет 3. Ағынды суларды ауыр металл иондарынан тазартудың типтік әдістері.

Ағынды суларды ауыр металл иондарынан тазарту үшін соңғы бірнеше онжылдықта түрлендірілген адсорбенттерді қолдану айтарлықтай өсті, өйткені түрлендіруші агенттер тиімді адсорбция үшін биоматериалдардың беттік қасиеттерін жақсартуға қабілетті. Олардың адсорбциясының тиімділігін бағалау үшін әртүрлі технологиялық параметрлері, изотермалар, кинетика және есептеу әдістері қолданылды. Қазіргі уақытта оларды пайдалану зертханалық масштабпен шектеледі, оларды коммерциялық немесе ауқымды өндіріске кеңейтуді қажет етеді. Адсорбенттердің тиімділігін өндіріс шығындарымен теңестіру үшін жаңа әдістер мен технологияларды мұқият зерттеу қажет. Бірақ, экологиялық таза тауарларға айналмай, үлкен көлемдегі ауылшаруашылық қалдықтарының жаһандық өндірісі ауылдық жерлердің ластануына және белгілі бір дәрежеде ауылдық жерлерде егіншілікті жүзеге асыруды қиындатады. Нәтижесінде ауыл шаруашылығы қалдықтарынан экологиялық таза тауарларды өндіру ауыл шаруашылығы қалдықтарын жағудан туындаған ауаның ластану деңгейін тиімді төмендетеді (Hussein et al., 2025). Климаттың өзгеруіне, суды тазартуға және жалпы қоршаған ортаны қорғауға қатысты биомасса адсорбенттерінің дамуы маңызды рөл атқарады. Сонымен қатар, бүкіл әлемдегі аналитикалық есептерге сәйкес, биомасса негізіндегі адсорбенттердің адсорбциялық қасиеттерін жақсартуға басымдылық беріліп, ғылыми зерттеулердің басты мақсаттары болып отыр. Арзан адсорбенттердің адсорбциялық қабілетін одан әрі арттыру үшін биомасса негізіндегі адсорбенттерге қосуға болатын агенттерді табуға негіз болды.

Екінші жағынан, түрлендіру процесінің күрделілігі, оның қаржылық қиындықтары және әртүрлі химиялық түрлендіргіштермен байланысты экологиялық мәселелер айтарлықтай назар аудартып отыр. Ауыл шаруашылығы қалдықтарын

пайдаланып биокөміртек өндірісі ең бәсекеге қабілетті, экологиялық таза және тұрақты технологиялық стратегия болып саналады. Қазіргі уақытта шығарындыларды азайту, климаттың өзгеруін азайту, ресурстар циклін басқару, энергияны үнемдеу және қоршаған ортаны қорғау үшін қалдықтарды басқару өзекті мәселе екені белгілі. Сондықтан биомасса негізіндегі адсорбенттердің болашағын бағалау үшін келесі перспективаны пайдалану керек:

1) Биомасса негізіндегі адсорбенттердің коммерциялануын ынталандыру үшін ауылшаруашылық қалдықтарын карбонизациялау технологиясын әзірлеу және жетілдіру маңызды.

2) Биологиялық сорбция процесінде қолдану үшін өте тиімді экологиялық таза түрлендіргіш заттар мен процестерді әзірлеу қажет.

3) Болашақта ластану ауқымында инженерлік мәселелерді шешу үшін биомасса негізіндегі адсорбенттерді пайдалануды қамтитын зерттеулерді кеңейту керек.

Қорытындылай келе, ауылшаруашылық қалдықтары биомасса негізіндегі адсорбенттерге қарағанда артықшылықтары бар және қоршаған ортаны қорғау қолданбаларында қымбат коммерциялық белсендендірілген көмірді ауыстыру үшін пайдаланылуы мүмкін.

Қорытынды. Ағынды сулардан ауыр металдарды жою қазіргі экологиялық химияның маңызды міндеті болып табылады. Қолданыстағы әдістердің ішінде адсорбция жоғары тиімділігімен, іске асырудың қарапайымдылығымен және арзан табиғи шикізаттарды пайдалану мүмкіндігімен ерекшеленеді. Өнеркәсіптің қарқынды дамуы су объектілеріне өте уытты, биожинақталатын, биологиялық ыдырамайтын келесі химиялық элементтерді қорғасын (Pb), кадмий (Cd), хром (Cr), мыс (Cu) және мырыш (Zn) сияқты ауыр металдардың шығарындыларының артуына әкеледі. Ағынды су құрамындағы ауыр метал иондарын жоюда ауылшаруашылық қалдықтарын адсорбент ретінде пайдалану ғалымдардың зерттеулерінде көрсетілген. Мысалы, Солтүстік Қазақстан облысының қарақұмық қабықтары көміртегіге бай, қолжетімді ауыл шаруашылығы қалдықтары болып табылады. Қарақұмық қабығында целлюлоза, лигнин, гемицеллюлоза бар. Осы компоненттер оларды көміртегі сорбенттерін өндіруге қолайлы шикізат етеді. Қарақұмық қабығын ағынды су құрамындағы ауыр метал иондарын жою үшін пайдаланудың артықшылықтары:

- Төмен шикізат құны;
- Ауыл шаруашылығы қалдықтарын қайта өңдеу;
- Экологиялық қауіпсіз;
- Жоғары тазалау тиімділігі.

Қарақұмық қабығынан алынған белсендендірілген көмірді пайдалану ағынды суларды ауыр металдарды тазартудың перспективалы тәсілі, сонымен қатар, экологиялық қауіпсіздікті, үнемділікті және жоғары сорбциялық қабілеттілікті біріктіреді.

Бүгінгі таңда ағынды суларды тазарту үшін өнеркәсіпте жергілікті қолжетімділігіне, техникалық мүмкіндігіне, инженерлік қолданылуына және шығындардың тиімділігіне байланысты арзан адсорбенттерді кеңінен қолдану-

дың маңызы зор. Егер, қолжетімді және өзіндік құны төмен адсорбенттер ағынды судағы ауыр металдарды жоюда жақсы нәтиже көрсетсе, оларды тек шығындардың тиімсіздігін азайту үшін ғана емес, сонымен қатар пайдалылықты арттыру үшін өнеркәсіпте кеңінен қолдануға болады. Бүгінгі таңда ағынды суларды тазартуда оны практикалық қолданудың экономикалық тиімділігін бағалау үшін ауыр металдарды жою үшін арзан адсорбенттерді пайдаланудың шығындары мен мүмкіндіктеріне талдау жүргізу қажет. Арзан адсорбенттерді пайдалану қоршаған ортаның тұрақтылығына ықпал етуі мүмкін. Арзан адсорбенттерді ағынды су құрамындағы ауыр метал иондарынан тазартуға байланысты ғылыми зерттеулерде келесі технологиялық шарттарға назар аударылу керек: белсендіру шарттарын оңтайландыру, сорбент бетін өзгерту, өнеркәсіптік қолдану үшін технологияны масштабтау. Әрине, арзан адсорбенттер болашақта коммерциялық мақсатта көптеген перспективалы артықшылықтарға қол жеткізеді.

Қазіргі уақытта ағынды сулар құрамындағы ауыр металдарды жою маңызды рөл атқарады, өйткені ауыр металдар қоршаған ортаға қауіпті әсер етеді. Сондықтан ауыр металдарды жоюдың көптеген әдістері бар. Дәстүрлі әдістер мен фотокатализбен салыстырғанда адсорбциялық процестерді қолданудың көптеген мүмкіндіктері мен перспективалары бар. Атап айтқанда, арзан адсорбенттер адсорбенттер тиімді және үнемді материалдар ретінде қолданылады, ағынды сулардан ауыр металл иондарын тазарту бойынша зерттеулердің бағыттылығын айқындайды. Ең бастысы, ең қолайлы әдісті таңдау үшін ағынды сулардың физикалық қасиеттері мен әдістердің сипаттамалары маңызды рөл атқарады. Ұсынылған шолу құрамында ауыр металл иондары бар ағынды суларды тазартуға байланысты жүргізілетін ғылыми зерттеулер үшін үлгі болады.

Қорытындылай келе, дүниежүзінде тұщы су тапшылығына байланысты ағынды суларды тазарту және қайта өңдеу кең таралған. Ағынды сулардан таза су алу технологиялары да жақсы дамыған және қолжетімді. Сонымен қатар, ағынды суларды қайта өңдеудің болашағы туралы халықтың әртүрлі ақпарат құралдарынан қажетті мәліметті алуы мен біліміне байланысты. Дамыған елдерде суды қайта өңдеу жақсы жолға қойылғанымен, дамушы елдерде инфрақұрылымның талапқа сәйкес келмеуі және халықты хабардар етудің жеткіліксіздігінен болуы мүмкін.

References

- Abiodun O.A., Oluwaseun O., Oladayo O.K., George A.A., Opatola E., Orah R.F., Isukuru E.J., Edel Ch., Oluwayomi O.T., Okolie J.A., Omotayo I.A. (2023). Remediation of Heavy Metals Using Biomass-Based Adsorbents: Adsorption Kinetics and Isotherm Models. *Clean Technol.* – No. 5. – P. 934-960. <https://doi.org/10.3390/cleantechnol5030047>. (in Eng.).
- Adamović M., Stjepanović M., Velić N. (2024). Exploring the potential of buckwheat hull-based biosorbents for efficient water pollutant removal. *Croatian Journal of Food Science and Technology.* – No. 16 (2). – P. 273-289. <https://doi.org/10.17508/CJFST.2024.16.2.08>. (in Eng.).
- Ai T., Jiang, X., Liu Q., Lv L., Dai S. (2020). Single-component and competitive adsorption of tetracycline and Zn(II) on an NH₄Cl-induced magnetic ultra-fine buckwheat peel powder biochar from water: studies on the kinetics, isotherms, and mechanism. *RSC Advances*. – No. 10(35). – P. 20427-20437. <https://doi.org/10.1039/d0ra02346a> (in Eng.).
- Biltayib B. M., Bonyani M., Khan A., Su C.-H. and Yu Y.-Y. (2021). Predictive modeling and

simulation of wastewater treatment process using nano-based materials: effect of pH and adsorbent dosage, *J. Mol. Liq.* – No. 343. – P. 117611. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117611 (in Eng.).

Cheng K., Wallaert S., Ardebili H. and Karim A. (2022). Advanced triboelectric nanogenerators based on low-dimension carbon materials: a review. *Carbon.* – No. 194. – P. 81-103. DOI:10.1016/j.carbon.2022.03.037. (in Eng.).

Diaz De Tuesta J.L., Roman F.F., Marques V.C., Silva A.S., Silva A.P.F., Bosco T.C., Shinibekova A.A., Sadenova A., Kalmakhanova M.S., Massalimova B.K., Arrobas M., Silva A.M. T., Gomes H.T. (2022). Performance and modeling of Ni(II) adsorption from low concentrated wastewater on carbon microspheres prepared from tangerine peels by FeCl₃-assisted hydrothermal carbonization. *Journal of Environmental Chemical Engineering.* – No. 10. – P. 108143. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2022.108143>. (in Eng.).

Duan C., Ma T., Wang J. and Zhou Y. (2020). Removal of heavy metals from aqueous solution using carbon-based adsorbents: a review, *J. Water Process. Eng.* – No. 37. – P. 101339. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2020.101339>. (in Eng.).

Hussein E.B., Rasheed F.D, Mohammed A.S., Kayani K.F. (2025). Emerging nanotechnology approaches for sustainable water treatment and heavy metals removal: a comprehensive review. *Royal society of chemistry Adv.* – No. 15. – P. 41061-41107. (in Eng.).

Khalil K. M. S., Elhamdy W. A. and Elsamahy A. A. (2022). Biomass derived P-doped activated carbon as nanostructured mesoporous adsorbent for chromium(VI) pollutants with pronounced functional efficiency and recyclability, *Colloids Surf., A.* – No. 641. – P. 128553. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2022.128553. (in Eng.).

Metuyouy K., Benkirane L., Sánchez M.E., Cara-Jiménez J., Plakas K.V., Chafik T. (2024). Valorization of agricultural olive waste as an activated carbon adsorbent for the remediation of water sources contaminated with pharmaceuticals. *Sustainable Chemistry for the Environment.* – No. 6. – P. 100110. <https://doi.org/10.1016/j.scenv.2024.100110>. (in Eng.).

Pandey P., Khan F., Agarwal S., and Singh M. (2023). Nano Adsorbents in Wastewater Treatment: A New Paradigm in Wastewater Management. *AMG Transcend Association.* – No. 12 (4). – P. 125. DOI: 10.33263/LIANBS124.125. (in Eng.).

Seimukhanova L., Zhantikejev U., Sapargali I., Kunarbekova M., Kudaibergenov K., Skwarek E., Azat S. (2025). Surface and Structural Characterization of Buckwheat Husk-Derived Activated Carbons: Correlation of SEM, Elemental, FTIR, Raman, and Porous Properties with Electrokinetic Behavior. *International Journal of Molecular Sciences.* – No. 27. – P. 1803. <https://doi.org/10.3390/ijms27041803>. (in Eng.).

Shaikhiev I.G., Sverguzova S.V., Galimova R.Z., Grechina A.S. (2020). Using wastes of buckwheat processing as sorption materials for the removal of pollutants from aqueous media: a review. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* – No. 945. – P. 012044. DOI:10.1088/1757-899X/945/1/012044. (in Eng.).

UN Water. (2025). The United Nations World Water Development Report 2025: Mountains and glaciers Mountains and glaciers Water towers. UNESCO. <https://doi.org/10.54679/LHPJ5153>. (in Eng.).

Vahedi S., Yazdi M. S., Arani A. R. and Azadfalsh M. (2021). A comparative study on the effect of pH values and carbonic additives on the supercapacitive performance of LDH-derived Ni-Co-Al oxide. *J. Energy Storage.* – No. 43. – P. 103211. (in Eng.).

Wang B., Lan J., Bo Ch., Ou J. (2023). Adsorption of heavy metal onto biomass-derived activated carbon: review. *RSC Advances.* – P. 4275-4302. DOI: 10.1039/d2ra07911a. (in Eng.).

Wang Y, Liu Z, Chen X, Sun D, Sun Y, Liu L, Li J, Li S. (2025). Preparation of biomass activated carbon and its adsorption performance for anionic/cationic dyes(10mg/L): A case study of coffee grounds, hemp stalks and macadamia nut shells. *Next Materials,* – No. 9. – P. 101258. <https://doi.org/10.1016/j.nxmate.2025.101258>. (in Eng.).

Yin D., Wang Z., Wen X., Ding Y., Hou X., Geng Y. and Li Y. (2019). Effects of carbon concentration, pH, and bubbling depth on carbon dioxide absorption ratio in microalgae medium. *Environ. Sci. Pollut. Res.* – No. 26. – P. 32902-32910. (in Eng.).

Yuan Y., An Z., Zhang R., Wei X. and Lai B. (2021). Efficiencies and mechanisms of heavy metals adsorption on waste leather-derived high-nitrogen activated carbon. *J. Cleaner Prod.* – No. 293. – P. 126215. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.126215>. (in Eng.).

Zhao Jiayu, Luo Qian, Zhao Wenlong, Li Cong, Xiao Junyang, Li Junfeng, Zhu Xuemei. (2026). A chitosan-modified buckwheat hull biochar dynamic adsorption column as a sustainable and efficient technology for lead-acid battery wastewater treatment. *Environmental Science Water Research & Technology*. – No. 12. – P. 1209-1221. DOI: 10.1039/d5ew01081k. (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 272–285

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.451>

UDC: 536.6
IRSTI: 29.19.09

©Nurtai Zh.¹, Orynbassar R.², Aimaganbetova Z.K.², Zhanturina N.N.^{2*}, 2026.

¹K. Kulazhanov Kazakh Technology and Business University, Astana, Kazakhstan;

²K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan.

E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz

SIMULATION OF KINETIC PARAMETERS OF VINYL ESTER RESIN SAMPLES WITH DIATOMITE AND DIMETHYL METHYLPHOSPHONATE FILLERS

Nurtai Zhadyra — PhD, Associate Professor, K. Kulazhanov Kazakh Technology and Business University, Astana, Kazakhstan,

E-mail: zhadira_nurtai@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0744-0389>;

Orynbassar Raigul — Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

E-mail: raihan_06_79@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6198-3018>;

Aimaganbetova Zukhra — PhD, Associate Professor, Docent, 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, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan,

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

Abstract. This article presents the results of predicting the kinetic properties of composite materials based on vinyl ester resin (VER) with the addition of diatomaceous earth and dimethyl methylphosphonate (DMMP) using the Netzsch Kinetics Neo software based on the results of thermogravimetric analysis (TGA). The VER samples were synthesized at the University of Science and Technology of China (Hefei, China) as part of a project funded under a targeted grant program. The kinetic characteristics of four samples were predicted based on the results of thermogravimetric analysis: Pure VER, VER + DE – a VER sample with a diatomite concentration of 25%, VER+DE/DMMP – VER with physically mixed DMMP and diatomite at concentrations of 12.5% and 12.5%, respectively, and VER + DE@DMMP – a sample with DMMP immobilized in the pores of diatomite (25%). Based on the TGA curves, models were selected in the Netzsch Kinetics Neo software, which allow for the prediction of the samples' kinetic properties under specific conditions over a defined period of time—something that is not feasible under laboratory conditions. Models were selected in the Netzsch Kinetics

Neo software. For the pure sample, the model corresponded to a simple first-order reaction; for VER with diatomite, independent reactions (simple and diffusion); for VER+DE/DMMP and VER+DE@DMMP, autocatalytic A2 and A3, and diffusion D3.

The results of the analysis showed that pure VER decomposes very slowly at low temperatures, but quite rapidly at high temperatures, compared to the other samples. The VER+DE/DMMP and VER+DE@DMMP samples exhibit a higher decomposition rate in the initial stages, whereas mass loss slows down at high temperatures.

In the dynamic mode, the pure VER sample showed the shortest decomposition time and the lowest temperature. In the immobilized sample, decomposition proceeds slightly faster than in the diatomite sample. The composite with physically mixed diatomite and DMMP demonstrated intermediate decomposition temperatures and times.

The results obtained open up opportunities for the development of new fire-resistant materials with controllable functional properties.

Keywords: vinyl ester resin, diatomite, DMMP, thermogravimetric analysis, Netzsch Kinetics Neo, degradation, decomposition time

Acknowledgments. This work was supported by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR28712729).

For citations: Nurtai Zh., Orynbasar R., Aimagambetova Z.K., Zhanturina N.N. Simulation of Kinetic Parameters of Vinyl Ester Resin Samples with Diatomite and Dimethyl Methylphosphonate Fillers. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 272–285. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.451>

©Нуртай Ж.¹, Орынбасар Р.О.², Аймаганбетова З.К.²,
Жантурина Н.Н.^{2*}, 2026.

¹Қ. Құлажанов атындағы Қазақ технология және бизнес университеті,
Астана, Қазақстан;

²Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан.
E-mail: nzhanurina@zhubanov.edu.kz

ДИАТОМИТ пен ДИМЕТИЛ МЕТИЛФОСФОНАТ ТОЛТЫРҒЫШТАРЫ БАР ВИНИЛЭФИР ШАЙЫР ҮЛГІЛЕРІНІҢ КИНЕТИКАЛЫҚ ПАРАМЕТРЛЕРІНІҢ МОДЕЛЬДЕУ

Нуртай Жадыра — PhD, қауымдастырылған профессор, Қ. Құлажанов атындағы Қазақ технология және бизнес университеті, Астана, Қазақстан,
E-mail: zhadira_nurtai@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0744-0389>;

Орынбасар Райгуль — техника ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,
E-mail: raihan_06_79@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6198-3018>;

Аймаганбетова Зухра — PhD, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

E-mail: z.aimaganbetova@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-8765-516X>;

Жантурина Нургул — PhD, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан,

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

Аннотация. Бұл мақала Netzsch Kinetics Neo бағдарламасын пайдалана отырып, термогравиметриялық талдау (ТГА) нәтижелерінен негізінде диатомит пен диметил метилфосфонат (DMMP) қосылған винил эфир шайыры (VER) негізіндегі композиттік материалдардың кинетикалық қасиеттерін болжау зерттеуінің нәтижелерін ұсынады. VER үлгілері Қытай Ғылым және технология университетінде (Хэфэй, Қытай) мақсатты бағдарлама аясында қаржыландырылған жоба шеңберінде синтезделді. Термогравиметриялық талдау нәтижелері негізінде төрт үлгінің кинетикалық сипаттамаларын болжау жүргізілді: таза VER, VER + DE – диатомит концентрациясы 25% болатын VER үлгісі, VER+DE/DMMP – DMMP пен диатомит 12,5% және 12,5% концентрацияда физикалық араласқан VER; VER + DE@DMMP – диатомит тесіктерінде бекітілген DMMP-і бар үлгі (25%). ТГА қисықтарына сүйене отырып, Netzsch Kinetics Neo бағдарламасы арқылы модельдер таңдалды; бұл модельдер үлгілердің белгілі бір жағдайларда белгіленген уақыт аралығындағы кинетикалық қасиеттерін болжауға мүмкіндік береді, ал зертханалық жағдайларда мұны жүзеге асыру мүмкін емес. Модельдер Netzsch Kinetics Neo бағдарламасында таңдалды. Таза үлгі үшін модель қарапайым бірінші реттік реакцияға сәйкес келді; диатомит қосылған VER үшін – тәуелсіз реакциялар (қарапайым және диффузиялық); VER+DE/DMMP және VER+DE@DMMP үшін – автокаталитикалық А2 және А3, диффузиялық D3.

Талдау нәтижелері таза VER-дің төмен температурада өте баяу ыдырайтынын, ал жоғары температурада басқа үлгілерге қарағанда салыстырмалы түрде тез ыдырайтынын көрсетті. VER+DE/DMMP және VER+DE@DMMP үлгілері бастапқы кезеңдерде ыдырау жылдамдығы жоғары болса, жоғары температурада массаның жоғалуы бәсеңдеді.

Динамикалық режимде таза VER үлгісі ыдырау уақытының ең қысқа болуын және ең төменгі температураны көрсетті. Иммобилизацияланған үлгіде ыдырау диатомит қосылған үлгіге қарағанда сәл жылдам жүреді. Физикалық жолмен араластырылған диатомит пен DMMP қоспасы ыдыраудың орташа температурасы мен уақытын көрсетті.

Алынған нәтижелер басқарылатын функционалдық қасиеттері бар жаңа отқа төзімді материалдарды әзірлеуге мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: винил эфир шайыры, диатомит, DMMP, термогравиметриялық талдау, Netzsch Kinetics Neo, деградация, ыдырау уақыты

©Нуртай Ж.¹, Орынбасар Р.О.², Аймаганбетова З.К.²,
Жантурина Н.Н.^{2 *}, 2026.

¹Казахский университет технологий и бизнеса имени К. Кулажанова;

²Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова.

E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ОБРАЗЦОВ ВИНИЛЭФИРНЫХ СМОЛ С НАПОЛНИТЕЛЯМИ ИЗ ДИАТОМИТА И ДИМЕТИЛМЕТИЛФОСФОНАТА

Нуртай Жадыра — PhD, ассоциированный профессор, Казахский университет технологий и бизнеса имени К. Кулажанова, Астана, Казахстан,

E-mail: zhadira_nurtai@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0744-0389>;

Орынбасар Райгуль — кандидат технических наук, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет имени К. Жубанова, Актюбе, Казахстан,

E-mail: raihan_06_79@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6198-3018>;

Аймаганбетова Зухра — PhD, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, Актюбе, Казахстан,

E-mail: z.aimaganbetova@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-8765-516X>;

Жантурина Нургул — PhD, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет имени К.Жубанова, Актюбе, Казахстан,

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

Аннотация. В статье представлены результаты прогнозирования кинетических характеристик композитных материалов на основе винилэфирной смолы (VER), модифицированной диатомитом и диметилметилфосфонатом (Dimethyl Methylphosphonate, DMMP), с использованием программного комплекса Netzsch Kinetics Neo на основе данных термогравиметрического анализа (ТГА). Образцы винилэфирной смолы были синтезированы в Университете науки и технологий Китая (г. Хэфэй, КНР) в рамках выполнения проекта программно-целевого финансирования. Проведено моделирование кинетических параметров четырех типов образцов: Pure VER (чистая винилэфирная смола), VER + DE (образец с содержанием диатомита 25 %), VER + DE/DMMP (образец с физически смешанными диатомитом и DMMP в концентрациях по 12,5 %), а также VER + DE@DMMP (образец с DMMP, иммобилизованным в порах диатомита, с общим содержанием наполнителя 25 %). На основании кривых ТГА в программе Netzsch Kinetics Neo были подобраны кинетические модели, позволяющие прогнозировать поведение материалов при различных температурных режимах и продолжительности воздействия, что затруднительно реализовать в лабораторных условиях. Для чистой смолы наиболее адекватной оказалась модель простой реакции первого порядка. Для образца VER + DE установлена комбинация независимых реакций первого порядка и диффузионного механизма. Для образцов VER + DE/DMMP и VER + DE@DMMP наиболее соответствующими оказались автокаталитические модели A2 и A3 в сочетании с диффузионной моделью D3. Результаты показали, что чистая винилэфирная смола характеризуется медленным разложением при низких темпера-

турах и более интенсивной деградацией при высоких температурах по сравнению с модифицированными образцами. Композиты VER + DE/DMMP и VER + DE@DMMP демонстрируют повышенную скорость разложения на начальных стадиях процесса, тогда как при высоких температурах скорость потери массы снижается. В динамическом режиме чистая смола характеризуется минимальным временем термического разложения и наиболее низкой температурой деструкции. Для образца с иммобилизованным DMMP процесс разложения протекает несколько быстрее, чем для композита, содержащего только диатомит. Образец с физически смешанными диатомитом и DMMP характеризуется промежуточными значениями температуры и времени разложения. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности использования диатомита и диметилметилфосфоната для создания новых огнестойких полимерных материалов с регулируемыми эксплуатационными свойствами.

Ключевые слова: винилэфирная смола, диатомит, DMMP, термогравиметрический анализ, Netzsch Kinetics Neo, деградация, время разложения

Introduction. Polymer composites are a special class of materials that combine a polymer matrix with reinforcing or functional fillers, enabling the production of materials with predetermined physical, chemical, mechanical, and performance properties. Due to their low weight, low cost, and desirable thermal properties, they are widely used in industries such as construction, transportation, aviation, energy, and the chemical industry (Wu et al., 2023).

A significant drawback is the rapid flammability and combustibility of the polymer matrix, as well as rapid heat release. To address this issue, the development of flame retardants that create a protective barrier during combustion and prevent the formation of carbon residue is becoming increasingly relevant (Wang et al., 2023).

Vinyl ester resins (VER) are unsaturated polyester resins with enhanced chemical resistance and strength (Pączkowski et al., 2022). These materials are produced by reacting epoxy resin with methacrylic acid. The resulting epoxyacrylates dissolve in monomers. The resulting liquid resins can be used similarly to unsaturated polyester resins (UPR) (Nodehi et al., 2022).

Vinyl ester resins can be viewed as a compromise between unsaturated polyester and epoxy resins (Todjiyev et al., 2026).

However, due to their polymer matrix, ECMs are not sufficiently fire-resistant, which limits their application (Hu et al., 2022). This problem has been partially solved by physically adding fire-retardant substances to the resins or chemically introducing fire-retardant groups into their network structure (Zhang et al., 2020). However, while flame retardants increase the material's fire resistance, they simultaneously contribute to the deterioration of certain physicochemical properties (Li et al., 2022).

One of the fillers that minimally degrades the properties of the polymer matrix of the fire-retardant material is dimethyl methylphosphonate (DMMP), which possesses flame-retardant properties through

the interaction of the generated radicals with $H\bullet$ and $OH\bullet$ radicals (Xavier et al.,

2025). Due to its volatility, DMMP does not remain in the polymer matrix for long, and its effect is short-lived.

Scientists from the University of Science and Technology of China have found a way to ensure the long-term flame-retardant properties of DMMP by immobilizing DMMP in the micro- and nanoporous channels of diatomaceous earth (DE) and then incorporating it into vinyl ester resin (VER) (Xie et al., 2026).

The choice of diatomite was justified, first, by its widespread occurrence in Kazakhstan (Aktobe Region), and second, by its porous structure, which stems from its origin in sedimentary rocks and algae (Xu et al., 2019). The fire-retardant and flame-suppressing properties of diatomite are well known (Bi et al., 2024).

When characterizing new materials using analytical methods to determine thermal properties, thermogravimetric analysis is employed, which allows for the determination of mass loss at various temperatures under a specified heating rate. In the Netzsch Kinetics Neo software, based on the analysis data, it is possible to determine predictive kinetic characteristics, such as the degree of degradation over a very long period of time that cannot be analyzed under laboratory conditions, the calculation of the degradation temperature, the degradation time at very high heating rates that cannot be set on a laboratory instrument, and other characteristics (Harter et al., 2022).

This study presents data on the prediction of kinetic characteristics of VER-based composites with diatomite and DMMP additives based on thermogravimetric analysis using the Netzsch Kinetics Neo software.

Materials and Methods. Composite materials based on vinyl ester resin with the addition of diatomaceous earth and DMMP were prepared at the University of Science and Technology of China (Hefei, China) as part of a project funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR28712729) [[16]].

Four VER samples were used to record and study the kinetic characteristics:

Pure VER, VER + DE – a VER sample with a diatomite concentration of 25%, VER+DE/DMMP – VER with physically mixed DMMP and diatomite at concentrations of 12.5% and 12.5%, respectively, VER + DE@DMMP – a sample with DMMP immobilized in the pores of diatomite (25%).

The composite containing DE@DMMP was prepared by first vacuum-immobilizing DMMP within the pores of DE (producing DE@DMMP), after which the resulting filler was incorporated into vinyl ester resin (VER) with stirring until a homogeneous dispersion was achieved. The mixture was degassed under vacuum, then a curing accelerator and initiator (each at 1.5 wt.% relative to the resin) were added, poured into molds, and cured at room temperature until the composite was fully formed.

Thermogravimetric analysis was performed on a NETZSCH TG 209 F1 Libra (Germany) instrument, dynamically heating the sample in a 40 mL/min flow of inert nitrogen gas from room temperature to 800 °C. The heating rate was 10 °C/min.

Kinetics analysis was performed using the NETZSCH Kinetics-Neo (Germany) software. The program works as follows: first, TGA data obtained under real-world conditions—that is, up to a temperature of 800 °C with a heating rate of 10 °C/min—are

loaded into the program. Then, based on the TGA data, the program selects a model corresponding to a single reaction or several parallel reactions. Using this program, it is possible to predict the thermal properties of a material under certain conditions that cannot be replicated in a laboratory, such as very high temperatures, high heating rates, isothermal conditions, and the behavior of the material over an unlimited period of time.

Results and Discussion. We obtained the thermogravimetric analysis results of the four samples and performed modeling in the NETZSCH KINETIC NEO program. The following figures show the models (Figures 1, 2, 3, and 4).

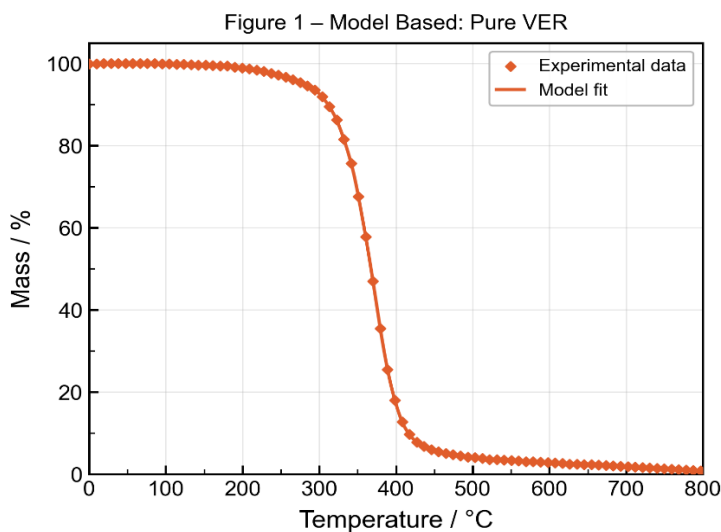


Figure 1. Model of pure VER.

The TGA curve shows that significant mass loss in the pure VER sample begins at 300 degrees, and by 400 degrees, half of the sample's mass has already been lost. From 440 degrees onward, the mass begins to decrease only slightly. Accordingly, degradation begins after 27 minutes, 50% of the mass is lost after 36 minutes, and the rate of loss slows down after 42 minutes. It takes about an hour for the mass to be completely lost.

The reaction model of the pure sample corresponds to a simple first-order F_n reaction, and the activation energy is 103.5 kJ/mol.

The reaction follows the following formula

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

here α conversion degree, k – rate constant.

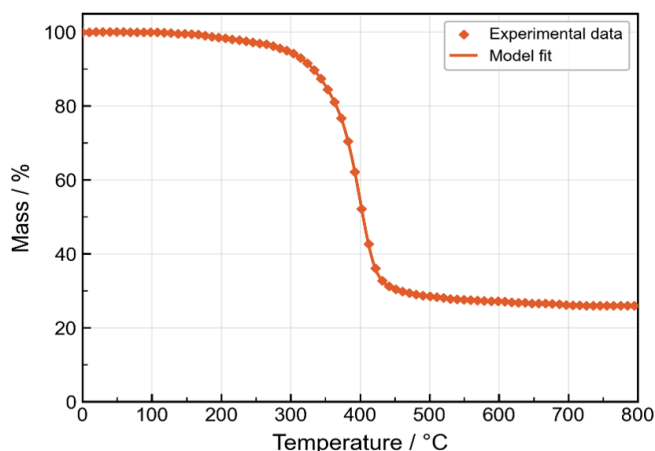


Figure 2. Model of VER + DE.

A significant loss of mass in the VER sample containing diatomite also begins at a temperature of 300 degrees, reaching 50% decomposition at 419 degrees. From 454 degrees onward, the mass begins to decrease slightly. At a temperature of 800 degrees, approximately 30% of the mass remains. Accordingly, degradation begins at 29 minutes, 50% of the mass is lost by 39 minutes, and the rate of loss slows down after 45 minutes. It takes 77 minutes for the mass to decrease by 30%.

The model for the diatomite-added sample consists of two independent reactions – a first-order F_n reaction and a D3 reaction (181 kJ/mol and 13 kJ/mol, respectively).

D3 — Diffusion model (3D: Jander model). This model describes diffusion-controlled processes in solid materials. The reaction equation is:

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

Here, the speed is highly dependent on the product being generated.

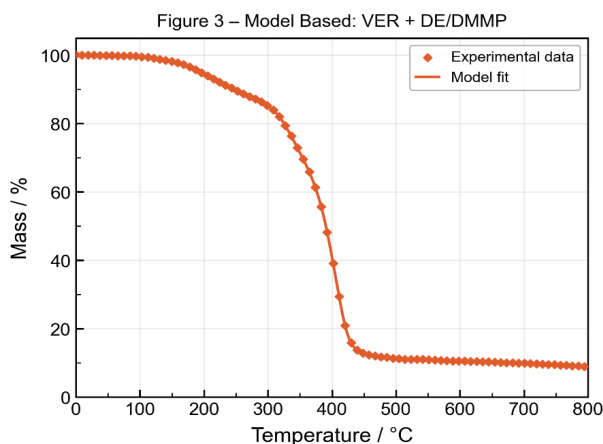


Figure 3. The model of VER+DE/DMMP.

A significant loss of mass in the VER sample, which contains physically mixed DMMP and diatomite, begins at a temperature of 303 degrees, reaching 50% decomposition at 408 degrees. From 458 degrees onward, the mass begins to decrease slightly. At a temperature of 800 degrees, approximately 20% of the mass remains. Accordingly, degradation begins at 28 minutes, 50% of the mass is lost by 38 minutes, and the rate of loss slows down after 43 minutes. It takes 77 minutes for the mass to decrease by 20%.

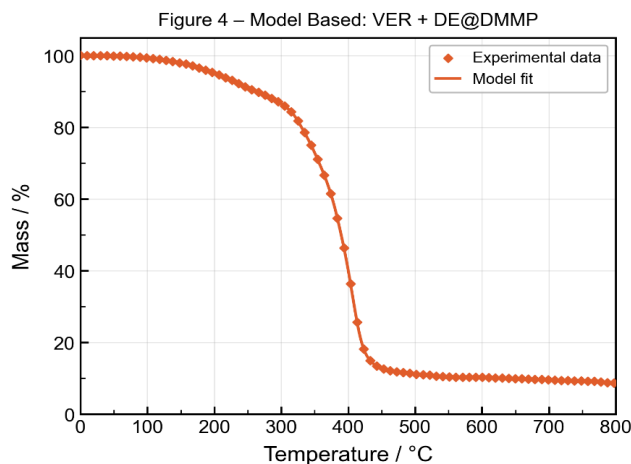


Figure 4. The model of VER + DE@DMMP.

A significant loss of mass in the VER sample, with DMMP mobilized in the diatomite pores, begins at a temperature of 313 degrees, reaching 50% decomposition at 405 degrees. From 453 degrees onward, the mass begins to decrease slightly. At a temperature of 800 degrees, approximately 15% of the mass remains. Accordingly, degradation begins at 29 minutes, 50% of the mass is lost by 38 minutes, and the rate of loss slows down after 43 minutes. It takes 75 minutes for the mass to decrease by 15%.

The VER+DE/DMMP and VER + DE@DMMP models correspond to three independent parallel reactions: A2 (21–48 kJ/mol), A3 (52–129 kJ/mol), D3 (164–40 kJ/mol). The activation energies for the VER+DE/DMMP and VER + DE@DMMP models are shown in parentheses.

A2 — Autocatalytic reaction model, corresponding to equation

$$d\alpha/dt = k \cdot \alpha \cdot (1 - \alpha).$$

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

A3 — Autocatalytic reaction model

$$d\alpha/dt = k \cdot \alpha^2 \cdot (1 - \alpha),$$

here, the rate is highly dependent on the product being generated.

It can be observed here that in the VER sample containing physically mixed diatomite and DMMP, autocatalysis is initiated more readily compared to the immobilized sample, whereas diffusion, conversely, proceeds more slowly. In the sample with immobilized DMMP, there is a protective barrier, which slows down the chemical reactions.

After importing the TGA data into the NETZSCH Kinetics-Neo software, we predicted the kinetic characteristics of the samples under isothermal conditions. In doing so, we estimated the rate of mass loss for the samples at specific temperatures.

The results are shown in Table 1, which presents data on the time of mass loss at specific fractions and at different holding temperatures.

Table 1. Time of mass loss at different temperatures.

	Time of 10% mass lost		Time of 50% mass loss	
Pure VER	100 ^o	17 month	100 ^o	11 years
	200	90 hours	200	3 days
	300	1.5 hours	300	35 min
	400	18 min	400	2 min
VER+DE	100 ^o	2.9 year	100 ^o	23 years
	200	1 day	200	9 days
	300	12 min	300	3.6 hour
	400	0.7 min	400	6 min
VER+DE/DMMP	100 ^o	3 days	100 ^o	11 days
	200	1.8 hours	200	7 hours
	300	3 min	300	37 min
	400	36 sec	400	6.8 min
VER + DE@DMMP	100 ^o	4.8 hour	100 ^o	4.5 days
	200	29 min	200	4 hour
	300	5 min	300	33 min
	400	1.2 min	400	5.7 min

According to the program data, the maximum mass loss for pure VER is 82%, for the VER+DE sample it is 68%, for VER+DE/DMMP it is 79%, and for VER+DE@DMMP it is 84%.

The rate of mass loss depends heavily on temperature, and as the temperature rises, the degradation rate increases sharply.

VER+DE is the least thermally stable at low temperatures (2.9 years to 10% loss at 100°C—longer than Pure), but at high temperatures (300–400°C), degradation occurs more rapidly.

VER+DE/DMMP loses 10% of its mass very quickly at 300–400 °C (3 min and 36 sec). The thermal stability of VER+DE@DMMP is intermediate.

At 100 and 200 degrees, pure VER and VER with diatomaceous earth degrade over years, whereas VER+DE/DMMP and VER + DE@DMMP degrade over days and hours. However, at high temperatures, the difference in degradation time disappears (minutes and hours).

The degradation rate depends on temperature; the higher the temperature, the faster the rate. Effect of additives:

VER+DE/DMMP and VER + DE@DMMP samples show a higher decomposition rate in the initial stages, while at high temperatures, mass loss slows down (6–7 min to 80%).

Samples with DMMP/diatomite (3 and 5) show a faster initial rate of degradation but sometimes slow down mass loss at high temperatures.

Pure VER degrades slowly at low temperatures but rapidly at 300–400 °C. For example, at 400 °C, 50% of the mass of the pure sample is lost in 2 minutes, while for the sample with a physical mixture of diatomaceous earth and DMMP it takes 6.8 minutes, and for the sample with immobilized diatomaceous earth it takes 5.7 minutes.

The next step in predicting the kinetic characteristics was to estimate the temperature-time degradation profile of the samples under dynamic conditions. While we obtained the TGA results in the laboratory at a heating rate of 10°C/min, the software allows users to select any heating rate.

The simulation in the software using the dynamic mode was done, setting the heating rate to 120 K/min, which simulates the material's behavior under fire conditions (Lyon et al., 2000) (Fig. 5).

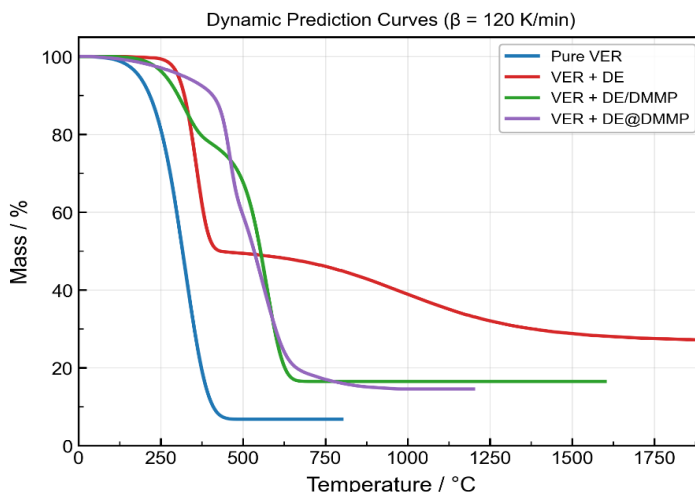


Figure 5. Dynamic prediction curves at a heating rate of 120 K/min.

The dynamic mode allows us to determine the time and temperature at which various degrees of material decomposition occur.

The graphs show that pure VER begins to decompose at 346 degrees, with diatomite at 370 degrees, and the sample with physically mixed DE and DMMP at a temperature slightly below 271 degrees. The immobilized sample showed the highest decomposition onset temperature—454 degrees.

At the same time, for all samples except the pure one, the decomposition is non-uniform; in the sample with diatomite, decomposition occurs very rapidly in the 400–500°C range and slows down significantly above 500°C. In the physically mixed sample, decomposition also proceeds in two stages at different rates, though the difference is not as significant. In the immobilized sample, the difference is almost negligible—

decomposition proceeds faster in the 200–400°C range and slightly slower from 400°C onward. It is likely that the interaction of DMMP with the diatomite surface provides partial stabilization of the system and slows down decomposition processes at elevated temperatures.

The half-decomposition temperatures for the samples are as follows: Pure VER—472 degrees, VER+DE—801, VER+DE/DMMP—600 degrees, VER+DE@DMMP—572 degrees. Here, the sample with diatomite showed the highest temperature. In the immobilized sample, however, the 50% decomposition temperature is still higher compared to the pure resin.

The temperatures at which the samples completely decompose are 560, 1500, 678, and 852 °C, respectively. Here, too, the sample containing diatomite exhibited the highest temperature, followed by the immobilized sample.

Time-dependent modeling showed that VER+ DE@DMMP begins to decompose after just 1.2 minutes, while the pure sample remains stable for a long time (2.5 min). The other two samples showed decomposition times intermediate between these two. Half of the mass remains in the pure sample after 3.8 minutes, in the diatomite sample after 6.2 minutes, in the physically mixed sample after 4.9 minutes, and in the immobilized sample after 4.6 minutes. Complete decomposition is significantly slower in the diatomite sample, taking 20 minutes, while the pure sample degrades completely in 4 minutes, VER+DE/DMMP in 5 minutes, and VER+DE@DMMP in 7.6 minutes.

If we analyze the comparative degradation temperatures of the samples under actual TGA experimental conditions at a rate of 10°C/min and according to the simulation at a rate of 120°C/min in the NETZSCH KINETIC NEO software, it can be observed that at 10°C/min, the temperature range from the onset of degradation to its slowdown varies from 300°C to 400°C, with times ranging from 29 min to 45 min. Complete degradation occurs approximately 70 minutes after the start of heating. Meanwhile, under conditions of 120°C/min, according to the simulation, the times of degradation onset vary significantly among samples in the range from 271°C to 454°C, and the slowing down occurs from 470°C to 720°C, which is significantly higher than at 10°C/min. The onset times of degradation at high heating rates range from 1 to 3 min, and complete degradation occurs within a wide range from 1 min to 20 min.

Conclusion. This article presents a simulation of the kinetic parameters of four VER-based composites with added diatomite and DMMP, based on TGA results: Pure VER, VER + DE – a VER sample with a 25% diatomite concentration, VER+DE/DMMP – VER with physically mixed DMMP and diatomite at concentrations of 12.5% and 12.5%, respectively, VER + DE@DMMP – a sample with DMMP immobilized in the pores of diatomite (25%).

To determine the kinetic parameters of the samples, the TGA results were exported to the NETZSCH Kinetics-Neo software, and models were constructed based on which predictions were made in isothermal and dynamic modes. The selected reactions are as follows: pure VER – a simple first-order F_n reaction; VER with diatomite – two independent reactions (F_n and D_3); VER+DE/DMMP and VER+DE@DMMP – A_2 , A_3 , D_3 .

A prediction was made of the degradation time of the composites in isothermal mode at temperatures ranging from 100 to 400 degrees.

According to the program data, the maximum mass loss for pure VER is 82%, for the VER+DE sample—68%, for VER+DE/DMMP—79%, and for VER+DE@DMMP—84%.

The rate of mass loss depends heavily on temperature: as temperature increases, the decomposition rate rises sharply.

The times required for 10%, 50%, and 80% mass loss of the samples were predicted. The analysis results showed that pure VER decomposes very slowly at low temperatures but relatively quickly at high temperatures compared to the other samples. The VER+DE/DMMP and VER+DE@DMMP samples exhibit a higher decomposition rate in the initial stages, whereas at high temperatures, mass loss slows down (6–7 minutes to 80%).

In the dynamic mode, the time and temperature at which various degrees of material decomposition are reached were predicted at a heating rate of 120 K/min, which corresponds to a simulated fire scenario.

The immobilized sample exhibited the highest decomposition onset temperature, while the sample with physically mixed diatomite and DMMP exhibited the lowest. For all samples except the pure one, the decomposition rate is non-uniform; for VER+DE@DMMP, the rate slows down as the temperature increases. The interaction of DMMP with diatomite leads to partial stabilization of the system and a slowing of decomposition as the temperature rises.

The VER+DE sample (801°C) decomposes the slowest, while half of the pure vinyl ester resin sample (472°C) degrades very quickly.

Complete decomposition of the diatomaceous earth sample occurs at a very high temperature.

Time-dependent modeling showed that decomposition occurs rapidly in the pure sample, most slowly in the diatomaceous earth sample, and slightly faster in the immobilized sample than in the diatomaceous earth sample. A dynamic comparison revealed an increase in the degradation temperature and a significant reduction in the degradation time at a rate of 120°C/min compared to the actual conditions of the TGA experiment.

Predictions of kinetic characteristics can be applied to the development of new polymer composites with functional properties that maintain stability under the influence of various factors, as well as fire-resistant structures that exhibit an extremely low degradation rate under fire conditions.

References

Bi Q.-Q., Li Y.-M., He L., Li Z., Wang D.-Y. (2024). Nanoporous flame retardants: Toward asphalt with enhanced fire safety and smoke suppression behavior. *Composites Communications*. – Vol. 47. – P. 101869. <https://doi.org/10.1016/j.coco.2024.101869> (in Eng.).

Harter A. G., Klapötke T. M., Lechner J. T., Stierstorfer J. (2022). Kinetic predictions concerning the long-term stability of TKX-50 and other common explosives using the NETZSCH Kinetics Neo software.

Propellants, Explosives, Pyrotechnics. – Vol. 47. – P. e202200031. <https://doi.org/10.1002/prep.202200031> (in Eng.).

Hu S.-L., Li Y.-M., Hu W.-J., Hobson J., Wang D.-Y. (2022). Strategic design unsaturated polyester resins composites with excellent flame retardancy and high tensile strength. *Polymer Degradation and Stability*. – Vol. 206. – P. 110190. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2022.110190> (in Eng.).

Li Z., Fu T., Lu J.-H., He J.-H., Li W.-D., Liu B.-W., Chen L., Wang Y.-Z. (2022). Ultra-high fire-safety unsaturated polyesters enabled by self-assembled micro/nano rod from Schiff base, diphenylphosphinyl group and nickel (II) metal. *Composites Part B: Engineering*. – Vol. 242. – P. 110032. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2022.110032> (in Eng.).

Lyon R. E. (2000). Solid-state thermochemistry of flaming combustion. In: Grand A. F., Wilkie C. A. (Eds.), *Fire Retardancy of Polymeric Materials*. Marcel Dekker, New York. – P. 391-447. (in Eng.).

Nasiriddinovich Todjiyev J., Basimovich Parmanov A., Shokirjon o'g'li Tursunov S., Nurmanov E., Narmatillo Narzullayevich Mamatkulov N., Khudiyarova G. S., Sabidovna S., Abdurazmanova U., Yuldasheva U., Urozaliyevich Abdullaev J., Juraboev F. M. (2026). Vinyl esters of carboxylic acids: Synthesis, properties, applications, and technological processes. *Chemical Review and Letters*. – Vol. 9 (1). – P. 40–63. <https://www.chemrevlett.com> (in Eng.).

Nodehi M. (2022). Epoxy, polyester and vinyl ester-based polymer concrete: a review. *Innovative Infrastructure Solutions*. – Vol. 7. – P. 64. <https://doi.org/10.1007/s41062-021-00661-3> (in Eng.).

Paçzkowski P., Puszka A., Gawdzik B. (2022). Investigation of degradation of composites based on unsaturated polyester resin and vinyl ester resin. *Materials*. – Vol. 15 (4). – P. 1286. <https://doi.org/10.3390/ma15041286> (in Eng.).

Wang Z., Wu Z., Weng L., Ge S., Jiang D., Huang M., Mulvihill D. M., Chen Q., Guo Z., Jazzar A., He X., Zhang X., Xu B. B. (2023). A roadmap review of thermally conductive polymer composites: Critical factors, progress, and prospects. *Advanced Functional Materials*. – Vol. 33 (36). – P. 2301549. <https://doi.org/10.1002/adfm.202301549> (in Eng.).

Wu C., Xu F., Wang H., Liu H., Yan F., Ma C. (2023). Manufacturing technologies of polymer composites — a review. *Polymers*. – Vol. 15 (3). – P. 712. <https://doi.org/10.3390/polym15030712> (in Eng.).

Xavier J. R. (2025). Recent innovations in graphene-based nanocomposite coatings for enhanced flame retardancy in industrial applications. *Polymer Degradation and Stability*. – Vol. 240. – P. 111479. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2025.111479> (in Eng.).

Xie J., Akhmetova M., Zhanturina N., Hou Y., Bekeshev A., Hu W., Wang X., Hu Y., Chu F. (2026). Boosting the flame retardancy of vinyl ester resins via a DE@DMMP hybrid: Reducing migration and improving fire performance. *Polymer Degradation and Stability*. – Vol. 246. – P. 111963. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2026.111963> (in Eng.).

Xu W., Wang G., Xu J., Liu Y., Chen R., Yan H. (2019). Modification of diatomite with melamine coated zeolitic imidazolate framework-8 as an effective flame retardant to enhance flame retardancy and smoke suppression of rigid polyurethane foam. *Journal of Hazardous Materials*. – Vol. 379. – P. 120819. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.120819> (in Eng.).

Zhang X., Zhang W., Zeng G., Du J., Zhang W., Yang R. (2020). The effect of different smoke suppressants with APP for enhancing the flame retardancy and smoke suppression on vinyl ester resin. *Polymer Engineering and Science*. – Vol. 60 (2). – P. 314-322. <https://doi.org/10.1002/pen.25286> (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 286–301

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.452>

UDC: 666.913.4

IRSTI: 65.35.33

©Sagyntayeva A.¹, Zhanikulov N.^{1*}, Sudarev E.², Kaiyrbaeva M.¹,
Zhakipbayev B.^{3*}, 2026.

¹Academician Ye.A. Buketov Karaganda National Research University,
Karaganda, Kazakhstan;

²National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia;

³Peoples Friendship university named after Academician A. Kuatbekov,
Shymkent, Kazakhstan.

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru

RESEARCH ON THE QUALITY OF RAW MATERIALS FOR OBTAINING OF GYPSUM-CEMENT-POZZOLANO COMPOSITE MATERIAL

Sagyntayeva Akmarzhan — PhD student, Academician Ye.A. Buketov Karaganda National Research University, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: akmarzhan_97_31@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3275-4144>;

Zhanikulov Nurgali — PhD, Associate Professor, Academician Ye.A. Buketov Karaganda National Research University, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>;

Sudarev Evgeniy — Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, N.M. Kizhner Research and Educational Center; National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia,

E-mail: sudarev@tpu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5596-4048>;

Kaiyrbaeva Marzhan — Master, Senior Teacher, Academician Ye.A. Buketov Karaganda National Research University, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: m_kaiyrbaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1964-9582>;

Zhakipbayev Bibol — PhD, Associate Professor, Chief Researcher, Peoples' Friendship University named after Academician A. Kuatbekov, Shymkent, Kazakhstan,

E-mail: bibol.ye.zhakipbayev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>.

Abstract. This scientific article presents the results of physicochemical methods used to study the suitability of gypsum, Portland cement, slag, and ash for obtaining gypsum-cement-pozzolanic composite materials. The quality of the raw materials was tested using state of the art equipment. The relevance of producing gypsum-cement-pozzolanic (GCP) composite materials is directly related to the high cost of Portland cement and the increasing amount of CO₂ emitted into the atmosphere, as well as the need to produce environmentally friendly products based on the principle of a "green economy". The study found that the gypsum composition consists of 29,89% CaO and 38,11% SO₃. At a temperature of 120-180°C, the transition of dihydrate gypsum to

hemihydrate gypsum and then to anhydride was recorded, with a total mass loss of 15-16%. The microstructure is polycrystalline, which fully confirms the stoichiometric value of calcium sulfate. The cement composition consists of 60,87% CaO, 20,48% SiO₂, and 5,88% Al₂O₃. Dehydration of the portlandite mineral Ca(OH)₂ was determined in the temperature range of 420-580°C with a total mass loss of 2-3,5%. The cement microstructure was determined as consisting of predominantly C₃S and C₂S minerals, with an intermediate phase consisting of C₃A+C₄AF minerals. The opoka composition consists of 75,31% SiO₂, 1,24% CaO and 9,24% Al₂O₃. In the temperature range of 400-520°C, a loss of water molecules in clay minerals was determined with a total mass loss of 10-11%. The microstructure fully confirms the presence of highly porous amorphous silica aggregates. The ash composition consists of 58,98% SiO₂, 4,05% Fe₂O₃, and 30,05% Al₂O₃. Carbon combustion and decarbonization were determined in the temperature range of 380-640°C, with a total mass loss of 4,5-5,5%. Particles of unburned carbon impurities with a glassy microstructure were detected. The results of the physicochemical study demonstrated the feasibility of producing a gypsum-cement-pozzolan composite material from a mixture of gypsum, cement, slag, and ash.

Keywords: gypsum, portland cement, opoka, ash, pozzolan additives, composite materials, gypsum-cement-pozzolan mixtures

For citations: Sagyntayeva A., Zhanikulov N., Sudarev E., Kaiyrbaeva M., Zhakipbayev B. Research on the Quality of Raw Materials for Obtaining Gypsum-Cement-Pozzolan Composite Material. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.2. Pp. 286–301. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.452>

©Сағынтаева А.¹, Жаникулов Н.^{1*}, Сударев Е.², Қайырбаева М.¹,
Жакипбаев Б.^{3*}, 2026.

¹Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті,
Қарағанды, Қазақстан;

²Ұлттық зерттеу Томск политехникалық университеті, Томск, Ресей;

³Академик Ә. Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті,
Шымкент, Қазақстан.

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru

ГИПС-ЦЕМЕНТ-ПУЦЦОЛАНДЫ КОМПОЗИЦИЯЛЫҚ МАТЕРИАЛ АЛУ ҮШІН ҚАЖЕТТІ ШИКІЗАТТАРДЫҢ САПАСЫН ЗЕРТТЕУ

Сағынтаева Ақмаржан — PhD докторант, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: akmarzhan_97_31@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3275-4144>;

Жаникулов Нурғали — PhD, қауымдастырылған профессор, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>;

Сударев Евгений — техника ғылымдарының кандидаты, доцент, Н.М. Кижнер атындағы ғылыми-оқыту орталығы; Томск политехникалық университеті, Томск, Ресей,

E-mail: sudarev@tpu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5596-4048>;

Кайырбаева Маржан — магистр, аға оқытушы, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: m_kaiyrbaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1964-9582>;

Жакипбаев Бибол — PhD, қауымдастырылған профессор, бас ғылыми қызметкер, Академик Ә. Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті, Шымкент, Қазақстан,

E-mail: bibol.ye.zhakupbayev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>.

Аннотация. Ғылыми мақалада гипс-цемент-пуццоланды композициялық материал алу үшін гипс, портландцемент, опока және күл материалдардың жарамдылығын физика-химиялық әдістермен зерттеудің нәтижелері келтірілген. Шикізаттардың сапасын анықтау жұмыстары заманауи құрал-жабдықтардың көмегімен тексерілді. Гипс-цемент-пуццоланды (ГЦП) композициялық материалдарды алудың өзектілігі портландцемент бағасының қымбат және атмосфераға шығаратын CO_2 газының мөлшерінің артуымен, «жасыл экономика» принципі бойынша экологиялық таза өнім алумен тікелей байланысты. Зерттеу нәтижесінде гипстің құрамы 29,89% CaO және 38,11% SO_3 тұратындығы анықталды. 120-180°C температура аралығында эндотермиялық әсерде екі сулы гипстің жарты сулы гипске, сосын ангидридке өтуі, жалпы 15-16% масса жоғалуы тіркелді. Микроқұрылымы поликристалды болып келген, кальций сульфатының стехиометриялық мәнін толықтай дәлелдейді. Цементтің құрамы 60,87% CaO , 20,48% SiO_2 және 5,88% Al_2O_3 тұратындығы анықталды. 420-580°C температура аралығында портландит минералының $\text{Ca}(\text{OH})_2$ сусыздануы анықталды, жалпы 2-3,5% масса жоғалуы тіркелді. Цемент микроқұрылымында C_3S және C_2S минералдарының басымдығы және аралық фаза $\text{C}_3\text{A}+\text{C}_4\text{AF}$ тұратындығы анықталды. Опоканың құрамы 75,31% SiO_2 , 1,24% CaO және 9,24% Al_2O_3 тұратындығы анықталды. 400-520°C температура аралығында сазды минералдардың құрамындағы су молекулаларының жоғалуы анықталды, жалпы 10-11% масса жоғалуы тіркелді. Микроқұрылымы жоғары кеуекті болып келген, аморфты кремний диоксидінің агрегаттарын толықтай дәлелдейді. Күлдің құрамы 58,98% SiO_2 , 4,05% Fe_2O_3 және 30,05% Al_2O_3 тұратындығы анықталды. 380-640°C температура аралығында көміртектің жану мен декарбонизациялану процесінің жүруі анықталды, жалпы 4,5-5,5% масса жоғалуы тіркелді. Микроқұрылымы шыны тәрізді болып келген, жанбаған көміртек қоспаларының бөлшектері анықталды. Жүргізілген физика-химиялық зерттеу нәтижесінде гипс, цемент, опока және күл қосындысынан гипс-цемент-пуццоланды композициялық материал алуға толықтай мүмкіндік бар екендігі дәлелденді.

Түйін сөздер: гипс, портландцемент, опока, күл, пуццоланды қоспалар, композициялық материалдар, гипс-цемент-пуццолан қоспалары

©Сагынтаева А.¹, Жаникулов Н.^{1*}, Сударев Е.², Кайырбаева М.¹,
Жакипбаев Б.^{3*}, 2026.

¹Карагандинский национальный исследовательский университет имени
академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан;

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Томск, Россия;

³Университет дружбы народов имени академика А. Куатбекова,
Шымкент, Казахстан.

E-mail:nurgali.zhanikulov@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕСТВА СЫРЬЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ГИПСО- ЦЕМЕНТО-ПУЦЦОЛАНОВОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА

Сагынтаева Акмаржан — PhD докторант, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

E-mail: akmarzhan_97_31@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3275-4144>;

Жаникулов Нургали — PhD, ассоциированный профессор, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

E-mail: nurgali.zhanikulov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>;

Сударев Евгений — кандидат технических наук, доцент, Научно-образовательный центр имени Н.М. Кижнера; Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия,

E-mail: sudarev@tpu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5596-4048>;

Кайырбаева Маржан — магистр, старший преподаватель, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,

E-mail: m_kaiyrbaeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1964-9582>;

Жакипбаев Бибол — PhD, ассоциированный профессор, главный научный сотрудник, Университет дружбы народов имени академика А. Куатбекова, Шымкент, Казахстан,

E-mail: bibol.ye.zhakipbayev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0750-9753>.

Аннотация. Разработка гипсо-цементно-пуццолановых композиционных материалов является перспективным направлением строительного материаловедения, обусловленным необходимостью снижения расхода портландцемента, сокращения выбросов углекислого газа и расширения использования природного и техногенного минерального сырья в соответствии с принципами «зелёной экономики». В связи с этим особую актуальность приобретает оценка качества исходных компонентов и их пригодности для получения композиционных вяжущих. В работе представлены результаты комплексного физико-химического исследования гипса, портландцемента, опоки и золы, предназначенных для получения гипсо-цементно-пуццолановых композиционных материалов. Анализ сырья проводился с использованием современных методов, позволяющих определить химический состав, термические характеристики и особенности микроструктуры исследуемых компонентов. Установлено, что гипс содержит 29,89 % CaO и 38,11 % SO₃, а в температурном диапазоне 120–180 °C происходит последовательное превращение дигидрата гипса в полугидрат и ангидрит с общей потерей массы 15–16 %. Для портландцемента

выявлено преобладание оксидов CaO (60,87 %), SiO_2 (20,48 %) и Al_2O_3 (5,88 %), а также наличие основных минералов C_3S и C_2S . Опока характеризуется высоким содержанием SiO_2 (75,31 %) и наличием высокопористых аморфных кремнезёмных агрегатов. В составе золы установлено содержание 58,98 % SiO_2 , 30,05 % Al_2O_3 и 4,05 % Fe_2O_3 , а также присутствие стекловидных частиц и несгоревших углеродных включений. Результаты физико-химического анализа подтвердили возможность использования исследуемых компонентов для получения гипсо-цементно-пуццолановых композиционных материалов. Использование смесей на основе гипса, портландцемента, опоки и золы позволяет получать экологически безопасные композиционные вяжущие с пониженным содержанием клинкера и способствует рациональному использованию природного сырья и промышленных отходов.

Ключевые слова: гипс, портландцемент, опока, зола, пуццолановые добавки, композиционные материалы, гипсо-цементно-пуццолановые смеси

Kіріспе. 2025 жылы Қазақстан Республикасында жұмыс жасайтын цемент зауыттар 14,378 млн тонна цемент, 8,791 млн тонна клинкер өндіріді. Бұл 2024 жылғы көрсеткішке қарағанда 17,2 % және 3,2 % жоғары (Production, 2026). Алайда, барлық цемент зауыттары клинкер кұйдіру кезінде бөлінетін CO_2 газының шығару деңгейін төмендету мақсатында, әр цемент зауытқа бөлінген квоталарды қатаң сақтау үшін қоспасы бар портландцемент пен композициялық цемент түрлерінің өндірісін арттырғаны белгілі болды (Amiraliyev et al., 2025).

Қазіргі таңда әлемдік цемент өндірісінің көлемі жылына 3,3 млрд тонна цементті құрап, рекордтың деңгейге жетсе, гипс өндірісінің көлемі 147 млн тоннаға жетті, бұл тұтастырғыш материалдардың ең үлкен сегментін құрап отыр (Cement, 2024).

Әлемде тиімді технологиялық, экологиялық таза композициялық материалдардың құрамын әзірлеу ерекше маңызға ие. Осындай перспективалы бағыттардың бірі – гипс, цемент және белсенді минералды қоспалардың артықшылықтарымен біріктірілген гипсо-цемент-пуццоланды (ГЦП) композициялық материалдарды айтуға болады (Bumanis et al., 2020). Гипс-цемент-пуццоланды (ГЦП) композициялық материалдар аралас композиттер болғандықтан олардың әлемдік өндіріс нарығы портландцементке қарағанда әлде қайда төмен. Алайда әлемдік сарапшылардың болжамынша цемент пен гипсті тұтастырғыш материалдардың жалпы көлемінің 1-5 % құрайды делінген, бұл шамамен 30-150 млн тоннаға бағаланады (Sahmenko et al., 2024).

Қазіргі заманғы бейорганикалық материалдар мен тұтастырғыш заттардың дамуын арттыруда жаңа ГЦП композициялық материалдардың құрамын әзірлеу келесідей өзектілікпен расталады:

Біріншіден, құрылыс материалдардың қымбат бағасын төмендету қажеттілігінен туындайды. Гипс-цемент-пуццоланды композициялық материалдарды пайдалану, қымбат және экологияға зияны басымырақ портландцементті ішінара алмастыруға мүмкіндік береді.

Екіншіден, бұл композициялық материал «жасыл экономика» принципі бойынша экологиялық таза құрылыс талаптарына сай келеді. Минералды ресурстарды: пуццоландар, күл және шлактарды пайдалану арқылы қоршаған ортаға әсерді азайтуға мүмкіндік береді.

Үшіншіден, бұл жаңа инновациялық композициялық материалды алудың дамуына және портландцементке балама материалдың пайда болуына мүмкіндік береді.

Бұл зерттеудің ғылыми жаңалығы алғаш рет гипс-цемент-пуццолан композициялық материал алу үшін отандық шикізат материалдардың жарамдылығын физика-химиялық әдістермен зерттеу болып табылады.

Әдеби шолу. Портландцемент өндірісі карбонатты шикізатты декарбонизациялау нәтижесінде, клинкерді күйдіру процесінде отынды жағу кезінде қалыптасатын көміртек диоксидінің (CO_2) елеулі шығарындыларымен қатар жүреді. Орташа алғанда 1 т цемент клинкерінің өндірісі үшін атмосфераға шамамен 0,7-0,9 т CO_2 газы бөлінеді. Бұл цемент өндіріс саланың жиынтық үлесі жаһандық антропогендік шығарындылардың 7-8 % құрайды. Бұл клинкерлік құрамдас бөлігі төмен баламалы тұтқыр жүйелерді әзірлеу қажеттілігін негіздейді. Көміртегі ізін төмендетудің тиімді жолдарының бірі цементті гипс-цемент-пуццоланды композиттерінің құрамында пуццолан қоспаларымен ішінара ауыстыру болып табылады. Тұтастырғыш салмағының 20-50 % мөлшерінде пуццолан компоненттерін енгізу цемент шығынын және CO_2 шығарындыларын төмендетуге мүмкіндік береді. Бұл ретте пуццолан реакциялары кальций гидросиликаттарының (C-S-H фазалары) қосымша пайда болуына ықпал етеді, бұл материалдың құрылымы мен беріктік сипаттамаларына оң әсер етеді (Potapova, 2016).

Жалпы портландцемент құрамында 5-7 % гипс болады, бұл цементтің ұстасу мерзімін реттеу үшін өндіріледі. Портландцементтің қатаю кезінде этрингит минераланың көп мөлшерде түзілуі салдарынан цемент тасының жарылуына мүмкіндік туғызады. Сол себепті цемент тасының құрамындағы этрингит минералын кристалдануы қатаң бақыланады (Calderon-Morales et al., 2021). Бұл процессті болдырмау үшін қоспаға пуццолан материалдарын ендіру нәтижесінде гипс-цемент-пуццолан деп аталатын үштік композициялық материал пайда болады (Colak, 2021). Гипс-цемент-пуццолан композициялық материалдың портландцемент және гипс тұтастырғыштан айырмашылығы оның суға төзімділігі мен жоғары механикалық беріктікке ие. Сонымен қатар, гипс-цемент-пуццоланды (ГЦП) композициялық материалдардың құрамында 50 %-дан жоғары гипстен тұратындықтан қоршаған ортаға зиянсыздығы әлдеқайда төмен (Bumanis et al., 2020). Гипс-цемент-пуццолан үштік композициялық материал алу үшін құрамына әртүрлі өнеркәсіптік қалдықтар мен қайта өңделген гипстерді, жасанды қосалқы өнімдер мен минералды пайдалануға мүмкіндік береді (Bumanis et al., 2022).

Галаутдинов А.Р. және басқа ғалымдар гипс-цемент-пуццоланды тұтастырғыш материалдардың құрамын әзірлеу және оның қатаю ерекшеліктері бойынша зерттеулер жүргізген. Қатаю процесінің жоғары беріктікке жеткізу үшін

жоғары сапалы гипс және портландцемент пен белсенді минералды қоспаларды пайдаланған. Негізгі зерттеу нәтижесінде гипс-цемент-пуццолан қатайған тастың гидратациясы мен құрылым түзілу процестеріне, оның беріктік шегіне және суға төзімділігіне, сондай-ақ қоспаның су қажеттілігіне минералды және химиялық қоспалар кешенінің әсерін анықтаған (Galautdinov et al., 2019).

Осылайша, ғылыми әдебиеттерді талдау нәтижесінде гипс-цемент-пуццолан композициялық материалдарын алу бейорганикалық материалдар ғылымында перспективалы бағыт екенін көрсетеді. Оларды әзірлеу жүйеде жүретін физика-химиялық процестерді тереңірек түсінумен, тұрақты және жоғары тиімді композиттерді жасауға бағытталған. Біз көздеп отырған гипс, цемент, опока және күл қосындысынан алынатын ГЦП композициялық материалы ешқандай ғылыми деректерде толық қарастырылмаған және қолданысқа енгізілмеген, толық зерттелмеген.

Материалдар мен зерттеу әдістері. Біздің ғылыми зерттеу жұмыстар Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университетінің «Композициялық материалдар зертханасында» орындалды. ГЦП композициялық материал алу үшін бастапқы шикізат ретінде Қарағанды облысы Ақтау кентінде орналасқан «Central Asia cement» зауытының ЦЕМ I/ 42.5 Б маркалы портландцементі, Түркістан облысы Оранғай кен орынының опокасы, Қарағанды қаласы ЖЭО-3 күл қалдығы және табиғи екі сулы гипс қолданылды. Олардың құрамын, құрылымын және қасиеттерін кешенді зерттеу үшін талдаудың бірқатар заманауи физика-химиялық әдістері қолданылды.

Гипс, цемент, опока және күлді кешенді зерттеу үшін шикізаттардың химиялық құрамын, фазалық құрылымын және термиялық қасиеттерін бағалауды қамтамасыз ететін төрт талдамалық әдіс қолданылды.

Компоненттердің элементтік және оксидтік құрамы Bruker компаниясының жоғары өнімді толқынды-дисперсиялық рентгенофлуоресцентті спектрометрі көмегімен анықталды (Declercq et al., 2019). Онда ұнтақ үлгілері стандартты планшеттерге орналастырылды, ал элементтердің сипатты рентгендік сәулеленуі бойынша химиялық қосылыстарды сандық және сапалық бағалау орындалды. Бастапқы шикізаттардың элементтік және оксидтік құрамы рентгендік флуоресценттік спектрометрде айқындалды. Гипс шикізаты үшін бұл әдіс кальций және күкірт тотықтарының құрамын анықтай отырып, катаю процестеріне әсер ететін ықтимал қоспа компоненттерін анықтауды қамтамасыз етті. Цемент жағдайында рентгендік флуоресценттік спектрометр оның гидравликалық белсенділігін анықтайтын CaO , SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 т.б. сияқты негізгі оксидтерді сандық бағалау үшін пайдаланылды. Опокаға талдау шикізат құрамында кремнеземнің жоғары құрамының барлығын дәлелдеу үшін әрі қабілетті пуццоландық белсенділігін бағалауға мүмкіндік берді. Оның көмегімен реакцияға түсуге және құрылымның қалыптасуына ықпал етуге қабілетті фазалардың маңыздылығы бағаланды. Яғни, рентгендік флуоресценттік спектрометр көмегімен компоненттердің химиялық құрамын және олардың композициялық материал құрамында негіздеуді қамтамасыз етті.

Қыздыру кезіндегі массаның термиялық қасиеттері мен өзгерістері Labsys Evo 1600 TG/DSC (Myrzakozha et al., 2014) термогравиметриялық талдағышын қолдана отырып зерттелді. Онда үлгілер тигельдерге орналастырылды және бақыланатын жылдамдықпен қыздырылды, бұл гидраттардың дегидратация, ыдырау сатыларын, материалдардың термиялық тұрақтылығы мен реакциялық белсенділігін анықтауға мүмкіндік берді. Термогравиметриялық талдау термиялық өзгерістерді және қыздыру кезінде материалдардың массасын өзгерту үшін қолданылды. Гипс үшін бұл әдіс гипстің ангидритке өту процестерін көрсететін кристалданған суды жоғалтуды қоса алғанда $(\text{CaSO}_4)^*$ дегидратациялаудың негізгі кезеңдерін анықтауға мүмкіндік берді. Цементті зерттеуде бұл әдіс гидратты қосылыстардың ыдырау процестерін анықтады. Қыздыру арқылы шикізат массасының өзгеруі бойынша гидратация дәрежесін бағалауға мүмкіндік берді. Опока жоғары термиялық тұрақтылығын және қарастырылып отырған температуралық диапазонда маңызды фазалық өзгерістердің жоқтығын дәлелдейді. Күл үшін термогравиметриялық талдау қалдық көміртегіні анықтауға және оның қыздыру процессіне реакциялық белсенділігін тұспалдауға мүмкіндік берді. Термогравиметриялық талдауды қолдану термиялық әсер ету кезінде кездесетін процестерді және олардың композициялық материалдардың қасиеттеріне әсерін жан-жақты түсінуге мүмкіндік берді.

Материалдардың фазалық құрылымы JEOL JSM-6610LV (Makarov et al., 2011) растрлық сканерлейтін электрондық микроскопында зерттелді. Шикізаттар төсеніштерге бекітіліп, жұқа өткізгіш қабатпен қапталған және бөлшектердің пішіні мен өлшемін, кеуектілігі мен гидратты ісік ерекшеліктерін анықтау үшін электрондық сканерленді. Растрлық электрондық микроскопта алынған шикізаттардың микроқұрылымы мен морфологиясына зерттеу жүргізілді. Гипсті зерттеу оның кристалды құрылымының ерекшеліктерін және құрылымның қалыптасу процестеріне әсер ететін бөлшектердің нысанын анықтауға мүмкіндік берді. Цемент үшін жасалынған зерттеу бөлшектердің өлшемі және пішінін анықтау үшін, әрі сумен әрекеттесу процессі кезінде пайда болатын жаңа құрылымдарды бақылауға мүмкіндік берді. Опокаға жасалған талдау кеуекті құрылымның бар екендігін анықтайды. Ол байланыс кеңістігін ұлғайтуға және басқа компоненттермен өзара әрекеттесу процестерінде оның белсенділігін арттыруға ықпал етеді. Күл үшін жасалынған талдау композиттік құрылымын қалыптастыруға белсенді қатысатын, әрі оның беріктігіне әсер ететін компоненттерді анықтауға мүмкіндік берді. Қысқаша айтқанда, растрлық электрондық микроскопта бастапқы шикізаттардың құрамын анықтауға және олардың композициялық материалды алу процестеріне қатысуын бағалауға мүмкіндік берді.

Нәтижелер және талқылаулар. ГЦП композициялық материалды алу үшін бастапқы шикізаттардың химиялық құрамын анықтау Heidelberg Cement тобының құрамына кіретін ЖШС «Шымкентцемент» зауытында орналасқан зауанауи Bruker компаниясының жоғары өнімді толқынды-дисперсиялық рентген флуоресцентті спектрометрі көмегімен анықталды. Бастапқы шикізат материалдардың химиялық құрамы 1 - кестеде көрсетілген.

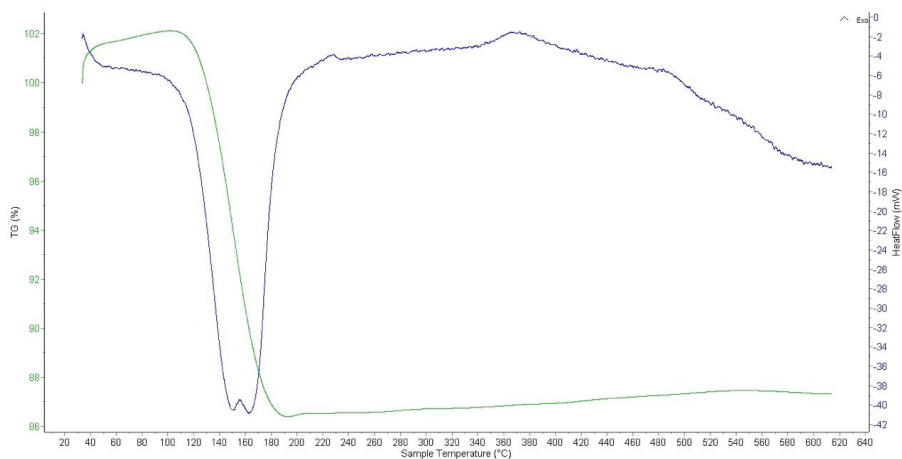
Кесте 1. Шикізат материалдардың химиялық құрамы.

Шикізат	Химиялық құрамы, сал. %													
	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	Na ₂ O	K ₂ O	P ₂ O ₅	TiO ₂	Mn ₂ O ₄	ККЖ	баска	жалпы
Гипс	4,64	1,29	0,44	29,89	0,92	38,11	0,10	0,37	0,03	0,22	0,02	23,75	0,22	100
Цемент	20,48	5,88	3,77	60,87	1,74	2,58	0,41	0,84	0,07	0,58	0,28	2,45	0,05	100
Опока	75,31	9,24	2,91	1,24	1,41	2,25	0,81	0,91	0,12	0,35	0,05	4,68	0,72	100
Күл	58,98	30,05	4,05	2,08	0,59	0,12	0,48	0,57	0,37	1,39	0,11	0,97	0,24	100

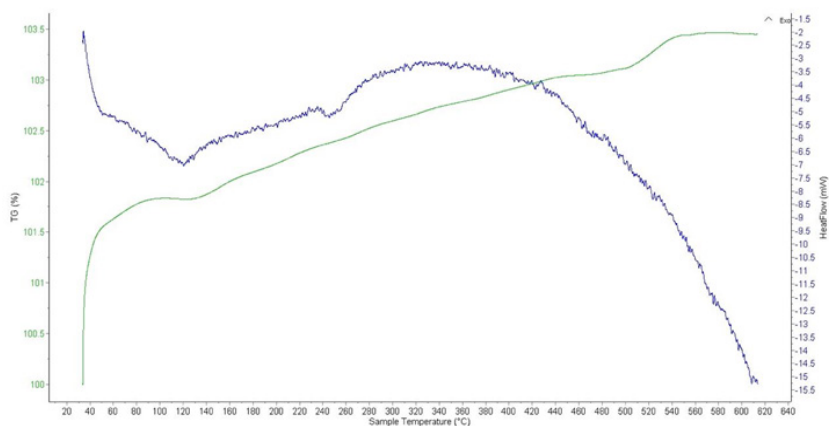
* ККЖ – күйдіру кезіндегі жоғалу

Рентген флуоресцентті спектрометрде алынған нәтижелерде, табиғи екі сулы гипс ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) тасының химиялық құрамында 29,89 % кальций оксидінен, 38,11 % күкірт оксидінен және 20 % астам кристаллизацияланған судан тұратындығы анықталды. ЦЕМ I/ 42.5 Б маркалы портландцементтің химиялық құрамында 60,87 % кальций оксидінен, 20,48 % кремний оксидінен және 5,8 % астам алюминий оксидінен тұратындығы анықталды. Опоканың химиялық құрамында 75,31 % кремний оксидінен, 9,24 % алюминий оксидінен және 4,6 % астам күйдіру кезіндегі жоғалудан тұратындығы анықталды. Қарағанды қаласы ЖЭО-3 күл қалдығының химиялық құрамында 58,98 % кремний оксидінен, 30,05 % алюминий оксидінен және 4,0 % астам темір оксидінен тұратындығы анықталды. Нәтижесінде шикізаттардың химиялық құрамы негізгі басым бөлігі (SiO_2 , CaO, Al_2O_3 және SO_3) оксидтерден құралғаны және ауыр металдардың мөлшері шамадан артық емес екендігі, сондай-ақ, зиянды қоспа бөлшектердің кездеспейтіндігі анықталды.

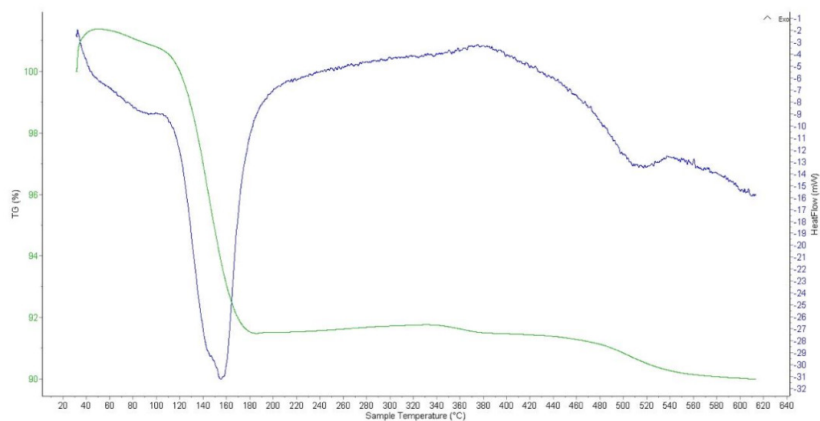
Термогравиметриялық талдау Академик Е.А. Бөкетов атындағы ҚарҰЗУ-нің «Akylbayev Research Center» орналасқан зауанауи Labsys Evo 1600 TG/DSC термогравиметриялық талдағышын қолдана отырып зерттелді. Термогравиметриялық талдау нәтижелерінің графигі 1 суретте көрсетілген.



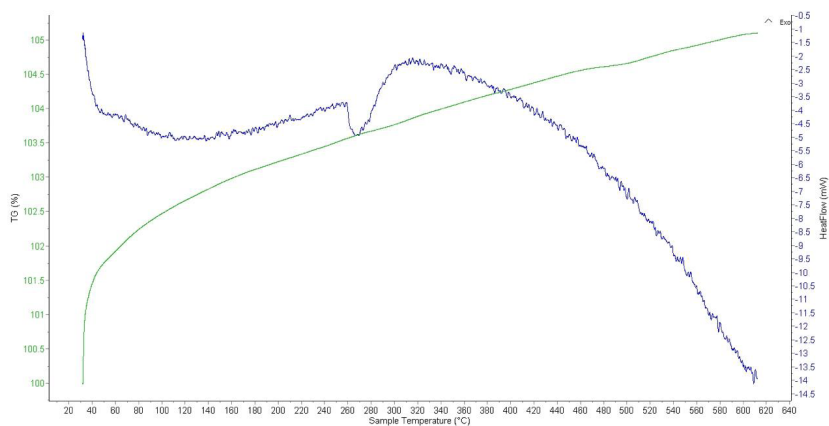
(a)



(а)



(ә)



(б)

Сурет 1. Қыздыру кезіндегі шикізат массалары мен жылу эффектісінің өзгеру графигі (TGA/DSC): а) гипс; ә) цемент; б) опока; в) күл.

Термогравиметриялық талдау (ТГА) кезінде үлгі салмағының өзгеруін тіркеу арқылы материалдардың термиялық тұрақтылығы мен фазалық өзгерістерін бағалауға мүмкіндік береді. Гипстің термогравиметриялық және дифференциалды жылу талдауында гипстің ыдырауы сатылы сипатта екенін және бірізді дегидратациядан туындағанын көрсетті. Қыздырудың басталуы 20-100 °C температурада орын алды. Термогравиметрлік қисық сызығында үлгі массасы шамамен 15,5 % төмендеуі 120-180 °C температуралар аралығында едәуір салмақ жоғалтқандығын көрсетеді. Бұл процесс жылу ағынының қисығында айқын эндотермиялық әсерді көрсетеді. Массаның жоғалуы екі сулы гипстің ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) дегидратациясына байланысты, ол кристалданған суды бірізді жоғалтады. Алдымен жартылай сулы гипске ($\text{CaSO}_4 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$), содан кейін ангидритке (CaSO_4) ауысады. 200 °C-тан кейін масса іс жүзінде 640 °C-ге дейін тұрақты болып, бұл пайда болған ангидриттің термиялық тұрақтылығын көрсетеді. Таза гипс үшін (20,9 %) бақыланатын массаның жоғалуы теориялықтан біршама төмен. Бұл бастапқы сынамада қоспалардың немесе ішінара сусыздандырылған материалдың болуы мүмкіндігімен түсіндіріледі. Гипс кристалданған судың жоғары үлесімен табиғи немесе техникалық қос сулы гипстің классикалық мінез-құлқын көрсетеді. 170 °C жоғары қызған кезде тұрақты ангидрит пайда болады. 400-600 °C температурада шағын төмендеу сазды минерал құрамындағы су молекулаларының ыдырауын көрсетеді.

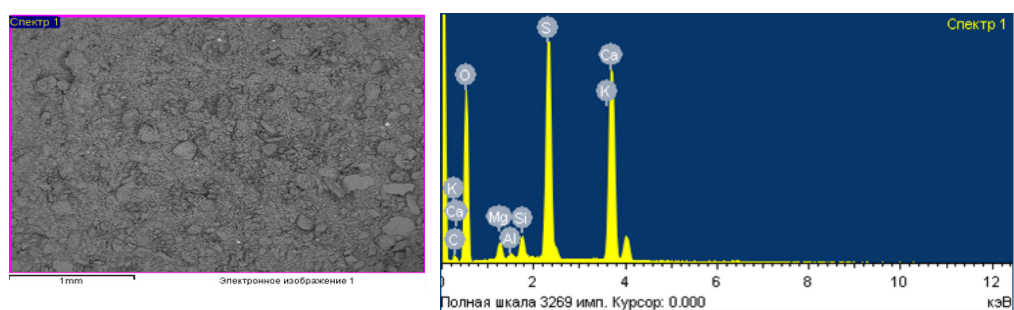
Цементтің термогравиметриялық және дифференциалды жылу талдауында ЦЕМ I/42.5 Б маркалы портландцементтің 20-120 °C температуралар аралығында 0,8-1,0 % жуық массаның жоғалуы бос (адсорбцияланған) ылғалдың, өте әлсіз байланысқан судың ұшуын көрсетеді. 120-200 °C температуралар аралығында этtringит минералдың ($3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$) және белгілі бір дәрежеде гипстің сусыздануы жүреді. Этtringит кристалдану суының көп бөлігін осы диапазонда жоғалтады. 200-400 °C температуралар аралығында моносольфоалюминаттың сусыздануы және төмен негізді кальций гидросиликаттарының (C-S-H) ішінара ыдырауы жүрді. 420-580 °C аралығындағы қарқынды масса жоғалту портландит минералының дегидратациясын көрсетеді. 600 °C-тан жоғары температураның одан әрі төмендеуі кальциттің декарбонизациялануын көрсетті.

Опоканың термогравиметриялық және дифференциалды жылу талдауында 20-120 °C температуралар аралығында бастапқы массаның жоғалуы адсорбцияланған судың жоғалуымен түсіндіріледі. 120-180 °C температурада күрт төмендеу опоканың сусыздануын, сазды минералдардың құрамындағы су молекулаларының жоғалуын көрсетеді. 180-400 °C температуралар аралығында масса жоғалу минималданады, органикалық заттардың жануы басталады. 400-520 °C аралығында сазды минерал гидрослюданың құрылымдық сусыздануы және ішінара кальцит қоспаларының декарбонизацияға ұшырауын көрсетеді. 520-640 °C аралығында кремний оксидінің соңғы сусыздануы орын алды. Жалпы 640 °C дейін 10,5-11,5 % масса жоғалту орын алды.

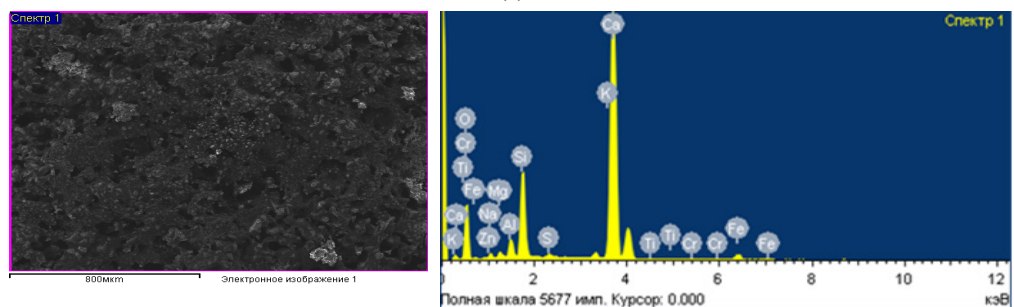
Күлдің термогравиметриялық және дифференциалды жылу талдауында 20-150 °C температуралар аралығында бастапқы массаның жоғалуы шамамен 1,2-

1,5 % құрайды, мұнда адсорбцияланған ылғалдың жоғалауы тіркелді. 150-280 °C температурада тұрақтылық тіркелді, ал 280-380 °C аралығында экзотермиялық әсердің, яғни күл құрамында жанбай қалған көміртектің тотығуымен түсіндіріледі. 280-640 °C аралығында негізгі массаның жоғалуы 4,5 % құрады. Мұнда негізгі процес күлдің құрамындағы сазды және карбонатты фазалардан судың жоғалуы орын алды.

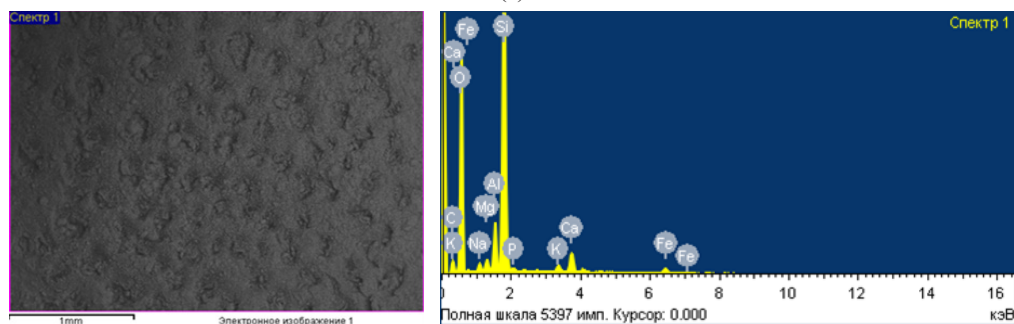
Электронды микроскопиялық талдау М. Әуезов атындағы ОҚЗУ-нің «Құрылымдық және биохимиялық материалдар аймақтық инженерлік сынақ зертханасында» орналасқан зауанауи JEOL JSM-6610LV растрлық сканерлейтін микроскопын қолдана отырып зерттелді. Электронды микроскопиялық талдау нәтижелері 2 - суретте көрсетілген.



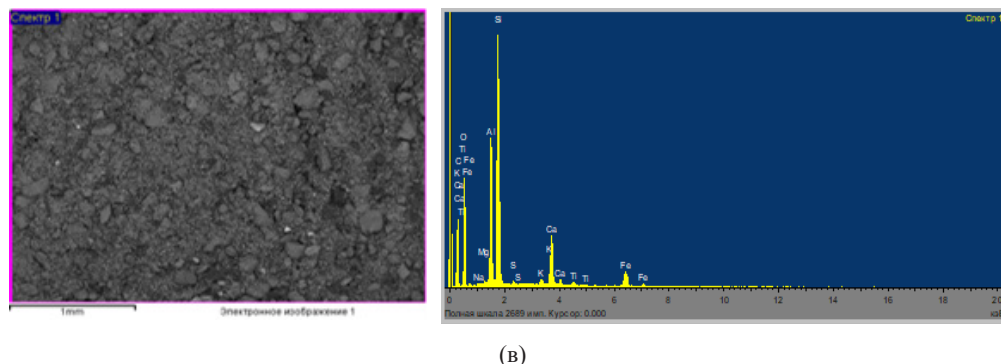
(a)



(a)



(6)



Сурет 2. Микроқұрылым және рентгендік спектрограмма: а) гипс; ә) цемент; б) опока; в) құл.

Расторлы электронды микроскопиялық талдау нәтижесінде, гипс дигидратның поликристалды агрегаты бейнелеген. Суретте гипс микроқұрылымы ірі түйіршікті тәрізді, өлшемі 50-ден 500 мкм-ге дейінгі дұрыс емес пішінде көрсетілген. Түйіршік беті тегіс емес және кедір-бұдыр, жарықты ұсақталған табиғи гипс жынысына тән көрініс анықталды. Гипс микроқұрылымында жасанды түрде өсірілген немесе қайта кристалданған гипске тән айқын ине тәрізді немесе ламельді морфология кездескен жоқ. Энергия дисперсиялық рентгендік спектроскопия нәтижесінде негізгі элемент күкірттің (S) шың қарқындылығы жоғары, кальций (Ca) және оттегі (O) шындары жоғары және сульфат формаларына сәйкес келеді. Бұл кальций сульфатының стехиометриялық мәніне толықтай дәлелдейді. Si, Al, K және Mg аз мөлшерде болуы табиғи гипс құрамында саз қоспаларының бар екендігін көрсетеді.

Микроскопиялық талдауда портландцемент ұнтағының гидратталмаған күйі бейнелеген. Суретте цемент микроқұрылымы ұсақ дисперсті және бөлшектердің пішіні гетеогенді сипатта, өлшемі 5-10 мкм аз және орташа өлшемі 10-40 мкм аралығында көрсетілген. Түйіршік беті тегіс емес, қараңғы фонда айтарлықтай анық емес фазалар көрінісі анықталды. Цемент микроқұрылымында үш кальцийлі силикат және екі кальцийлі силикат минералдарының басымдығы және аралық фаза үш кальцийлі алюминат және ауыр фаза төрт кальцийлі алюмофериттен тұратындығы анықталды. Энергия дисперсиялық рентгендік спектроскопия нәтижесінде негізгі элемент Ca – цемент минералдарының негізгі катионы және Si – силикат фазаларының маңызды элементі анықталған. Бұл кальций силикаттарының басым екендігін растайды. Al және Fe болуы алюминат (C_3A) және феррит (C_4AF) фазаларының бар екенін көрсетеді. Кішкентай күкірт шыңы (S) ұстасу мерзімін реттеуші гипс дигидратын ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$) көрсетеді.

Микроскопиялық талдауда опока минералының жоғары кеуікті және күрделі беттік құрылым бейнелеген. Суретте опока микроқұрылымы жүздеген мкм дейінгі біркелкі емес тесіктер мен қуыстар көрінеді, 100 мкм кіші бөлшектер аморфты кремний диоксидінің агрегаттары көрсетілген. Энергия дисперсиялық рентгендік спектроскопия нәтижесінде опоканың кремнийлі табиғатын толық растайды. Кремний мен оттегінің жоғары мөлшері аморфты кремнийдің басым

екенін көрсетеді. Са, Al, Fe, Mg және К болуы табиғи опокаға тән және саз минералдарының (каолинит, монтмориллонит), карбонат қоспаларының және темір қосылыстарының бар екенін көрсетеді (Jurkowska et al., 2022).

Микроскопиялық талдауда күлдің жоғары дисперстілігімен бейнеленген. Суретте 5 мкм-ден 100-150 мкм-ге дейінгі өлшемдегі бөлшектердің, шыны тәрізді микроқұрылымы көрсетілген. Бұл жоғары температурада күйдірілген және жылдам салқындағанды көрсетеді. Кейбір ірі бөлшектер кеуекті болуы жанбаған көміртек қоспаларының бөлшектеріне тән көрініс анықталды. Энергия дисперсиялық рентгендік спектроскопия нәтижесінде күлдің кремнийлігі тән. Si және Al мөлшерінің жоғары болуы негізгі пуццоландық белсенді фаза болып табылатын алюмосиликат шынысының басым екенін растайды. Темірдің болуы феррит және магнетиттің болуын көрсетеді. Са және S аз мөлшерде болуы кальций қосылыстары мен сульфаттардың болуын көрсетеді. Көміртек шыңы (C) жанбаған көміртектің болуын, оның мөлшері күлдің минералды қоспа ретіндегі сапасына әсер етеді.

Қорытынды. Зерттеу жұмысының нәтижесінде келесідей қорытынды жасалды:

1. Зерттелген материалдардың химиялық құрамын талдау нәтижесінде, гипс құрамында кальций сульфаты дигидраты $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ басым болуы SO_3 (38,11 %) және CaO (29,89 %) жоғары құрамымен сипатталады. SiO_2 (4,64 %) және Al_2O_3 (1,29 %) төмен құрамы саз қоспаларының салыстырмалы түрде аз мөлшерде кездесетіндігін көрсетті. Портландцемент ЦЕМ I 42,5Б құрамында CaO (60,87 %) және SiO_2 (20,48 %), Al_2O_3 (5,88 %) және Fe_2O_3 (3,77 %) анықталды. Негізгі оксидтердің арақатынасы силикат фазаларының алит және белит басым болуын дәлелдейді. Опокада SiO_2 (75,31 %) мөлшерінің айтарлықтай жоғарылауымен, төмен CaO (1,24 %) мөлшерімен ерекшеленеді. Кремний диоксидінің жоғары мөлшері, Al_2O_3 айтарлықтай төмен мөлшерімен (9,24 %) және күйдіру кезіндегі жоғалу (ККЖ=4,68 %) аморфты кремнийі мен саз минералдарының басым болуын көрсетеді. Бұл химиялық құрам опоканың жоғары пуццоландық белсенділігін анықтайды. ЖЭС ұшқыш күлі F класындағы кремнийлі ұшқын күлге тән, SiO_2 (58,98 %) және Al_2O_3 (30,05 %) жоғары мөлшерімен сипатталады. Қышқылдық оксидтің жалпы мөлшері ($\text{SiO}_2 + \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Fe}_2\text{O}_3$) 93 % асады, бұл алюмосиликат шынысының жоғары мөлшерін көрсетеді. CaO мөлшерінің төмендігі (2,08 %) оның қышқылдық сипатын растайды. Күйдіру кезіндегі жоғалу (0,97 %) шығыны жанбаған көміртек пен карбонаттардың төмен мөлшерде екендігін дәлелдейді.

2. Зерттелген материалдардың термогравиметриялық талдау нәтижесінде, гипстің 120-180 °C температура аралығында негізгі масса жоғалу 15-16 % болды, мұнда негізгі процес $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ сусыздануы орын алды. ЦЕМ I 42,5Б портландцементте 420-580 °C температура аралығында негізгі масса жоғалу 2-3,5 % болды, мұнда негізгі процес портландит минералының $\text{Ca}(\text{OH})_2$ сусыздануы анықталды. Опокада 400-520 °C температура аралығында негізгі масса жоғалу 10-11 % анықталды, мұнда негізгі процес сазды минералдардың құрамындағы су молекулаларының жоғалуы анықталды. Күлде 380-640 °C температура аралығында

негізгі масса жоғалу 4,5-5,5 % болды, мұнда негізгі процес көміртектің жану мен декарбонизациялану процесінің жүруі дәлелденді.

3. Зерттелген материалдардың расторлы электронды микроскопиялық талдау нәтижесінде, барлық компоненттердің құрамы айтарлықтай тұрақты екені және зиянды және қажетсіз қоспалардың мөлшері рұқсат етілген шектен төмен екені анықталды. Сондай-ақ, шикізаттардың құрамында радиоактивті элементтер U, Th, Ra және улы ауыр металл элементтерінің Cu, Pb, Be бөлшектері анықталған жоқ.

Қорытындылай келе, жүргізілген физика-химиялық зерттеудің нәтижесінде гипс, цемент, опока және күл қосындысынан гипс-цемент-пуццоланды композициялық материал алуға толықтай мүмкіндік бар екендігі дәлелденді.

References

Amiraliyev B., Taimasov B., Potapova E., Sarsenbaev B., Begentayev M., Dauletiyarov M., Kuandykova A., Abdullin A., Ainabekov N., Auyesbek S. (2025) Heat Treatment of Clay Shales and Their Utilization as Active Mineral Additives for the Production of Composite Cements. *Journal of Composites Science*. – No. 9. – 269 p. <https://doi.org/10.3390/jcs9060269> (in English).

Bumanis G., Korjakins A., Bajare D. (2022) Environmental Benefit of Alternative Binders in Construction Industry: Life Cycle Assessment. *Environments*. – No. 9. – P. 6. <https://doi.org/10.3390/environments9010006> (in English).

Bumanis G., Vitola L., Pundiene I., Sinka M., Bajare D. (2020) Gypsum, Geopolymers, and Starch-Alternative Binders for Bio-Based Building Materials: A Review and Life-Cycle Assessment. *Sustainability*. – No. 12. – P. 5666. <https://doi.org/10.3390/su12145666> (in English).

Bumanis G., Zorica J., Bajare D. (2020) Properties of Foamed Lightweight High-Performance Phosphogypsum-Based Ternary System Binder. *Applied Sciences*. – No. 10. – P. 6222. <https://doi.org/10.3390/app10186222> (in English).

Calderón-Morales B.R.S., García-Martínez A., Pineda P., García-Tenório R. (2021) Valorization of Phosphogypsum in Cement-Based Materials: Limits and Potential in Eco-Efficient Construction. *Journal of Building Engineering*. – No. 44. – P. 102506. <https://doi.org/10.1016/j.jobbe.2021.102506> (in English).

Cement Industry Net Zero Progress Report 2024/25. Global Cement and Concrete Association. On this link. <https://gccassociation.org/wp-content/uploads/2024/11/GCCA-Cement-Industry-ProgressReport-202425.pdf> 10.11.2024. (in English)

Colak A. (2011) Physical, Mechanical, and Durability Properties of Gypsum–Portland Cement–natural Pozzolan Blends. *Canadian Journal of Civil Engineering*. – No. 28. – P. 375-382. <https://doi.org/10.1139/100-123> (in English).

Declercq Y., Delbecq N., De Grave J., De Smedt P., Finke P., Mouazen A.M., Nawar S., Vandenberghe D., Van Meirvenne M., Verdoodt A. (2019) A Comprehensive Study of Three Different Portable XRF Scanners to Assess the Soil Geochemistry of An Extensive Sample Dataset. *Remote Sensing*. – No. 11. – P. 2490. <https://doi.org/10.3390/rs11212490> (in English).

Galautdinov A.R., Mukhametrahimov R.Kh. (2019) Osobennosti gidratatsii modifitsirovannogo gipsotsementno-puttsolanovogo vyazhushchego [Features of hydration of modified gypsum-cement-pozzolan binder]. *Construction materials*. – No. 10. – P. 58-63. (in Russian).

Jurkowska A.A., Świerczewska-Gładysz E. (2022). Opoka – a mysterious carbonate-siliceous rock: an overview of general concepts. *Geology, Geophysics and Environment*. – No. 48. – P. 257-278. <https://doi.org/10.7494/geol.2022.48.3.257> (in English).

Makarova I.A., Lokhova N.A. (2011) Fiziko-khimicheskiye metody issledovaniya stroitel'nykh materialov [Physico-chemical methods of research of building materials]. BSU edition: Belarus. – No. 2011. – 139 p. (in Russian).

Myrzakozha D.A., Mirzakhodzhaev A.A. (2014) Zamanai zertteu adisteri [Modern research methods]. Almaty. – No. 2014. – 352 p. (in Kazakh).

Potapova E.N. (2016) Nailuchshiye dostupnyye tekhnologii proizvodstva tsementa. Opyt razrabotki rossiyskogo spravochnika [The best cement production technologies. Experience in the development of the Russian directory]. Crocus: Moscow, Russia. – 49 p. (in Russian).

Production. Portland cement (except white). Bureau of National statistics of the Agency for strategic planning and Reforms of the Republic of Kazakhstan. On this link. <https://stat.gov.kz/en/> 06.03.2026. (in English).

Sahmenko G., Puzule L., Sapata A., Slosbergs P., Bumanis G., Sinka M., Bajare D. (2024) Gypsum–Cement–Pozzolan Composites for 3D Printing: Properties and Life Cycle Assessment. *Journal of Composites Science*. – No. 8. – P. 212. <https://doi.org/10.3390/jcs8060212> (in English).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 302–314

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.453>

UDC: 544.556.1

IRSTI: 31.15.27

©Satayeva S.¹, Yermukhanova S.^{1*}, Urazova A.¹, Mendygaliyeva A.²,
Sabitov B.¹, 2026.

¹West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan,
Uralsk, Kazakhstan;

²Mahambet Otemisuly West Kazakhstan University, Uralsk, Kazakhstan.
E-mail: svetok_88-88@mail.ru

OBTAINING BENZENE BY PHOTOCATALYTIC OXIDATION OF TOLUENE

Satayeva Sapura — PhD, Associate Professor, West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan, Uralsk, Kazakhstan,

E-mail: sataeva_safura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2397-9069>;

Yermukhanova Svetlana — Master of Technical Sciences, Senior Lecturer, West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan, Uralsk, Kazakhstan,

E-mail: svetok_88-88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-3280-0069>;

Urazova Alia — Master of Technical Sciences, Senior Lecturer, West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan, Uralsk, Kazakhstan,

E-mail: urazova_17@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6339-9635>;

Mendygaliyeva Aigul — Master of Technical Sciences, Senior Lecturer, Mahambet Otemisuly West Kazakhstan University, Uralsk, Kazakhstan,

E-mail: aigulek_26_88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0009-8078-6886>;

Sabitov Bekzat — Master student, West Kazakhstan Agrarian and Technical University named after Zhangir khan, Uralsk, Kazakhstan,

E-mail: bekzat.sabitov.kz7777@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0009-3612-9977>.

Abstract. Work revealed the mechanistic features of the process by studying the intermediate products formed during the photocatalytic oxidation of toluene, the reaction mechanism, and the pathways for the formation of benzene. The photocatalytic oxidation of toluene was carried out, and benzene, benzaldehyde, benzoic acid, and benzyl alcohol were obtained as reaction products. In addition, the role of intermediate compounds in the formation of benzene was evaluated, and based on the experimental data obtained, the mechanism of the oxidation of toluene to benzene was proposed. The toxic and carcinogenic properties of benzene formed during photocatalytic processes and its environmental hazard to the environment were considered.

Main factors affecting the photocatalysis process were considered during the study - light source, catalyst type, reaction time and reaction medium. As a result of the



experiments, the formation of benzene was recorded using the relative concentration method and its intermediate stages were clarified.

Results obtained allow a deeper understanding of the laws of benzene formation during the photocatalytic oxidation of toluene and can serve as a basis for the development of effective and environmentally safe technologies for the purification of volatile organic compounds in the air. The study provides additional insight into the role of benzaldehyde as a key intermediate in benzene formation and contributes to a better understanding of the formation of hazardous by-products during photocatalytic treatment of volatile organic compounds.

Keywords: photocatalysis, toluene, photocatalysts, benzene, benzaldehyde, carcinogens

For citations: Satayeva S., Yermukhanova S., Urazova A., Mendygaliyeva A., Sabitov B. Obtaining Benzene by Photocatalytic Oxidation of Toluene. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 302–314. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.453>

©Сатаева С.¹, Ермуханова С.^{1*}, Уразова А.¹, Мендыгалиева А.²,
Сабитов Б.¹, 2026.

¹Жәңгір хан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті,
Орал, Қазақстан;

²Махамбет Өтемісұлы атындағы Батыс Қазақстан университеті, Орал, Қазақстан.
E-mail: svetok_88-88@mail.ru

ТОЛУОЛДЫҢ ФОТОКАТАЛИТИКАЛЫҚ ТОТЫҒУЫ АРҚЫЛЫ БЕНЗОЛ АЛУ

Сатаева Сапура — PhD, қауымдастырылған профессор, Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал қаласы, Қазақстан,
E-mail: sataeva_safura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2397-9069>;

Ермуханова Светлана — техника ғылымдарының магистрі, аға оқытушы, Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал қаласы, Қазақстан,
E-mail: svetok_88-88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-3280-0069>;

Уразова Алия — техника ғылымдарының магистрі, аға оқытушы, Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал қаласы, Қазақстан,
E-mail: urazova_17@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6339-9635>;

Мендыгалиева Айгүл — техника ғылымдарының магистрі, аға оқытушы, Махамбет Өтемісұлы атындағы Батыс Қазақстан университеті, Орал, Қазақстан,
E-mail: aigulek_26_88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0009-8078-6886>;

Сабитов Бекзат — магистрант, Жәңгірхан атындағы Батыс Қазақстан аграрлық-техникалық университеті, Орал қаласы, Қазақстан,
E-mail: bekzat.sabitov.kz7777@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0009-3612-9977>.

Аннотация. Бұл мақалада толуолдың фотокаталитикалық тотығуы кезінде түзілетін аралық өнімдерді алу процесі, реакция механизмі және бензолдың түзілу жолдары қарастырылады. Толуолдың фотокаталитикалық тотығуы жүргізілді,

нәтижесінде бензол, бензальдегид, бензой қышқылы және бензил спирті реакция өнімдері ретінде алынды. Сонымен қатар, бензолдың түзілуіндегі аралық өнімдердің рөлі бағаланды және алынған тәжірибелік деректерге негізделген толуолдың бензолға тотығу механизмі ұсынылды.

Фотокаталитикалық процестер кезінде түзілетін бензолдың уытты және канцерогендік қасиеттері, сондай-ақ оның қоршаған ортаға және адам денсаулығына тигізетін қауіптері талқыланады, өйткені бензол ұзақ уақыт әсер еткен жағдайда ауыр аурулардың, соның ішінде қатерлі ісік түрлерінің даму қаупін арттыратын қауіпті ластаушы заттардың бірі болып табылады.

Зерттеуде фотокаталитикалық процеске әсер ететін негізгі факторлар қарастырылды: жарық көзі, катализатор түрі мен қасиеттері, реакция ұзақтығы, реакция ортасының құрамы және бастапқы материал концентрациясы. Олардың толуолдың фотокаталитикалық тотығу жылдамдығына, оның түрлену дәрежесіне және аралық және соңғы өнімдердің түзілу селективтілігіне әсері талданды. Салыстырмалы концентрация әдісін қолданатын тәжірибелер бензолдың түзілуін көрсетті, және оның түзілуінің бірнеше аралық сатылары анықталып, нақтыланды. Алынған деректер бізге процесс жағдайлары мен бензол шығымы арасындағы байланысты орнатуға мүмкіндік берді, бұл фотокаталитикалық технологиялардың қауіпсіздігін бағалау үшін маңызды.

Бұл нәтижелер фотокаталитикалық толуол тотығуы кезінде бензолдың түзілуінің негізгі механизмдерін тереңірек түсінуге ықпал етеді, реакция механизмінің ерекшеліктерін және соңғы өнімдердің түзілуіндегі аралық өнімдердің рөлін ашады. Бұл зерттеу нәтижелерін фотокаталитикалық тазарту жағдайларын оңтайландыру, улы қосалқы өнімдердің түзілуін азайту және ауа мен су ортасынан ұшпа органикалық қосылыстарды кетірудің тиімдірек, экологиялық таза технологияларын әзірлеу үшін пайдалануға болады.

Түйін сөздер: фотокатализ, толуол, фотокаталитикалық тотығу, бензол, бензальдегид, канцерогенді қосылыстар

©Сатаева С.¹, Ермуханова С.^{1*}, Уразова А.¹, Мендыгилиева А.²,
Сабитов Б.¹, 2026.

¹Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангир хана,
Уральск, Казахстан;

²Западно-Казахстанский университет имени М. Утемисова, Уральск, Казахстан.
E-mail: svetok_88-88@mail.ru

ПОЛУЧЕНИЕ БЕНЗОЛА МЕТОДОМ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ ТОЛУОЛА

Сатаева Сапура — PhD, ассоциированный профессор, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангир хана, Уральск, Казахстан,
E-mail: sataeva_safura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2397-9069>;

Ермуханова Светлана — магистр технических наук, старший преподаватель, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангир хана, Уральск, Казахстан,
E-mail: svetok_88-88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-3280-0069>;



Уразова Алия — магистр технических наук, старший преподаватель, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангир хана, Уральск, Казахстан,
E-mail: urazova_17@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6339-9635>;

Мендыгалиева Айгул — магистр технических наук, старший преподаватель, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени М. Утемисова, Уральск, Казахстан,
E-mail: aigulek_26_88@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0009-8078-6886>;

Сабитов Бекзат — магистрант, Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангир хана, Уральск, Казахстан,
E-mail: bekzat.sabitov.kz7777@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0009-3612-9977>.

Аннотация. В работе исследованы промежуточные продукты, образующиеся при фотокаталитическом окислении толуола, а также рассмотрены механизм протекания реакции и пути образования бензола. В результате фотокаталитического окисления толуола в качестве продуктов реакции были идентифицированы бензол, бензальдегид, бензойная кислота и бензиловый спирт. На основе экспериментальных данных оценена роль промежуточных соединений в формировании бензола и предложена схема механизма его образования. Особое внимание уделено токсическим и канцерогенным свойствам бензола, образующегося в ходе фотокаталитических процессов, а также потенциальным экологическим рискам, связанным с его присутствием. В ходе исследования проанализированы основные факторы, влияющие на эффективность фотокаталитического процесса, включая тип и свойства катализатора, характеристики источника света, продолжительность реакции, состав реакционной среды и концентрацию исходного вещества. Проведена оценка их влияния на скорость фотокаталитического окисления толуола, степень его превращения и селективность образования промежуточных и конечных продуктов. В результате экспериментов методом относительной концентрации было подтверждено образование бензола и выявлены отдельные промежуточные стадии его формирования. Полученные данные позволили установить взаимосвязь между условиями проведения процесса и выходом бензола, что имеет важное значение для оценки безопасности фотокаталитических технологий. Результаты исследования способствуют более глубокому пониманию закономерностей образования бензола при фотокаталитическом окислении толуола, раскрывают особенности механизма реакции и роль промежуточных соединений в формировании конечных продуктов. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации процессов фотокаталитической очистки, снижения образования токсичных побочных продуктов и разработки более эффективных и экологически безопасных технологий удаления летучих органических соединений из воздушной и водной среды.

Ключевые слова: фотокатализ, толуол, фотокаталитическое окисление, бензол, бензальдегид, канцерогенные соединения

Introduction. Volatile organic compounds (VOCs) are organic chemical compounds found in a variety of products that readily evaporate and are distributed to the environment under normal conditions. VOCs are highly volatile, mobile, and resistant to degradation, and can be transported long distances in the environment (Faroon et al.,

2005). The most common VOCs are aromatic hydrocarbons (e.g., benzene, toluene, xylene, and ethylbenzene) and halogenated hydrocarbons (e.g., chloroethylene and trichloroethylene).

A special type of VOC is carcinogenic volatile organic compounds, which can cause cancer in humans. The main routes of VOC entry into the body from contaminated water are through drinking, bathing, eating, swimming and washing clothes (Chowdhury et al., 2009). The sources of VOC can be natural and anthropogenic. Natural sources include emissions from factories, natural forest fires and anaerobic processes in wetlands. Anthropogenic sources include domestic and industrial processes: food production, use of fertilizers and pesticides, septic systems, chlorination, transportation, combustion of hydrocarbon fuels, oil storage and distribution, textile cleaning, printing, pharmaceutical industry, etc. (Pandey et al., 2018).

The growth of agricultural activities worldwide (fuel use, burning of agricultural waste, and use of VOCs as inert components of pesticides) has led to the widespread release of VOCs into the environment. In addition, many studies have shown that VOCs are indoor air pollutants, with the main sources being tobacco smoke, chlorinated water, perfumes, paint strippers, adhesives, new clothing, and heaters that use plastic or kerosene. Some researchers have detected VOCs in bottled water, while others have found microbial volatile organic compounds in the air, which may originate from microbial metabolites or airborne mold spores (Fischer et al., 2003, Murrells et al., 2007, Guerra et al., 2018).

VOC has direct and indirect effects on humans and the environment, and the main problems they pose include: harm to human health and the environment through toxicity; carcinogenicity and other adverse effects; degradation of materials; formation of tropospheric photochemical oxidants; depletion of stratospheric ozone; global climate change; and the emission of unpleasant odors. In addition, VOC and nitrogen oxides react in the presence of sunlight to form photochemical oxidants (ozone, peroxyacyl nitrates, peroxides, etc.) (Williams et al., 2007). These compounds are harmful to human health and have a negative impact on the environment, as they oxidize NO gas, converting it into the even more dangerous NO₂.

Although the photocatalytic oxidation of toluene over TiO₂-based photocatalysts has been extensively investigated, the formation pathways of benzene as a toxic and carcinogenic intermediate remain insufficiently clarified. Most previous studies have focused primarily on the degradation efficiency of toluene and mineralization processes, while limited attention has been paid to the quantitative relationship between benzaldehyde, benzyl alcohol, benzoic acid, and benzene during photocatalytic transformation.

The novelty of the present study lies not only in the identification of intermediate products formed during photocatalytic oxidation of toluene, but also in the comparative assessment of their relative abundance under identical experimental conditions and in evaluating the contribution of benzaldehyde to benzene formation. Unlike previous studies primarily focused on toluene degradation efficiency and mineralization, this work provides experimental evidence regarding the relative distribution of benzaldehyde,

benzyl alcohol, benzoic acid and benzene, allowing a more detailed interpretation of the pathways leading to the formation of hazardous by-products during photocatalytic treatment.

Materials and methods. Photocatalytic oxidation of gaseous organic compounds involves several processes, the most important of which are: the generation and recombination of electrons and holes, adsorption of pollutants, chemical reactions, and desorption of products (Ajmal et al., 2022). The initial stage of photocatalytic oxidation is the formation of electron-hole pairs under the influence of light. They can migrate to the surface of the catalyst and be trapped in various regions. Photogenerated electrons can reduce O_2 molecules or organic molecules adsorbed on the catalyst surface. On the other hand, photogenerated holes can oxidize water molecules, forming hydroxyl radicals ($OH^\bullet$) and hydrogen peroxide, which can oxidize organic pollutants.

Electron-hole pairs can recombine instead of participating in surface reactions, which reduces the efficiency of the photocatalytic reaction. To prevent recombination, it is important to improve the separation of electrons and holes. This can be achieved by alloying, deposition of co-catalysts, or the use of heterostructures. The use of nanomaterials improves the access of electrons to the catalyst surface and reduces the interaction distance with electron acceptors (Yamada, et al., 2012, Yli-Juuti, et al., 2020).

The mechanism of photocatalytic oxidation of gaseous organic substances is shown in Figure 2 below, and the reaction stages are described as follows:

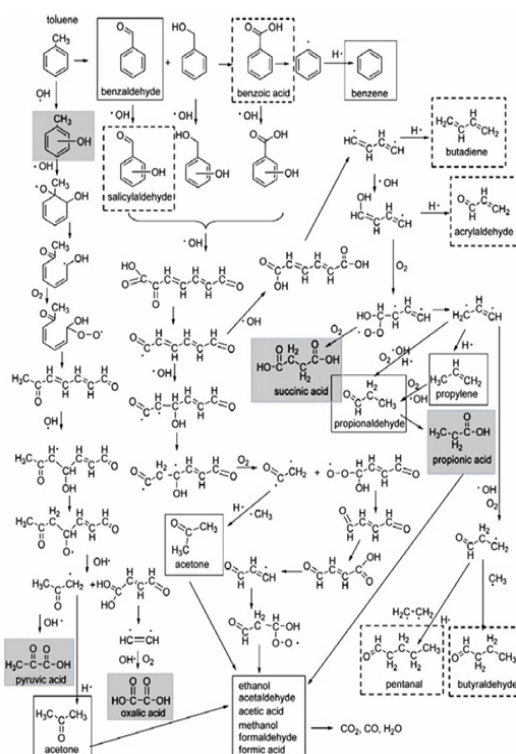
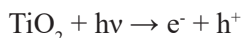


Figure 1. Mechanism of photo catalytic oxidation of toluene.

The figure shows the multi-step mechanism of the photocatalytic oxidation of toluene molecule (Mo, et al., 2009). This process usually occurs on a semiconductor photocatalyst (e.g., titanium(IV) oxide) under the influence of light. The basic idea is that when light is applied, active species ($\bullet\text{OH}$, $\text{O}_2\bullet^-$, h^+) are formed, which gradually oxidize toluene and finally mineralize it to CO_2 and H_2O .

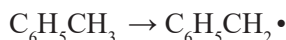
Excitation of the photocatalyst under the influence of light:



where:

- h^+ is a "hole" in the valence band;
- e^- is an electron in the conduction band.

When water reacts with oxygen, hydroxyl radicals ($\bullet\text{OH}$) and superoxide radicals ($\text{O}_2\bullet^-$) are formed. The methyl group in toluene, $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_3$, is the most reactive. The $\bullet\text{OH}$ radical abstracts a hydrogen, forming a benzyl radical:



Further, oxygen is added to form benzyl alcohol, benzaldehyde, and benzoic acid. Finally, all organic intermediates are completely oxidized to form $\text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$.

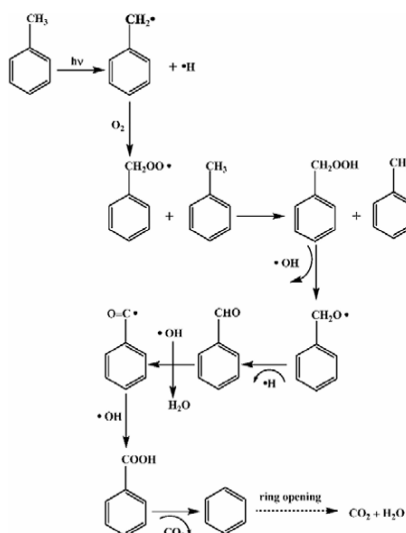


Figure 2. The mechanism of oxidation of toluene to benzene.

Toluene, under the influence of light, first forms a benzyl radical, which reacts with oxygen and turns into peroxide intermediates; then gradually benzyl alcohol, benzaldehyde and benzoic acid are formed, and decarboxylation of benzoic acid results in benzene (Sun et al., 2010, Malayeri et al., 2022, Frank et al., 2020).

Methods of preparing the photocatalyst. Titanium dioxide (TiO_2 (anatase) HTA301 –

pigment), which plays a key role in the photocatalysis process, is applied to the surface of the catalyst in the form of a suspension using a solution of methanol (CH_3OH). For this purpose, pre-cleaned chromatographic glass vials with a volume of 20 ml are used. TiO_2 is placed in each chromatographic glass vial at the rate of 0.2 g.

0.5 ml of methanol is added to it and a homogeneous suspension is obtained. The suspension is applied evenly to the inner wall of the chromatographic glass vial. The Applied area is on average 12 cm^2 . This suspension is blown and dried by compressed air. Due to the high volatility of methanol, the catalyst surface quickly and evenly becomes a solid layer. The inside of the chromatographic glass vial is blown under compressed air for 30 seconds so that it is completely filled with compressed air. Immediately after blowing, the mouth of the chromatographic glass bottle is hermetically sealed with a special SEPTA sealing device consisting of aluminum and silicone.

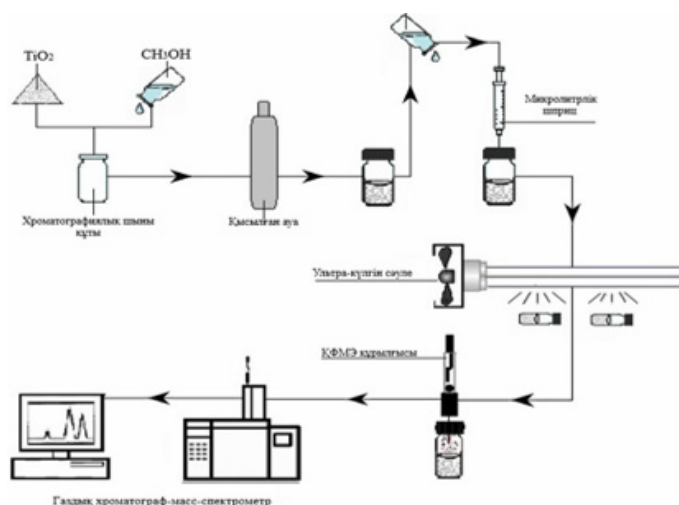


Figure 3. Diagram of photocatalytic oxidation of toluene.

A low-pressure fluorescent lamp of the Philips PL-L 36W/10/4P SECURA model was used as a source of ultraviolet radiation to carry out the photocatalytic oxidation process. This lamp steadily emitted light at a wavelength of 365 Nm, providing the optimal spectral range for activation by the titanium dioxide (TiO_2) photocatalyst. During the experiment, chromatographic glass vials prepared according to each organic compound were alternately placed in the radiation source.

The vials were placed in the very center of the two fluorescent tubes of the Philips lamp and exposed to ultraviolet radiation for 30 minutes at a distance of 1.5 cm from the radiation source. These conditions made it possible for the photocatalysis process to proceed effectively and for the active formation of electron-pore pairs (e^-/h^+) that occur at surface intervals. During irradiation, active oxygen species such as hydrogen peroxide (H_2O_2), hydroxyl radicals ($\bullet\text{OH}$) and superoxide-anion radicals ($\text{O}_2^-\bullet$) were formed on the surface of the TiO_2 photocatalyst, which caused the oxidation of the introduced organic compounds.

Results and discussion. To determine the formed volatile intermediates, the method of gas chromatography-mass spectrometry (GC–MS) was used. The exact composition of the extracted products was determined by the method. As a result, all compounds were effectively detected and fully registered with a gas chromatograph. The chromatogram of intermediates during photocatalytic oxidation of toluene is shown in Figure 4.

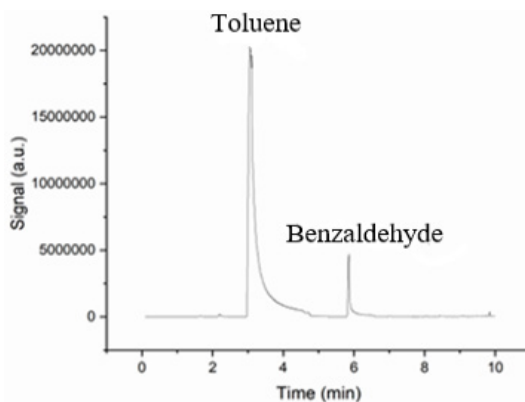


Figure 4. Chromatogram of intermediates during photocatalytic oxidation of toluene.

On the chromatogram, a very high intensity peak is observed in the area of about 3 minutes, which corresponds to toluene. This indicates that the amount of toluene predominates in the reaction mixture. In addition, a second peak characteristic of benzaldehyde was recorded in the period of about 5.8–6.0 minutes. The formation of benzaldehyde proves that intermediates are formed during photocatalytic oxidation of toluene.

The results obtained indicate that the oxidation process of toluene occurs in stages and benzaldehyde is an important intermediate compound in the reaction mechanism.

In chromatograms obtained after photocatalytic oxidation of benzaldehyde, the formation of benzene from benzaldehyde was clearly observed. The chromatogram of intermediates during photocatalytic oxidation of benzaldehyde is presented in Figure 5.

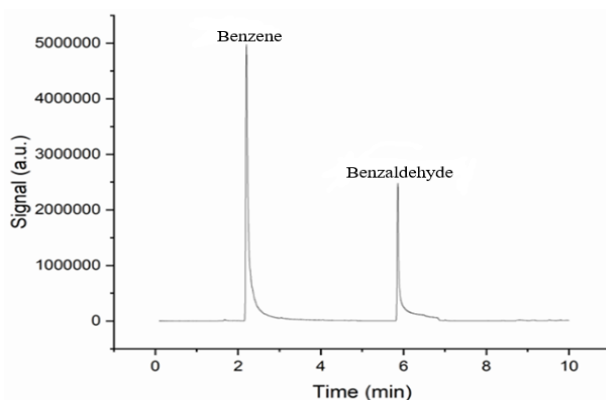


Figure 5. Chromatogram of intermediates during photocatalytic oxidation of benzaldehyde.

As you can see from the image, the result proves that benzaldehyde is further converted to benzene by oxidation or decarbonylation, that is, the role of benzaldehyde as one of the ways of benzene formation has been established.

Table 1. The ratio of the common values of the intermediates formed by toluene.

Benzaldehyde / Toluene	0,069:1
Benzyl alcohol / Toluene	0,004:1
Benzene / Toluene	0,002:1
Acetone / Toluene	0,0004:1

The relative quantitative ratios of the total values of the intermediates formed by the photocatalytic oxidation of toluene are investigated. This was important for studying in which direction and through which intermediate stages toluene is oxidized.

The benzaldehyde / toluene ratio was 0.069:1. This result showed that benzaldehyde is the main intermediate in the pathway of photocatalytic oxidation of toluene. That is, as a result of the first oxidation of toluene, mainly benzaldehyde is formed.

The benzyl alcohol / toluene ratio was 0.004:1. This indicator means that a small amount of benzyl alcohol is formed from toluene. The benzyl alcohol can further oxidize to benzaldehyde. Thus, benzyl alcohol also plays a role as an intermediate product, but the amount is significantly smaller.

The benzene / toluene ratio was recorded at around 0.002:1. This means that a small amount of benzene is formed directly from toluene or through benzaldehyde. This situation indicates that benzene is not the main end product, the path of its formation in the reaction is limited. However, this does not exclude the way benzene is formed as an intermediate product.

The acetone / toluene ratio was at 0.0004:1. This very small concentration means that toluene forms acetone indirectly or through secondary processes. It is observed that acetone appeared only as an additional by-product, and not in the main reaction pathway.

In general, it was found that after the photocatalytic oxidation of toluene, benzaldehyde was formed as the most dominant intermediate. Its amount is quite high in comparison with other products. This proves that the main oxidation pathway of toluene is through benzaldehyde. Although benzyl alcohol and benzene are also formed as intermediates, their proportion is low. Acetone, on the other hand, is a possible secondary or by-product formed as a result of combustion.

The ratio of the common values of the intermediates formed by benzaldehyde is given in Table 4.

Table 2. The ratio of the common values of the intermediates formed by toluene.

Benzene / Benzaldehyde	0,371:1
Benzyl alcohol / benzaldehyde	0,02:1
Benzoic acid / benzaldehyde	0,017:1
Acetone / Benzaldehyde	0,0025:1

As a result of a comparative quantitative analysis, the proportions of intermediate products formed in comparison with benzaldehyde were determined. This analysis was carried out to assess which compounds can be further formed from benzaldehyde.

The benzene / benzaldehyde ratio was 0.371:1. This result indicates that a significant amount of benzaldehyde is further converted to benzene. That is, benzaldehyde is an important intermediate product in the benzene formation pathway.

However, the formation of benzene from benzaldehyde is considered a tentative pathway under photocatalytic conditions and may not represent the dominant reaction route. In conventional TiO_2 -mediated oxidation systems, benzaldehyde is typically further oxidized to benzoic acid and ultimately mineralized to CO_2 and H_2O . The observed benzene formation may be associated with partial deoxygenation or decarbonylation reactions occurring under specific surface properties and reactive oxygen species conditions. Therefore, this pathway should be interpreted as a secondary transformation rather than a primary reaction mechanism. Additional confirmation through in situ spectroscopic techniques or isotopic labeling experiments would be required to fully validate this pathway.

The benzyl alcohol / benzaldehyde ratio was around 0.02:1. This means that benzyl alcohol is oxidized to benzaldehyde, but its concentration is low. That is, benzaldehyde is considered as a fact confirming that it is formed from benzyl alcohol, but the proportion of this pathway is limited.

The benzoic acid / benzaldehyde ratio was recorded at 0.017:1. This indicator means that benzoic acid is formed in small quantities by oxidation from benzaldehyde. This also proves the ability of benzaldehyde to oxidize further, but shows that it is not the main pathway.

The acetone / benzaldehyde ratio was only 0.0025:1. This indicates the formation of a very small amount of acetone, perhaps indirectly or as a product of the combustion process. The probability of its formation from benzaldehyde is low, but indirect processes occurring in the course of the reaction cannot be ruled out.

Based on these relative values, it was found that benzaldehyde becomes benzene as the main intermediate product, and the proportion of paths with the participation of benzoic acid and benzyl alcohol is significantly less. That is, the formation of benzene is the main transformation pathway of benzaldehyde.

Conclusion. The paper investigated the process of photocatalytic oxidation of toluene. It was found that under the influence of a photocatalyst based on titanium(IV) oxide and ultraviolet radiation, multi-stage radical oxidation of toluene occurs. It was shown that the main active particles in the reaction are $\bullet\text{OH}$, $\text{O}_2^{\bullet-}$ radicals and electron-hole pairs.

According to the results of gas chromatography-mass spectrometry, benzaldehyde was identified as the main intermediate product (benzaldehyde/toluene=0.069:1). It has also been observed that small amounts of benzyl alcohol, benzene and acetone are formed.

A study of the photocatalytic oxidation of benzaldehyde showed that it is the main intermediate compound in the formation of benzene. The presence of a benzene/

benzaldehyde ratio of 0.371:1 proved that benzaldehyde is converted to benzene by photochemical transformation or decarbonylation.

The results of the study showed that the photocatalytic oxidation of toluene is a complex and multi-stage process. During the reaction, partial oxidation of the aromatic ring and the formation of intermediates occurs, and at the final stage, organic compounds are completely mineralized and decomposed to CO₂ and H₂O. It was also found that the photocatalytic system has the ability to form toxic and carcinogenic intermediates, including benzene. This indicates the importance of controlling the formation of intermediate products when improving photocatalytic cleaning technologies.

In general, the results obtained allow us to deeply understand the mechanisms of neutralization of volatile organic compounds by the photocatalytic method and can serve as a scientific basis for the development of environmentally safe and effective photocatalytic technologies.

The scientific contribution of this work consists in establishing the relative distribution of major intermediate products formed during photocatalytic oxidation of toluene and demonstrating the potential involvement of benzaldehyde in benzene formation under TiO₂/UV conditions. These findings contribute to a better understanding of benzene formation during photocatalytic oxidation of toluene and may assist in the development of photocatalytic systems that minimize the generation of toxic intermediate products.

References

Ajmal Z., ul Haq M., Naciri Y., Djellabi R., Hassan N., Zaman S., Murtaza A., Kumar A., Al-Sehemi A.G., Algarni H., et al. (2022) Recent Advancement in Conjugated Polymers Based Photocatalytic Technology for Air Pollutants Abatement: Cases of CO₂, NO_x, and VOCs. *Chemosphere.* – No. 308. – P. 136358. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2022.136358 (in Eng.).

Chowdhury S., Champagne P. (2009) Risk from exposure to trihalomethanes during shower: Probabilistic assessment and control. *Science of the Total Environment.* – No. 407. – P. 1570-1578. (in Eng.).

Faroon O., Taylor J., Roney N., Fransen M.E., Bogaczyk S., Diamond G. (2005) Toxicological Profile for Carbon Tetrachloride. Department of Health and Human Services, Public Health Service Agency for Toxic Substances and Disease Registry, Atlanta, GA, USA (in Eng.).

Fischer G., Dott W. (2003) Relevance of airborne fungi and their secondary metabolites for environmental, occupational and indoor hygiene. *Archives of Microbiology.* – No. 179. – P. 75-82. (in Eng.).

Frank S., Dunkel A., Schieberle P. (2020) Model Studies on Benzene Formation from Benzaldehyde. *European Food Research and Technology.* – No. 246. – P. 901-908. DOI: 10.1007/s00217-020-03467-2 (in Eng.).

Guerra F.D., Attia M.F., Whitehead D.C., Alexis F. (2018) Nanotechnology for Environmental Remediation: Materials and Applications. *Molecules.* – No. 23. – P. 1760. DOI: 10.3390/molecules23071760 (in Eng.).

Malayeri M., Lee C.S., Niu J., Zhu J., Haghighat F. (2022) Kinetic Modeling and Reaction Mechanism of Toluene and By-Products in Photocatalytic Oxidation Reactor. *Chemical Engineering Journal.* – No. 427. – P. 131536. DOI: 10.1016/j.cej.2021.131536 (in Eng.).

Mo J., Zhang Y., Xu Q., Zhu Y., Lamson J.J., Zhao R. (2009) Determination and Risk Assessment of By-Products Resulting from Photocatalytic Oxidation of Toluene. *Applied Catalysis B: Environmental.* – No. 89(3-4). – P. 570-576. DOI: 10.1016/j.apcatb.2008.12.013 (in Eng.).

Murrells T. (2007) Climate Change Consequences of VOC Emission Controls. Report to the Department for Environment, Food and Rural Affairs, Welsh Assembly Government, the Scottish Executive and the

Department of the Environment for Northern Ireland. AEA Energy and Environment. – No. 9. – P. 1-19. (in Eng.).

Pandey P., Yadav R. (2018) A Review on Volatile Organic Compounds (VOCs) as Environmental Pollutants: Fate and Distribution. International Journal of Plant and Environment. (in Eng.).

Sun L., Li G., Wan S., An T. (2010) Mechanistic Study and Mutagenicity Assessment of Intermediates in Photocatalytic Degradation of Gaseous Toluene. Chemosphere. – No. 78(3). – P. 313-318. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2009.10.060 (in Eng.).

Williams J., Koppmann R. (2007) Volatile Organic Compounds in the Atmosphere: An Overview. Environmental Chemistry. – P. 1-32. (in Eng.).

Yamada Y., Kanemitsu Y. (2012) Determination of Electron and Hole Lifetimes of Rutile and Anatase TiO₂ Single Crystals. Applied Physics Letters. – No. 101. – P. 133907. DOI: 10.1063/1.4756690 (in Eng.).

Yli-Juuti T., Mohr C., Riipinen I. (2020) Open questions on atmospheric nanoparticle growth. Communications Chemistry. – No. 3. – P. 1-4. DOI: 10.1038/s42004-020-0274-0 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 315–328

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.454>

UDC: 620.193
IRSTI: 31.41.11

©Sdikova G.Zh.¹, Dalabayeva N.S.^{2*}, Sarova N.B.³, Muhtar T.Zh.¹,
Zhaltyrbayeva N.K.³, 2026.

¹M. Utemisov West Kazakhstan University, Oral, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

³Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan.

*Email: nazgulds81@gmail.com

EFFICIENCY OF PHOSPHORUS-CONTAINING INHIBITORS IN PROTECTING STEEL AGAINST CORROSION

Sdikova Guliya — Candidate of Chemical Sciences, Senior Lecturer, M. Utemisov West Kazakhstan University, Oral, Kazakhstan,

E-mail: sdikova.guliya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7949-1521>;

Dalabayeva Nazgul — Candidate of Chemical Sciences, Senior Lecturer, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: nazgulds81@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6824-2100>;

Sarova Nurbanu — Candidate of Chemical Sciences, Senior Lecturer, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: sarova.n@kaznmu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-7541-2224>;

Muhtar Tanagoz — Master, M. Utemisov West Kazakhstan University, Oral, Kazakhstan,

E-mail: tanamuhtar@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-0718-1205>;

Zhaltyrbayeva Nazym — Master, Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: nazzhaltyrbayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-3453-8544>.

Abstract. This paper investigates the results of an analysis of the effect of phosphate inhibitors on reducing corrosion of austenitic stainless steel grade 12X18H10T. Phosphates, including sodium orthophosphate (Na_3PO_4) and its derivatives, are known to form protective films on the surface of metals that inhibit corrosion and protect the surface of steel from aggressive media. In particular, the mechanism of action of sodium orthophosphate is based on protecting the metal surface from corrosion in various environments due to the formation of a special protective film. To synthesize the phosphorous inhibitor, sodium dihydrogen phosphate was heated for various times at temperatures from 40 to 590 °C. To identify the composition of the synthesized phosphate inhibitor, IR spectra were taken using IRTracer-100, which revealed intense bands corresponding to fluctuations in the P-O and O-P-O bonds characteristic of the phosphate anion. To enhance the synergistic effect and stabilize the system, the

phosphate-based inhibitor was supplemented with zinc sulfate crystallohydrate ($\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$), since zinc ions together with phosphate inhibitors form a dense, stable protective film on the metal surface, slowing corrosion. During the work of the steel plate was studied in different environments (tap water, sea water, ground water, NaCl , HCl , H_2SO_4 , HNO_3 , Na_2SO_4 , Na_2CO_3 , NaHCO_3 , $\text{CaSO}_4 + \text{NaHCO}_3$, NaOH (solution $\text{Na}_2\text{CO}_3 + \text{Na}_2\text{SO}_4$, $\text{NaHCO}_3 + \text{CaCl}_2$, MgSO_4) for 2, 4 and 8 days, after which it was carried out a comparative analysis of the experimental results. This article presents calculations of the corrosion rate and the protective effect of a pure phosphate inhibitor $(\text{NaPO}_3)_x$, as well as an inhibitor with the addition of $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ in a ratio of 1:1, obtained using the gravimetric method. To determine the nature of the inhibitor's adsorption on the metal surface, experimental data were described using Frumkin adsorption isotherms.

Keywords: corrosion, steel, inhibitor, protective film, rate of corrosion, aggressive environment

For citations: Sdikova G.Zh., Dalabayeva N.S., Sarova N.B., Muhtar T.Zh., Zhaltyrbayeva N.K. Efficiency of Phosphorus-Containing Inhibitors in Protecting Steel against Corrosion. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 315–328. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.454>

©Сдикова Г.Ж.¹, Далабаева Н.С.^{2*}, Сарова Н.Б.³, Мұхтар Т.Ж.¹,
Жалтырбаева Н.К.³, 2026.

¹М.Өтемісов атындағы Батыс Қазақстан университеті, Орал, Қазақстан;

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

³Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан.

*Email: nazgulds81@gmail.com

ФОСФОР ИНГИБИТОРЛАРДЫҢ БОЛАТТЫҢ ЖЕМІРІЛУІНЕ ҚАРСЫ ТИІМДІЛІГІ

Сдикова Гулия — химия ғылымдарының кандидаты, аға оқытушы, М.Өтемісов атындағы Батыс Қазақстан университеті, Орал, Қазақстан,

E-mail: sdikova.guliya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7949-1521>;

Далабаева Назгуль — химия ғылымдарының кандидаты, аға оқытушы, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: nazgulds81@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6824-2100>;

Сарова Нұрбану — химия ғылымдарының кандидаты, аға оқытушы, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: sarova.n@kaznmu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-7541-2224>;

Мұхтар Таназөз — магистр, М.Өтемісов атындағы Батыс Қазақстан университеті, Орал, Қазақстан, E-mail: tanamuhtar@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-0718-1205>;

Жалтырбаева Назым — магистр, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: nazzhaltyrbayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-3453-8544>.

Аннотация. Мақалада 12Х18Н10Т маркалы аустенитті тот баспайтын болаттың жемірілуге ұшырауын бәсеңдету үшін фосфат қосылыстары негізінде

алынған ингибиторлардың әсері зерттелді. Фосфаттар, соның ішінде, натрий ортофосфаты (Na_3PO_4) және оның туындылары жемірілуді тежейтін қорғаныс қабықшаларын түзейді және болаттың бетін агрессивті ортадан қорғайды. Соның ішінде натрий ортофосфатының әсер ету механизмі металл бетінде арнайы қорғаныс қабықшасын түзу арқылы әр түрлі орталарда жемірілуден қорғауына негізделген. Фосфор ингибиторын синтездеу үшін натрий дигидрофосфатын әр түрлі уақыт аралығында 40-590°C температурада қыздырып алынды. Синтезделген фосфатты ингибитордың құрамын идентификациялау үшін IRTracer-100 арқылы инфрақызыл спектрлері түсіріліп, фосфат-анионға тән P—O және O—P—O байланыстарының тербелістеріне сәйкес интенсивті жолақтар байқалғанның көрсетті. Синергетикалық әсерді күшейту және жүйені тұрақтандыру мақсатында фосфатты ингибитордың құрамына мырыш сульфатының кристаллогидраты ($\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) енгізілді, өйткені мырыш иондары фосфорлы ингибиторлармен бірге металл бетінде қорғаушы тығыз тұрақты қабықша түзіп, жемірілуді баяулатады. Зерттеу барысында болат таспалары әр түрлі орталарда (кұбыр суы, теңіз суы, қабат суы, NaCl , HCl , H_2SO_4 , HNO_3 , Na_2SO_4 , Na_2CO_3 , NaHCO_3 , $\text{CaSO}_4 + \text{NaHCO}_3$, NaOH , $\text{Na}_2\text{CO}_3 + \text{Na}_2\text{SO}_4$, $\text{NaHCO}_3 + \text{CaCl}_2$, MgSO_4 ерітінділері) 2, 4 және 8 тәулік аралығында зерттеліп, тәжірибе нәтижелері салыстырмалы түрде талданды. Мақалада гравиметриялық әдіс негізінде таза фосфат ингибитордың (NaPO_3)_x және (NaPO_3)_x + $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 1:1 ара қатынастағы ингибиторлардың жемірілу жылдамдығы мен қорғау эффектісінің есептеулері келтірілді. Ингибитордың металл бетіне адсорбциялану сипатын анықтау үшін тәжірибелік деректер Фрумкин адсорбциялық изотермаларымен сипатталды, молекулалар арасындағы өзара әсер коэффициентінің мәні оң болғандықтан, ингибитор молекулалары металл бетінде бір-біріне жақындап, тығыз қорғаныш қабат түзетінін және бұл жемірілуді баяулататынын көрсетті.

Түйін сөздер: болат; фосфатты ингибитор; коррозия; жемірілу; қорғаныс эффектісі, жемірілу жылдамдығы, агрессивті орта

©Сдикова Г.Ж.¹, Далабаева Н.С.^{2*}, Сарова Н.Б.³, Мухтар Т.Ж.¹,
Жалтырбаева Н.К.³, 2026.

¹Западно-Казахстанский университет имени М. Утемисова, Уральск, Казахстан;

²Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

³Казахский национальный педагогический университет имени Абая,
Алматы, Казахстан.

*Email: nazgulds81@gmail.com

ЭФФЕКТИВНОСТЬ ФОСФОРСОДЕРЖАЩИХ ИНГИБИТОРОВ ПРОТИВ КОРРОЗИИ СТАЛИ

Сдикова Гулия — кандидат химических наук, старший преподаватель, Западно-Казахстанский университет имени М. Утемисова, Уральск, Казахстан,

E-mail: sdikova.guliya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7949-1521>;

Далабаева Назгуль — кандидат химических наук, старший преподаватель, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: nazgulds81@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6824-2100>;

Сарова Нұрбану — кандидат химических наук, старший преподаватель, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,

E-mail: sarova.n@kaznmu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-7541-2224>;

Мұхтар Танагөз — магистр, Западно-Казахстанский университет имени М. Утемисова, Уральск, Казахстан,

E-mail: tanamuhtar@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-0718-1205>;

Жалтырбаева Назым — магистр, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан,

E-mail: nazzhaltyrbayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-3453-8544>.

Аннотация. В статье представлены результаты исследования эффективности фосфорсодержащих ингибиторов коррозии аустенитной нержавеющей стали марки 12X18H10T. Известно, что фосфатные соединения, в частности ортофосфат натрия (Na_3PO_4) и его производные, способны формировать на поверхности металла защитные плёнки, препятствующие развитию коррозионных процессов в агрессивных средах. Для синтеза фосфатного ингибитора дигидрофосфат натрия подвергали термической обработке при температурах от 40 до 590 °С в течение различного времени. Состав синтезированных продуктов определяли методом ИК-спектроскопии на приборе IRTracer-100. Полученные спектры содержали интенсивные полосы поглощения, соответствующие колебаниям связей P–O и O–P–O, характерным для фосфат-анионов. Для усиления синергетического эффекта и повышения стабильности защитной системы фосфатный ингибитор был модифицирован кристаллогидратом сульфата цинка $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$. Ионы цинка совместно с фосфатами способствуют образованию плотной и устойчивой защитной плёнки на поверхности металла, что приводит к замедлению коррозионных процессов. Коррозионные испытания проводились в различных средах: водопроводной, морской и пластовой воде, а также в растворах NaCl, HCl, H_2SO_4 , HNO_3 , Na_2SO_4 , Na_2CO_3 , NaHCO_3 , NaOH и смешанных солевых системах. Стальные образцы выдерживали в исследуемых средах в течение 2, 4 и 8 суток, после чего проводили сравнительный анализ полученных результатов. С помощью гравиметрического метода были рассчитаны скорость коррозии и защитный эффект для чистого фосфатного ингибитора $(\text{NaPO}_3)_x$, а также для композиции $(\text{NaPO}_3)_x$: $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ в соотношении 1:1. Для установления механизма взаимодействия ингибитора с поверхностью металла экспериментальные данные были обработаны с использованием адсорбционных изотерм Фрумкина.

Ключевые слова: сталь; фосфатный ингибитор; коррозия; точечная коррозия; защитный эффект; скорость коррозии; агрессивная среда

Кіріспе. Қазіргі уақытта металл конструкцияларының, әсіресе болаттың коррозиясы – мұнай өнеркәсіп саласындағы елеулі техникалық және экономикалық мәселелердің бірі. Жабдықтардың коррозиясы қызмет ету мерзімін қысқартып қана қоймай, өндірістік және энергетикалық шығындарды арттырады. Сондықтан, болатты әр түрлі ортада, соның ішінде агрессивті ортада жемірілуден тиімді

қорғау жолдарын іздеу - өзекті мәселелердің бірі болып табылады (Denisa-Ioana (Gheorghe) et al., 2025; Al-Amieri and Waleed al-azzawi, 2023).

Коррозиядан қорғаудың кең таралған әдістерінің бірі - химиялық ингибиторларды қолдану. Коррозия ингибиторлары - металл мен қоршаған орта (ауа, ылғал, жауын-шашынның әсері және т.б.) арасындағы реакцияны бәсеңдететін немесе толық тоқтататын заттар. Соңғы жылдары бейорганикалық ингибиторларға, әсіресе фосфор қосылыстардың негізінде алынған ингибиторларға, ерекше назар аударылуда. Фосфатты ингибиторлар болат бетінде тұрақты, тығыз пассивациялық қабықша түзеді және сыртқы химиялық әсерлерден қорғайды (Ahmed et al., 2022). Сонымен қатар, өндірістің тұрақты дамуы мен экологиялық қауіпсіздік талаптарына сай коррозия ингибиторларының қоршаған ортаға уытты болмауын талап етеді. Осыған орай, фосфатты ингибиторлар экологиялық жағынан бейтарап және тиімді тежегіш ретінде танымал, себебі суда жақсы еритін, зиянсыз және табиғи ортада оңай ыдырайтын қосылыстар (Raimbekova et al., 2023). Зерттеудің негізгі мақсаты - фосфор негізіндегі бейорганикалық ингибиторлардың болаттың коррозиясын тежеу қабілетін гравиметриялық әдіс арқылы қорғау эффекті мен жемірілу жылдамдығын анықтау. Бұл зерттеулер мұнай саласындағы жабдықтар мен конструкцияларын қорғаудың экологиялық және экономикалық жағынан тиімді әдістерін жасауға жол ашады (Revon and Priyantha, 2025; Nouhaila et al., 2025).

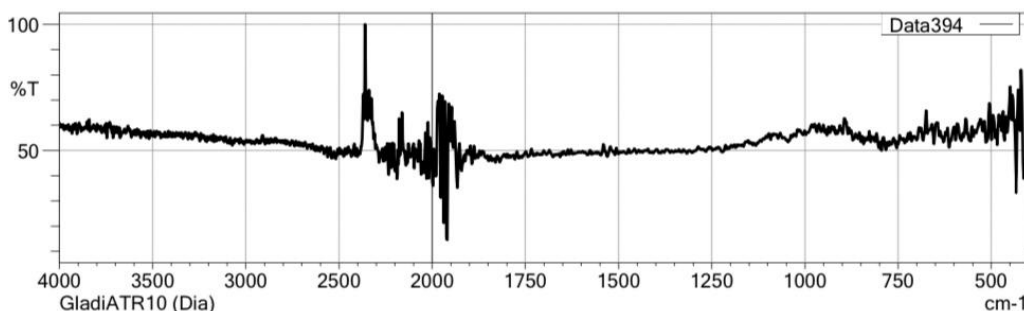
Коррозия ингибиторлар «жасыл химия» талаптарына сай орындалуы тиіс: табиғи жағдайда оңай және тез ыдырауы, тірі ағзаларда жинақталмауы және судағы уыттылығының жоқтығы немесе өте төмен болуы (Revon and Priyantha, 2025). Химиялық заттың табиғатта ыдырауы оның тұрақтылығын анықтайтын маңызды факторлардың бірі болып табылады (Elouhabi et al., 2025). Биодеградация бұл заттың микроорганизмдердің әсерінен көмірқышқыл газы мен суға айналу үдерісі. Заттың ыдырау қабілетіне оның құрылымы мен микроорганизмдердің белсенділігі әсер етеді. Биоаккумуляция - бұл химиялық заттардың тірі ағзаларға зиянды әсерінің бір бөлігі. Ол заттың судан, ауадан, тамақтан немесе топырақтан тірі ағзада жиналу қабілетін білдіреді (Nomozov et al., 2024).

Материалдар және негізгі әдістер. Зерттеу жұмысына 12X18H10T маркалы аустенитті тот баспайтын болаттан дайындалған таспа тәрізді үлгілер қолданылды. Аталған болаттың химиялық құрамына – 0,12%-ға дейін көміртек, шамамен 18% хром, 10% никель және 0,8% дейін титан бар, бұл оның коррозияға төзімділігін және құрылымдық тұрақтылығын қамтамасыз етеді. МемСТ 9.905-82 стандартына сәйкес жемірілу төзімділігінің бағалауы жүргізілді. Стандартқа сай сынаққа дейін болат таспалардың беті механикалық өңдеуден, яғни абразивті материалдар көмегімен тегістеліп, беттік ақаулар және оксидті қабықшалардан жойылып дайындалды. 60–80 °С температурада үлгілер сілтінің сулы ерітіндісінде майсыздандырылды және органикалық қоспалардан тазартылды (Safdar et al., 2024). Реакциялық қабілетін арттыру үшін болат таспалардың беті сынақ алдында белсендірілді, бұл ингибитордың қорғаныш әсерін объективті бағалау үшін мүмкіндік берді. Белсендірілгеннен кейін үлгілер 0,0001 г дәлдікпен

аналитикалық таразыда өлшеніп, штангенциркуль арқылы геометриялық параметрлері анықталып, олардың бет ауданы анықталып, коррозия жылдамдығы және ингибитордың қорғау эффектісі есептелді (Hui, 2025).

Нәтижелер. Натрий дигидрофосфатынан әр түрлі уақыт және температура интервалында (45 мин-40-44°C, 45 мин 90-114°C, 90 мин - 160°C, 180 мин - 240°C, 300 мин - 580-590°C) қыздырып фосфорлы ингибитор алынды (Mahmoud et al., 2024; Soumen et al., 2025).

Натрий дигидрофосфатының физика-химиялық өзгерістерін мақсатты түрде қамтамасыз ету үшін термиялық өңдеу процесі бірнеше сатылардан тұрды және әрбір температуралық саты таңдалды. Натрий дигидрофосфатының құрамындағы бос ылғалды жою және бастапқы құрылымын тұрақтандыру үшін 40-44 °C температурада қыздыру мүмкіндік берді. Дегидратация процесінің жүруі және кристаллогидраттардың ыдырауы 90-114 °C кезінде артты. Фосфат топтарының конденсациясы және төмен молекулалы конденсацияланған фосфаттардың түзілуі 160 °C-та 90 минут бойы жүргізілген қыздыру барысында байқалды. Полифосфатты құрылымдардың қалыптасуы 240 °C термиялық өңдеуді 180 минутқа дейін ұзарту қамтамасыз етті. Соңғы кезеңде 580-590 °C температурада 300 минут бойы термиялық қыздыру кезінде тұрақты, жоғары тежегіш қасиеттерге ие фосфорқұрамдас ингибитор алынды. 1-суретте синтезделген ингибитордың құрамы IRTracer-100 арқылы түсірілген (Shimadzu Corporation) инфрақызыл спектрлері көрсетілген.



Сурет 1. Фосфор ингибиторының ИҚ спектрлері.

1 суретте синтезделген фосфор ингибиторының ИҚ спектрінен 1200-900 cm^{-1} және 650-500 cm^{-1} аймақтарында фосфат-анионға тән O–P–O және P–O байланыстарының тербелістеріне сәйкес жолақтарының болуы фосфатты қабаттың түзілуін көрсетті. (H_2O) мен (-OH) топтардың бар екенін 3700-3000 cm^{-1} аймағындағы кең жолақтар мен 1640 cm^{-1} маңындағы сигнал адсорбцияланған дәлелдейді. Атмосфералық және фондық сигнал ретінде CO_2 қарастырылған және $\approx 2350 \text{ cm}^{-1}$ аймағындағы интенсивті жолақ жұтылуына жататыны анық. C–H алкил және C=O карбонил топтарына тән жолақтардың әлсіз болуы қорғаныш қабықшаның бейорганикалық табиғатын көрсетеді (Qahtan et al., 2025).

Зерттеу барысында болат таспалардың әртүрлі орталарда (қабат суы, құбыр

суы, теңіз суы, NaCl , HCl , H_2SO_4 , HNO_3 , Na_2SO_4 , Na_2CO_3 , NaHCO_3 , CaSO_4 + NaHCO_3 , NaOH , Na_2CO_3 + Na_2SO_4 , NaHCO_3 + CaCl_2 , MgSO_4 ерітінділері) жемірілуге ұшырау ерекшеліктері зерттеліп, гравиметриялық әдіспен массалық өзгерістер анықталды. Болат таспалары 2, 4 және 8 тәулік аралығында зерттеліп, тәжірибе нәтижелері салыстырмалы түрде талданды.

Ингибиторлардың тұрмыстық су жүйелеріндегі тиімділігін бағалау үшін нақты пайдалану жағдайын модельдеп, құбыр және теңіз сулары; хлорид иондарына бай агрессивті ортада қорғаныш қабілетін зерттеу үшін қабат суының орталары зерттелді. NaCl 3% ерітіндісі күрделі иондық құрамда ингибиторлардың өндірістік тиімділігін анықтау үшін алынды, H_2SO_4 қышқыл ортада болаттың белсенді еруі мен ингибитор әсерін бағалау үшін қарастырылды; HCl ерітінділері аса агрессивті қышқыл ортада қорғаныш қабықша түзілуін зерттеу үшін зерттелді. Na_2SO_4 0,1 М ерітіндісі сульфатты ортада пассивация және жемірілу механизмдерін талдау үшін тандалды, Na_2CO_3 0,1 М ерітіндісі сілтілік ортада фосфор қосылыстарының тұрақтылығы мен пассивациясын бағалау үшін алынды, NaHCO_3 0,1 М ерітіндісі буферлік ортада ингибиторлардың pH-тұрақтылығын зерттеуге алынды. CaSO_4 + NaHCO_3 қасп түзілуімен қатар жүретін жемірілу үдерісінде ингибитор әсерін бағалау үшін, NaOH ерітіндісі жоғары сілтілік жағдайда фосфатты ингибиторлардың химиялық тұрақтылығын бағалау үшін, Na_2CO_3 + Na_2SO_4 көпкомпонентті электролиттік ортада ингибиторлардың тиімділігін зерттеуге, NaHCO_3 + CaCl_2 кермекті суда адсорбциялық қабат түзілуін бағалауға, MgSO_4 0,1 М ерітіндісі екі валентті катиондар қатысында қорғаныш қасиеттерін зерттеу үшін алынды (Ayesha et al., 2025).

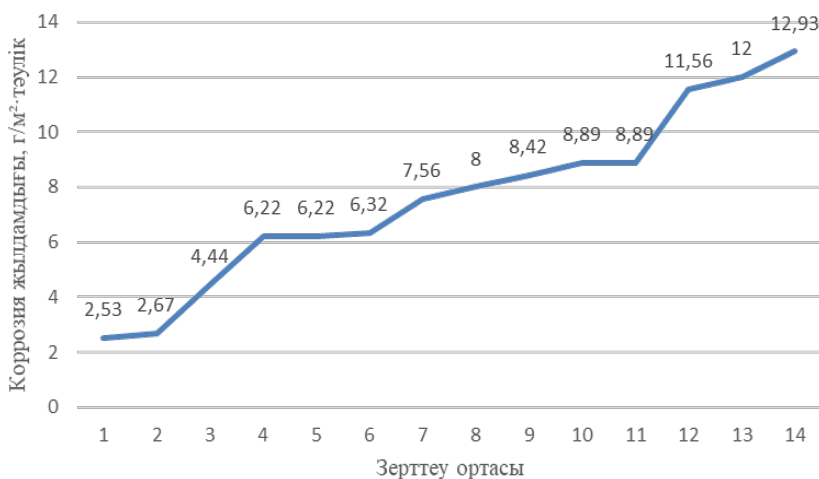
Зерттеу барысында болат таспалардың әртүрлі агрессивті орталарда жемірілуге ұшырау ерекшеліктері қарастырылып, гравиметриялық әдіспен оның салдарынан болатын массалық өзгерістер анықталды.

Синергетикалық әсерді күшейту және жүйені тұрақтандыру мақсатында фосфор құрамдас ингибиторға $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ енгізілді, себебі мырыш иондары фосфорлы ингибиторлармен бірге металл бетінде тығыз әрі тұрақты қорғау қабат түзіп, жемірілудің баяу жүруіне ықпал етеді. Сондай-ақ, анодтық ингибитор ретінде әсер етіп, мырыш иондары металл бетінің анодтық учаскелерін пассивтенуіне, соның нәтижесінде металдың еруі азаюына, ингибитордың тиімділігінің артуына, мырыш сульфаты ингибитор жүйесінің химиялық тұрақтылығын жақсартуына, фосфорлы қосылыстардың ыдырауын баяулатуына ықпал етеді. Қоспа ретінде кристаллогидрат түріндегі тұз алудың себебі оның жақсы еруін қамтамасыз етуі, ылғалдылықты реттеуге көмектесуі.

2 суретте $(\text{NaPO}_3)_x$ + $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 1:1 ингибиторы қатысында болаттың 14 түрлі орталардағы жемірілу жылдамдығы салыстырылды (4 тәулік). Қабаттағы суда жемірілу жылдамдығы ең төмендегі 2,53 г/м²·тәулік мәнін құрайды, яғни бұл орта салыстырмалы түрде агрессивті емес екені көрсетті. Жемірілу жылдамдығы 2,67 г/м²·тәулік H_2SO_4 (0,1 М) ортасында байқалды, бұл қышқылды ортаның металлға айтарлықтай агрессивті әсерін білдіреді. Жемірілу жылдамдығы 4,44 г/м²·тәулікке 0,1 М HCl ерітіндісінде дейін өсіп, хлорид-иондардың әсерінен коррозияның

күшейетегінін көрсетті. Құбыр суы мен 0,1 М MgSO_4 ерітінділерінде жемірілу жылдамдығы 6,22-6,32 г/м²·тәулікке дейін жоғарылайды. 0,05 М NaHCO_3 + 0,05 М CaCl_2 ерітінділерінде жемірілу жылдамдығы 8,42 г/м²·тәулік көрсетті, яғни аралас тұзды-карбонатты ортада коррозия жоғары деңгейде сақталатына ықпал етеді. Жемірілу жылдамдығы 7,56 г/м²·тәулік 0,1 М Na_2SO_4 ерітіндісінде байқалды, бұл сульфат-иондардың әсерін көрсетеді. Жемірілу жылдамдықтарының күрт өсуі теңіз суында (8,0 г/м²·тәулік) және CaSO_4 + NaHCO_3 (0,05 М + 0,05 М) (11,56 г/м²·тәулік) орталарына сәйкес келеді, себебі жоғары минералдану мен хлоридтердің әсерінен жемірілу күшейеді.

0,1 М NaHCO_3 ретінде жемірілу жылдамдығы 6,22 г/м²·тәулікке дейін төмендеді, бұл бикарбонаттардың белгілі бір дәрежеде қорғаныш әсері бар екенін көрсетті. 0,05 М Na_2CO_3 + 0,05 М Na_2SO_4 ортасында жемірілу жылдамдығы қайта өсіп, 8,89 г/м²·тәулікке дейін жетті. Жемірілу жылдамдығының ең жоғары мәндері 0,1 М NaOH (12,0 г/м²·тәулік) және 0,1 М Na_2CO_3 (12,93 г/м²·тәулік) орталарында байқалды. Яғни, әр түрлі орталарда металдың жемірілуі жылдам жүретіні байқалады, себебі мұндай ортада электрөткізгіштік жоғары болып, электрохимиялық реакциялар қарқынды өтіп, хлорид иондары қорғаныш қабаттарын бұзады. Табиғи сулар мен бикарбонатты жүйелерде, керісінше, металл бетінде қорғаныш қабат түзіліп, жемірілу процесі баяу жүретіні анықталды.



Сурет 2. 4 тәулік ішіндегі $\text{NaPO}_3)_x$ + $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 1:1 ингибиторы қатысында болаттың әртүрлі орталардағы жемірілу жылдамдығының мәндері.

Зерттеу барысында 12X18H10T маркалы болат таспаларының жемірілу жылдамдығы келесі факторларға тәуелді: зерттеу ортасының иондық құрамы, рН мәні және электролиттің минералдану деңгейі. 1:1 қатынастағы $(\text{NaPO}_3)_x$ + $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ фосфор ингибитор жүйесінің қатысында барлық орталарда жемірілу жылдамдығының төмендеуі байқалды және фосфорлы ингибитор мен мырыш иондары арасындағы айқын синергетикалық әсеріне тәуелді екені дәлелдеді. Алынған эксперименттік нәтижелерге сәйкес, жемірілу жылдамдығы

ортаның химиялық құрамына және иондық табиғатына тікелей байланысты. Болат таспаларының еруі анодтық реакциялардың жоғары қарқындылығы H_2SO_4 және HCl қышқылды орталарда байқалады. Бірақ фосфоркұрамдас ингибитор жүйесінің қатысында 4 және 8 тәулік ішінде жемірілу жылдамдығының едәуір төмендеуі металл бетінде тұрақты қорғаныш қабықшаның түзілетінін көрсетеді. Қорғаныш қабықша фосфат-иондардың болат бетімен химиялық байланысуы және мырыш иондарының гидроксо-фосфатты кешендер түзуі нәтижесінде қалыптасады. HCl , NaCl 3%, теңіз суы орталарында, яғни хлорид-иондары бар орталарда, жемірілу жылдамдығының жоғары болуы Cl^- иондарының пассив қабықшаның бұзылуына, локальды жемірілуді арттуымен байланысты, дегенмен ZnSO_4 қосу бұл әсерді белгілі бір дәрежеде тежейтіні анық.

NaCl 3%, теңіз суы, яғни хлоридті және жоғары минералданған орталарда жемірілу жылдамдығының айтарлықтай өсуі байқалды, себебі Cl^- иондарының метал бетінде локальды жемірілуді күшеюіне әкелетіні дәлелдейді. Сульфатты орталарда (MgSO_4 , Na_2SO_4) жемірілу орташа деңгейде, ал карбонат және бикарбонат жүйелерінде жемірілу жылдамдығы ортаның құрамына байланысты өзгеріп, кей жағдайларда қорғаныш қабықша түзілуіне қарамастан жоғары мәндерге жететіні байқалды.

Ең жоғары жемірілу жылдамдығы Na_2CO_3 , NaOH карбонатты және сілтілі орталарда байқалды, себебі мұндай орталарда пассив қабықшаның тұрақсыздығымен және иондық әсердің күшеюімен түсіндіріледі, яғни металдың жемірілуі ортаның агрессивтілігіне тіәуелді, сондықтан өндірістік және табиғи жүйелерде жемірілуден қорғау үшін ингибиторларды қолдану және ортаның құрамын ескеру өзекті мәселердің бірі болып табылады.

Зерттелген 14 орталарда (H_2SO_4 , HCl , MgSO_4 , NaCl , Na_2SO_4 , табиғи және теңіз сулары, карбонат-бикарбонат жүйелері, NaOH ерітінділері) фосфорлы ингибитордың эффективтілігі мен тиімділігі мырыш сульфаты кристаллогидратын қосу арқылы айтарлықтай артуына ықпал етті. Мырыш иондары фосфат ингибиторымен бірге, металл бетінде тығыз әрі тұрақты қорғаныш қабықша түзіліп, металдың еруін және жемірілу жылдамдығын баяулатады.

Қышқылды орталарда 1:1 қатынастағы $(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ фосфоркұрамдас ингибитордың анодтық әсерін арттырады, агрессивті ортаның метал бетіне тікелей әсерін азайтады. Қабаттағы су, құбыр және теңіз суларында мырыш иондары хлорид және сульфат иондарының жемірушілік белсенділігі азаяды, қорғаныш қабаттың тұрақтылығына қамтамасыз етеді. Карбонат-бикарбонат және сілтілі жүйелерінде мырыш қосылыстары реттелген пассив қабықша түзулуіне ықпал етіп, жергілікті жемірілуді болдырмайды. MgSO_4 , Na_2SO_4 Сульфатты орталарда металдың жемірілуі орташа деңгейде сақталады, себебі бұл жағдайда SO_4^{2-} иондарының агрессивтілігі Cl^- иондарға қарағанда төмен болғанымен, ерітіндінің иондық күшінің жоғары болуының әсерінен электродтық реакцияларды жеделдетеді. Na_2CO_3 , NaHCO_3 , аралас жүйелерінде жемірілу жылдамдығының жоғары мәндері пассив қабықшаның тұрақсыздығымен және CO_3^{2-} тұздарының қайта кристалдануымен байланысты. NaOH сілтілі ортада

жемірілу жылдамдығының салыстырмалы түрде жоғары болуы болат таспаның бетінде түзілетін OH^- қабатының борпылдақ және механикалық тұрақсыз болуымен сипатталу мүмкін. Мырыш иондары бұл ортада да пассивтендіруші әсер етіп, металл таспаның бетін анодтық аймақтарын тежейтіні көрсетті.

Зерттеу барысында 14 ортаның ішінен қорғау эффектісі жоғары 7 түрлі ортадағы үлгілер алынды. 8 тәулік ішіндегі зерттеу нәтижелері жемірілу жылдамдығының ($\text{г/м}^2 \cdot \text{тәулік}$) өзгеруі 1 кестеде келтірілді.

Кесте 1. $(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 1:1 ингибиторы қатысында болаттың әртүрлі орталардағы жемірілу жылдамдығы мен қорғау эффектісі мәндері (8 тәулік).

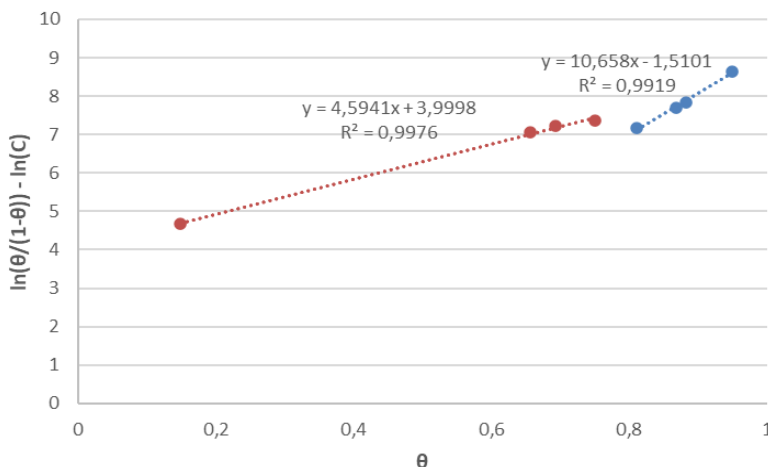
Үлгі №	Орта, С (М)	Жемірілу жылдамдығы, $\text{г/м}^2 \cdot \text{тәулік}$	Z, қорғау эффектісі, %
1	3% Теңіз суы	2,22	94,89
2	0,1 М NaHCO_3	3,78	89,17
3	0,5 М NaCl	3,16	87,83
6	0,1 М Na_2CO_3	2,44	81,00
4	0,1 М Na_2SO_4	4,21	79,52
5	0,05 М NaHCO_3 + 0,05 М CaCl_2	3,47	79,32
7	0,1 М H_2SO_4	5,00	75,00

Ең жоғары жемірілу жылдамдығы 0,1М H_2SO_4 ортада ($5,00 \text{ г/м}^2 \cdot \text{тәулік}$) байқалды, яғни бұл орта ең агрессивті болып табылады. Ең төмен жемірілу жылдамдығы теңіз суы ортасында анықталды, Na_2CO_3 0,1 М жемірілу жылдамдығы $2,44 \text{ г/м}^2 \cdot \text{тәулік}$ тең. Бұл осы ортаның салыстырмалы түрде аз агрессивті екенін көрсетеді. $\text{NaHCO}_3 + \text{CaCl}_2$ 0,05М+0,05М; Na_2SO_4 0,1М; орталарда көрсеткіш біршама тұрақтанып, $2,22\text{--}4,21 \text{ г/м}^2 \cdot \text{тәулік}$ аралығында өзгереді. 0,1 М NaHCO_3 ортада жемірілу жылдамдығы $3,78 \text{ г/м}^2 \cdot \text{тәулікке}$ жетті, яғни, жемірілу жылдамдығы зерттеу ортасының құрамына айтарлықтай тәуелді: қышқылды, тұзды және минералданған орталарда жемірілу күшейеді, ал салыстырмалы бейтарап орталарда төмен мәндер байқалады.

2 тәулік ішінде болат таспалардың бетінде жемірілу айтарлықтай байқалмады, 4 тәуліктен кейін жемірілу өте баяу жүретіні анықталды, 8 тәулік өткен соң массаның елеулі азаюы байқалды, яғни жемірілу әсердің қарқындылығын көрсетілді (Nouhaila et al., 2023; Durdubaeva et al., 2022). Алғашқы 2 және 4 тәулікте болат таспаларының массасының өзгерісі өте аз (құбыр суы, теңіз суы, NaCl , HCl 0,1 М; HNO_3 0,1 М; 0,05М), кейбір жағдайларда, мысалы қабат суында массаның аздап артуы байқалды - бұл ылғал сіңуімен немесе өлшеу қатесімен түсіндірілуі мүмкін. 8 тәулік ішінде барлық болат үлгілерде массаның нақты төмендеуі байқалды, бұл кезеңде жемірілу ісері белсенді жүруіне ықпал етті. Металлдар үшін ең қауіпті, немесе агрессивті орта ретінде күшті қышқыл ерітінділері болып келеді, бұл орталарда металлдың массасы азайғаны, яғни металл жемірілуі болғаны көрсетті. 3% NaCl және құбыр суы ерітінділерінде болат таспалардың беті салыстырмалы түрде қорғаулы, масса көбінесе тұрақты немесе аздап артқаны байқалғаны анық. Жемірілу қарқынының уақытқа байланысты артуы - болатты ингибиторлар

көмегімен ұзақ мерзімді қорғау қажеттілігін дәлелдейді (Kaiynbayeva et al., 2022; Niyazbekova et al., 2024).

Фрумкин адсорбциялық изотермалары ингибитордың болат таспаның бетіне адсорбциялану сипатын анықтау үшін мүмкіндік береді. Фрумкин изотермалары $(\text{NaPO}_3)_x$ ингибиторы (қызыл жолақпен) және $(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 1:1 ингибиторы (көк жолақпен) үшін 3 суретте көрсетілген.



Сурет 3. $(\text{NaPO}_3)_x$ және $(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 1:1 ингибиторлары үшін Фрумкин изотермалары.

Фрумкин моделі 2 түрлі ингибитор (таза $(\text{NaPO}_3)_x$ және $(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ қоспасымен 1:1 арақатынаста) молекулалары арасындағы тартылыс күштерінің арқасында адсорбция процесінің күрделі екенін көрсетеді. Молекулалар арасындағы өзара әсер коэффициентінің мәні оң болғандықтан, ингибитор молекулалары металл бетінде бір-біріне жақындап, тығыз қорғаныш қабат түзетінін және бұл жемірілуді баяулататының көрсетті. Бұл нәтиже ингибитор жүйесінің көпкомпонентті орталарда, яғни теңіз суы, NaCl , Na_2CO_3 , NaHCO_3 орталарында жоғары тиімділігін түсіндіреді. $(\text{NaPO}_3)_x$ ингибиторымен салыстырғанда $(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 1:1 ингибиторының қорғаныс эффектісінің мәндері жоғары екені анықталды.

$(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ арасындағы синергетикалық эффекті бірнеше механизм арқылы жүзеге асу мүмкін, атап айтқанда адсорбциялық механизм бойынша фосфат-иондар болат бетіне хемосорбциялану кезінде активті орталықтар жабылып, анодтық пассивация кезінде мырыш иондары металл бетінің анодтық аймақтарын пассивтендіреді; темір-мырыш фосфаттары негізіндегі тығыз, аз еритін қорғаныш қабат түзілуі арқылы иондық агрессияны тежеу барысында хлорид және сульфат иондарының диффузиясының шектеуіне әкеледі. Осының нәтижесінде металдың еру жылдамдығы төмендеп, ингибитордың қорғау эффектісінің өсуіне ықпал етеді.

Осылайша, мырыш сульфатының кристаллогидраты фосфорқұрамдас

ингибитордың синергетикалық компоненті ретінде әр түрлі орталарда жемірілуге қарсы қорғау эффектісінің сенімділігі мен ұзақ мерзімділігін арттырады.

Алынған зерттеу нәтижелері фосфорқұрамдас ингибиторларды келешекте зерттеудің маңыздылығын және оларды қолдану металлбұйымдар мен жабдықтарды агрессивті ортада ұзақ мерзімді әрі тиімді қорғауға мүмкіндік беретінін айқындайды (Avdeev, 2025; Zhu et al., 2025). Әдістердің сан түрлілігі және оларды ғылыми негізде жүйелендіру биологиялық ыдырау, улылық және биоаккумуляция тәрізді экологиялық көрсеткіштерге негізделген зерттеулерді өндірістік тәжірибеге енгізуге бағыттайды. Бұған қоса техногендік әсерді азайтып, өндірістің экологиялық қауіпсіздігін арттыруға және экономикалық тиімділігіне мүмкіндік береді.

Осыған орай, «жасыл химия» қағидаттарын қолдану арқылы жаңартылған ингибиторларды әзірлеу экологиялық тұрғыдан қауіпсіз технологияларды қолдануда негізгі рөл атқарады. Бұл жағдайда тек ингибиторлардың тиімділігін арттыру ғана қоймай, олардың синтез жолдарын оңтайландыру, қалдықсыз технология қолдану, шикізатты тиімді пайдалану сияқты міндеттер де өзекті мәселелердің қатарына жатқызады (Farshad et al., 2023).

Қорытынды. $(\text{NaPO}_3)_x$ және $(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ингибиторлар жүйелерінде жүргізілген адсорбциялық және кинетикалық талдаулар болатты әртүрлі агрессивті орталарда қорғауы адсорбция-пассивация механизмдері арқылы жүзеге асатынын дәлелдейді. Мырыш иондары фосфорлы қосылыстармен бірге болат таспалардың бетінде тығыз, химиялық тұрақты қабықша түзеді және иондардың диффузиясын шектеп, металдың еруін баяулатады. Бұл жүйе ұзақ мерзімді металл коррозиясындағы қорғанышты қамтамасыз етіп, өндірістік жағдайда қолдануға перспективалы екенін көрсетті.

Сонымен қатар, алынған нәтижелер 1:1 ара қатынастағы $(\text{NaPO}_3)_x + \text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ингибитор жүйесінің болат таспалары қышқылды, тұзды, бейтарап және сілтілі орталарда тиімді қорғауын қамтамасыз ететіні анықталды. Жемірілу жылдамдығы уақыт өткен сайын төмендеуі және қорғау эффектісінің артуы түзілген қорғаныш қабықшаның біртіндеп нығайып, тұрақты күйге өтетінін көрсетті. Адсорбциялық изотермалар арқылы фосфор ингибитордың болат таспаның бетімен берік байланыс түзіп, синергетикалық әсерінен адсорбция-пассивация механизмдері екенін дәлелдеді. Сонымен қатар, экологиялық қауіпсіз, және экономикалық жағынан тиімді жемірілу ингибиторларын әзірлеу – заманауи ғылыми-техникалық прогрестің маңызды мәселелердің бірі. Яғни бұл зерттеу жұмысы «жасыл химия» қағидаларына дамыту бағытына негізделген. Фосфат құрамды ингибиторды жемірілуге қарсы пайдалану - қалдықсыз технология, экономикалық тиімділігі және қауіпсіз жергілікті шикізат қолдану арқылы жүзеге асыру мүмкін. Бұл бағытта жүргізілетін кешенді зерттеулер металл конструкциялар мен жабдықтардың қызмет ету мерзімін ұзартып, өндірістің экологиялық жауапкершілігін арттырады. Табиғи ресурстарды ұтымды пайдалануға және тұрақты даму мақсаттарына қол жеткізуге айтарлықтай үлес қосады, себебі қоршаған ортаға зиянды қалдықсыз, табиғи ресурстарды ұтымды қолдану жолдарына негізделген.

References

- Ahmed A.A., Emad Y., Wan nor Roslam Wan I., Waleed K.A. (2022) A Review of Inorganic Corrosion Inhibitors: Types, Mechanisms, and Applications. *Tribology in Industry*. – No. 45(2). – P. 313. <https://doi.org/10.24874/ti.1456.03.23.06> (in Eng.).
- Al-Amiery, Waleed al-azzawi. A. (2023) Review of Inorganic Corrosion Inhibitors: Types, Mechanisms, and Applications. *Tribology in Industry*. – No. 45(1). – P. 313. <https://doi.org/10.24874/ti.1456.03.23.06> (in Eng.).
- Avdeev Y.G. (2025) Inhibitory protection of low carbon steel in a flow of phosphoric acid solution containing iron (III) phosphate. *Russian Journal of Electrochemistry*. – No. 61(1). – P. 105. <https://doi.org/10.7868/S3034618525010067> (in Eng.).
- Ayesha B.S., Sultan Nasar A., Umapathy M. J. (2025) Enhanced corrosion resistance of zinc phosphate coatings on mild steel through incorporation of nanocrystalline CeO_2 and CeO_2 -CuO nanocomposite. *RSC Adv*. – No. 15. – P. 20916-20934. <https://doi.org/10.1039/D5RA02800K> (in Eng.).
- Denisa-Ioana (Gheorghe) R, Ecaterina M and Sorin-M. A (2025) Recent Development of Corrosion Inhibitors: Types, Mechanisms, Electrochemical Behavior, Efficiency, and Environmental Impact. *Technologies*, – No. 13 (3). – P. 103. <https://doi.org/10.3390/technologies13030103> (in Eng.).
- Durdubaeva R., Beknazarov H., Asamatdinov A., Yusupova N. Study of steel corrosion inhibition with the use of secondary waste. (2022) *Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. Chemistry. Geography. Ecology Series*. – No. 1(138). <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2022-138-1-31-36> (in Eng.).
- Elouhabi N., Timoudan N., Bensalah J., Ait Hmid L., Bouabbadi A., Halioui C., Safi Z., Benzaouak A., Zarrouk A., Harchrass M. (2025) Evaluation of the corrosion inhibition performance of the phosphate derivative $\text{K}_2\text{SrP}_2\text{O}_7$ on carbon steel in 1 M hydrochloric acid solution. *Inorganic Chemistry Communications*. – No. 180. – P. 114961. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2025.114961> (in Eng.).
- Farshad B., Taghi Sh., Bahram R., Seyed A.H. (2023) Sustainable development of an effective anti-corrosion film over the St12-steel surface against seawater attacks using Ce(III) ions/tri-sodium phosphate anions. *Scientific Reports*. – No. 13. – P. 12169. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-38540-9> (in Eng.).
- Hui L. (2025) Study on disodium hydrogen phosphate and 2, 4-dimethylpyridine as corrosion inhibitor for Q235 steel in 3.5 wt% NaCl solution. *Transactions of Materials Research*. – P. 100127. <https://doi.org/10.1016/j.tramat.2025.100127> (in Eng.).
- Kaiynbayeva R.A., Sultanbayeva G.Sh., Kozhabekova N.N., Shakirova A.K., Chernyakova R.M., Dzhusipbekov U.Zh. (2022) Study of the inhibitory properties of sodium tripolyphosphate in the “oimash salt- H_2O -NaTPP” system. *Chemical Journal of Kazakhstan*. – No. 4. – P. 1185.95. <https://doi.org/10.51580/2022-3/2710-1185.95> (in Eng.).
- Mahmoud A. Ahmed, Sherif A and Ashraf A.M. (2024) Current and emerging trends of inorganic, organic and eco-friendly corrosion inhibitors (Review Article). *RSC Adv*. – No. 14. – P. 31877-31920. <https://doi.org/10.1039/D4RA05662K> (in Eng.).
- Niyazbekova A.B., Shakirov T.A., Baytlesova L.I., Zhunusbekova N.M., Niyazbaeva A.I., Gubaidullina G.M. (2024) Effect of phosphate nature on the inhibitory capability of phosphate compositions. *International Journal of Biology and Chemistry*. – No. 17(1). <https://doi.org/10.26577/IJBCh2024v17i1-a16> (in Eng.).
- Nomozov A., Beknazarov K., Khodjamkulov S., Misirov Z., & Yuldashova S. (2024) Synthesis of Corrosion Inhibitors Based on (Thio)Urea, Orthophosphoric Acid and Formaldehyde and Their Inhibition Efficiency. *Baghdad Science Journal*. – P. 10590. <https://doi.org/10.21123/bsj.2024.10590> (in Eng.).
- Nouhaila F., Moussa O., Mariam B., Mohammed Ch., Mounia B.Z. (2025) Co-apatite phosphate compound: High-Performance corrosion inhibition in highly aggressive HCl solution (1.0 M and 5.0 M) and biological assessment. *Hybrid Advances*. – P. 100593. <https://doi.org/10.1016/j.hybadv.2025.100593> (in Eng.).
- Qahtan A. Yousif, Mahmoud A. Bedair, Ahmed M. Abuelela, Azaj Ansari, Sumit Sahil Malhotra and Zainb Fadel. (2025) High-performance corrosion inhibitors for carbon steel in hydrochloric acid: electrochemical and DFT studies. *RSC Adv*. – No. 15. – P. 28666-28688. 2011. <https://doi.org/10.1039/2046-2069/2011> (in Eng.).
- Raimbekova A.S., Kapralova V.I., Dalbanbai A., Kubekova Sh.N., Popova A.K. (2023) Effect of

various phosphate inhibitors on corrosion of low carbon steel in 3% sodium chloride solution. Engineering Journal of Satbayev University. – No. 145(4). <https://doi.org/10.51301/ejsu.2023.i4.04> (in Eng.).

Revon N., Priyantha N. (2025) Interference of solution constituents on corrosion inhibition of phosphate species on Grade 202 stainless steel. Discover Chemistry. – No. 2(1). <https://doi.org/10.1007/s44371-025-00157-4> (in Eng.).

Safdar H., Ambar I., Sujhla H., Purnawan P.P., Muhammad A. (2024) Identifying alkaline phosphatase inhibitory potential of cyclooxygenase-2 inhibitors: Insights from molecular docking, MD simulations, molecular expression analysis in MCF-7 breast cancer cell line and in vitro investigations. International Journal of Biological Macromolecules. – No. 277. – P. 132721. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2024.132721> (in Eng.).

Soumen M., Jitendra K.S., Dong-E.L., Taejoon P. (2020) Effect of Phosphate-Based Inhibitor on Corrosion Kinetics and Mechanism for Formation of Passive Film onto the Steel Rebar in Chloride-Containing Pore Solution. Materials (Basel). – No. 13(16). – P. 3642. <https://doi.org/10.3390/ma13163642> (in Eng.).

Zhu P., Tian-Yang Zh., Jian Ai., Ren-Jie P., Dai-Xu Zh., Bin Xu. (2025) Effects of a composite phosphate corrosion inhibitor on corrosion behavior and water quality stability in drinking water distribution systems. Water Cycle. 05.004. <https://doi.org/10.1016/j.watcyc.2025.05.004> (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 329–337

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.455>

UDC: 547.97:631.5:577.1
IRSTI: 31.23.15

©Shaimardan M.^{1,2*}, Azhikhanova Z.^{1,2}, Abutalip M.^{1,2},
Toktarbaiuly O.^{1,2}, 2026.

¹Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan;

²Teqnovate LLC, Astana, Kazakhstan.

*E-mail: minavar.shaimardan@nu.edu.kz

ISOLATION AND CHARACTERIZATION OF LIGNIN FROM PHLOMIS TUBEROSA L. BIOMASS VIA ACID TREATMENT

Shaimardan Minavar — PhD, Senior Researcher, Nazarbayev University; «Teqnovate» LLC, Astana, Kazakhstan,

E-mail: minavar.shaimardan@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-7571-820X>;

Azhikhanova Zhanat — PhD, Junior Researcher, Nazarbayev University; «Teqnovate» LLC, Astana, Kazakhstan,

E-mail: zhanat.azhikhanova@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0003-9556-270X>;

Abutalip Munziya — PhD, Associate Professor, Researcher, Nazarbayev University; «Teqnovate» LLC, Astana, Kazakhstan,

E-mail: munziya.abutalip@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2200-8479>;

Toktarbaiuly Olzat — PhD, Leading researcher, Nazarbayev University; «Teqnovate» LLC, Astana, Kazakhstan,

E-mail: olzat.toktarbaiuly@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4594-3435>.

Abstract. Converting lignocellulosic biomass into valuable products is a sustainable way of developing renewable biomaterials. Lignin, a naturally abundant aromatic polymer and one of the main components of plant biomass, is an important raw material for producing bio-based materials. However, the potential of many plant species as sources of lignin remains largely unexplored. This study successfully isolated lignin from the stems of *Phlomis tuberosa* L. for the first time using an acid treatment method. The plant stems were treated with concentrated formic acid at 80 °C for three hours. After acid hydrolysis, the lignin was separated from the liquid fraction by rotary evaporation and precipitation. The lignin biopolymer obtained from the stems of *Phlomis tuberosa* L. was characterized using Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), scanning electron microscopy (SEM) and transmission electron microscopy (TEM). FTIR spectra confirmed the presence of the characteristic lignin functional groups, such as hydroxyl (O-H), carbonyl (C=O) and aliphatic (C-H). Microscopic analysis revealed uniform particle morphology and low aggregation. These findings suggest favorable physicochemical properties and potential applications in nanoscale materials.

The results demonstrate that *Phlomis tuberosa* L. biomass is a promising, previously unexplored source of lignin. Due to its structural characteristics, the isolated lignin could be used as a sustainable raw material in the production of advanced, bio-based functional materials, such as nano-hydrogels, biodegradable composites and drug delivery systems.

Keywords: *Phlomis tuberosa* L., lignocellulose, lignin, acid treatment

For citations: Shaimardan M., Azhikhanova Z., Abutalip M., Toktarbaiuly O. Isolation and Characterization of Lignin from *Phlomis tuberosa* L. Biomass via Acid Treatment. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 328–337. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.455>

©Шаймардан М.^{1,2*}, Ажиханова Ж.^{1,2}, Әбутәліп М.^{1,2},
Тоқтарбайұлы О.^{1,2}, 2026.

¹Назарбаев университеті, Астана, Қазақстан;

²Technovate ЖШС, Астана, Қазақстан.

*E-mail: minavar.shaimardan@nu.edu.kz

PHLOMIS TUBEROSA L. ӨСІМДІГІ БИОМАССАСЫНАН ЛИГНИНДІ ҚЫШҚЫЛДЫҚ ӨНДЕУ АРҚЫЛЫ БӨЛІП АЛУ ЖӘНЕ СИПАТТАУ

Шаймардан Минавар — PhD, аға ғылыми қызметкер, Назарбаев университеті; «Technovate» ЖШС, Астана, Қазақстан,

E-mail: minavar.shaimardan@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-7571-820X>;

Ажиханова Жанат — PhD, кіші ғылыми қызметкер, Назарбаев университеті; «Technovate» ЖШС, Астана, Қазақстан,

E-mail: zhanat.azhikhanova@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0003-9556-270X>;

Әбутәліп Мунзия — PhD, қауымдастырылған профессор, ғылыми қызметкер, Назарбаев университеті; «Technovate» ЖШС, Астана, Қазақстан,

E-mail: munziya.abutalip@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2200-8479>;

Тоқтарбайұлы Олзат — PhD, жетекші ғылыми қызметкер, Назарбаев университеті; «Technovate» ЖШС, Астана, Қазақстан,

E-mail: olzat.toktarbaiuly@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4594-3435>.

Аннотация. Лигноцеллюлозалы биомассаны құнды өнімдерге айналдыру – жаңартылатын биоматериалдарды дамытудың экологиялық тұрғыдан тұрақты және тиімді тәсілі болып табылады. Лигнин - табиғатта кең таралған ароматты полимер және өсімдік биомассасының негізгі компоненттерінің бірі, сондықтан ол био-негізді материалдар өндіру үшін маңызды шикізат көзі ретінде қарастырылады. Алайда көптеген өсімдік түрлерінің лигнин көзі ретіндегі әлеуеті әлі күнге дейін толық зерттелмеген. Осы зерттеуде алғаш рет *Phlomis tuberosa* L. өсімдігінің сабақтарынан қышқылдық өндеу әдісі арқылы лигнин сәтті бөлініп алынды. Өсімдік сабақтары 80 °C температурада үш сағат бойы концентрлі құмырсқа қышқылымен өңделді. Қышқылдық гидролизден кейін лигнин сұйық фракциядан роторлы буландыру және тұндыру әдістері арқылы бөлініп алынды.

Phlomis tuberosa L. сабақтарынан алынған лигнин биополимері Фурье түрлендірулі инфрақызыл спектроскопия (FTIR), сканерлеуші электрондық

микроскопия (SEM) және трансмиссиялық электрондық микроскопия (ТЕМ) әдістерімен жан-жақты сипатталды. FTIR спектрлері гидроксил (О–Н), карбонил (С=О) және алифаттық (С–Н) сияқты лигнинге тән функционалдық топтардың бар екенін растады. Микроскопиялық талдау бөлшектердің біркелкі морфологиясын және агрегация деңгейінің төмен екенін көрсетті. Бұл нәтижелер материалдың қолайлы физика-химиялық қасиеттерге ие екенін және наноөлшемді материалдарда қолдану әлеуетін дәлелдейді.

Зерттеу нәтижелері *Phlomis tuberosa* L. биомассасының лигниннің болашағы зор әрі бұрын жеткілікті зерттелмеген көзі екенін көрсетті. Құрылымдық ерекшеліктеріне байланысты бөлініп алынған лигнин нано-гидрогельдер, биоыдырайтын композиттер, сенсорлық материалдар және дәрілік заттарды жеткізу жүйелері сияқты заманауи био-негізді функционалдық материалдарды өндіруде тұрақты шикізат ретінде қолданылуы мүмкін.

Түйін сөздер: *Phlomis tuberosa* L., лигноцеллюлоза, лигнин, қышқылдық өңдеу

©Шаймардан М.^{1,2*}, Ажиханова Ж.^{1,2}, Абуталип М.^{1,2}, Токтарбай О.^{1,2}, 2026.

¹Назарбаев университеті, Астана, Қазақстан;

²ТОО «Technovate», Астана, Қазақстан.

*E-mail: minavar.shaimardan@nu.edu.kz

ВЫДЕЛЕНИЕ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ЛИГНИНА ИЗ БИОМАССЫ *PHLOMIS TUBEROSA* L. С ПОМОЩЬЮ КИСЛОТНОЙ ОБРАБОТКИ

Шаймардан Минавар — PhD, старший научный сотрудник, Назарбаев университет; ТОО «Technovate», Астана, Казахстан;

E-mail: minavar.shaimardan@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-7571-820X>;

Ажиханова Жанат — PhD, младший научный сотрудник, Назарбаев университет; ТОО «Technovate», Астана, Казахстан;

E-mail: zhanat.azhikhanova@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0009-0003-9556-270X>;

Мунзия Абуталип — PhD, доцент, научный сотрудник, Назарбаев университет; ТОО «Technovate», Астана, Казахстан;

E-mail: munziya.abutalip@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2200-8479>;

Токтарбай Олзат — PhD, ведущий научный сотрудник, Назарбаев университет; ТОО «Technovate», Астана, Казахстан;

E-mail: olzat.toktarbaiuly@nu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4594-3435>.

Аннотация. Рациональное использование лигноцеллюлозной биомассы является одним из перспективных направлений развития технологий получения возобновляемых и экологически безопасных материалов. Лигнин, являющийся одним из основных компонентов растительной биомассы и наиболее распространенным природным ароматическим полимером, рассматривается как ценное сырьё для производства биоматериалов различного назначения. Вместе с тем потенциал многих видов растений в качестве источников лигнина остаётся недостаточно изученным. В настоящем исследовании впервые осуществлено выделение лигнина из стеблей *Phlomis tuberosa* L. методом кислотной обработки. В качестве экстрагента использовали концентрированную муравьиную кислоту, обработку

проводили при температуре 80 °С в течение трёх часов. После завершения гидролиза лигнин выделяли из жидкой фракции методом ротационного испарения с последующим осаждением. Структурные и морфологические характеристики полученного лигнина исследованы с использованием инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье (FTIR), сканирующей электронной микроскопии (SEM) и просвечивающей электронной микроскопии (TEM). Результаты FTIR-анализа подтвердили наличие характерных для лигнина функциональных групп, включая гидроксильные (O–H), карбонильные (C=O) и алифатические (C–H) связи. Микроскопические исследования показали однородную морфологию частиц и низкую степень их агрегации, что свидетельствует о благоприятных физико-химических свойствах выделенного биополимера. Полученные результаты демонстрируют, что биомасса *Phlomis tuberosa* L. представляет собой перспективный и ранее не исследованный источник лигнина. Благодаря своим структурным особенностям выделенный лигнин может быть использован в качестве экологически безопасного сырья для получения современных функциональных материалов, включая наногидрогели, биоразлагаемые композиты и системы адресной доставки лекарственных средств.

Ключевые слова: *Phlomis tuberosa* L., лигноцеллюлозная биомасса, лигнин, кислотная обработка, FTIR, биоматериалы, биоразлагаемые композиты.

Кіріспе. *Phlomis tuberosa* L. өсімдігінің сабақтары сияқты лигноцеллюлозалық биомассалар жаңартылатын табиғи ресурстар ретінде тұрақтылығы мен экономикалық тиімділігіне байланысты ғылыми зерттеулердің маңызды нысаны болып табылады. Бұл биомассалардың негізгі биополимерлік компоненттері – целлюлоза, гемицеллюлоза және лигнин – функционалдық материалдар, адсорбенттер және композиттік өнімдер өндіру үшін құнды шикізат ретінде қарастырылады (Sheridan et al., 2024; Bouhfid et al., 2025; Kai et al., 2016). Лигнин – монолигнолдардың радикалдық қосылуы нәтижесінде түзілетін үш өлшемді фенилпропаноидты полимер. Оның ароматтық құрылымы мен функционалдық топтары химиялық реакциялық қабілетін арттырып, материалтану саласында ерекше қызығушылық тудырады (Gosselink et al., 2012; Dai et al., 2019).

Лигноцеллюлозалық биомасса көміртектің бай көзі болып табылады және орман және ауыл шаруашылығы қалдықтары сияқты жеткілікті пайдаланылмайтын ресурстарды тиімді қолдану арқылы биоэнергия, биохимиялық өнімдер және биоматериалдар өндіруге мүмкіндік береді. Қазіргі уақытта өндірістік лигнин негізінен ағаш өңдеу өнеркәсібінен алынады, сондықтан баламалы шикізат көздерін зерттеу маңызды. Қазақстанның орталық аймақтарында өсетін көпжылдық шөптесін өсімдік *Phlomis tuberosa* L. осындай перспективалы балама көздердің бірі бола алады. *Phlomis* туысы (Lamiaceae тұқымдасы) Еуропа мен Азияда кең таралған жүзден астам түрді қамтиды (Amor et al., 2019). *Phlomis tuberosa* L. дәстүрлі медицинада кеңінен қолданылады (Vitaliy et al., 2018; Alipieva et al., 2000; Olennikov et al., 2010). Алайда оның сабақтарынан алынатын лигниннің құрылымдық және физика-химиялық қасиеттері әлі толық зерттелмеген.

Алдыңғы зерттеулерде *Phlomis tuberosa* L. өсімдігінің гүлдері, жер үсті бөлік-

тері және тамырларынан алынған экстракттар мен эфир майларының антиоксиданттық, антидиабеттік, антихолинэстераздық және басқа да биологиялық белсенділіктері, сондай-ақ олардың химиялық құрамы мен витаминдік құрамы зерттелген (Azhikhanova et al., 2025). Негізгі компоненттер ретінде хлороген қышқылы мен ферул қышқылы анықталған, ал В3, С және Е витаминдері басым екені көрсетілген. Сонымен қатар, *Phlomis tuberosa* L. сабақтарынан алынған целлюлоза негізіндегі композиттік мембраналардың жоғары адсорбциялық қабілеті, тұрақтылығы және қайта қолдану мүмкіндігі зерттелген. Сонымен қатар, *Phlomis tuberosa* L. сабақтарынан алынған целлюлоза негізіндегі композиттік мембраналардың адсорбциялық қасиеттері зерттелген (Azhikhanova et al., 2026). Бұл нәтижелер өсімдіктің лигноцеллюлозалық компоненттерінің функционалдық материалдар өндірудегі әлеуетін көрсетеді, алайда лигнин фракциясы әлі зерттелмеген күйінде қалып отыр.

Осыған байланысты, аталған зерттеуде *Phlomis tuberosa* L. биомассасынан лигнинді қышқылдық өңдеу арқылы бөліп алу және оның құрылымдық сипаттамаларын зерттеу мақсат етілді. Лигнинді бөліп алу процесінде құмырсқа қышқылы қолданылып, алынған материал SEM, TEM және FTIR әдістері арқылы сипатталды. Зерттеудің негізгі мақсаты – биомассада лигнинді бөліп алудың био-негізді және төмен шығынды технологиялық тәсілін әзірлеу және алынған лигниннің материалдық әлеуетін бағалау.

Материалдар мен зерттеу әдістері. Өсімдік материалы – *Phlomis tuberosa* L. өсімдігі маусым айында таулы Ортау аймағынан (жапырақтары, гүлдері, сабақтары және тамырлары) жиналды. Жиналған материалдар жеке бөліктерге (жер үсті бөліктері және тамырлар) бөлініп, тазартылды. Өсімдіктердің түсі мен химиялық құрамын сақтау мақсатында материалдар бөлме температурасында көлеңкелі жерде, тікелей күн сәулесінен қорғалған жағдайда үш апта бойы ауада кептірілді. Үлгі нұсқалары MUP1024 тіркеу нөмірімен Мугла Сытқы Кочман университетінің (Мугла, Түркия) Химия кафедрасының гербарий қорына тапсырылды (Azhikhanova et al., 2025; Flora of Kazakhstan, 1964).

Phlomis tuberosa L. сабағы биомассасын қышқылмен өңдеу. Ауада кептірілген *Phlomis tuberosa* L. сабағының 10 г үлгісі 80% құмырсқа қышқылының 100 мл



Сурет 1. *Phlomis tuberosa* L. биомассасын целлюлоза, гемицеллюлоза және лигнин фракцияларына бөлу сызбанұсқасы.

ерітіндісімен алдын ала өңделді. Қоспа лигноцеллюлозалық құрылымды ыдыратуды жеңілдету мақсатында 80°C температурада термостатпен бақыланатын май моншасында үш сағат бойы 120 айн/мин жылдамдықпен үздіксіз араластыра отырып қыздырылды.

Реакция аяқталғаннан кейін суспензия қатты және сұйық фазаларды бөлу үшін сүзілді. Нәтижесінде құмырсқа қышқылында еритін фракция (spent liquor) және целлюлозаға бай қатты қалдық алынды. Қатты қалдықтағы целлюлоза матрицасына әлсіз байланысқан лигнин немесе гемицеллюлоза қанттарының қалдықтарын жою мақсатында ол 80% жаңа құмырсқа қышқылының 100 мл ерітіндісімен жуылды.

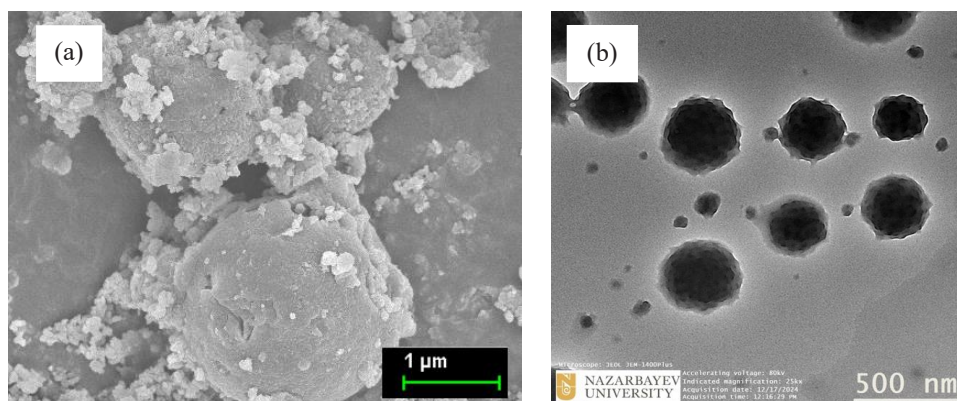
Құмырсқа қышқылын қайта пайдалану мүмкіндігін қамтамасыз ету үшін spent liquor 60 °C температурада роторлы буландырғышта концентрленіп, шамамен 100 мл қалпына келтірілген құмырсқа қышқылы алынды. Құрамында еріген компоненттер бар қалған сулы фаза 50 мл деиондалған сумен сұйылтылып, кейін 5000 айн/мин жылдамдықта 10 минут бойы центрифугаланды. Нәтижесінде лигнинге бай тұнба түзілді, ол кейін жуылып, кептіргіш шкафта кептірілді.

Еріген гемицеллюлоза бар үстіңгі сұйық фаза еритін фракция ретінде белгіленді. Барлық тәжірибелер алдыңғы зерттеуіміздегідей үш қайталаумен жүргізілді (Azhikhanova et al., 2025).

Зерттеу әдістері. *Phlomis tuberosa* L. өсімдігінің сабақтарынан бөлініп алынған лигниннің беткі морфологиясын зерттеу үшін үдеткіш кернеуі 5–20 kV болатын сканерлеуші электрондық микроскопия (SEM) (Zeiss Crossbeam 540, Германия) қолданылды. Беткі морфологияны жан-жақты талдау мақсатында әртүрлі үлкейту деңгейлерінде суреттер түсірілді. SEM талдауы үшін үлгілер екіжақты жабысқақ таспа көмегімен көміртекті негізі бар металл тұғырға бекітілді. Кейін үлгі беттері автоматты Quorum Q150T ES тозаңдатқыш құрылғысы арқылы қалыңдығы 10.0 нм алтын қабатымен қапталды.

Лигнин экстрактісіндегі функционалдық топтарды анықтау үшін Фурье түрлендірулі инфрақызыл спектроскопия (FTIR) әдісі қолданылды. Спектрлер ATR инфрақызыл модулімен жабдықталған Cary 600 Series FTIR спектрофотометрі (Agilent Technologies) көмегімен 500–4000 см⁻¹ диапазонында тіркелді. Спектрлік ажыратымдылық 4 см⁻¹, ал сканерлеу жылдамдығы 1 см⁻¹ с⁻¹ болды. Барлық нәтижелер үш үлгінің орташа мәні ± стандартты ауытқу түрінде берілді.

Нәтижелер мен талқылау. 3-суретте *Phlomis tuberosa* L. өсімдігінің сабақтарынан бөлініп алынған лигниннің FTIR, SEM және TEM талдаулары арқылы алынған физика-химиялық сипаттамаларының нәтижелері көрсетілген. 2а-суретте лигниннің құрылымдық тұтастығын айқын көрсететін жоғары ажыратымды SEM бейнесі ұсынылған, онда яғни айқын



Сурет 2. *Phlomis tuberosa* L. сабағынан бөлініп алынған лигниннің сипаттамасы: (a) SEM бейнесі (масштаб сызығы: 1 μm), (b) TEM бейнесі.

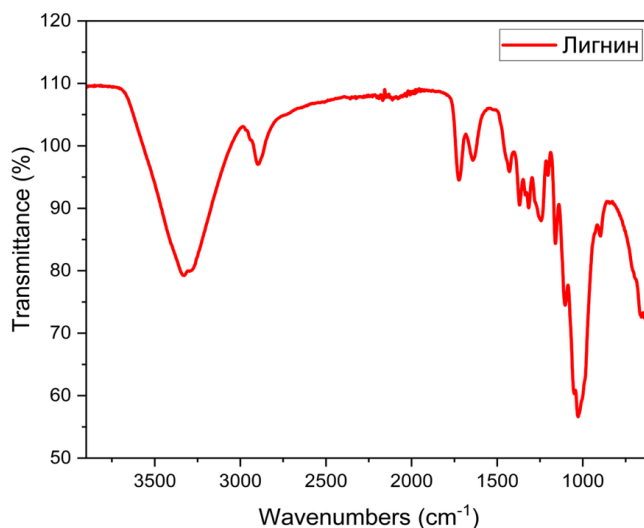
деформация немесе фрагментация байқалмайды. Лигнин бірнеше микрометрлік өлшемдегі микросфералар түріндегі пішінді морфологияны көрсетті. Қаттылық немесе үзілу байқалған жоқ. Микросфералардың бетінде көбіне қабыршақ тәрізді құрылымдар таралған (Dai et al., 2021). Микросфералар тәрізді архитектураның сақталуы және беткі ірі ақаулардың болмауы лигниннің тиімді бөлініп алынғанын және оның табиғи жақын құрылымын сақтағанын дәлелдейді.

Лигниннің наноқұрылымдық морфологиясын бағалау үшін трансмиссиялық электрондық микроскопия (ТЕМ) талдауы қолданылды. Лигниннің ТЕМ бейнесі 2b-суретте көрсетілген. ТЕМ нәтижелері лигнин бөлшектерінің пішіні мен мөлшері үлгі түріне байланысты өзгеретінін көрсетті. Сфералық лигнин үлгілері біркелкі таралған, дөңгелек бөлшектер түрінде көрінді. Бөлшектердің мөлшері нанометрлік диапазонда болып, олардың морфологиясы салыстырмалы түрде біркелкі болды (Dai et al., 2021; Spiridon & Tanase, 2018).

ТЕМ нәтижелері лигниннің морфологиялық сипаттамалары қолданылған бөлу әдісіне тікелей тәуелді екенін көрсетті. Алынған деректер лигнинді функционалдық материалдар, адсорбенттер немесе композиттік толтырғыштар ретінде қолдану әлеуетін ғылыми тұрғыда негіздейді.

Фурье трансформациясы инфрақызыл (FTIR) лигнин үлгісінің спектрлері, өткізгіштік режимде $500\text{--}3500\text{ см}^{-1}$ толқын нөмірлері аралығында өлшенді. FTIR әдісі *Phlomis tuberosa* L. сабағынан алынған лигниннің функционалдық топтарды анықтау үшін қолданылды (3-сурет). FTIR спектрі лигнинге тән функционалдық топтардың сақталғанын растайды. Спектр лигниннің сипатты сіңіру жолақтарын көрсетеді, шамамен 3300 см^{-1} аймағындағы кең жұтылу жолағы О-Н созылу тербелістеріне сәйкес келеді және лигнин тізбегіндегі гидроксил топтары арасындағы кең ауқымды сутектік байланыстардың бар екенін көрсетеді.

Алифатты және ароматты топтардағы С-Н созылу тербелістері $2900\text{--}3000\text{ см}^{-1}$ маңында, ароматты скелеттік тербелістер (C=C) шамамен 1600 және 1500 см^{-1} -де, сондай-ақ эфир және фенолдық топтардан С-О/С-О-С созылуы $1200\text{--}1000\text{ см}^{-1}$ аралығында.



Сурет 3. *Phlomis tuberosa* L. сабағынан бөлініп алынған лигниннің FTIR спектрі.

Анықталған спектралдық белгілер лигниннің полифенолдық құрылымына тән негізгі функционалдық топтардың сақталғанын растады. Алынған нәтижелер лигниннің құрылымдық тұтастығы бұзылмағанын көрсетеді, бұл әдебиеттегі FTIR спектрлерімен сәйкес келеді (Zhang et al., 2021). Бұл зерттелген лигниннің физика-химиялық қасиеттері сақталғанын және оны әртүрлі қолдану салаларында тиімді пайдалануға мүмкіндік беретінін көрсетеді.

Қорытынды. Тұрақты және жаңартылатын биоматериалдарға сұраныстың артуы дәстүрлі ағаш негізіндегі көздерден басқа баламалы лигноцеллюлозалық ресурстарды анықтаудың маңыздылығын көрсетеді. Осы контексте, аталған зерттеу *Phlomis tuberosa* L. өсімдігінің лигнин көзі ретінде әлеуетін қарастырды. Зерттеу осы дәрілік өсімдіктің сабақтарынан лигнинді алғаш рет құмырсқа қышқылымен өңдеу әдісі арқылы сәтті бөлініп алынды. Бұл тәсіл агрессивті химикаттарға тәуелділікті азайта отырып, алынған биополимердің тиімділігін және құрылымдық тұтастығын сақтап, қазіргі экологиялық мәселелерді шешуге мүмкіндік береді.

Нәтижелер физика-химиялық сипаттау ұсынылған әдістеменің дұрыстығын растады. FTIR талдауы лигнинге тән функционалдық топтардың сақталғанын дәлелдеп, оның полимерлі фенолдық құрылымының сақталғанын көрсетті. SEM және ТЕМ зерттеулері тиімді бөлінуді көрсетіп, анықталған морфологиясы бар және агрегациясы аз бөлшектер алынғанын дәлелдеді. Бұл нәтижелер бөліну әдісінің сенімділігін растайды және *Phlomis tuberosa* L. ағаштан тыс лигниннің перспективалы көзі бола алатыны жөніндегі бастапқы гипотезаны қолдайды.

Зерттеу ғылыми білімге үлес қосып, өсімдіктің фитохимиялық сипаттамасын кеңейтті және оның лигнин құрамына алғашқы жан-жақты көзқарас берді. Бұл зерттеу тұрақты лигноцеллюлозалық шикізат спектрін кеңейтеді және биомассаны құнды өнімдерге айналдыруда жасыл химия тәсілдерінің рөлін

күшейтеді. Сонымен қатар, алынған лигниннің құрылымдық қасиеттері оны наногидрогельдерді дамыту, дәрілерді жеткізу жүйелері және басқа да заманауи биоматериал технологияларында қолдануға мүмкіндік береді. Жалпы алғанда, бұл зерттеу материалтану және биомедицина саласында функционалдық модификация, ірі көлемді өңдеу және интердисциплинарлық қолдану бағытындағы болашақ зерттеулерге жол ашуы мүмкін.

References

- Alipieva K.I., Jensen S.R., Franzyk H., Handjieva N.V., Evstatieva L.N. (2000) Iridoid glucosides from *Phlomis tuberosa* L. and *Phlomis herba-ventis* L. *Zeitschrift für Naturforschung C*. – Vol. 55(3-4). – P. 137-140. <https://doi.org/10.1515/znc-2000-3-402> (in Eng.).
- Amor I.L.B., Boubaker J., Sgaier M.B., Skandrani I., Bhouiri W., Neffati A., Kilani S., Bouhlel I., Ghedira K., Chekir-Ghedira L. (2019) Phytochemistry and biological activities of *Phlomis* species. *Journal of Ethnopharmacology*. – No.125. – P. 183-202. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2009.06.022> (in Eng.).
- Azhikhanova Zh., et al. (2025) Phytochemical profiling and various biological activities of *Phlomis tuberosa* L. *Scientific Reports*. – No. 15. – P. 7293. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-80456-5> (in Eng.).
- Azhikhanova Zh., Megbenu H.K., Zhengis A., Baisalova G., Shaimardan M., Aldongarov A., Karibayev M., Ali M.O., Nuraje N. (2026) Bio based cellulose membrane from *Phlomis tuberosa* L. for methylene blue dye removal from wastewater and molecular interaction mechanisms. *Scientific Reports*. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-31751-2> (in Eng.).
- Bouhfid R., Qaiss A.E.K., Raji M. (2025) Morphological properties of lignin. In: *Handbook of Lignin*. – P. 395-429. https://doi.org/10.1007/978-981-96-7633-0_17 (in Eng.).
- Dai J., Patti A., Saito K. (2019) Recent developments in chemical degradation of lignin: catalytic oxidation and ionic liquids. *Tetrahedron Letters*. – No.57. – P. 4945-4951. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2016.09.084> (in Eng.).
- Dai K., Zhao G., Wang Z., Peng X., Wu J., Yang P., Li M., Tang C., Zhuang W., Ying H. (2021) Novel mesoporous lignin calcium for efficiently scavenging cationic dyes from dye effluent. *ACS Omega*. – No. 6. – P. 816-826. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c05401> (in Eng.).
- Flora of Kazakhstan (1964) Almaty: Publishing House of the Academy of Sciences of the Kazakh SSR. – Vol. 7. – P. 396. (in Eng.).
- Gosselink R.J.A., Teunissen W., Van Dam J.E.G., De Jong E., Gellerstedt G., Scott E.L., Sanders J.P.M. (2012) Lignin depolymerisation in supercritical carbon dioxide/acetone/water fluid for the production of aromatic chemicals. *Bioresource Technology*. – No.106. – P. 173-177. (in Eng.).
- Kai D., Tan M.J., Chee P.L., Chua Y.K., Yap Y.L., Loh X.J. (2016) Towards lignin based functional materials in a sustainable world. *Green Chemistry*. – No.18. – P. 1175-1200. (in Eng.).
- Olennikov D.N., Dudareva L.V., Tankhaeva L.M. (2010) Chemical composition of essential oils from *Galeopsis bifida* and *Phlomoides tuberosa*. *Chemistry of Natural Compounds*. – No. 46. – P. 316-318. (in Eng.).
- Sheridan E., et al. (2024) A systematic study on the processes of lignin extraction and nanodispersion to control properties and functionality. *Green Chemistry*. – No. 26. – P. 2967-2984. <https://doi.org/10.1039/d3gc04299e> (in Eng.).
- Spiridon I., Tanase C.A. (2018) Design, characterization and preliminary biological evaluation of new lignin chitosan biocomposites. *International Journal of Biological Macromolecules*. – No. 114. – P. 855-863. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2018.03.140> (in Eng.).
- Vitaliy K., Tamara S., Mariya S., Svetlana K., Nadezhda C., Bolat M. (2018) Chemical composition of essential oil from aerial parts of *Phlomis tuberosa* L. growing wild in Northern Kazakhstan. *Journal of Essential Oil Bearing Plants*. – Vol. 21(2). – P. 462-475. <https://doi.org/10.1080/0972060X.2018.1441076> (in Eng.).
- Zhang Y., Wang H., Sun X., Wang Y., Liu Z. (2021) Separation and characterization of biomass components (cellulose, hemicellulose, and lignin) from corn stalk. *BioResources*. – No. 16(4). – P. 7205-7219. <https://doi.org/10.15376/biores.16.4.7205-7219> (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 338–352

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.456>

UDC: 661.183.2:661.666.3:620.92

IRSTI: 55.09.35

©Yesimsiitova Z.B.^{1,2*}, Seisenova A.¹, Oryngaliyeva S.Zh.^{1,3}, Sanuar A.¹,
Manap K.R.^{1,3}, 2026.

¹Scientific Center for New Technologies, Almaty, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

³AlAkSan, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: amanatglobalhalima@gmail.com

OBTAINING CARBONIZED MATERIALS FROM RICE HUSK USING A MOBILE PYROLYSIS PLANT FOR ENERGY APPLICATIONS

Yesimsiitova Zura — Candidate of Biological Sciences, Professor, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: zura1958@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4735-2033>;

Seisenova Aknur — PhD, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: z_aknura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8981-307X>;

Oryngaliyeva Sandugash — Master's student, Research Fellow, LLP "Scientific Center for New Technologies"; AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: Amanatglobalsert@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-2169-3074>;

Sanuar Ayazhan — Master's student, LLP "Scientific Center for New Technologies"; AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: aiazhan.sanuar.03@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0001-8224-6500>;

Manap Kalima — Master's degree, LLP "Scientific Center for New Technologies"; AlAkSan, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: amanatglobalhalima@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8397-8375>.

Abstract. This study investigates the conversion of agricultural biomass waste, specifically rice husk of the "Lider" variety grown in the Kyzylorda region of the Republic of Kazakhstan, into carbonized materials for energy storage applications. The relevance of the research is associated with the need for efficient utilization of plant-derived waste and the development of functional carbon materials for electrochemical devices. Rice husk was used as the raw material and was subjected to preliminary cleaning, drying, and grinding to obtain a homogeneous fraction. Carbonization was carried out by pyrolysis at temperatures ranging from 350 to 800 °C. The experiments were performed using a mobile pyrolysis unit of proprietary design, enabling biomass processing directly at the site of waste generation.

The influence of the unit design and carbonization conditions on the formation of the final product was evaluated. The obtained materials were characterized by



scanning electron microscopy (SEM), nitrogen adsorption-desorption analysis (BET), and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS). The results demonstrated that the carbonized material possesses a well-developed hierarchical porous structure consisting of micro- and mesopores. The specific surface area reached 146.94 m²/g, the total pore volume was 0.1051 cm³/g, and the average pore diameter was 2.86 nm. Elemental analysis revealed a carbon content of 68.36 wt.%, indicating efficient carbonization. The presence of silicon is attributed to the natural composition of rice husk and provides opportunities for the development of silicon-carbon composite materials.

The findings demonstrate that the proposed technological approach enables both efficient biomass waste utilization and the production of promising carbon materials for lithium-ion and sodium-ion batteries, supercapacitors, and other electrochemical energy storage systems.

Keywords: rice husk, biomass waste, carbonization, pyrolysis, carbon materials, mobile pyrolysis unit, energy storage systems

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).*

For citations: Yesimsiitova Z.B., Seisenova A., Oryngaliyeva S.Zh., Sanuar A., Manap K.R. Obtaining Carbonized Materials from Rice Husk Using a Mobile Pyrolysis Plant for Energy Applications. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 338–352. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.456>

©Есимситова З.Б.^{1,2*}, Сейсенова А.¹, Орынғалиева С.Ж.^{1,3}, Сануар А.¹,
Манап К.Р.^{1,3}, 2026.

¹ТОО «Scientific Center for New Technologies», Алматы, Қазақстан;

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

³AlAkSan, Алматы, Қазақстан.

E-mail: amanatglobalhalima@gmail.com

ЭНЕРГИЯЛЫҚ ҚОЛДАНУ ҮШІН ЖЫЛЖЫМАЛЫ ПИРОЛИЗ ҚОНДЫРҒЫСЫН ПАЙДАЛАНУ АРҚЫЛЫ КҮРІШ ҚАУЫЗЫНАН КӨМІРТЕКТІ МАТЕРИАЛДАР АЛУ

Есимситова Зура — биология ғылымдарының кандидаты, профессор, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: zura1958@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4735-2033>;

Сейсенова Акнұр — PhD, Scientific Center for New Technologies; AlAkSan, Алматы, Қазақстан,

E-mail: z_aknura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8981-307X>;

Орынғалиева Сандұғаш — магистрант, ғылыми қызметкер, «Scientific Center for New Technologies» ЖШС; AlAkSan, Алматы, Қазақстан,

E-mail: Amanatglobalsert@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-2169-3074>;

Сануар Аяжан — магистрант, «Scientific Center for New Technologies» ЖШС; AlAkSan, Алматы, Қазақстан,

E-mail: aiazhan.sanuar.03@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0001-8224-6500>;

Манап Калима — магистр, «Scientific Center for New Technologies» ЖШС; AlAkSan, Алматы, Қазақстан,

E-mail: amanatglobalhalima@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8397-8375>.

Аннотация. Бұл жұмыста ауыл шаруашылығы биоқалдықтарын, атап айтқанда Қазақстан Республикасының Қызылорда облысында өсірілетін «Лидер» сортының күріш қауызын қайта өңдеу арқылы энергия жинақтау жүйелеріне арналған көміртекті материалдарды алу мәселелері қарастырылған. Зерттеудің өзектілігі өсімдік текті қалдықтарды тиімді кәдеге жарату және электрохимиялық құрылғылар үшін жаңа функционалдық көміртекті материалдарды әзірлеу қажеттілігімен байланысты. Бастапқы шикізат ретінде күріш қауызы пайдаланылып, ол алдын ала тазартылып, кептіріліп және біртекті фракцияға дейін ұсақталды. Карбонизация процесі 350–800 °C температура аралығында пиролиз әдісі арқылы жүргізілді. Тәжірибелер биоқалдықтарды олардың түзілу орындарында өңдеуге мүмкіндік беретін авторлық мобильді пиролиз қондырғысын қолдану арқылы орындалды.

Зерттеу барысында қондырғының конструкциялық ерекшеліктері және олардың карбонизация тиімділігіне әсері бағаланды. Алынған материалдар сканерлеуші электрондық микроскопия (СЭМ), азоттың төмен температурадағы адсорбция-десорбциясы (БЭТ-талдау) және энергия-дисперсиялық рентгендік спектроскопия (EDS) әдістерімен зерттелді. Нәтижелер карбондалған материалдың микро- және мезокеуектерден тұратын дамыған иерархиялық кеуекті құрылымға ие екенін көрсетті. Материалдың меншікті беткі ауданы 146,94 м²/г, кеуектердің жалпы көлемі 0,1051 см³/г, ал орташа кеуек диаметрі 2,86 нм құрады. Элементтік талдау нәтижелері бойынша көміртек мөлшері 68,36 мас.% жеткені анықталды, бұл карбонизация процесінің тиімді өткенін көрсетеді. Кремнийдің болуы күріш қауызының табиғи құрамымен байланысты және кремний-көміртек композиттерін алуға мүмкіндік береді.

Зерттеу нәтижелері ұсынылған технологиялық тәсілдің биоқалдықтарды кәдеге жарату мен литий-ионды, натрий-ионды аккумуляторлар, суперконденсаторлар және басқа да электрохимиялық жүйелер үшін перспективалы көміртекті материалдар алуды бір мезгілде қамтамасыз ететінін көрсетті.

Түйін сөздер: күріш қауызы, биоотходтар, карбондалу, пиролиз, көміртекті материалдар, мобильді пиролиз қондырғысы, энергия жинақтау жүйелері

©Есимсиитова З.Б.^{1,2*}, Сейсенова А.¹, Орынғалиева С.Ж.^{1,3}, Сануар А.¹,
Манап К.Р.^{1,3}, 2026.

¹ТОО «Scientific Center for New Technologies», Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

³AlAkSan, Алматы, Казахстан.

E-mail: amanatglobalhalima@gmail.com

ПОЛУЧЕНИЕ КАРБОНИЗИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ ИЗ РИСОВОЙ ШЕЛУХИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОБИЛЬНОЙ ПИРОЛИЗНОЙ УСТАНОВКИ ДЛЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

Есимсиитова Зура — кандидат биологических наук, профессор, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: zura1958@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4735-2033>;

Сейсенова Акнұр — PhD, ТОО «Scientific Center for New Technologies»; AlAkSan, Алматы, Казахстан,

E-mail: z_aknura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8981-307X>;

Орынғалиева Сандугаш — магистрант, научный сотрудник, ТОО «Scientific Center for New Technologies»; AlAkSan, Алматы, Казахстан,

E-mail: Amanatglobalsert@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-2169-3074>;

Сануар Аязжан — магистрант, ТОО «Scientific Center for New Technologies»; AlAkSan, Алматы, Казахстан,

E-mail: aiazhan.sanuvar.03@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0001-8224-6500>;

Манап Қалима — магистр, ТОО «Scientific Center for New Technologies»; AlAkSan, Алматы, Казахстан,

E-mail: amanatglobalhalima@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8397-8375>.

Аннотация. В работе рассмотрена переработка сельскохозяйственных биоотходов, в частности рисовой шелухи сорта «Лидер» (Кызылординская область, Республика Казахстан), с целью получения карбонизированных материалов для применения в системах накопления энергии. Актуальность исследования обусловлена необходимостью рациональной утилизации растительных отходов и разработкой новых функциональных углеродных материалов для электрохимических устройств. В качестве исходного сырья использовали рисовую шелуху, которую предварительно очищали, высушивали и измельчали до однородной фракции. Карбонизацию осуществляли методом пиролиза в диапазоне температур 350–800 °С с использованием мобильной пиролизной установки собственной разработки, позволяющей проводить переработку биоотходов непосредственно в местах их образования. Исследованы конструктивные особенности разработанной установки и их влияние на эффективность процесса карбонизации. Полученные материалы были охарактеризованы методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ), низкотемпературной адсорбции-десорбции азота (ВЕТ-анализ) и энергодисперсионного рентгеноспектрального анализа (EDS). Установлено, что карбонизированный материал обладает развитой иерархической пористой структурой, включающей микро- и мезопоры. Удельная поверхность образцов

составила 146,94 м²/г, общий объём пор - 0,1051 см³/г, а средний диаметр пор - 2,86 нм. Согласно данным элементного анализа, содержание углерода достигало 68,36 мас. %, что свидетельствует об эффективном протекании процесса карбонизации. Установлено, что присутствие кремния обусловлено природными особенностями химического состава рисовой шелухи и создаёт предпосылки для дальнейшего получения кремний-углеродных композитов. Показано, что предложенный технологический подход позволяет одновременно решать задачи утилизации сельскохозяйственных отходов и получения перспективных углеродных материалов для литий-ионных и натрий-ионных аккумуляторов, суперконденсаторов и других электрохимических систем.

Ключевые слова: рисовая шелуха, биоотходы, карбонизация, пиролиз, углеродные материалы, мобильная пиролизная установка, системы накопления энергии

Введение. Рост потребности в эффективных системах накопления энергии стимулирует поиск новых материалов для аккумуляторов и суперконденсаторов. Особый интерес представляют углеродные материалы, полученные из биомассы, благодаря их доступности, низкой стоимости и развитой пористой структуре (Askaruly et al., 2025).

В последние годы активно исследуются кремнийсодержащие анодные материалы, обладающие высокой теоретической ёмкостью (до 4200 мА·ч/г). Однако их применение ограничено значительными объёмными изменениями при литировании, что приводит к деградации структуры и снижению срока службы аккумуляторов.

Одним из эффективных решений является использование углеродной матрицы, которая обеспечивает механическую стабилизацию, улучшает электропроводность и способствует формированию стабильного межфазного слоя. Современные исследования показывают, что материалы на основе биоотходов (рисовая шелуха, бамбук, тростник) демонстрируют высокую удельную ёмкость (800–1500 мА·ч/г) и стабильность при циклировании (Wang et al., 2021; Jorn-am et al., 2024).

В то же время важной глобальной проблемой является накопление биоотходов, особенно сельскохозяйственного и пищевого происхождения. По оценкам, ежегодно в мире образуются сотни миллионов тонн растительных остатков, значительная часть которых утилизируется путём сжигания или складирования, что приводит к выбросам парниковых газов, загрязнению воздуха и деградации почв. В Казахстане, особенно в южных регионах, включая Кызылординскую область, образуются значительные объёмы рисовой шелухи, которая часто не находит рационального применения и становится источником экологической нагрузки (Sun et al., 2021).

В связи с этим использование биомассы как возобновляемого сырья для получения углеродных материалов представляет собой перспективное направление, соответствующее принципам устойчивого развития и циркулярной

экономики. Карбонизированные материалы, полученные из биоотходов, находят применение в качестве анодов для литий- и натрий-ионных аккумуляторов, а также в суперконденсаторах. Их преимущества включают низкую стоимость, экологическую безопасность, развитую пористую структуру и высокую удельную ёмкость.

Существующие методы переработки биомассы включают пиролиз, карбонизацию и активацию, позволяющие получать материалы с заданной структурой и свойствами. В качестве сырья широко используются рисовая шелуха, древесные отходы, травянистые растения, скорлупа орехов и другие виды биоотходов. Однако большинство технологий требует стационарного оборудования и значительных энергетических затрат, что ограничивает их применение в условиях удалённых или сельскохозяйственных регионов (Wu et al., 2022).

В этом контексте получение карбонизированных материалов из растительных отходов является важным этапом создания функциональных углеродных матриц для энергетических применений (Song et al., 2020; Yang et al., 2024).

Дополнительной задачей является разработка технологий переработки биоотходов непосредственно на месте их образования. Использование мобильных пиролизных установок позволяет снизить транспортные затраты, уменьшить выбросы и повысить энергоэффективность процесса (Gao et al., 2025)..

Актуальность и научная новизна работы заключаются в разработке и применении мобильной пиролизной установки нестандартной конструкции, обеспечивающей эффективную переработку биоотходов с получением карбонизированного материала с заданными структурными характеристиками.

Целью данной работы является получение карбонизированного материала из рисовой шелухи с использованием мобильной пиролизной установки и исследование его структуры для энергетических применений.

Материалы исследования и методы. Сырьё. В качестве исходного сырья использовали сельскохозяйственные биоотходы - рисовую шелуху сорта «Лидер», собранную в Кызылординской области Республики Казахстан. Данный вид биомассы характеризуется высокой доступностью, значительными объёмами образования и наличием органической и минеральной составляющих, что делает его перспективным для получения углеродных материалов.

Перед термической переработкой сырьё подвергали предварительной подготовке. Рисовую шелуху очищали от механических примесей (почвы, пыли и посторонних включений), после чего проводили сушку при температуре 100–105 °С до достижения постоянной массы с целью удаления влаги.

Высушенное сырьё измельчали механическим способом до получения однородной фракции. Для повышения равномерности последующей термической обработки использовали вибрационное сито, позволяющее получать частицы размером до **80 мкм**. Уменьшение размера частиц способствует улучшению теплообмена и более равномерному протеканию процесса карбонизации (Gautam et al., 2023; Kong et al., 2023).

Нестандартное оборудование для утилизации биоотходов и получения карбонизированного материала. Мобильная пиролизная установка. Для получения карбонизированного материала использовали мобильную пиролизную установку собственной разработки, предназначенную для термической переработки биоорганических и горно-металлургических отходов с получением углеродсодержащих продуктов (Seisenova et al., 2025).

Разработка установок направлена на решение задачи переработки отходов непосредственно в местах их образования с повышением энергоэффективности процесса, снижением выбросов загрязняющих веществ и упрощением конструкции оборудования.

В отличие от традиционных стационарных пиролизных систем, предложенная установка обеспечивает мобильность, автономность и возможность интеграции всех стадий переработки в едином технологическом цикле.

Конструкция установки. Мобильная пиролизная установка (рисунок 1) включает следующие основные узлы:

- приёмно-подготовительный блок с загрузочным бункером (I) для подачи исходного сырья;
- сушильный отсек (II), обеспечивающий удаление влаги перед термической обработкой;
- горизонтальный герметичный реактор (III), в котором осуществляется процесс пиролиза при температуре 350–800 °С в условиях ограниченного доступа кислорода;
- газовые горелки (IV), работающие на собственном пиролизном газе, что обеспечивает энергоэффективность процесса;
- система конденсации (V), предназначенная для охлаждения и разделения летучих продуктов;
- измельчитель с виброситом (VI), обеспечивающий фракционирование сырья до размеров частиц ≤ 80 мкм;
- вертикальный улавливатель жидких продуктов (VII) для сбора конденсированных жидких фракций;
- скруббер Вентури (VIII), установленный на выходе реактора и предназначенный для очистки газовых выбросов от твёрдых и аэрозольных частиц;
- приёмник готового продукта (IX) для сбора карбонизированного материала.

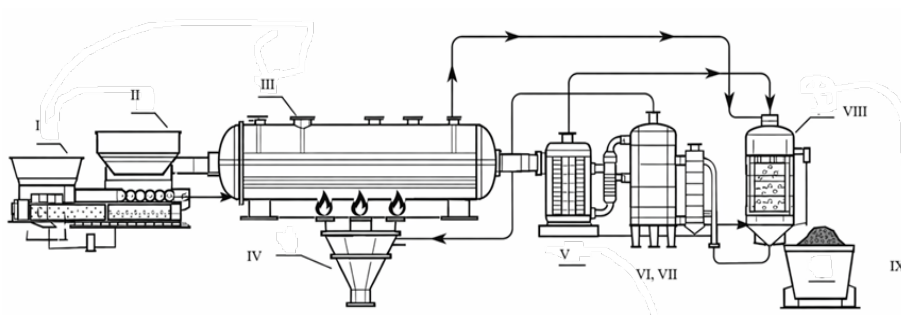


Рисунок 1. Устройство мобильная пиролизная установка.

Принцип работы установки. Сырьё загружается в бункер (I) и направляется в сушильный отсек (II), где происходит удаление остаточной влаги. После предварительной подготовки материал поступает в горизонтальный герметичный реактор (III), где при температуре 350–800 °C осуществляется процесс пиролиза.

В результате термического разложения биомассы образуются:

- твёрдый углеродсодержащий остаток;
- пиролизный газ;
- жидкие продукты.

Пиролизный газ используется в качестве топлива для газовых горелок (IV), что обеспечивает частичную энергетическую автономность установки. Газообразные продукты проходят через систему конденсации (V), после чего очищаются в скруббере Вентури (VIII). Жидкие продукты пиролиза после конденсации собирались в вертикальном улавливателе (VII). Полученная жидкая фракция (пиролизное масло) может использоваться в качестве вторичного энергетического сырья либо направляться на дальнейшую переработку в зависимости от состава и условий эксплуатации установки, а твёрдый продукт поступает в приёмник (IX).

Разработанная установка обеспечивает повышение производительности процесса переработки, упрощение конструктивного исполнения оборудования, увеличение функциональности за счёт интеграции нескольких технологических стадий, снижение выбросов загрязняющих веществ, повышение энергоэффективности благодаря использованию пиролизного газа, а также возможность переработки отходов непосредственно в местах их образования..

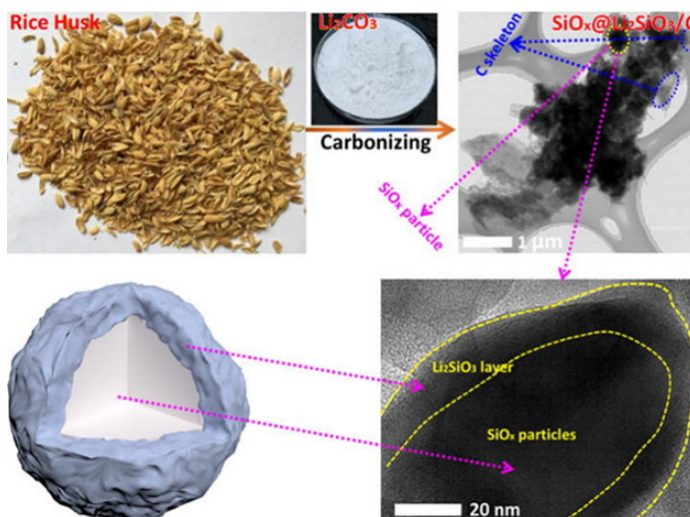


Рисунок 2. Морфологические изменения рисовой шелухи на различных стадиях переработки: исходное сырьё, измельчённое сырьё и карбонизированный продукт.

Для исследования структурных, текстурных и элементных характеристик карбонизированного материала применяли комплекс современных физико-химических методов анализа.

Сканирующая электронная микроскопия (СЭМ). Морфология поверхности и микроструктура образцов исследовались методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с использованием электронного микроскопа (модель указать).

Перед анализом образцы покрывали тонким углеродным слоем методом вакуумного напыления.

Съёмка проводилась при ускоряющем напряжении 5–20 кВ с различными увеличениями в диапазоне от $\times 500$ до $\times 20\,000$, что позволило оценить морфологию поверхности, размер и форму частиц, наличие пористой структуры, степень сохранения природной структуры биомассы, а также формирование углеродного каркаса после карбонизации.

БЭТ-анализ (адсорбция–десорбция азота). Текстурные характеристики образцов определялись методом низкотемпературной адсорбции–десорбции азота с использованием анализатора удельной поверхности (модель указать).

В качестве адсорбата использовали азот (N_2) при температуре 77 К. Перед измерениями образцы подвергались дегазации при температуре 150–300 °С в течение 4–12 часов для удаления адсорбированных примесей и влаги.

Расчёт текстурных параметров проводился с использованием модели Брунауэра–Эммета–Теллера (БЕТ) для определения удельной поверхности, метода Барретта–Джойнера–Халенды (БДХ) для анализа распределения пор по размерам, а также метода DFT для оценки микропористой структуры. В ходе анализа определялись удельная поверхность (m^2/g), общий объём пор (cm^3/g), средний диаметр пор (нм) и распределение микро-, мезо- и макропор.

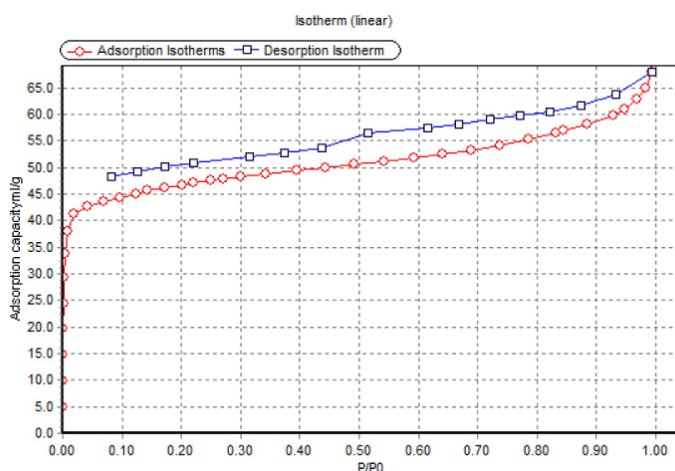


Рисунок 3. Изотермы адсорбции–десорбции для карбонизированного материала из рисовой шелухи.

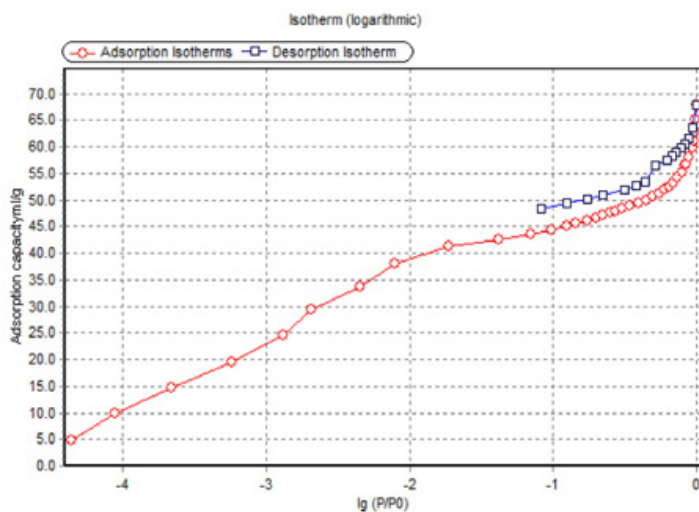


Рисунок 4. Изотермы адсорбции–десорбции азота (N_2) карбонизированного материала в координатах $\lg(P/P_0)$.

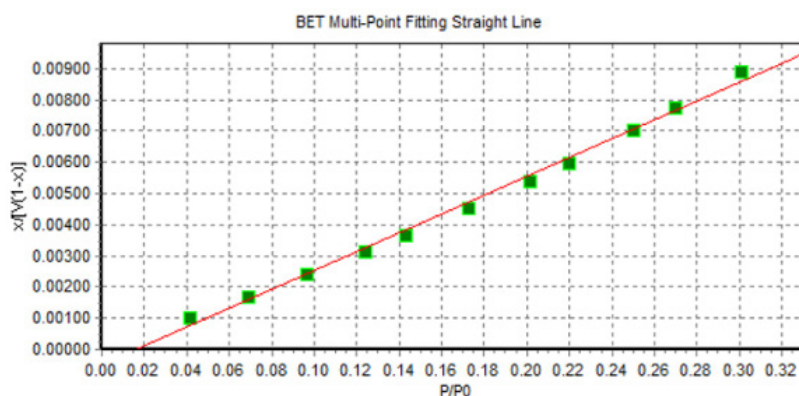


Рисунок 5. Линейная аппроксимация уравнения БЭТ для карбонизированного материала.

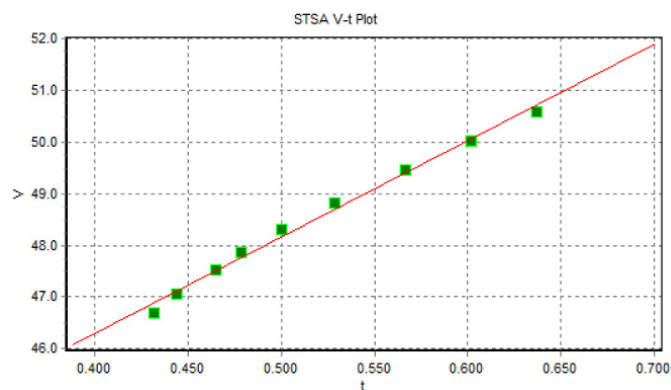


Рисунок 6. t-график ($V-t$ plot) для определения микропористости карбонизированного материала.

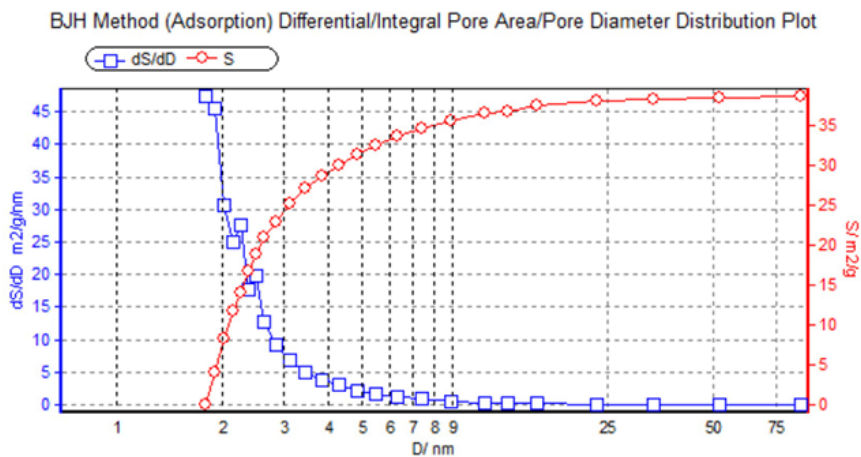


Рисунок 7. Распределение пор по размерам карбонизированного материала (метод ВЈН).

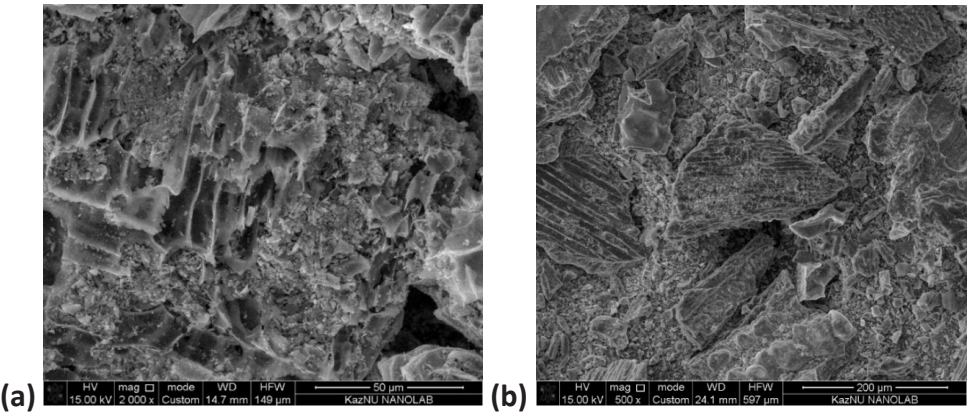


Рисунок 8. СЭМ-изображения карбонизированного материала из рисовой шелухи:
(a) детальная структура пор при увеличении $\times 2000$ (или какое у тебя фактически);
(b) морфология при увеличении $\times 500$.

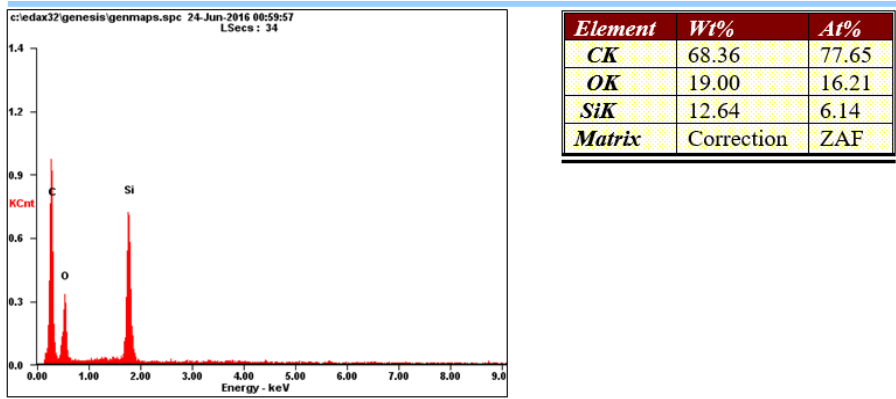


Рисунок 9. EDS-спектр и количественный элементный анализ карбонизированного материала.

Результаты и обсуждение. Результаты исследования морфологических, текстурных и элементных характеристик карбонизированного материала, полученного из рисовой шелухи, показали существенные изменения структуры исходного сырья в процессе термической обработки. Исходная рисовая шелуха характеризуется выраженной волокнистой структурой с анизотропной организацией, обусловленной природной морфологией растительных тканей. После измельчения наблюдается разрушение макроструктуры и формирование более однородной дисперсной системы, что способствует равномерному прогреву материала при последующей карбонизации.

В процессе пиролиза при температуре 350–800 °С происходит термическое разложение основных компонентов биомассы (целлюлозы, гемицеллюлозы и лигнина), сопровождающееся выделением летучих веществ и формированием углеродного каркаса. СЭМ-изображения демонстрируют, что карбонизированный материал представлен фрагментированными частицами неправильной формы со слоистой и пластинчатой морфологией. При увеличении наблюдаются продольные каналы, унаследованные от сосудистой структуры растения, а также развитая система пор, включающая микропоры и каверны. Поверхность материала характеризуется высокой шероховатостью и структурной неоднородностью. Таким образом, формируется иерархическая пористая структура с частичным сохранением природной морфологии биомассы.

Результаты низкотемпературной адсорбции–десорбции азота показали, что полученный материал обладает развитой удельной поверхностью и пористой структурой. Удельная поверхность, рассчитанная по методу БЭТ, составила 146.94 м²/г, что свидетельствует о формировании развитого углеродного каркаса. При этом микропористая поверхность достигает 123.90 м²/г, тогда как внешняя поверхность составляет 23.04 м²/г, что указывает на преобладание микропор. Общий объём пор составляет 0.1051 см³/г, при этом объём мезопор, определённый методом ВЖН, составляет 0.0512 см³/г (адсорбция) и 0.0433 см³/г (десорбция). Средний размер пор равен 2.86 нм, что соответствует мезопористой области, при этом наиболее вероятный размер пор составляет около 3.93 нм, а медианный размер микропор - 0.76 нм.

Анализ изотерм адсорбции–десорбции показывает поведение, характерное для мезопористых материалов (тип IV по классификации IUPAC) с наличием гистерезиса. Распределение пор по размерам подтверждает, что основная доля пор приходится на диапазон 2–5 нм, что является оптимальным для электрохимических применений. t-график указывает на значительный вклад микропор в общую структуру материала. Таким образом, материал характеризуется иерархической пористой структурой, включающей микро- и мезопоры.

Сформированная структура является благоприятной для применения в электрохимических системах, поскольку микропоры обеспечивают накопление заряда, мезопоры способствуют эффективной диффузии электролита, а развитая удельная поверхность увеличивает активную площадь взаимодействия. Полученные значения соответствуют литературным данным для карбонизированных

материалов из биомассы (100–300 м²/г), что подтверждает конкурентоспособность разработанного материала.

Элементный анализ показал присутствие углерода, кислорода и кремния. Следует отметить, что значительная часть кислорода связана с кремнием в составе диоксида кремния (SiO₂), который является характерным компонентом рисовой шелухи. Остальная часть кислорода может быть обусловлена наличием кислородсодержащих функциональных групп на поверхности углеродной матрицы. Присутствие кремния связано с природной способностью рисовой шелухи аккумулировать кремнийсодержащие соединения и делает полученный материал перспективным для создания кремний-углеродных композитов. Наличие кислорода связано с остаточными функциональными группами на поверхности, которые могут способствовать улучшению взаимодействия с электролитом. Присутствие кремния обусловлено природной способностью рисовой шелухи аккумулировать кремнийсодержащие соединения и может способствовать улучшению электрохимических характеристик материала, а также делает его перспективным для создания кремний-углеродных композитов.

Анализ показал, что температура карбонизации оказывает ключевое влияние на формирование структуры материала. При температуре 350–500 °С наблюдается частичное сохранение природной структуры, тогда как при повышении температуры до 600–800 °С происходит более глубокая карбонизация с формированием развитого углеродного каркаса и увеличением удельной поверхности. Конструкция мобильной пиролизной установки также оказывает значительное влияние на качество получаемого материала. Использование герметичного реактора обеспечивает ограниченный доступ кислорода и предотвращает окисление углерода, а применение пиролизного газа в качестве топлива способствует равномерному нагреву и повышению энергоэффективности процесса. Наличие системы конденсации и скруббера Вентури обеспечивает очистку газовых выбросов и стабилизацию технологического режима.

Полученные результаты согласуются с литературными данными для карбонизированных материалов, полученных из различных видов биомассы, включая рисовую шелуху, древесные отходы и травянистые растения. Формирование структуры материала обусловлено термическим разложением органической части биомассы, удалением летучих компонентов и последующим образованием пористой углеродной структуры. Сформированная иерархическая структура обеспечивает эффективный транспорт ионов и высокую реакционную способность материала. В связи с этим полученный карбонизированный материал может быть использован в качестве анодного материала для литий-ионных и натрий-ионных аккумуляторов, а также в суперконденсаторах и в качестве основы для синтеза кремний-углеродных композитов.

Заключение. В ходе проведённого исследования продемонстрирована возможность эффективной переработки сельскохозяйственных биоотходов - рисовой шелухи сорта «Лидер» - с получением карбонизированного материала, обладающего развитой пористой структурой и перспективного для применения в

энергетических системах. Установлено, что предварительная подготовка сырья (сушка и измельчение) и последующая карбонизация в температурном диапазоне 350–800 °С обеспечивают формирование углеродного каркаса с иерархической структурой.

Результаты СЭМ-анализа показали, что карбонизация приводит к разрушению исходной волокнистой структуры и формированию пористого материала с частичным сохранением природной морфологии. БЭТ-анализ подтвердил наличие развитой удельной поверхности (146.94 м²/г) и иерархической системы пор, включающей микро- и мезопоры, что обеспечивает благоприятные условия для транспорта ионов и накопления заряда. Элементный анализ показал преобладание углерода (68.36 мас.%) с присутствием кислорода и кремния, что обусловлено природным составом исходного сырья и может способствовать улучшению функциональных характеристик материала.

Показано, что параметры карбонизации и конструктивные особенности мобильной пиролизной установки оказывают существенное влияние на формирование структуры и свойств материала. Использование герметичного реактора, работающего в условиях ограниченного доступа кислорода, а также применение пиролизного газа в качестве источника энергии обеспечивают повышение энергоэффективности процесса и равномерность термической обработки. Наличие системы очистки газов позволяет снизить экологическую нагрузку.

Практическая значимость работы заключается в разработке технологического подхода, позволяющего осуществлять утилизацию биоотходов непосредственно в местах их образования с одновременным получением функциональных углеродных материалов. Полученный материал может быть использован в качестве анодного материала для литий-ионных и натрий-ионных аккумуляторов, а также в суперконденсаторах и как основа для создания кремний-углеродных композитов.

Таким образом, предложенный подход сочетает экологическую и технологическую эффективность и соответствует принципам устойчивого развития и циркулярной экономики. Перспективы дальнейших исследований связаны с оптимизацией параметров карбонизации, проведением электрохимических испытаний и разработкой композитных материалов с улучшенными эксплуатационными характеристиками.

References

- Askaruly K., Idrissov N., Abdisattar A., Azat S., Kuli Z., Yeleuov M., Malchik F., Daulbayev C., Yszhan Y., Sarsembayeva B., Nysanbayeva S. (2024) Utilizing rice husk-derived Si/C composites to enhance energy capacity and cycle sustainability of lithium-ion batteries. *Diamond and Related Materials*. – No. 152. – P. 111631. DOI: 10.1016/j.diamond.2024.111631 (in Eng.).
- Gao P., Wang Y., Cui X., Zhang K., Wang L., Wang Y., Wang Q., Chen J. (2025) Facile synthesis of core-shell Si/C nanoparticles via in-situ reduction of rice husk-derived silica in molten salts as ultra-stable lithium-ion battery anode. *Journal of Energy Storage*. – No. 109. – P. 119103. DOI: 10.1016/j.est.2025.119103 (in Eng.).
- Gautam M., Mishra G.K., Furquan M., Bhawana K., Kumar D., Mitra S. (2023) Low-stress silicon and SiC anodes for lithium-ion batteries. *Chemical Engineering Journal*. – No. 476. – P. 144916. DOI: 10.1016/j.cej.2023.144916 (in Eng.).

Jorn-am T., Liang X., Song S., Chanthad C., Paoprasert P. (2024) The total use of rice husk to create highly porous silicon and sulfur-doped activated carbon for lithium-ion capacitors. *Sustainable Materials and Technologies*. – No. 42. – P. e00914. DOI: 10.1016/j.susmat.2024.e00914 (in Eng.).

Kong X., Xi Z., Jiang Y., Li S., Chen X., Zhang J., Wang L., Wan Z., Pan A. (2023) Fe-N-C decorated biomass SiOx/C composites with gradient conductive structure. *Chemical Engineering Journal*. – No. 478. – P. 147178. DOI: 10.1016/j.cej.2023.147178 (in Eng.).

Meng Z., Xu Z., Li H., Xiong H., Liu X., Qin C., Wang Z. (2025) Silicon/biomass carbon composites for lithium-ion batteries. *Energies*. – No. 18(4). – P. 972. DOI: 10.3390/en18040972 (in Eng.).

Seisenova A., Nuraly A., Baiseitov D., Kapizov O., Oryngaliyeva S., Alimkulova Z., Mutushev A. (2025) Comprehensive assessment of ash and slag waste for the synthesis of silicon-based functional materials. *Processes*. – No. 13(9). – P. 2722. DOI: 10.3390/pr13092722 (in Eng.).

Song J., Guo S., Kou L., Liu H., Kajiyoshi K., Su J., Zheng P. (2020) Nitrogen-doped carbon/SiOx composites from rice husks for lithium-ion batteries. – *SSRN Electronic Journal*. DOI: 10.2139/ssrn.3567478 (in Eng.).

Sun X., Qiao L. (2021) Synthesis and electrochemical properties of bioderived silicon particles for lithium-ion battery anodes. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. – No. 32(15). – P. 20452-20461. DOI: 10.1007/s10854-021-05683-2 (in Eng.).

Wang J., Wang Y., Jiang Q., Zhang J., Yin H., Wang Z., Gao J., Wu Z., Liang J., Zuo S. (2021) Interconnected hollow Si/C hybrids engineered by CO₂-introduced magnesiothermic reduction of biosilica from reed plants for lithium storage. *Energy & Fuels*. – No. 35(12). – P. 10124-10135. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.1c00836 (in Eng.).

Wu Y., Jiang Y., Liu W., Wen H., Dong S., Chen H., Wang L. (2022) Engineering bamboo leaves into 3D macroporous Si@C composites for lithium-ion battery anodes. *Frontiers in Chemistry*. – No. 10. – P. 882681. DOI: 10.3389/fchem.2022.882681 (in Eng.).

Yang X., Li Y., Chen W., Zhang C., Huang L., Luo X. (2024) Scalable synthesis of Si/C composites from silicon kerf waste. *Energy & Fuels*. – No. 38(6). – P. 4877-4887. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.3c05121 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 353–366

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.457>

UDC: 615.322
IRSTI: 61.45.36

©Zhetenova M.S.^{1*}, Suleimenova M.Sh.¹, Nuraly A.M.^{1,2}, Mutushev A.Zh.^{1,2},
Kalimoldina L.M.¹, 2026.

¹Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan;

²Scientific Center for New Technologies, Almaty, Kazakhstan.

*E-mail: madina.zhetenova21@gmail.com

DEVELOPMENT AND RESEARCH OF CAROTENOID-CONTAINING EXTRACTS OBTAINED FROM PLANT RAW MATERIALS

Zhetenova Madina — PhD Student, Assistant, Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: madina.zhetenova21@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-6596-8789>;

Suleimenova Mariya — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Almaty Technological
University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: s.mariyash@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5455-6475>;

Nuraly Assiya — PhD, Assistant Professor, Leading Researcher, Scientific Center for New Technologies;
Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: assiya488@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2323-0365>;

Mutushev Alibek — PhD, Assistant Professor, Leading Researcher, Scientific Center for New Technologies;
Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: alibek_090@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5047-5608>;

Kalimoldina Laila — Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Almaty Technological
University, Almaty, Kazakhstan,
E-mail: kalimoldinal@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4397-9629>.

Abstract. Carotenoids currently play an important and key role in scientific research. Despite the prevalence of carotenoids, there are still some unexplored issues related to variable bioavailability. In this regard, there is a need to study their physical and chemical properties. Thus, the study of carotenoids from plant raw materials is an urgent direction in our modern science and aimed at their application in pharmaceutical industries. They are important biologically active compounds that have activity and are widely used in various industries, especially pharmaceutical ones. Their chemical structure determines their biological activity and physico-chemical properties. The relevance of the study is due to its antioxidant properties. The purpose of this work is to extract carotenoids from plant raw materials (corn and beetroot) and structural characteristics using spectroscopic analysis methods. It was found that the studied carotenoids possess a system of conjugated double bonds, confirmed with the obtained

data by IR spectroscopy. IR spectroscopy helped identify the characteristic fluctuations of C-H, C=C bonds, confirming the presence of a polyene chain. Corn powder extract of all parts of corn, beet leaf powder extract obtained by ultrasonic extraction contain a higher number of carotenoids compared to the extract obtained by the traditional method. The amount of carotenoid yield is 30-42% higher after ultrasonic extraction compared to traditional extraction. Studies show their effect on metabolism and the induction of intercellular connections through gap junctions. Thus, carotenoids have a positive effect on a wide range of cellular processes and further research is needed to fully understand their potential in disease prevention and treatment. The scientific novelty of the study is a comprehensive study of the possibility of extracting carotenoids from various parts of Kazakhstan varieties of corn and beet tops by ultrasonic extraction.

Keywords: carotenoids, extraction, vegetable raw materials, antioxidant activity, IR spectroscopy, ultrasonic extraction

Financing. *This study was conducted as part of the targeted financing program for the IRN AR26101397 project «Development of technology for the production of carotenoid-containing preparations based on plant raw materials».*

For citations: Zhetenova M.S., Suleimenova M.Sh., Nuraly A.M., Mutushev A.Zh., Kalimoldina L.M. Development and Research of Carotenoid-Containing Extracts Obtained from Plant Raw Materials. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 353–366. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.457>

©Жетенова М.С.^{1*}, Сүлейменова М.Ш.¹, Нұралы Ә.М.^{1,2}, Мутушев А.Ж.^{1,2},
Калимолдина Л.М.¹, 2026.

¹Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан;

²Scientific Center for New Technologies, Алматы, Қазақстан.

*E-mail: madina.zhetenova21@gmail.com

ӨСІМДІК ШИКІЗАТЫНАН АЛЫНҒАН ҚҰРАМЫНДА КАРОТИНОИД БАР СЫҒЫНДЫЛАРДЫ ӘЗІРЛЕУ ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ

Жетенова Мадина — PhD докторант, ассистент, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: madina.zhetenova21@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-6596-8789>;

Сүлейменова Мария — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: s.mariyash@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5455-6475>;

Нұралы Әсия — PhD, ассистент-профессор, жетекші ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies; Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: assiya488@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2323-0365>;

Мутушев Алибек — PhD, ассистент-профессор, жетекші ғылыми қызметкер, Scientific Center for New Technologies; Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: alibek_090@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5047-5608>;



Калимолдина Лайла — техника ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан,
E-mail: kalimoldinal@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4397-9629>.

Аннотация. Қазіргі уақытта каротиноидтар ғылыми зерттеулерде маңызды және шешуші рөл атқарады. Каротиноидтардың таралуына қарамастан, өзгермелі биожетімділікке қатысты кейбір мәселелер әлі де зерттелмеген. Осыған байланысты олардың физикалық және химиялық қасиеттерін зерттеу қажет. Осылайша, Өсімдік шикізатынан алынған каротиноидтарды зерттеу Біздің қазіргі ғылымымыздағы өзекті бағыт болып табылады және оларды фармацевтика салаларында қолдануға бағытталған. Олар маңызды биологиялық белсенді қосылыстар болып табылады, олардың белсенділігі бар және әртүрлі салаларда, әсіресе фармацевтикалық салаларда кеңінен қолданылады. Олардың химиялық құрылымы олардың биологиялық белсенділігі мен физика-химиялық қасиеттерін анықтайды. Зерттеудің өзектілігі антиоксиданттық қасиеттерге байланысты. Бұл жұмыстың мақсаты-Өсімдік шикізатынан (жүгері мен қызылша) каротиноидтарды алу және спектроскопиялық талдау әдістерін қолдана отырып құрылымдық сипаттамалар. Зерттелетін каротиноидтардың конъюгаттық қос байланыс жүйесі бар екендігі анықталды, олар алынған ИҚ спектроскопиясымен расталды. ИҚ спектроскопиясы Полиен тізбегінің болуын растайтын байланыстардың тән C-H, C=C тербелістерін анықтауға көмектесті. Жүгерінің барлық бөліктерінің жүгері ұнтағы сығындысы, қызылша шыңдарынан алынған ұнтақ сығындысы ультрадыбыстық экстракциямен алынған дәстүрлі әдіспен алынған сығындымен салыстырғанда каротиноидтардың көп мөлшері бар. Дәстүрлі экстракциямен салыстырғанда ультрадыбыстық экстракциядан кейін каротиноидтардың шығарылу мөлшері 30-42% - ға көп. Зерттеулер олардың метаболизмге және саңылаулар арқылы жасушааралық байланыстардың индукциясына әсерін көрсетеді. Осылайша, каротиноидтар жасушалық процестердің кең ауқымына оң әсер етеді және қажет аурулардың алдын алу және емдеуде қолдану әлеуетін толық түсіну үшін қосымша зерттеулер. Зерттеудің ғылыми жаңалығы ультрадыбыстық экстракция әдісімен қазақстандық жүгері мен қызылша шыңдарының әртүрлі бөліктерінен каротиноидтарды алу мүмкіндігін кешенді зерттеу болып табылады.

Түйін сөздер: каротиноидтар, экстракция, өсімдік шикізаты, антиоксиданттық белсенділік, ИҚ спектроскопиясы, ультрадыбыстық экстракция

©Жетенова М.С.^{1*}, Сулейменова М.Ш.¹, Нуралы А.М.^{1,2}, Мутушев А.Ж.^{1,2},
Калимолдина Л.М.¹, 2026.

¹Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан;

²Scientific Center for New Technologies, Алматы, Казахстан.

*E-mail: madina.zhetenova21@gmail.com

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ КАРОТИНОИДСОДЕРЖАЩИХ ЭКСТРАКТОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

Жетенова Мадина — PhD докторант, ассистент, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: madina.zhetenova21@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-6596-8789>;

Сулейменова Мария — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: s.mariyash@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5455-6475>;

Нуралы Асия — PhD, ассистент-профессор, ведущий научный сотрудник, Scientific Center for New Technologies; Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: assiya488@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2323-0365>;

Мутушев Алибек — PhD, ассистент-профессор, ведущий научный сотрудник, Scientific Center for New Technologies; Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: alibek_090@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5047-5608>;

Калимолдина Лайла — кандидат технических наук, ассоциированный профессор, Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан,

E-mail: kalimoldinal@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4397-9629>.

Аннотация. Каротиноиды представляют собой важный класс природных биологически активных соединений, обладающих выраженными антиоксидантными свойствами и широко применяемых в пищевой, фармацевтической и косметической промышленности. Несмотря на значительное количество исследований, ряд вопросов, связанных с их биодоступностью, стабильностью и эффективностью методов извлечения, остаётся недостаточно изученным. В связи с этим исследование каротиноидов растительного происхождения и разработка эффективных способов их экстракции являются актуальным направлением современной науки. Целью работы являлось получение каротиноидсодержащих экстрактов из растительного сырья (различных частей кукурузы и ботвы свёклы) и исследование их структурных особенностей с использованием спектроскопических методов анализа. Для извлечения биологически активных соединений применялись традиционный и ультразвуковой методы экстракции. Структурные характеристики полученных экстрактов изучались методом инфракрасной спектроскопии. Результаты ИК-анализа подтвердили наличие системы сопряжённых двойных связей, характерной для каротиноидов, а также позволили идентифицировать колебания связей C–H и C=C, свидетельствующие о присутствии полиеновой цепи. Установлено, что экстракты, полученные методом ультразвуковой экстракции из различных частей кукурузы и ботвы свёклы, содержат большее количество каротиноидов по сравнению с образцами, полученными традиционным способом. Выход целевых

соединений при использовании ультразвуковой экстракции увеличивался на 30–42 %. Полученные результаты подтверждают перспективность применения ультразвуковой обработки для интенсификации процессов извлечения биологически активных веществ. Научная новизна исследования заключается в комплексном изучении возможности получения каротиноидов из различных частей казахстанских сортов кукурузы и ботвы свёклы с использованием ультразвуковой экстракции. Полученные данные расширяют представления о потенциале растительного сырья как источника природных антиоксидантов и создают предпосылки для их дальнейшего использования в фармацевтической промышленности и профилактической медицине.

Ключевые слова: каротиноиды, экстракция, растительное сырьё, антиоксидантная активность, ИК спектроскопия, ультразвуковая экстракция

Introduction. Carotenoids are natural pigments synthesized by plant, algae, fungi. Carotenoids are a class of more than 1200 natural pigments, which consist of beneficial thing. Carotenoids are important for human health because they actively act as antioxidants, helping to protect cells from damage caused by reactive oxygen species. They were associated with a reduced risk of chronic diseases such as diabetes, cancer, heart diseases. In addition, the benefits for the eyes are very great. Also, another role is their activity of provitamin A, the ability of some carotenoids to form vitamin A under the action of dioxygenase enzymes (Nikolay et al., 2023).

Carotenoids are divided into groups according to the number of carbon atoms. Carotenoids containing carbon atoms include also oxides: vitamin A and crocetin—the yellow coloring agent of saffron, norbixin and bixin and others. Likewise, in the human body, carotenoids have an effect against intense light and damage by harmful free radicals and maintain the integrity of biological membranes in structure, functionality. The mechanisms of action of carotenoids on health are considered complex and further research is needed to provide a comprehensive understanding. Carotenoids are indispensable for human health. Many of them are huge, and only a small part is fully studied. Carotenoids are essential for our body. Carotenoids are found in large quantities in plants, including beets and corn, which contain a large amount of carotenoids.

Literary review. Carotenoids are a common class of isoprenoid pigments that can be synthesized by photosynthetic organisms as well as bacteria (Wellala et al., 2022). Carotenoids can be divided into two main groups: nonpolar carotenes: β -carotene and lycopene, hydrocarbon compounds and polar xanthophylls, such as lutein and canthaxanthin, whose structures contain hydrogen, carbon, oxygen (Genç, 2020). Carotenoids can be divided into pro- and provitamin A, which cannot be converted into retinoid groups. Carotenoids are effective compounds with antioxidant properties and are non-toxic.

Underutilized agro-industrial residues offer promising, low-cost feedstocks for the recovery of valuable phytochemicals. In maize (*Zea mays*), xanthophylls such as zeaxanthin and lutein are mainly associated with the kernel, particularly the endosperm and aleurone layers, whereas maize cobs represent a lignocellulosic byproduct

generated after grain removal. Therefore, maize processing residues, including kernel-derived fractions and other byproducts, may serve as potential sources of carotenoid-containing materials, depending on their composition and processing.

Beet tops (*Beta vulgaris* leaves), often discarded after root harvest, are rich in lutein co-occurring with betalains for potential synergistic antioxidant effects. Bilberry leaves (*Vaccinium myrtillus*) provide lutein together with anthocyanins, enhancing overall bioactivity. These materials are abundant in Kazakhstan's agro-sector, representing an opportunity for local valorization and reduced environmental impact from waste disposal.

Conventional extraction methods such as organic solvent maceration, Soxhlet extraction, or alkaline hydrolysis suffer from several drawbacks: prolonged processing times (hours to days), high solvent consumption (toxic volatile organics), energy intensity, and thermal/oxidative degradation of labile carotenoids, leading to isomerization (trans-cis) and loss of bioactivity. These limitations conflict with green chemistry principles (e.g., reduced hazardous substances, energy efficiency).

Ultrasonic-assisted extraction (UAE) addresses these issues by harnessing acoustic cavitation: the formation, growth, and implosion of microbubbles in liquid media generates localized extreme conditions high temperatures (~5000 K), pressures (>1000 atm), microjets (>100 m/s), shear forces, and microturbulence that disrupt cell walls, weaken intermolecular bonds (hydrogen/hydrophobic), enhance solvent penetration, and accelerate mass transfer without bulk heating.

Recent studies demonstrate UAE's superiority for carotenoid recovery from various matrices, achieving 20–93% yield increases over conventional methods while preserving structural integrity and anti-oxidant capacity. Response surface methodology (RSM) with central composite design (CCD) has proven effective for multi-parameter optimization (temperature, time, solvent ratio, power), yielding robust models for process scale-up.

In recent years, more than 700 carotenoids have been identified in nature. The structure of carotenoids is sensitive, especially the molecular structure and high temperatures when exposed to light can be compromised so care must be taken when handling them. The frequency of carotenoids may also differ from the selected extraction methods and purification process.

According to their chemical structure, carotenoids are divided into two main groups: carotenes and xanthophylls. Carotenes are hydrocarbon compounds and consist exclusively of carbon and hydrogen atoms.

The extraction process is the physical separation of the components of a mixture, which is based on the difference in their solubility in two liquids or in an absorber. There are two common types of extraction: solid phase and solvent extraction.

Solvent extraction is mainly based on the extraction of uncharged particles from a water system with an organic solvent or the extraction of polar ionized particles from a solvent into an aqueous solution (Mustafa et al., 2011).

Carotenoids are mainly found in different parts of plants: leaves, seeds, fruits, and roots (Toti et al., 2018). There is also a daily consumption range (mg) of carotenoids. Consumption and daily rate are shown in Table 1.

Table 1. Daily consumption rate and main sources of some carotenoids.

№	Carotenoids	Recommended daily consumption rate (mg)	Main sources
1	β -carotene	0,95-8,700	Carrots, blueberries, blueberries, beans and other vegetables
2	α -carotene	0,13-2,35	Corn, carrot, pumpkin
3	Lutein	1,1-4,13	Broccoli, carrots, corn, beets and other green vegetables, fruits
4	Zeaxanthin	0,89-4,10	Pumpkin, sweet corn, beetroot, tomato, carrot

Daily consumption and their recommendation are useful for absorbing useful activity. Reports from foreign studies have shown that high consumption of carotenoids can help reduce the risk of various diseases. The recommended intake is based on meeting the need for 780-800 mcg of vitamins A.

Many carotenoids are found in cell structures and traditional extraction methods using organic solvents are safe solvents, including biodegradable. However, sometimes it is difficult for solvents to enter the cellular environment to come into contact with carotenoids, so the penetration and extraction of carotenoids to increase efficiency requires physical methods such as ultrasound (Goula et al., 2017). The process of obtaining a drug containing a group of carotenoids consists of several stages. The steps of the process are shown in Figure 1.

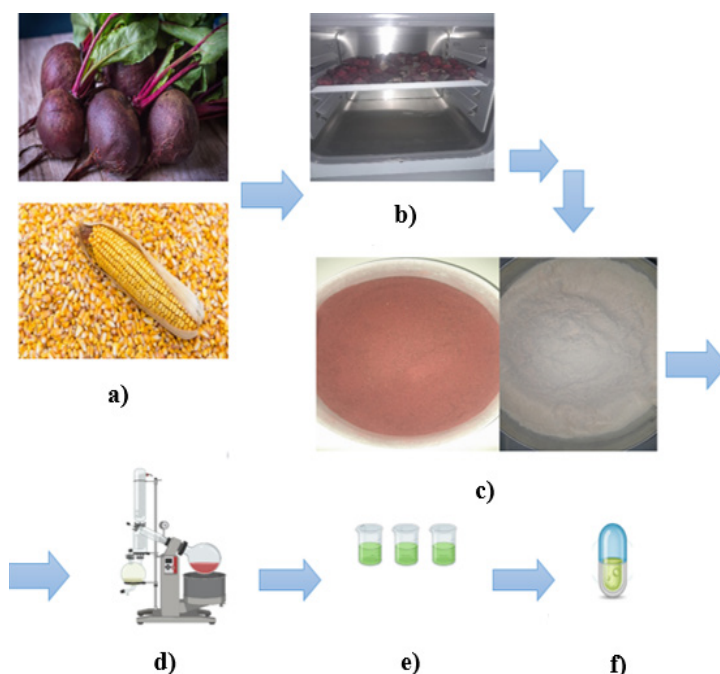


Figure 1. The process of obtaining carotenoids from vegetable raw materials (corn and beetroot): a) source, b) drying in the vacuum drying cabinet, c) crushing of plant raw materials, d) rotary evaporation, e) liquid extraction, f) the finished product.

As a result of the study, it was found that ultrasonic extraction is a more effective method of extracting carotenoids from various parts of corn compared to traditional extraction. Extraction was carried out from 600 gram of corn powder of 8 varieties of corn of all parts and separately of grains and husks using hexane (1:15 by weight/ vol.) at a temperature of 30-40 ° C for 2 hours.

Blueberry leaves and berries were treated in a similar way: washed, dried at 35-40 °C in a vacuum (VAC-24, Thermo Fisher Scientific) for 7 hours to a humidity of <5%, crushed to a particle size of 0.5–0.7 mm and stored under the same conditions.

Lutein from beet tops and blueberry leaves was extracted using ethyl acetate: ethanol (1:1 vol./vol.) under identical conditions. The extracts were subjected to alkaline hydrolysis (5-10% NaOH, 20-30 °C, atmosphere N °, 90 min), neutralization to pH 7 with distilled water, and concentration by rotary evaporation (Laborota 4000) at a temperature of <40 °C.

Materials and Methods. Materials: H₂O, organic solvents: butanol, hexane (CFA) ratio 1:10, 1:20, 10-11% pentane, 5-10% sodium hydroxide solution.

Methods: solvent extraction method, infrared spectroscopy using the IRTracer-100 from Shimadzu.

Corn cobs and beets were dried in a VAC-24 vacuum cabinet at a temperature of 35-40 °C for 5-7 hours. The dried samples were ground in a laboratory mill to a fraction of 0.7 mm. The preparation of raw materials also includes additional drying of 500-600-gram powders at a temperature not exceeding 50-60 ° C in order to prevent thermal degradation of carotenoids.

The extraction process includes the following steps: the extraction of zeaxanthin and lutein was carried out with an organic solvent, hexane and butanol, at a temperature of 30-40 ° C and a ratio of raw materials and solvent 1:10-1:20. The process is based on the diffusion transfer of carotenoids from the plant matrix into the extraction medium and is accompanied by the destruction of protein-lipid complexes.

Further, to convert the essential forms of zeaxanthin and lutein to a free state, alkaline hydrolysis was performed using 5-10% sodium hydroxide solution at a temperature of 23-25 °C in an inert atmosphere. The extract was purified by washing to a neutral pH, followed by extraction with 10-11% pentane and concentration. Additionally, the extract was purified with distilled water to pH = 7. A powder volume of 480-500 grams was obtained.

Quantitative determination of carotenoids in the samples was carried out by the spectrophotometric method. The sample weight of 0.05 g was accurately weighed and placed in a measuring flask with a volume of 0.1 dm³. Extraction of the target compounds was carried out by adding ethanol, preheated to 40 °C, followed by thorough mixing until the extractives were completely dissolved.

The optical density of the obtained solution was measured using a Shimadzu UV-1800 spectrophotometer. The measurements were carried out in a cuvette with an optical layer thickness of 0.01 cm at a wavelength of 450 nm, corresponding to the maximum absorption of carotenoids. Pure ethanol was used as the reference solution.

After the measurement, the sample was cooled to 20 ° C, then the volume of the

solution in the measuring flask was brought to the mark with ethanol and thoroughly mixed to ensure uniformity. After obtaining samples for purity determination, as well as structural analysis, studies were conducted using infrared spectroscopy on the IRTracer-100 device from Shimadzu.

Results and discussions. As a result of traditional solvent extraction, the total extraction time was about 3-4 hours, and ultrasonic extraction took 35-40 minutes. Extracts of the following samples were obtained: 8 samples of corn powder extract of all parts, 1 sample of beetroot powder extract, 1 sample of blueberry leaf/berry powder.

Carotenoids are lipophilic compounds, so their extraction largely depends on the ability of the raw material matrix to interact with the solvent, as well as on structural changes caused by ultrasonic cavitation.

In this study, the influence of the following indicators was evaluated: bulk density, moisture capacity, oil retention capacity, swelling ability and hydration density on the carotenoid content in ultrasound extracts. The results are summarized in Table 2.

Table 2. Functional and technological properties in traditional extracts.

Material	Bulk density (g/ml)	Moisture capacity (ml/g)	Oil retention capacity (g/g)	Swelling capacity (ml/g)	Hydration density (g/ml)
Beetroot powder	1,8	1,5	1,5	10,5	9,3
Corn powder	1,15	1.1	1.2	11,8	0,5
Blueberry Leaf/ Berry Powder	0,9	0,8	1,8	9,5	2,1

The bulk density reflected the degree of compactness of the powder particles. High values of this indicator (more than 0.8 g/ml) lead to a decrease in porosity and a deterioration in the penetration of the solvent deep into the particles. Under ultrasonic treatment conditions, this limits the effect of cavitation and reduces the efficiency of mass transfer.

The low bulk density of the studied substances (powder from beet tops, powder from corn cobs, powder from blueberry leaves/berries) contributes to an increase in the inter particle space. Moisture capacity characterizes the powder's ability to bind and retain water. High values of these parameters contribute to a more complete wetting of the plant matrix and activation of the ultrasonic capillary effect. Improved hydration leads to swelling of the cell walls, their partial destruction under the action of cavitation forces and a more efficient release of carotenoids associated with proteins and polysaccharides.

An analysis using infrared spectroscopy was performed to determine the chemical structure and purity of the functional group analysis. The result is shown in Figure 2.

Infrared spectroscopy was used to determine the presence of carotenoid-containing substances zeaxanthin and lutein in the obtained extracts (Figure 2). IR spectra were recorded in the range of 4000-400 cm^{-1} . Spectrum analysis revealed characteristic absorption bands corresponding to the functional groups included in the structure of zeaxanthin and lutein.

Infrared spectroscopy (FTIR) is a method that determines the characteristics of bonds to use for quantitative and qualitative analysis. This is an analytical method that relies

on molecules absorbing infrared radiation of a certain frequency and also matching the oscillation frequencies of their chemical bonds.

The study by Aldo Rosales (2022) explains that the standard deviation is calculated between the results obtained using IR radiation and the reference values for calibration or verification. In addition, the calibration determination coefficient and the verification determination coefficient are also calculated.

Strong bands related to valence vibrations of the C-H bonds of methyl and methylene groups of carbon-hydrogen chains are recorded in the region of 3000-2800 cm^{-1} . A wide band in the range of 3400-3200 cm^{-1} indicates the presence of hydroxyl groups (O-H), which may be associated with both remaining moisture and hydroxylated forms of carotenoids (for example, lutein and zeaxanthin).

In the «fingerprint region» (1500-900 cm^{-1}), there are a number of intense peaks corresponding to the C-O, C-C, and deformation vibrations of the CH_2/CH_3 groups. Bands in the range of 960-900 cm^{-1} are characteristic of out-of-plane deformation vibrations =C-H of trans-disubstituted double bonds typical of the carotenoid structure.

Bands corresponding to valence vibrations of the C-O bonds of alcohol groups are recorded in the range of 1020-1100 cm^{-1} . Their presence further confirms the oxygen-containing nature of the studied compounds and is consistent with the literature data for lutein and zeaxanthin.

The results obtained are important for understanding the structural features of carotenoids and their behavior in various environments. The obtained patterns can be used for a more accurate interpretation of the infrared spectra of carotenoids and for methods of qualitative and quantitative analysis. The data obtained expands the understanding of sensitivity.

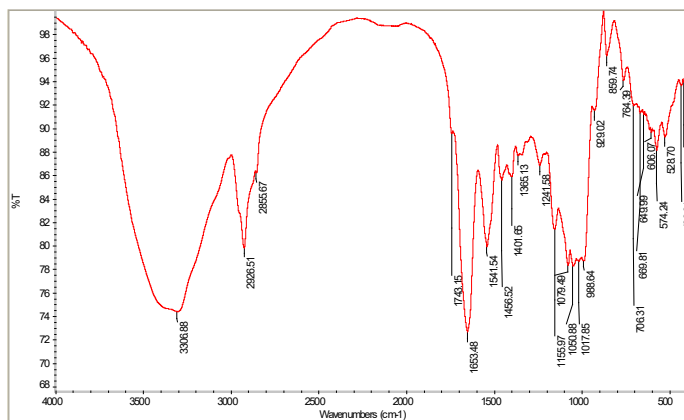


Figure 2. Results of IR spectroscopy of corn flour samples.

Figure 2 shows the IR spectrum of samples from corn powders. Characteristic absorption bands are observed in the spectrum, confirming the presence of carotenoids. Intense bands in the range of 1650-1500 cm^{-1} correspond to valence vibrations of conjugated C=C double bonds of the polyene chain of carotenoids.

The most pronounced peaks in the region of $1550\text{--}1520\text{ cm}^{-1}$ are typical for beta-carotene, lutein, and other carotenoids.

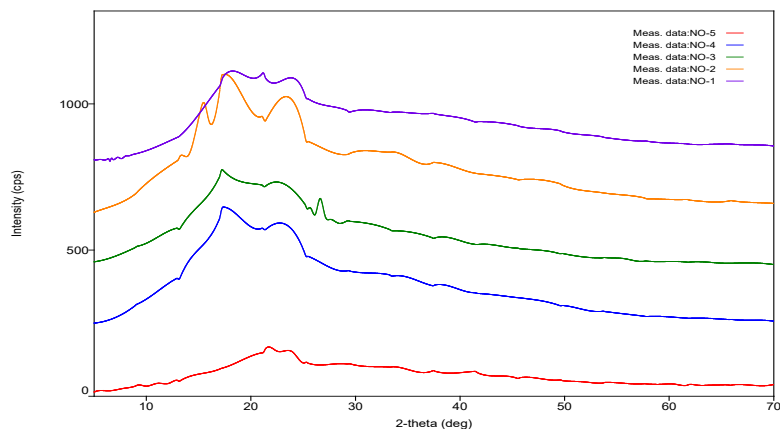


Figure 3. The result of X-ray analysis of samples of corn and beet tops.

Figure 3 shows the diffractograms of the studied samples, and also all samples exhibit similar diffraction peaks, which indicate the formation of a crystalline phase. At the same time, the main diffraction maxima are located in the same regions, which indicates the identity of the structure of the studied samples.

The resulting spectrum confirms the successful extraction of carotenoids by ultrasonic extraction and reveals a characteristic ‘profile’ of highly conjugated polyene compounds.

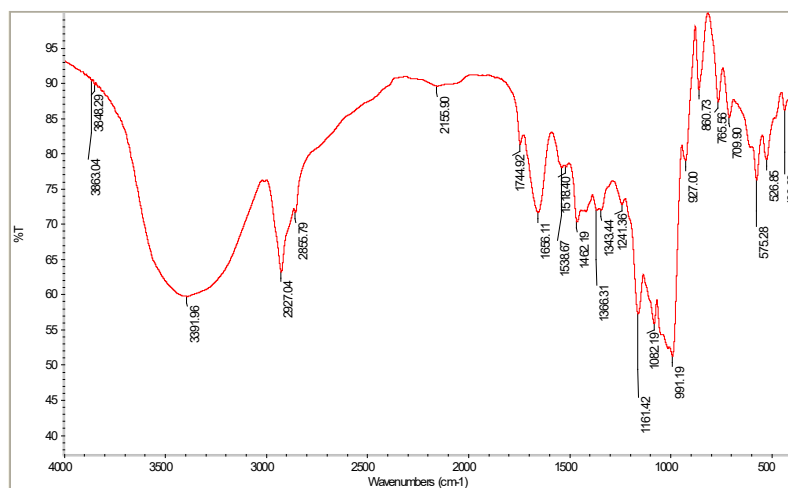


Figure 4. Results of IR spectroscopy in beet samples.

A distinctly pronounced band in the range of $1640\text{--}1660\text{ cm}^{-1}$ refers to fluctuations in conjugated $\text{C}=\text{C}$ double bonds. This area is diagnostically significant for carotenoids

and indicates the presence of an extensive system of conjugated double bonds that determine the optical properties of lutein and zeaxanthin. In the range of 1020-1100 cm^{-1} , a group of bands corresponding to valence vibrations of C–O bonds of alcohol groups is observed. Their presence further confirms the oxygen-containing nature of the studied compounds. The bands in the range of 960-1000 cm^{-1} are associated with deformation fluctuations =C–H of vinyl and allylic fragments characteristic of the carotenoid skeleton. In the low frequency range of the spectrum (800-900 cm^{-1}), slight deformation fluctuations of methyl groups are recorded.

The extract of corn powder from all parts of Kizurax-150 corn, extract of powder from beet tops, extract of powder from leaves/blueberries obtained by ultrasonic extraction contain a higher amount of carotenoids compared to the extract obtained by the traditional method. The amount of carotenoid yield is 30-42% higher after ultrasonic extraction compared to traditional extraction. The results of the quantitative determination of carotenoids are shown in Figure 5. The graph is built using the Microsoft Origin program.

As is known, carotenoids are able to absorb ultraviolet radiation and light in various regions of the spectrum, since conjugated double bonds are present in the structure of carotenoids. The solvent used also has a key effect on the absorption of the compound. The carotenoid content is determined by absorbing a sample at a certain wavelength with absorption calculations that are given in foreign literature. The total carotenoid content is expressed in equivalents (Butnariu et al., 2016).

The obtained spectrum confirms the successful extraction of carotenoids by ultrasonic extraction and demonstrates the characteristic "profile" of polyene compounds with a high degree of conjugation.

Due to the fact that the extract of corn powder is the most optimal in terms of functional and technological properties, as well as according to the results of IR spectroscopy, it was later decided to conduct a study to determine the content of phenolic compounds (TPC) and total flavonoid content (TFC) only for samples of corn powder from corn grain and husk.

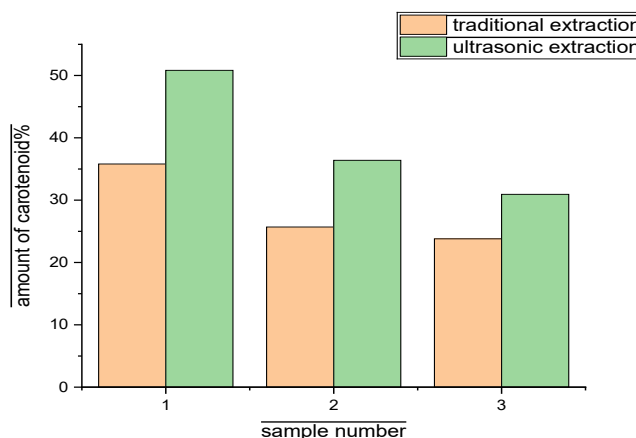


Figure 5. The actual yield of carotenoids during conventional and ultrasonic extraction.

As a result of the study, it was found that ultrasonic extraction is a more effective method of extracting carotenoids from various parts of corn compared to traditional extraction.

Conclusion. During the research, carotenoids were extracted from vegetable raw materials (corn and beetroot). Butanol was chosen as the optimal solvent. The optimal drying temperature is 36-40°C. After receiving the samples, IR spectroscopy and X-ray analysis were performed. IR spectroscopic analysis showed peaks in the range from 1250 to 3300 cm⁻¹. A number of characteristic absorption regions correspond to valence vibrations of C-H bonds, as well as conjugated C=C double bonds. This proves the presence of a hydrocarbon chain with a coupling system that is characteristic of carotenoids.

Samples of four varieties of corn and beet tops were examined. A comparison of the diffractograms showed a similar distribution of X-ray intensity, however, individual differences in the position and intensity of the maxima indicate a different degree of structural ordering of the studied samples.

During the research, the properties and role of carotenoids and their antioxidant activity were studied. The results show that carotenoids play a key role in protecting the body from oxidative stress and at the same time can contribute to the prevention of a number of chronic diseases. In the future, it is advisable to conduct more extensive studies aimed at studying bioavailability and their effectiveness.

The excellent results of ultrasonic extraction (UE) in the extraction of zeaxanthin and lutein from corn cobs, beet tops and blueberry leaves are primarily due to acoustic cavitation, which fundamentally alters the physico-chemical dynamics of the extraction process compared to traditional solvent-based methods.

Alkaline hydrolysis effectively cleaved esterified forms, releasing free xantho-phylls without detectable chemical modification of the polyene backbone, as confirmed by FTIR structural analysis. The key intensification factor was acoustic cavitation induced by ultrasound (40 kHz, 200 W), which promoted rapid cell wall disruption, sonoporation, microjet formation, boundary layer thinning, and enhanced mass transfer.

In traditional solvent extraction, carotenoid release is based on passive diffusion and equilibrium distribution, limited by an intact cell wall barrier, protective lipid-protein complexes, and low rates of mass transfer through the boundary layer. The extraction efficiency is limited by the coefficient of dilution and requires a long contact time, elevated temperatures and large volumes of solvent, which often leads to thermal/oxidative degradation and partial trans-cis isomerization of sensitive xanthophylls.

References

- Aldo R., José C., Jaime C., Luisa C., Thanda D., Thokozile N., Natalia P. (2023). Near-Infrared Spectroscopy to Predict Provitamin A Carotenoids Content in Maize. *Agronomy*. – No. 12(5). – P. 1027. DOI: 10.3390/agronomy12051027 (in Eng.).
- Butnariu M. (2016). *Methods of Analysis (Extraction, Separation, Identification and Quantification) of Carotenoids from Natural Products*. *J. Ecosyst. Ecography*. – No. 6. – P. 1-19. DOI: 10.4172/2157-7625.1000193 (in Eng.).
- Ewelina K., Marcin Andrzej K. (2022). Green Extraction of Carotenoids from Fruit and Vegetable Byproducts: A Review. *Molecules*. – No. 27(2). – P. 518. DOI: 10.3390/molecules27020518 (in Eng.).

Genç Y., Bardakci H., Yücel Ç., Karatoprak G., Akkol E.K., Barak T.H., Sobarzo-Sánchez E. Oxidative stress and marine carotenoids: Application by using nanoformulations. *Mar. Drugs*. – No. 18. – P. 423. DOI: 10.3390/md18080423 (in Eng.).

Goula A.M., Ververi M., Adamopoulou A., Kaderides K. (2017). Green ultrasound-assisted extraction of carotenoids from pomegranate wastes using vegetable oils. *Ultrason. Sonochem.* – No. 34. – P. 821-830. DOI: 10.1016/j.ultsonch.2016.07.022 (in Eng.).

Joel B., Kerry B., Mani N. (2023). The Use of Infrared Spectroscopy for the Quantification of Bioactive Compounds in Food: A Review. *Molecules*. – No. 28(7). – P. 3215. DOI: 10.3390/molecules28073215 (in Eng.).

Nikolay E., Ligia Focsan A., Yunlong G. (2023). The Endless World of Carotenoids—Structural, Chemical and Biological Aspects of Some Rare Carotenoids. *Int. J. Mol. Sci.* – No. 24(12). – P. 9885. DOI: 10.3390/ijms24129885 (in Eng.).

Papapostolou H., Kachrimanidou V., Alexandri M., Plessas S., Papadaki A., Kopsahelis N. (2023). Natural Carotenoids: Recent Advances on Separation from Microbial Biomass and Methods of Analysis. *Antioxidants*. – No. 12. – P. 1030. DOI: 10.3390/antiox12051030. (in Eng.).

Saini, R.K.; Keum, Y.S. (2018) Carotenoid extraction methods: A review of recent developments. *Food Chem.* – No. 240. – P. 90-103. (in Eng.).

Swapnil P., Meena M., Singh S.K., Dhuldhaj U.P., Marwal A. (2021). Vital roles of carotenoids in plants and humans to deteriorate stress with its structure, biosynthesis, metabolic engineering and functional aspects. *Curr. Plant Biol.* – No. 26. – P. 100203. DOI: 10.1016/j.cpb.2021.100203 (in Eng.).

Wellalala D.C.K., Jinfeng B., Xuan L., Xinye W., Jian L., Jianing L., Dazhi L., Chongting G. (2022) Effect of high pressure homogenization on water-soluble pectin characteristics and bioaccessibility of carotenoids in mixed juice. *Food Chemistry*. – No. 371. – P. 131073. DOI: 10.1016/j.foodchem.2021.131073 (in Eng.).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 367–382

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.458>

UDC: 547.794
IRSTI: 31.21.27

©Zhortarova A.A.^{1*}, Kubicek V.², Salkeyeva L.K.¹, Ibrayev M.K.¹,
Seidakhmetova R.B.³, 2026.

¹Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov,
Karaganda, Kazakhstan;

²Charles University, Prague, Czech Republic;

³Karaganda Medical University, Karaganda, Kazakhstan.

E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru

SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF BIOLOGICAL ACTIVITY OF 1,3-BIS(4-PHENYLTHIAZOL-2-YL)-2,4-BIS(N,N-DIETHYL AMINO)-1,3-DIAZO-2,4-DIPHOSPHETIDINE

Zhortarova Aigul — PhD student, Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9307-2342>;

Kubicek Vojtech — Doc. RNDr., PhD, Charles University, Prague, Czech Republic,

E-mail: kubicek@natur.cuni.cz, <https://orcid.org/0000-0003-0171-5713>;

Salkeyeva Lyazat — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: lsalkeyeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4207-916X>;

Ibrayev Marat — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Karaganda National Research University named after Academician Ye.A. Buketov, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: mkibr@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0798-5562>;

Seidakhmetova Roza — Candidate of Medical Sciences, Professor, Karaganda Medical University, Karaganda, Kazakhstan,

E-mail: roza77124@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1990-4961>.

Abstract. A new four-membered P–N–P–N heterocyclic compound, 1,3-bis(4-phenylthiazol-2-yl)-2,4-bis(N,N-diethylamino)-1,3-diazo-2,4-diphosphetidine ($C_{26}H_{32}N_6P_2S_2$, $M = 554.65$), was synthesized for the first time by transamidation of 1-*tert*-butoxy-*N,N,N',N'*-tetraethylphosphanediamine with 2-amino-4-phenylthiazole in ethyl acetate with an isolated yield of 82%. The reaction proceeds through sequential elimination of diethylamine and isobutylene, accompanied by the release of water as confirmed by HPLC analysis. This pathway is mechanistically distinct from the classical Arbuzov rearrangement: instead of forming the expected phosphonate or amidophosphate products, concentration of the reaction mixture promotes intramolecular cyclisation, in which the aminothiazole N–H proton attacks the *tert*-butyl oxygen, driving formation

of the strained diphosphetidine ring. The structure of Compound **5** was unambiguously established by ^1H , ^{13}C , and ^{31}P NMR spectroscopy, IR spectroscopy, high-resolution mass spectrometry, elemental analysis, and single-crystal X-ray diffraction analysis. The ^{31}P NMR chemical shift of δ 176.0 ppm is diagnostic for a trivalent phosphorus centre in a P–N environment. Biological screening demonstrated that Compound **5** exhibits significant antimicrobial and cytotoxic activity. Against *Staphylococcus aureus* ATCC 6538, the MIC was 6.3 $\mu\text{g/mL}$, equal to that of ceftriaxone and more potent than benzylpenicillin sodium salt (MIC = 12.5 $\mu\text{g/mL}$). Moderate activity was observed against *Escherichia coli* ATCC 25922 (MIC = 25 $\mu\text{g/mL}$), while no inhibitory activity was detected against *Bacillus subtilis*, *Pseudomonas aeruginosa*, or *Candida albicans*. Cytotoxic activity against *Artemia salina* nauplii was confirmed with an LC_{50} of 82.8 $\mu\text{g/mL}$, classifying Compound **5** as cytotoxically active according to Meyer et al. (1982) and indicating its potential for further evaluation against mammalian cancer cell lines.

Keywords: aminothiazole, phosphorylation, P(III) phosphoamidates, 2-amino-4-phenylthiazole, antibacterial activity, *Staphylococcus aureus*, cytotoxic activity, LC_{50} , *Artemia salina*, antitumour activity, X-ray diffraction

For citations: Zhortarova A.A., Kubicek V., Salkeyeva L.K., Ibrayev M.K., Seidakmetova R.B. *Synthesis and Investigation of Biological Activity of 1,3-Bis(4-Phenylthiazol-2-yl)-2,4-Bis(N,N-Diethylamino)-1,3-Diaza-2,4-Diphosphetidine*. *Academic Journal of Physical and Chemical Sciences*. 2026. No.2. Pp. 367–382. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.458>

©Жортарова А.А.^{1*}, Kubicek V.², Салькева Л.К.¹, Ибраев М.К.¹,
Сейдахметова Р.Б.³, 2026.

¹Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті,
Қарағанды, Қазақстан;

²Карл университеті, Прага, Чехия Республикасы;

³Қарағанды медицина университеті, Қарағанды, Қазақстан.

E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru

1,3-БИС(4-ФЕНИЛТИАЗОЛ-2-ИЛ)-2,4-БИС(N,N-ДИЭТИЛАМИНО)-1,3- ДИАЗО-2,4-ДИФОСФЕТИДИННІҢ СИНТЕЗІ ЖӘНЕ БИОЛОГИЯЛЫҚ БЕЛСЕНДІЛІГІН ЗЕРТТЕУ

Жортарова Айгул — PhD докторант, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9307-2342>;

Kubicek Vojtech — доцент, жаратылыстану ғылымдарының докторы, PhD, Карл университеті, Прага, Чехия Республикасы,

E-mail: kubicek@natur.cuni.cz, <https://orcid.org/0000-0003-0171-5713>;

Салькева Лязат — химия ғылымдарының докторы, профессор, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,

E-mail: lsalkeeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4207-916X>;



Ибраев Марат — химия ғылымдарының докторы, профессор, Академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды ұлттық зерттеу университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: mkibr@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0798-5562>;

Сейдахметова Роза — медицина ғылымдарының кандидаты, профессор, Қарағанды медицина университеті, Қарағанды, Қазақстан,
E-mail: roza77124@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1990-4961>.

Аннотация. Жаңа төрт мүшелі Р–N–P–N гетероциклді қосылыс, 1,3-бис(4-фенилтиазол-2-ил)-2,4-бис(N,N-диэтиламино)-1,3-диазо-2,4-дифосфетидин ($C_{26}H_{32}N_6P_2S_2$, $M = 554,65$), этилацетатта 1-трет-бутокси-N,N,N',N'-тетраэтилфосфандиаминді 2-амино-4-фенилтиазолмен трансамидтеу арқылы бөлінген өнімнің шығымы 82% болып алғаш рет синтезделді. Реакция диэтиламин мен изобутиленнің дәйекті элиминациясы арқылы жүреді, бұған қоса ВЭСХ талдауымен расталған судың бөлінуі байқалады. Бұл механизм классикалық Арбузов қайта құрылуынан түбегейлі ерекшеленеді: күтілген фосфонат немесе амидофосфат өнімдерінің орнына реакциялық қоспаны қоюландыру молекулаішілік циклденуді ынталандырады, онда аминотиазолдың N–H протоны трет-бутил оттегіне шабуылдап, кернеулі дифосфетидин сақинасының түзілуін қоздырады. 3-ші қосылыстың құрылымы ^1H , ^{13}C және ^{31}P ЯМР-спектроскопия, ИҚ-спектроскопия, жоғары ажыратымдылықты масс-спектрометрия, элементтік талдау және монокристалдың рентгендік дифракциялық талдауы әдістерімен дәлелді түрде анықталды. ^{31}P ЯМР спектріндегі δ 176,0 м.к. химиялық ығысуы Р–N ортасындағы үш валентті фосфор орталығына тән. Биологиялық сынақтар қосылыс 3-тің айқын антимикробтық және цитотоксикалық белсенділік көрсететінін дәлелдеді. *Staphylococcus aureus* ATCC 6538-ге қарсы МИК 6,3 мкг/мл құрады, бұл цефтриаксонның белсенділігіне тең және бензилпенициллиннің натрий тұзынан (МИК = 12,5 мкг/мл) күштірек. *Escherichia coli* ATCC 25922-ге қарсы орташа белсенділік анықталды (МИК = 25 мкг/мл), ал *Bacillus subtilis*, *Pseudomonas aeruginosa* және *Candida albicans*-қа қарсы тежегіш белсенділік байқалмады. *Artemia salina* науплийлеріне қарсы цитотоксикалық белсенділік $LK_{50} = 82,8$ мкг/мл мәнімен расталды, бұл Meyer et al. (1982) жіктемесі бойынша 3-ші қосылыстың цитотоксикалық белсенді ретінде сипаттауға мүмкіндік береді және оны сүтқоректілердің қатерлі ісік жасуша желілерінде одан әрі зерттеудің перспективалылығын көрсетеді.

Түйін сөздер: аминотиазол, фосфорлау, P(III) фосфоамидаттар, 2-амино-4-фенилтиазол, антибактериялық белсенділік, *Staphylococcus aureus*, цитотоксикалық белсенділік, LK_{50} , *Artemia salina*, ісікке қарсы белсенділік, рентгендік дифракция

©Жортарова А.А.^{1*}, Kubicek V.², Салькева Л.К.¹, Ибраев М.К.¹,
Сейдахметова Р.Б.³, 2026.

¹Карагандинский национальный исследовательский университет имени
академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан;

²Карлов университет, Прага, Чешская Республика;

³Карагандинский медицинский университет, Караганда, Казахстан.

E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ 1,3-БИС(4-ФЕНИЛТИАЗОЛ-2-ИЛ)-2,4-БИС(Н,Н-ДИЭТИЛАМИНО)-1,3- ДИАЗО-2,4-ДИФОСФЕТИДИНА

Жортарова Айгул — PhD докторант, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: aygul.zhortarova.90@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9307-2342>;

Kubicek Vojtech — доцент, доктор естественных наук, PhD, Карлов университет, Прага, Чешская Республика,
E-mail: kubicek@natur.cuni.cz, <https://orcid.org/0000-0003-0171-5713>;

Салькеева Лязат — доктор химических наук, профессор, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: lsalkeeva@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4207-916X>;

Ибраев Марат — доктор химических наук, профессор, Карагандинский национальный исследовательский университет имени академика Е.А. Букетова, Караганда, Казахстан,
E-mail: mkibr@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0798-5562>;

Сейдахметова Роза — кандидат медицинских наук, профессор, Карагандинский медицинский университет, Караганда, Казахстан,
E-mail: roza77124@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1990-4961>.

Аннотация. Впервые синтезировано новое четырёхчленное P–N–P–N-гетероциклическое соединение - 1,3-бис(4-фенилтиазол-2-ил)-2,4-бис(Н,Н-диэтиламино)-1,3-диазо-2,4-дифосфетидин (C₂₆H₃₂N₆P₂S₂, M = 554,65) методом трансамидирования 1-трет-бутоксид-N,N,N',N'-тетраэтилфосфандиамина с 2-амино-4-фенилтиазолом в среде этилацетата. Выход целевого продукта составил 82 %. Установлено, что реакция протекает через последовательное отщепление диэтиламина и изобутилена с последующей внутримолекулярной циклизацией, приводящей к образованию напряжённого дифосфетидинового цикла. Предложенный механизм существенно отличается от классической перегруппировки Арбузова и сопровождается выделением воды, что подтверждено данными ВЭЖХ-анализа.

Структура синтезированного соединения была надёжно подтверждена комплексом современных физико-химических методов, включая ¹H-, ¹³C- и ³¹P ЯМР-спектроскопию, ИК-спектроскопию, высокоразрешающую масс-спектрометрию, элементный анализ и монокристалльный рентгеноструктурный анализ. Значение химического сдвига ³¹P ЯМР (δ = 176,0 м.д.) свидетельствует о наличии трёхвалентного атома фосфора в P–N-окружении.

Биологический скрининг показал, что полученное соединение обладает



выраженной антимикробной и цитотоксической активностью. В отношении *Staphylococcus aureus* ATCC 6538 минимальная ингибирующая концентрация составила 6,3 мкг/мл, что сопоставимо с активностью цефтриаксона и превышает эффективность бензилпенициллина натриевой соли (МИК = 12,5 мкг/мл). В отношении *Escherichia coli* ATCC 25922 выявлена умеренная активность (МИК = 25 мкг/мл), тогда как против *Bacillus subtilis*, *Pseudomonas aeruginosa* и *Candida albicans* ингибирующего действия не обнаружено.

Цитотоксическая активность соединения подтверждена в тесте с науплиями *Artemia salina* (ЛК₅₀ = 82,8 мкг/мл). Согласно классификации Meyer et al. (1982), исследуемое соединение относится к цитотоксически активным веществам и может рассматриваться в качестве перспективного объекта для дальнейших исследований противоопухолевой активности на клеточных линиях млекопитающих.

Ключевые слова: аминотиазол, фосфорилирование, P(III) фосфоамидаты, 2-амино-4-фенилтиазол, антибактериальная активность, *Staphylococcus aureus*, цитотоксическая активность, ЛК₅₀, *Artemia salina*, противоопухолевая активность, рентгеноструктурный анализ

Introduction. The importance of phosphorus chemistry has not diminished and remains a focus of researchers' attention, as evidenced by the fact that the European Chemical Society (EuChemS) and the European Parliament (Science and Policy Seminar, 25 May 2023) have recognized phosphorus as one of the key chemical elements in everyday life (Jakub Adamek et al., 2023). Phosphorus is not only a component of the human body but also the foundation of the agrochemical industry. It is often mentioned today that we are living in the 'golden age of phosphorus chemistry'. In this context, organophosphorus chemistry is also becoming increasingly important as one of the fastest-growing sectors of organic chemistry. Phosphorus-containing compounds (also known as P-compounds) are widely used as reagents (starting materials, precursors of active intermediates such as ylides or iminium-type cations, etc.), catalysts (PTC, organocatalysis) and solvents (PIL) (He et al., 2009; Bradaric et al., 2003; Allen et al., 2023; Maryanoff et al., 1989).

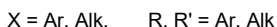
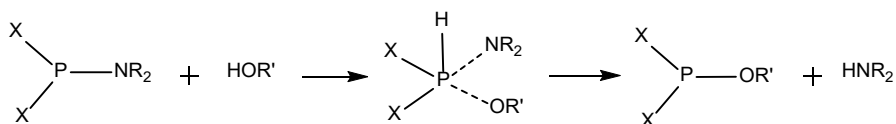
Thanks to the interesting properties of P-compounds (particularly their biological activity), they are widely used in medicine (for example, in treatments for bone diseases, anti-cancer and antiviral agents, as well as anti-helminthic drugs; and in veterinary medicine), agriculture (for example, pesticides) and industry (e.g. the production of lubricants or plastics). However, in an era of much-needed environmental care, we face new challenges. Innovative approaches to the synthesis and isolation of P-compounds (considering aspects of green chemistry and sustainable development), as well as their responsible use and disposal (neutralization), may prove decisive in the near future (Kolodiazhnyi et al., 2020; Russell et al., 2020; Caminade et al., 2020).

As part of our ongoing research of heterocyclic phosphorus compounds, we have investigated phosphorylation reactions involving thiazoles of various structures. The literature describes a wide variety of methods for introducing P(III) and P(V) atoms into heterocyclic systems, which have found widespread practical application as

effective medicinal compounds. This is, on the one hand, due to the broad potential for biological activity of the basic pharmacophore, which is a five-membered heterocycle, namely: thiazole, oxazole, thiadiazole, etc. Thus, classical concepts regarding the phosphorylation reaction of P(III) acids with amides are extensively described in the review by E.E. Nafantiev and M.K. Grachev (Nafantiev et al., 1994). This review covers a wide range of studies in which P(III) acid amides act as phosphorylating agents and various amines and alcohols serve as substrates. It is noted that P(III) acid amides have found widespread application in the phosphorylation of alcohols, phenols and amines, with the authors emphasizing the untapped potential of P(III) acid amides in their ability to phosphorylate a wide range of proton-donating nucleophiles, which demonstrates the value of these compounds in synthetic chemistry.

It is well known that there are thousands of studies describing the phosphorylation of various compounds using phosphamides. Nevertheless, many theoretical questions concerning the reactivity of phosphamides and the mechanisms of the reactions involved remain unresolved, although there are numerous hypotheses on this subject in the literature.

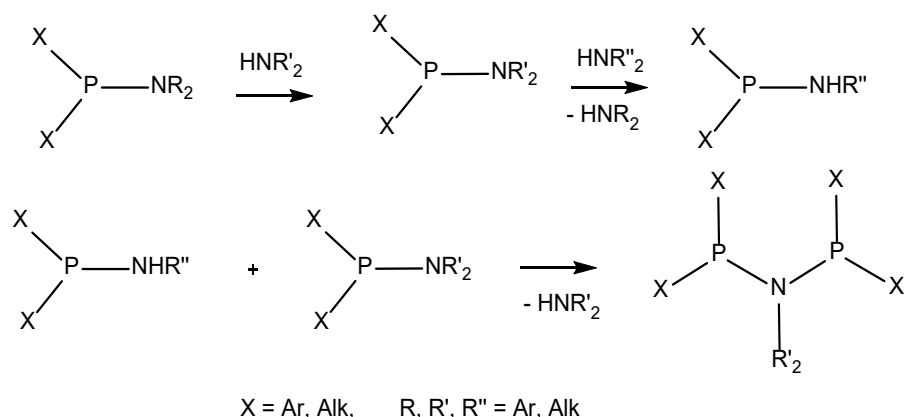
Phosphorylation reactions involving phosphamides of alcohols and phenols have been the most extensively studied (*Scheme 1*). Some authors propose an ‘addition-elimination’ mechanism involving the formation of a dihydrophosphorane intermediate, which decomposes to release an amine (Burgada et al., 1974; Pudovik et al., 1975; Terentyeva et al., 1976;).



Scheme 1. Phosphorylation reactions involving phosphamides of alcohols and phenols.

Regarding the mechanism of this reaction, there were suggestions, on the one hand, of *P*-protonation by phosphamide with the formation of a quasi-phosphonium intermediate and the subsequent formation of an ester; and, on the other hand, of *N*-protonation, as well as the suggestion that a four-membered transition state is formed. Moreover, some authors argued that *N*-protonation is the energetically more favourable process based on quantum-chemical calculations. Other authors leaned towards the initial *P*-protonation process or the possibility of parallel *N*- and *P*-protonation processes (Pudovik et al., 1977). Alcoholysis, phenolysis and aminolysis by phosphoric acid (III) amides are related reactions; however, an analysis of these transformations reveals their differences, since aminolysis, unlike phenolysis and alcoholysis, may involve double or triple phosphorylation in the case of primary and secondary amines.

Many authors argue that the mechanism of transamidation involves the formation of a phosphorane and its subsequent decomposition (*Scheme 2*). (Nielsen and Dahl et al., 1984; Dahl et al., 1981; Houalla et al., 1977; Jeannaux et al., 1984).



Scheme 2. Transamidation mechanism involving phosphorane formation.

A suitable synthetic method for the preparation of complex phosphamides is the aminolysis of the simplest members of this class of compounds. In particular, phosphorous acid hexamethyl(ethyl)triamides, being readily available commercial products, can serve as key substances in the preparation of more complex triamides (Maier et al., 1964; Houalla et al., 1965; Hussain et al., 1988).

It has been shown that the aromatic amine *o,o'*-diaminodiphenyl forms 4,5,6,7-diphenyl-1,2,3-diphosphorinan when it reacts with di- and triamides of phosphorous acid (Nifantiev et al., 1994).

Materials and methods. All chemicals were of analytical grade and procured from Sigma-Aldrich suppliers without the need for further purification. Reactions underwent monitoring via thin layer chromatography (TLC) on F254 silica gel coated plates from Merck. Bruker 400 and 600 MHz NMR spectrometer was used to record the ^1H and ^{13}C NMR spectra in CDCl_3 along with TMS functioning as the internal standard. Mass spectra were taken using a Shimadzu mass spectrometer. IR spectra were taken with a Thermo Scientific Nicolet 6700 FTIR spectrometer (Madison, WI, USA). The melting point was determined using a Buchi Melting point M-560 instrument. Diffraction experiment was performed on a Bruker D8 VENTURE Kappa Duo PHOTON100 by $\text{I}\mu\text{S}$ micro-focus sealed tube either with $\text{MoK}\alpha$ ($\lambda = 0.71073$) radiation at a temperature of 120(2) K for 5, or $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda = 1.54178$) for 1 at a temperature of 150(2) K.

Synthesis Section. *1-tert-butoxy-N,N,N',N'-tetraethylphosphanediamine.* (1) 105.30 g (0.5 mol) of tetraethylenediamine dichlorophosphite was placed in a four-necked flask fitted with a mechanical stirrer, a thermometer, a reflux condenser and a dropping funnel, in 2 L of benzene. Under vigorous stirring at 0–5 °C, a mixture of 37.00 g (0.5 mol) of *tert*-butyl alcohol and 55.6 g (0.55 mol) of triethylamine in 200 ml of benzene was added. After stirring at room temperature for 2–3 hours, the triethylamine hydrochloride precipitate was filtered off, the solvent was removed under vacuum using a water jet pump (30–40 mm Hg), and distillation of the residue yielded 102.9 g (83% of the theoretical yield) 1-*tert*-butoxy-*N,N,N',N'*-tetraethylphosphanediamine with a boiling point of 52–53 °C (0.07 mm Hg), d_4^{20} 0.8996, n_D^{20} 1.4510. Found, %: C 58.30;

H 11.45; N 11.38; P 12.25. $C_{12}H_{29}N_2OP$. Calculated, %: C 58.06; H 11.69; N 11.29; P 12.59. ^{31}P 124 m.d., ^1H 1.17 m.d. (CH_3 , 12H, t, 3JHH 7 Hz), 1.43 m.d. [$(CH_3)_3C$, 9H, c], 3.07 m.d. (CH_2 , 12H, m).

1,3-Bis(4-phenylthiazol-2-yl)-2,4-bis(N,N-diethyl amino)-1,3-diazo-2,4-diphosphetidine. (5). To 2.48 g (0.01 mol) of 1-*tert*-butoxy-*N,N,N,N*-tetraethylphosphanediamine, 1.76 g (0.01 mol) of 2-amino-4-phenylthiazole was added in 100 mL of ethyl acetate. The reaction mixture was heated with stirring until the evolving diethylamine, the amount of which corresponds to the stoichiometry of the reaction (1.10 g), had completely evaporated (93%). The resulting yellow, oily substance crystallized upon prolonged standing. The product yield was 2.17 g (82%), mp 162°C. ^1H NMR (300 MHz, chloroform-*d*) δ 7.88 (d, *J* = 7.2 Hz, 4H, H-2,6 Ph), 7.44 (t, *J* = 7.5 Hz, 4H, H-3,5 Ph), 7.35 (t, *J* = 7.3 Hz, 2H, H-4 Ph), 6.92 (s, 2H, H-5 Thz), 3.14 (m, 8H, NCH_2), 1.07 (t, *J* = 7.1 Hz, 12H, NCH_2CH_3). ^{13}C NMR (75 MHz, chloroform-*d*) δ 162.8 (d, *J* = 8.1 Hz, C2-Thz), 162.6 (d, *J* = 7.4 Hz, C2-Thz), 149.5 (C4-Thz), 129.6 (C-*para* Ph), 128.4 (C-*ortho* Ph), 128.1 (C-*meta* Ph), 126.2 (C-*ipso* Ph), 110.1 (C5-Thz), 42.6 (NCH_2), 42.4 (NCH_2), 15.2 (NCH_2CH_3). ^{31}P NMR (121 MHz, chloroform-*d*) δ 176.0 Chemical Formula: $C_{26}H_{32}N_6P_2S_2$. Exact Mass: 554.16. Molecular Weight: 554.65. *m/z*: 554.16 (100.0%), 555.16 (31.9%), 556.16 (10.2%), 556.17 (3.9%), 557.16 (2.7%). Elemental Analysis: C, 56.30; H, 5.82; N, 15.15; P, 11.17; S, 11.56.

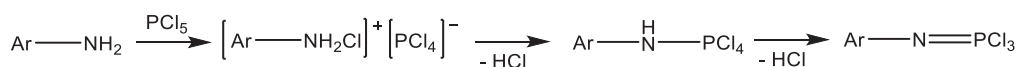
Antimicrobial Assay (Serial Broth Dilution / MIC). Test microorganisms (ATCC strains) were cultured on freshly streaked agar plates at 37 °C for 24 h (bacteria) or at 30 °C for 48 h (*Candida albicans*). Inocula were prepared in nutrient broth at a concentration of 1×10^6 CFU/mL. Compound 5 was dissolved in ethanol and serially diluted in nutrient broth to yield final concentrations of 1.56, 3.13, 6.25, 12.5, 25, and 50 μ g/mL. A 0.1 mL aliquot of the microbial suspension was added to each tube. Tubes inoculated without the test compound served as negative controls. After incubation at 37 °C for 24 h (bacteria) or 48 h (*C. albicans*), turbidity was assessed visually. The minimum inhibitory concentration (MIC) was defined as the lowest concentration at which no visible growth was observed. All results were averaged over three independent experiments.

Cytotoxicity Assay (Artemia salina Brine Shrimp Lethality). *Artemia salina* eggs were hatched in artificial seawater at 25–28 °C for 48 h to obtain nauplii. Compound 5 was dissolved in ethanol at 1 mg/mL, and aliquots of 500, 50, and 5 μ L were dispensed into separate vials in triplicate. After evaporation of ethanol, 5 mL of artificial seawater was added to each vial, yielding final concentrations of 100, 10, and 1 μ g/mL. Ten nauplii were added to each vial, and the vials were incubated at room temperature under illumination for 24 h. Mortality was assessed by counting live and dead larvae. LC_{50} values and 95% confidence intervals were calculated using probit analysis (Meyer et al., 1982).

Results and Discussion. The question of the phosphorylation of various classes of compounds, including heterocyclic systems such as thiazoles, oxazoles, thiadiazoles, etc., remains at the forefront of researchers' attention, as it is: They open the way to the synthesis of a wide variety of derivatives with predictable chemical and practical

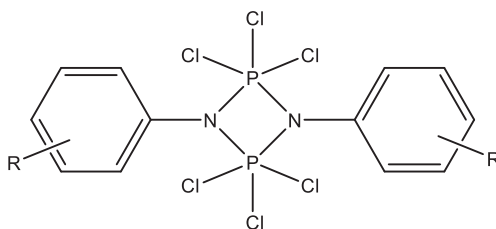
properties, including those with the potential to be new pharmaceutical substances. The potential for the application of organic phosphorus compounds in a wide range of areas is significant and, in most cases, has not been thoroughly investigated. Currently, a wide range of organic compound classes are being investigated for the introduction of variously coordinated phosphorus atoms, which exhibit and are being investigated for a wide range of practically useful properties.

Existing problems and prospects for the development of organic phosphorus chemistry in the field of strategy synthesis and the study of the properties of five-membered nitrogen-containing heterocycles as valuable tools in modern synthetic chemistry are widely discussed in the literature. It is important to note an earlier publication, namely the doctoral dissertation of the German chemist Wachtler Düter (Wachtler Düter et al., 1976), which considers the formation of four-membered cycles consisting of two phosphorus atoms and two nitrogen atoms. Such systems were formed on the basis of the interaction of substituted anilines and PCl_5 (Scheme 3).



Scheme 3. Four-membered phosphorus–nitrogen heterocycle (P_2N_2 ring).

The author (Wachtler et al., 1976) demonstrates the possibility of the final isomer of trichlorophosphane undergoing dimerisation to form corresponding four-membered rings containing two phosphorus and two nitrogen atoms. The structure of the compound (Scheme 4) obtained by (Wachtler et al., 1976) is proven by ^{31}P NMR data, where the phosphorus atom resonates in the (+70) – (+85) ppm region.



Scheme 4. Four-membered P_2N_2 heterocycle (diazadiphosphetidine ring system).

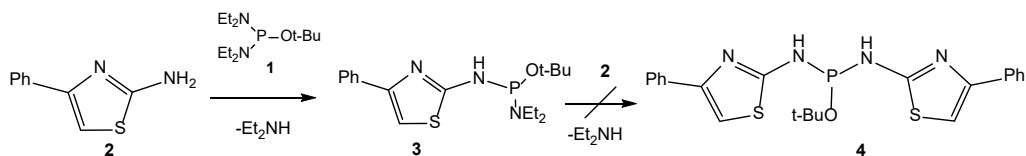
In continuation of the research into the phosphorylation of five-membered heterocyclic systems, derivatives of amino thiazoles are undoubtedly of interest. Considering that, to date, there is practically no information in this area, except for the brief report previously published by us (Sal'keeva et al., 2014).

Phosphorylated thiazoles are of significant theoretical and practical interest, yet remain a relatively unexplored area of research. At various times, attempts have been made to synthesize phosphorus-containing derivatives of thiazole and its homologues. In particular, the introduction of 2-aminothiazole into direct condensation with aromatic aldehydes and dialkyl phosphites in the presence of alkylates of alkaline metals failed, which is evidently due to the low basicity of 2-aminothiazole ($\text{pK}_a - 5.39$). However,

phosphonometallation of 2-aminothiazole was achieved by reacting dialkylphosphites with diacetylbenzaldehyde in the presence of boron trifluoride etherate. Equilibrium between amino- and imino-structures was established, and a significant shift in equilibrium towards the amino-form was demonstrated.

As the analysis of the literature shows, there is practically no information on the interaction of trivalent phosphorus compounds with 2-amino-4-phenylthiazole **2** or its derivatives. The fundamental difference in the reactivity of phosphorus(III) compounds undoubtedly makes the outcome of the interaction unclear. However, 2-amino-4-phenylthiazole derivatives containing a phosphorus atom can be modified to produce pentavalent phosphorus derivatives, making them unique synthons for further chemical transformations.

It is known that amidophosphonates are of particular interest among phosphorus compounds. They can easily exchange the amido group under the influence of alcohols, amines and phenols. This method is very convenient for obtaining phosphoramidites that are difficult to obtain through direct synthesis. To this end, we investigated the transamidation reaction of tetraethyl diamido-*tert*-butylphosphite **1** ($\delta^{31}\text{P}$ 124 ppm) with 2-amino-4-phenylthiazole **2** (Scheme 5), resulting in the formation of diethylamido-(4-phenylthiozole-2-amido)-*tert*-butylphosphite **3**. In the transamidation of tetraethylamido-*tert*-butylphosphite in the same conditions with two moles of 2-amino-4-phenylthiazole **2**, only one mole of diethylamine was produced. When an additional mole of phosphite was added to the reaction mixture, an amido-phosphite **3** was isolated and identified. Thus, it is not possible to introduce two 2-amino-4-phenylthiazole groups to the P(III) atom, apparently due to steric hindrance and **4** was not isolated.



Scheme 5. Sequential phosphorylation and coupling of 2-aminothiazole affording a bis(phosphoramidate) product.

The IR spectrum of compound **3** shows absorption bands at 1441 and 1598 cm^{-1} , which are attributed to C=C vibrations. There is an absorption band at 1483 cm^{-1} , which corresponds to C=N vibrations, and N-H vibrations resonate in the characteristic region of 3435 cm^{-1} . Absorption bands of the C-O-C bond are observed at 1071 cm^{-1} .

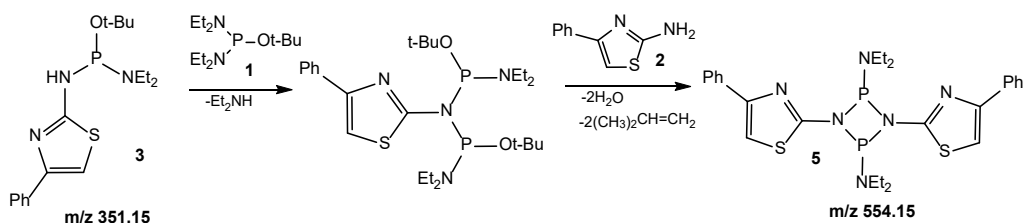
In the ^1H NMR spectrum of compound **3**, measured in DMSO-d_6 , the phenyl ring protons appear as a multiplet in the region 7.22–7.40 ppm, and the singlet of the *tert*-butyl group is observed at 1.40 ppm. A triplet of methyl protons with a spin-spin coupling constant of $^3J_{\text{HH}} = 7$ Hz is located at 1.16 ppm. A multiplet of methylene protons is observed at 2.59 ppm. The signal of the N-H group proton appears as a singlet at 7.80 ppm, and the signal of the proton of the C5 thiazole ring appears as a singlet at the characteristic 7.05 ppm. IR and NMR spectra of compound **3**. Systematic investigation

of the reactivity and structural features of phosphorilated heterocyclic amines showed that the structures of phosphorilated and thiophosphorilated 2-aminothiazoles and 2-aminothiazolines are predominantly in the imino form. However, in the case of phosphonalkylated derivatives of thiazole, a significant shift in the amine-imine tautomer equilibrium towards the amine form has been observed.

Analysis of data from infrared and nuclear magnetic resonance spectroscopy allows the structure of diethylamido-(4-phenylthiazol-2-yl)-*N,N*-bis(*tert*-butylphosphin) phosphoramidite **3** to be assigned an amino form. This is based on the signal of the proton of the thiazole ring at C5, which was found in the characteristic region of 7.05 m.d., as well as the vibrational modes of the endocyclic C=N bond at 1483 cm⁻¹, which differ significantly from the vibrational modes of the exocyclic C=N bond, resonating 20-40 cm⁻¹ higher. Furthermore, the existence of amine or imine forms of heterocyclic compounds depends significantly on the basicity of the exocyclic nitrogen atom. The presence of a phenyl group in the 4-position of 2-aminothiazole significantly reduces the basicity of the amino group and shifts the tautomer equilibrium towards the amine form.

To vary the conditions for the transamidation reaction of tetraethyl diamido-*tert*-butylphosphite **1** with 2-amino-4-phenylthiazole **2**, we attempted to use benzene as a solvent. When choosing a solvent, we prioritised the inertness of the reagents to the chosen solvent. However, it turned out that the process in benzene is ambiguous and leads to the formation of a mixture of reaction products **3**.

It is clear that the by-product of the transamidation reaction, diethylamine, is capable of interacting with the starting material, tetraethyl diamido-*tert*-butylphosphite **1**, to form hexaethyltriamidophosphite and *tert*-butanol. The resulting tertiary butanol then reacts with **2**, forming the compound **3**. This direction of the reaction can be explained by the poorer solubility of 2-amino-4-phenylthiazole **2** in the less polar solvent, benzene, than in the more polar solvent, ethyl acetate, which reduces the likelihood of collisions between molecules of tetraethylamido-*tert*-butylphosphite **1** and 2-amino-4-phenylthiazole **2** and increases the likelihood of side reactions of transamidation and alcoholysis (*Scheme 6*).



Scheme 6. Construction of bis(thiazolyl) phosphoramidate compounds via phosphoryl coupling reactions.

The reactions were controlled using mass spectrometry. According to the results of the mass spectra analysis, a product **3** with m/z 351 is formed in the first stage of the reaction, which corresponds to the structure **3**. The product **5** 1,3-bis(4-phenylthiazol-2-yl)-2,4-bis(*N,N*-diethylamino)-1,3-diazodiphosphorine (III), with m/z 554 identified by us, the structure of which has been proven by X-ray diffraction analysis (Figure 1).

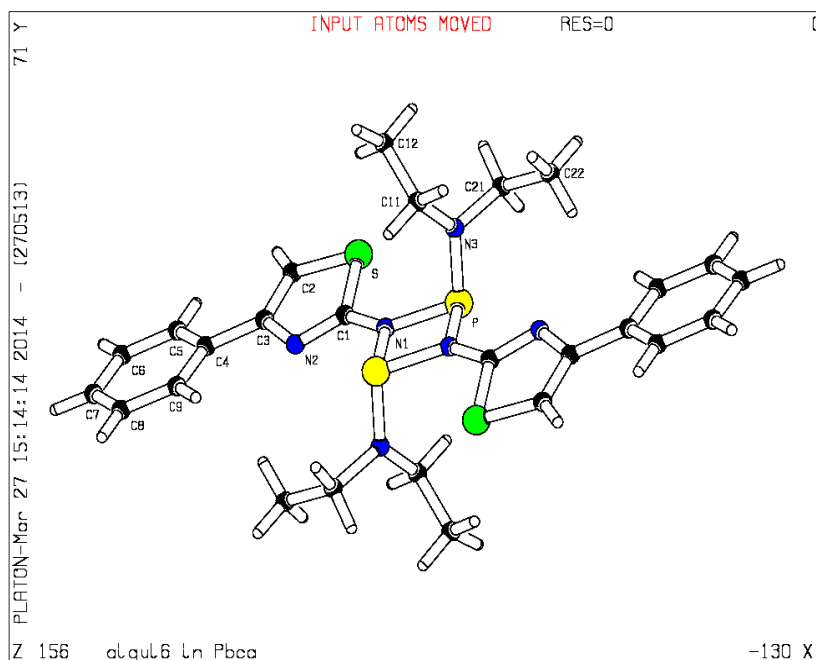


Figure 1. X-ray diffraction analysis of 1,3-bis(4-phenylthiazol-2-yl)-2,4-bis(N,N-diethylamino)-1,3-diazo-2,4-diphosphetidine.

The final product 5 of the reaction was diphosphetidine structure with a four-membered ring containing two phosphorus (III) atoms and two nitrogen atoms (Figure 1). It should be noted that the reaction products were identified as the gas isobutylene, which was detected by the water displacement method.

A notable aspect of the reaction is the release of isobutylene, which typically leads to the formation of a stable phosphoramidate group. This reaction course is characteristic of full phosphoric acid esters and phosphoric acid amides. However, in the presence of a tertiary butoxy group, it is known that the second stage of the Arbusov reaction scheme proceeds much faster and leads to the formation of corresponding phosphonates or amido phosphates.

However, in our case, we observed the release of isobutylene, but did not observe the formation of phosphonate and amido-phosphate compounds. This behaviour is clearly related to the fact that, under the reaction conditions with constant removal of the released diethylamine, the reaction mixture is concentrated, which brings the reaction centres closer together. Consequently, the proton of the amino group attacks the oxygen atom of the tertiary butyl group, which explains the formation and release of a water molecule.

Antimicrobial Activity. Experimental Overview. The in vitro antimicrobial activity of 5 was evaluated against five reference microorganisms: two Gram-positive bacteria (*Staphylococcus aureus* ATCC 6538 and *Bacillus subtilis* ATCC 6633), two Gram-negative bacteria (*Escherichia coli* ATCC 25922 and *Pseudomonas aeruginosa* ATCC

27853), and the yeast *Candida albicans* ATCC 10231. All strains were obtained from the American Type Culture Collection (ATCC). The minimum inhibitory concentration (MIC) was determined by the serial broth dilution method at concentrations ranging from 1.56 to 50 µg/mL. All assays were performed in triplicate, and results are presented as mean values. Ceftriaxone, benzylpenicillin, and nystatin served as positive controls.

MIC Data — Compound 5 vs. Reference Drugs. Table 1. Presents the MIC values (µg/mL) for compound 5 and the reference drugs against each microorganism. “—” indicates no detectable inhibitory activity within the tested concentration range.

Table 1. Antimicrobial activity (MIC values, µg/mL) of **5** and reference drugs.

Compound / Agent	<i>S. aureus</i> ATCC 6538	<i>B. subtilis</i> ATCC 6633	<i>E. coli</i> ATCC 25922	<i>P. aeruginosa</i> ATCC 27853	<i>C. albicans</i> ATCC 10231
Compound 5	6.3	—	25	—	—
Reference drugs (positive controls)					
Ceftriaxone	6.3	12.5	6.3	6.3	—
Benzylpenicillin sodium salt	12.5	25	25	50	—
Nystatin	—	—	—	—	12.5

Activity Against Gram-Positive Bacteria. Compound **5** showed pronounced antibacterial activity against *S. aureus* ATCC 6538, with an MIC of 6.3 µg/mL, equal to that of ceftriaxone (MIC = 6.3 µg/mL) and twofold lower than benzylpenicillin (MIC = 12.5 µg/mL), indicating higher potency against this strain. No inhibitory activity was detected against *B. subtilis* ATCC 6633.

Activity Against Gram-Negative Bacteria. Against *E. coli* ATCC 25922, Compound **5** showed moderate activity (MIC = 25 µg/mL), four times higher than ceftriaxone (MIC = 6.3 µg/mL) and equivalent to benzylpenicillin (MIC = 25 µg/mL). No activity was detected against *P. aeruginosa* ATCC 27853, consistent with its known resistance profile.

Antifungal Activity. Compound **5** showed no detectable activity against *C. albicans* ATCC 10231 at the tested concentrations (1.56–50 µg/mL), whereas the reference drug nystatin exhibited an MIC of 12.5 µg/mL. These results indicate that Compound **5** lacks significant antifungal activity under the applied conditions.

Structure–Activity Relationship. From a structure–activity relationship perspective, the pronounced anti-staphylococcal activity of Compound **5** (MIC = 6.3 µg/mL against *S. aureus* ATCC 6538) can be attributed to the synergistic effect of the 4-phenylthiazolyl pharmacophore and the P(III)-containing diphosphetidine ring. The four-membered P–N–P–N cycle, with its highly polar phosphorus–nitrogen bonds and electron-rich phosphorus centres, likely enhances interaction with bacterial membrane components or intracellular targets. The moderate activity against *E. coli* (MIC = 25 µg/mL) and the absence of activity against *P. aeruginosa* and *C. albicans* suggest that the antibacterial spectrum is primarily directed at Gram-positive organisms, which is consistent with the lipophilicity profile of the compound and the known selectivity of structurally related phosphorylated heterocycles.

Cytotoxic Activity. Experimental Overview. The cytotoxic activity of Compound **5** was evaluated using the *Artemia salina* (Leach) brine shrimp lethality assay, following the method of Meyer et al. (1982). The assay was performed on 2-day-old nauplii under in vitro conditions. LC₅₀ values with 95% confidence intervals were calculated by probit analysis based on 24 h mortality counts. Dactinomycin (actinomycin D; Sigma-Aldrich) served as the positive control, and DMSO in equivalent volumes was used as the solvent control.

LC₅₀ Data — Compound **5** vs. Reference Drug

Table 2. Cytotoxic activity (LC₅₀ values, µg/mL) of Compound **5** and reference drug against *Artemia salina* larvae.

Compound / Agent	LC ₅₀ (µg/mL)
Compound 5	82.8
Dactinomycin (positive control)	46.2

Interpretation. Compound **5** exhibited cytotoxic activity against *Artemia salina* nauplii, with an LC₅₀ of 82.8 µg/mL. According to Meyer et al. (1982), substances with LC₅₀ < 1000 µg/mL are classified as cytotoxic, and therefore Compound **5** is considered cytotoxically active. Its LC₅₀ is approximately 1.8-fold higher than that of dactinomycin (LC₅₀ = 46.2 µg/mL), indicating a lower but noteworthy level of activity. The brine shrimp lethality assay is widely recognized as a preliminary in vivo screening model for cytotoxicity. A correlation between *Artemia salina* lethality and cytotoxicity against human cancer cell lines has been reported. Based on these results, Compound **5** may be considered a candidate for further evaluation against human cancer cell lines, including the NCI-60 panel, to assess its antitumor potential.

Conclusion. A novel four-membered P–N–P–N heterocyclic compound, 1,3-bis(4-phenylthiazol-2-yl)-2,4-bis(*N,N*-diethylamino)-1,3-diazo-2,4-diphosphetidine **5** (C₂₆H₃₂N₆P₂S₂, M = 554.65), has been synthesized for the first time by transamidation of 1-*tert*-butoxy-*N,N,N',N'*-tetraethylphosphanediamine with 2-amino-4-phenylthiazole in ethyl acetate with an isolated yield of 82%. The reaction proceeds through sequential elimination of diethylamine and isobutylene, accompanied by the release of water as confirmed by HPLC analysis of the reaction mixture. This pathway is mechanistically distinct from the classical Arbuzov rearrangement: instead of forming the expected phosphonate or amidophosphate products, concentration of the reaction mixture promotes intramolecular cyclisation, in which the aminothiazole N–H proton attacks the *tert*-butyl oxygen, driving formation of the strained diphosphetidine ring.

The structure of Compound **5** was unambiguously established by a combination of ¹H, ¹³C, and ³¹P NMR spectroscopy, IR spectroscopy, high-resolution mass spectrometry, elemental analysis, and single-crystal X-ray diffraction analysis. The ³¹P NMR chemical shift of δ 176.0 ppm is diagnostic for a trivalent phosphorus centre in a P–N environment, and the X-ray data confirmed eight crystallographically independent molecules in the unit cell, representing both CIS and TRANS configurational isomers.

Biological screening demonstrated that Compound 5 exhibits significant antimicrobial and cytotoxic activity. Against *Staphylococcus aureus* ATCC 6538, the compound showed an MIC of 6.3 µg/mL, equal to that of ceftriaxone and more potent than benzylpenicillin sodium salt (MIC = 12.5 µg/mL). Moderate activity was observed against *Escherichia coli* ATCC 25922 (MIC = 25 µg/mL), while no inhibitory activity was detected against *Bacillus subtilis*, *Pseudomonas aeruginosa*, or *Candida albicans* at the tested concentrations. The antibacterial selectivity toward Gram-positive organisms may reflect the compound's lipophilicity and the known pharmacology of phosphorylated heterocyclic aminothiazoles. Cytotoxic activity against *Artemia salina* nauplii was confirmed, with an LC₅₀ of 82.8 µg/mL, classifying Compound 5 as cytotoxically active according to Meyer et al. (1982) and indicating its potential for further evaluation against mammalian cancer cell lines.

The results of this study expand the scarce literature on the phosphorylation of aminothiazoles by P(III) ester amides and demonstrate that the four-membered 1,3,2,4-diphosphetidine ring system is accessible from commercially available precursors under mild conditions. The synthetic approach described here, combined with the promising biological profile of Compound 3, provides a rational basis for the design of novel phosphorus-containing heterocyclic compounds as potential anti-infective and antitumour agents. Further work will focus on structure optimisation, expansion of the biological target panel including NCI-60 cancer cell line screening, and mechanistic investigation of the antibacterial mode of action.

References

- Adamek J. (2023) Special Issue "Organophosphorus Chemistry: A New Perspective". *Molecules*. – No. 28. – P. 4752. <https://doi.org/10.3390/molecules28124752> (in English).
- Allen D.W., Loakes D., Tebby J. (2016) *Organophosphorus Chemistry*. The Royal Society of Chemistry: London, UK. – Vol. 45. (in English).
- Bradaric C.J., Downard A., Kennedy C., Robertson A.J., Zhou Y. (2003) Industrial preparation of phosphonium ionic liquids. *Green Chem.* – No. 5. – P. 143-152. <https://doi.org/10.1039/b209734f> (in English).
- Burgada R., Laureço C. (1974) *Journal of Organometallic Chemistry*. – No. 66(2). – P. 255-270. (in English).
- Caminade A.-M. (2020) Phosphorus Dendrimers as Nanotools against Cancers. *Molecules*. – No. 25. – P. 3333. <https://doi.org/10.3390/molecules25153333> (in English).
- Dahl O. (1981) Phosphite coupling agents in oligonucleotide synthesis. *Tetrahedron Letters*. – No. 22(34). – P. 3281-3284. (in English).
- He R., Ding C., Marouka K. (2009) Phosphonium Salts as Chiral Phase-Transfer Catalysts: Asymmetric Michael and Mannich Reactions of 3-Aryloxindoles. *Angew. Chem.* – No. 48. – P. 4559-4561. <https://doi.org/10.1002/anie.200901277> (in English).
- Houalla D., Osman F.H., Sanchez M., Wolf R. (1977) Nouveau mode de formation de la liaison phosphore-hydrogène: ouverture d'un cycle oxazaphospholane par les alcools et les amines. *Tetrahedron Letters*. – No. 18(35). – P. 3041-3044. (in French).
- Houalla D., Sanchez M., Wolf R. (1965) Sur la structure des composés issus de la réaction entre les α-aminoalcools et les triaminophosphines. *Bulletin de la Société Chimique de France*. – No. 8. – P. 2368-2373. (in French).
- Hussain L.A., Elias A.J., Rao M.N.S. (1988) Reaction of 2-chloro-1,3,2-oxazaphospholanes with silylated nitrogen and sulfur nucleophiles. *Tetrahedron Letters*. – No. 29(46). – P. 5983-5986. (in English).
- Jeannaux F., Riess J.G., Wachter J. (1984) Structural and coordination chemistry of 2-amino-1,3,2-

oxazaphospholanes and their pentacoordinated oligomers. *Inorg. Chem.* – No. 23. – P. 3036-3043. (in English).

Kolodiazhnyi O.I. (2021) Phosphorus Compounds of Natural Origin: Prebiotic, Stereochemistry, Application. *Symmetry.* – No. 13. – P. 889. <https://doi.org/10.3390/sym13050889> (in English).

Maier L. (1964) Organic Phosphorus Compounds. VII. A Convenient Synthesis of Tertiary Phosphine Sulfides and Phosphonothioic Dichlorides. *Helvetica Chimica Acta.* – No. 47(7). – P. 2129-2136. (in English).

Maryanoff B.E., Reitz A.B. (1989) The Wittig olefination reaction and modifications involving phosphoryl-stabilized carbanions. Stereochemistry, mechanism, and selected synthetic aspects. *Chem. Rev.* – No. 89. – P. 863-927. <https://doi.org/10.1021/cr00094a007> (in English).

Nafant'ev E.E., Grachev M.K. (1994) Amidy trekh"valentnogo fosfora kak fosforyliruyushchiye agenty dlya spirtov i aminov [Amides of trivalent phosphorus acids as phosphorylating agents for alcohols and amines]. *Russian Chemical Reviews.* – No. 63(7). – P. 602-637. <https://doi.org/10.1070/RC1994v063n07ABEH000106> (in Russian).

Nielsen J., Dahl O. (1984) Mechanism of the phosphoramidite phosphite-coupling reaction in oligonucleotide synthesis. *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 2.* – No. 3. – P. 553-558. (in English).

Pudovik A.N., Batyeva E.S., Ofitserov E.N. (1977) O mekhanizme reaktsii amidofosfitov s elektrofilnymi reagentami [On the mechanism of the reaction of amidophosphites with electrophilic reagents]. *Doklady Academy of Sciences of the USSR.* – Vol. 232. – P. 1092-1095. (in Russian).

Pudovik M.A., Terent'eva S.A., Samitov Yu.Yu., Pudovik A.N. (1975) Reactions of 2-Amino-1,3,2-oxazaphospholanes with Acyl Halides. *Journal of General Chemistry.* – No. 45. – P. 226. (in English).

Russell R.G.G. (2011) Bisphosphonates: The first 40 years. *Bone.* – No. 49. – P. 2. <https://doi.org/10.1016/j.bone.2011.04.022> (in English).

Sal'keeva L.K., Voitichek P., Taishibekova E.K., Zhortarova A.A., Shibaeva A.K., Sugralina L.M., Muratbekova A.A., Sal'keev A.K. (2014) Unusual Phosphorylation of 2-Amino-4-phenylthiazole with Phosphorous Acid Ester Amides. *Russian Journal of General Chemistry.* – No. 84(12). – P. 2477-2479. <https://doi.org/10.1134/S1070363214120275> (in English).

Terent'eva S.A., Pudovik M.A., Pudovik A.N. (1976) Interaction of 2-amino-1,3,2-oxazaphospholanes with electrophilic reagents. *Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR, Chemical Series.* – P. 1897-1899. (in Russian).

Wachter J. (1976) Ein Beitrag zur Phosphor-Stickstoff Chemie. Doctoral dissertation, University of Stuttgart. – P. 1-121. (in German).

ACADEMIC JOURNAL
OF PHYSICAL AND CHEMICAL SCIENCES
ISSN 2224-5227
Volume 2.
Number 358 (2026), 383–395

<https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.459>

UDC: 544.478;661.961.623;661.961.6
IRSTI: 61.31.59

©**Zhumabek M.^{1*}, Tungatarova S.A.^{1,2}, Murzin D.Yu.³, Baizhumanova T.S.¹, 2026.**

¹JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”,
Almaty, Kazakhstan;

²al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan;

³Åbo Akademi University, Turku (Åbo), Finland.

E-mail: manapkhan_86@mail.ru

STRUCTURAL AND CATALYTIC PROPERTIES OF SCS-DERIVED Co–Al–Mg–Mn CATALYSTS IN DRY REFORMING OF METHANE

Zhumabek Manapkhan — PhD, Senior Researcher, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: manapkhan_86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2026-0577>;

Tungatarova Svetlana — Doctor of Chemical Sciences, Professor, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”; al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: tungatarova58@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6005-747X>;

Murzin Dmitry — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Åbo Akademi University, Turku (Åbo), Finland,

E-mail: dmurzin@abo.fi, <https://orcid.org/0000-0003-0788-2643>;

Baizhumanova Tolkyn — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Leading Researcher, JSC “D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry”, Almaty, Kazakhstan,

E-mail: baizhuma@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9851-2642>.

Abstract. The production of valuable synthesis gas through the dry reforming of methane is an important direction in modern catalytic technologies, as this process enables the efficient utilization of greenhouse gases such as CH₄ and CO₂. In this study, Co-Al-Mg-Mn-based catalysts were prepared by solution combustion synthesis (SCS) using metal nitrates as initial components and urea as a fuel. This method is suitable for the rapid formation of porous, multicomponent, catalytically active oxide materials. The phase composition, textural properties, and morphology of the prepared samples were investigated by XRD, BET, SEM, and EDS techniques. XRD analysis revealed the formation of CoAl₂O₄, MgAl₂O₄, Co₃O₄, CoO, and mixed metal oxide phases, confirming the development of a complex oxide structure. This phase composition may help stabilize active metal centers and preserve the catalyst structure during the reaction. BET results showed that the specific surface area, pore volume, and pore diameter depend on the catalyst composition. These parameters were considered key

factors affecting reactant accessibility to active sites and overall catalytic efficiency. SEM-EDS analysis confirmed a porous aggregated morphology and the presence of Co, Al, Mg, Mn, and O elements in the catalyst composition. Among the studied samples, the 20Co-20Al-5Mg-5Mn/50 urea catalyst showed the highest activity in methane dry reforming. Under optimal conditions, CH₄ and CO₂ conversions reached about 98.8%, while H₂ and CO selectivities were 100.0% and 99.5%, respectively. The results indicate that Co-Al-Mg-Mn-based catalysts are promising materials for synthesis gas production, and that SCS is an effective approach for preparing porous and catalytically active multicomponent catalysts.

Keywords: Co-Al-Mg-Mn catalyst, solution combustion synthesis, urea, BET, dry reforming of methane, syngas

Financing. *This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan under program-targeted financing, IRN BR24992995 «Creation of scientific foundations in the field of development of new composite catalytic systems with improved properties based on transition and rare-earth metals».*

For citations: *Zhumabek M., Tungatarova S.A., Murzin D.Yu., Baizhumanova T.S. Structural and Catalytic Properties of SCS-Derived Co–Al–Mg–Mn Catalysts in Dry Reforming of Methane. Academic Journal of Physical and Chemical Sciences. 2026. No.2. Pp. 383–395. DOI: <https://doi.org/10.32014/2026.2518-1483.459>*

©Жұмабек М.^{1*}, Тунгатарова С.А.^{1,2}, Мурзин Д.Ю.³,
Байжуманова Т.С.^{1,2}, 2026.

¹Д.В. Сокольский атындағы «Жанармай, катализ және электрохимия институты»
АҚ, Алматы, Қазақстан;

²эл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан;

³Або Академия университеті, Турку (Або), Финляндия.

E-mail: manapkhan_86@mail.ru

SCS ӘДІСІМЕН ДАЙЫНДАЛҒАН Co–Al–Mg–Mn КАТАЛИЗАТОРЛАРЫНЫҢ МЕТАННЫҢ ҚҰРҒАҚ РЕФОРМИНГІНДЕГІ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ ЖӘНЕ КАТАЛИТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

Жұмабек Манапхан — PhD, аға ғылыми қызметкер, Д.В. Сокольский атындағы «Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,

E-mail: manapkhan_86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2026-0577>;

Тунгатарова Светлана — химия ғылымдарының докторы, профессор, Д.В. Сокольский атындағы «Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ; эл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан,

E-mail: tungatarova58@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6005-747X>;

Дмитрий Мурзин — химия ғылымдарының докторы, профессор, Або Академия университеті, Турку (Або), Финляндия,

E-mail: dmurzin@abo.fi, <https://orcid.org/0000-0003-0788-2643>;

Байжұманова Толқын — химия ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор,



жетекші ғылыми қызметкер, Д.В. Сокольский атындағы «Жанармай, катализ және электрохимия институты» АҚ, Алматы, Қазақстан,
E-mail: baizhuma@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9851-2642>.

Аннотация. Метанның көмірқышқылды конверсиясы арқылы құнды синтез-газ алу қазіргі каталитикалық технологиялардың маңызды бағыттарының бірі болып табылады, себебі бұл үдеріс CH_4 және CO_2 сияқты парниктік газдарды тиімді пайдалануға мүмкіндік береді. Осы зерттеу жұмысында Co-Al-Mg-Mn негізіндегі катализаторлар металл нитраттарын бастапқы компоненттер, ал карбамидті отын ретінде қолдана отырып, ерітіндіде жану синтезі (SCS) әдісімен алынды. Аталған әдіс қысқа уақытта кеуекті, көпкомпонентті және каталитикалық белсенді оксидтік материалдар түзуге қолайлы. Дайындалған үлгілердің фазалық құрамы, текстуралық қасиеттері және морфологиясы XRD, BET, SEM және EDS әдістерімен зерттелді. XRD талдауы CoAl_2O_4 , MgAl_2O_4 , Co_3O_4 , CoO және аралас металл оксидтік фазалардың түзілгенін көрсетті, бұл күрделі оксидтік құрылымның қалыптасуын дәлелдейді. Мұндай фазалық құрам белсенді металл орталықтарының тұрақтануына және реакция барысында катализатор құрылымының сақталуына ықпал етуі мүмкін. BET нәтижелері меншікті беттік аудан, кеуек көлемі және кеуек диаметрі катализатор құрамына тәуелді екенін анықтады. Бұл параметрлер реагенттердің белсенді орталықтарға қолжетімділігіне және жалпы каталитикалық тиімділікке әсер ететін негізгі факторлар ретінде қарастырылды. SEM-EDS талдауы кеуекті агрегатталған морфологияны және Co, Al, Mg, Mn, және O элементтерінің болуын растады. Зерттелген үлгілердің ішінде 20Co-20Al-5Mg-5Mn/50 карбамид катализаторы ең жоғары белсенділік көрсетті. Оңтайлы жағдайда CH_4 және CO_2 конверсиялары шамамен 98,8%-ға жетіп, H_2 және CO селективтіліктері тиісінше 100,0% және 99,5% болды. Нәтижелер бұл катализаторлардың синтез-газ өндіру үшін перспективалы екенін көрсетті. SCS әдісінің практикалық артықшылығы да айқындалды.

Түйін сөздер: Co-Al-Mg-Mn катализаторы, ерітіндіде жану әдісі, карбамид, БЭТ, метанның көмірқышқылды конверсиясы, синтез-газ

©Жумабек М.^{1*}, Тунгатарова С.А.^{1,2}, Мурзин Д.Ю.³, Байжуманова Т.С.^{1,2},
2026.

¹АО «Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского»,
Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

³Университет Або Академи, Турку (Або), Финляндия.

E-mail: manapkhana_86@mail.ru

СТРУКТУРНЫЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Co–Al–Mg–Mn КАТАЛИЗАТОРОВ, ПРИГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ SCS, ДЛЯ СУХОГО РИФОРМИНГА МЕТАНА

Жумабек Манапхан — PhD, старший научный сотрудник, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: manapkhan_86@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2026-0577>;

Тунгатарова Светлана — доктор химических наук, профессор, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского»; Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан,

E-mail: tungatarova58@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6005-747X>;

Дмитрий Мурзин — доктор химических наук, профессор, Университет Або Академи, Турку (Або), Финляндия,

E-mail: dmurzin@abo.fi, <https://orcid.org/0000-0003-0788-2643>;

Байжуманова Толкын — кандидат химических наук, ассоциированный профессор, ведущий научный сотрудник, АО «Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского», Алматы, Казахстан,

E-mail: baizhuma@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9851-2642>.

Аннотация. Получение синтез-газа посредством углекислотной конверсии метана является одним из перспективных направлений современной каталитической химии, поскольку данный процесс позволяет эффективно утилизировать парниковые газы CH_4 и CO_2 . В настоящей работе Co-Al-Mg-Mn -катализаторы были синтезированы методом растворного горения (Solution Combustion Synthesis, SCS) с использованием нитратов металлов в качестве прекурсоров и карбамида в качестве топлива. Данный метод обеспечивает быстрое получение пористых многокомпонентных оксидных материалов с высокой каталитической активностью. Фазовый состав, текстурные характеристики и морфология синтезированных образцов исследованы методами рентгенофазового анализа (XRD), низкотемпературной адсорбции азота (BET), сканирующей электронной микроскопии (SEM) и энергодисперсионного анализа (EDS). Результаты XRD-анализа показали формирование фаз CoAl_2O_4 , MgAl_2O_4 , Co_3O_4 , CoO , а также смешанных оксидных фаз, что свидетельствует о формировании сложной многофазной структуры. Наличие таких фаз способствует стабилизации активных центров и повышению устойчивости катализаторов в условиях реакции. По данным BET установлено, что удельная поверхность, объём пор и средний диаметр пор существенно зависят от состава катализаторов и оказывают влияние на доступность активных центров и общую каталитическую активность. SEM-EDS-анализ подтвердил формирование пористой агрегированной морфологии и наличие в составе образцов элементов Co, Al, Mg, Mn и O. Среди исследованных образцов наибольшую активность в реакции сухого риформинга метана продемонстрировал катализатор 20Co–20Al–5Mg–5Mn/50 карбамид. В оптимальных условиях конверсии CH_4 и CO_2 достигали 98,8 %, а селективность по H_2 и CO составила 100,0 % и 99,5 % соответственно. Полученные результаты свидетельствуют о высокой перспективности Co-Al-Mg-Mn -катализаторов для получения синтез-газа, а также подтверждают эффективность метода SCS для синтеза пористых многокомпонентных каталитических материалов.

Ключевые слова: Co-Al-Mg-Mn катализатор, метод сжигания раствора, карбамид, BET, углекислотная конверсия метана, синтез-газ

Introduction. Methane carbon dioxide conversion, i.e., dry reforming of methane (DRM), is considered one of the important directions in modern catalytic chemistry

and low-carbon energy (Agún et al., 2025). This process enables the simultaneous conversion of methane and carbon dioxide into syngas, that is, a mixture of H_2 and CO (Zhu et al., 2024). The environmental significance of the DRM reaction is associated with its ability to convert two major greenhouse gases - CH_4 and CO_2 - into chemically valuable products. Syngas is an important intermediate feedstock for the production of methanol, dimethyl ether, oxo alcohols, and liquid hydrocarbons through Fischer-Tropsch synthesis (Sun et al., 2024). Therefore, DRM technology is regarded as a promising approach in terms of CO_2 utilization, deep processing of natural gas, and efficient management of the carbon cycle.

The general equation of the DRM reaction is as follows:



is written in this form, and the standard enthalpy of this reaction is approximately +247 kJ/mol (Agún et al., 2025; Escalante et al., 2024). The strongly endothermic nature of the reaction requires high temperatures; therefore, DRM is commonly carried out in the range of 700-900 °C (Manabayeva et al., 2023). High temperature is necessary to break the strong C-H bonds in the CH_4 molecule; however, these conditions may also enhance catalyst agglomeration and coke formation. For this reason, an efficient catalyst for DRM should not only exhibit high activity but also possess thermal stability and resistance to carbon deposition. Recent literature identifies high energy consumption, catalyst deactivation, and insufficient long-term stability as the main factors limiting the industrial implementation of DRM (Awad et al., 2024). In the DRM reaction, the theoretical H_2/CO ratio is approximately equal to 1, which is suitable for the production of some oxygenated organic compounds and Fischer-Tropsch products. However, under real experimental conditions, the H_2/CO ratio may deviate from 1 due to side reactions. Thermal decomposition of methane can increase the amount of H_2 and lead to carbon formation on the catalyst surface. For example, the Boudouard reaction can convert part of CO into CO_2 and solid carbon, thereby changing the composition of syngas (Colombo et al., 2024). Therefore, when evaluating DRM performance, CH_4 and CO_2 conversions should be considered together with the H_2/CO ratio, carbon formation, and catalyst stability.

Among DRM catalysts, Ni-based systems have been the most extensively studied because Ni exhibits high activity in methane activation and is less expensive than noble metals (Zhu et al., 2024). However, Ni catalysts are prone to sintering and carbon deposition at high temperatures. To overcome these drawbacks, strategies such as confining Ni particles within supports, introducing promoters, developing bimetallic systems, and using oxides with high oxygen mobility have been widely explored in recent years (Shi et al., 2024). Co-based catalysts are considered as an alternative or complementary active component to Ni-based systems for DRM. Metallic Co sites are capable of activating the C-H bonds of CH_4 molecules and, when combined with a properly selected support, can demonstrate high DRM activity. Nevertheless, Co catalysts are also susceptible to agglomeration and coke formation at elevated

temperatures (Escalante et al., 2024). Therefore, oxides such as Al_2O_3 , MgAl_2O_4 , CeO_2 , La_2O_3 , and others are often used as supports or promoters in Co-based catalysts (Sun et al., 2024; Yang et al., 2023).

Al_2O_3 is a widely used support in DRM catalysts because it can provide a high specific surface area and thermal stability. However, the acidic sites on the Al_2O_3 surface may, in some cases, enhance carbon formation (Li et al., 2024). Therefore, the modification of Al_2O_3 -based systems with promoters such as Mg, La, Ce, Zr, or Mn is important for improving catalyst stability (Tungatarova et al., 2025). Mg-containing components are used in DRM catalysts as promoters that enhance basic properties. Since CO_2 is an acidic molecule, basic sites such as MgO or MgAl_2O_4 can improve CO_2 adsorption and activation. Enhanced CO_2 activation may promote the oxidation of carbonaceous intermediates formed on the catalyst surface and thereby reduce coke formation (Song et al., 2024; Xu et al., 2024). MgAl_2O_4 spinel is considered a thermally stable support at high temperatures and may help limit the agglomeration of Ni or Co particles (Zafarnak et al., 2025). Mn is being investigated as a promoter in DRM systems that can improve redox properties and enhance resistance to carbon deposition. The incorporation of Mn may increase the mobility of oxygen species on the catalyst surface and promote the oxidation of carbonaceous intermediates. Studies on Mn-modified Ni-Al catalysts indicate that the main role of the Mn promoter is to improve coke resistance and long-term stability (Manabayeva et al., 2024).

Solution combustion synthesis (SCS) is considered one of the suitable methods for preparing multicomponent catalysts and oxide systems, because this approach is based on a rapid self-sustaining redox reaction between an oxidizer and a fuel in the presence of metal cations. In this process, metal nitrates are commonly used as oxidizers, while organic compounds such as urea, glycine, or citric acid are used as fuels (Deganello et al., 2018; Gao et al., 2017). During the combustion process, high temperatures are generated within a short time, which can lead to the formation of metal oxides, spinels, or solid solutions. The solution combustion method enables the uniform distribution of active components and enhances metal-support interactions. In Co-Al catalysts, the formation of the CoAl_2O_4 spinel phase is frequently observed. Although the CoAl_2O_4 phase is difficult to fully reduce, it can provide structural stability at high temperatures and limit the growth of Co particles (Tungatarova et al., 2025). In Ni-Co bimetallic systems, the electronic and structural synergy between the metals can facilitate CH_4 activation and improve catalyst stability by suppressing carbon formation (Liu et al., 2023).

The morphology of the catalyst support also has a significant effect on DRM activity and stability (Shen et al., 2020). Li et al., (2024) showed that the morphology of Al_2O_3 determines coke resistance in Ni/ Al_2O_3 catalysts. This effect is explained by the interaction of surface OH species with CH_x intermediates, which suppresses carbon formation. Therefore, in the design of DRM catalysts, not only the metal composition but also the surface chemistry, morphology of the support, and mobility of oxygen species are important factors.

In general, literature data demonstrate that the most effective catalysts for DRM

should be multifunctional, with stability considered a key criterion alongside catalytic activity. In such catalysts, one type of active site activates the CH_4 molecule, another enhances CO_2 adsorption, while a third function promotes the removal of carbonaceous intermediates (Wang et al., 2024). Analysis of the literature shows that DRM technology has significant scientific potential; however, for industrial application, the long-term stability of catalysts and their resistance to coke formation remain major challenges. Current studies demonstrate that controlling the synergistic interaction among the active metal, support, and promoter is one of the key scientific directions in the design of DRM catalysts. In particular, Co, Ni, Mg, Mn, and Al-containing catalysts prepared by solution combustion synthesis are being considered as promising systems for high-temperature operation, improved resistance to coke formation, and efficient syngas production. Therefore, research in this direction provides an important scientific basis for bringing the DRM process closer to practical application.

Materials and Methods. The catalysts used in this study were prepared by the solution combustion synthesis (SCS) method. A series of samples with different metal nitrate contents was synthesized. The metal nitrate salts were first ground and mixed in a porcelain dish. Then, 10 ml of distilled water preheated to 80°C was gradually added, and the mixture was stirred in air for several minutes until complete dissolution. The resulting precursor solution was transferred into a 250 ml heat-resistant glass beaker and placed in a muffle furnace preheated to 500°C . Thermocouples were used to monitor temperature changes during synthesis. After 2-3 min, the combustion process was visually observed without fully opening the furnace door. During combustion, the mixture foamed and rose along the beaker walls. After completion, the beaker was cooled in air, and the obtained catalyst was stored in sealed glass containers. The initial solution, combustion process, and final catalyst sample are shown in Figure 1.

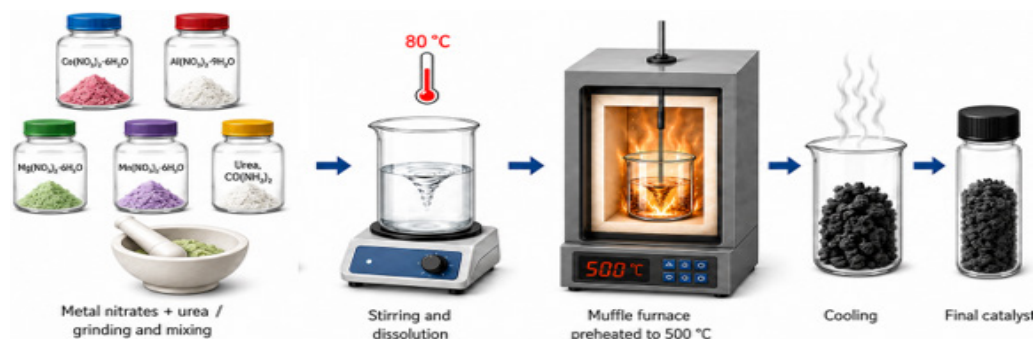


Figure 1. Schematic representation of the catalyst synthesis procedure using the solution combustion synthesis (SCS) method.

The catalytic activity of the catalysts in methane carbon dioxide conversion and oxidation processes was investigated using a laboratory flow-catalytic setup (AKQ-1). The setup consists of a feed gas mixture preparation system, a flow-type quartz tubular reactor, and a chromatographic system for analyzing the reaction products. The catalyst with a volume of 2 ml was placed into a quartz reactor, and the reaction temperature

was increased from 600 to 900 °C in 50 °C increments. The feed gases were supplied through pressure regulators, filters, and gas flow controllers to prepare the required reaction gas mixture. A portion of the vapor-gas mixture leaving the reactor was directed to chromatographic analysis. The reaction products were analyzed after 20 min of reaction and subsequently after every 60 min of catalyst operation. The composition of the initial gas mixture and reaction products was determined using CHROMOS GC-1000 and Agilent Technologies 6890N gas chromatographs. H₂, O₂, N₂, CH₄, C₂–C₄ hydrocarbons, CO, and CO₂ were analyzed using packed columns, while liquid organic compounds were analyzed using a capillary column.

The synthesized catalysts were characterized by X-ray phase analysis (XRD) at the Laboratory of Advanced Ceramics, Institute of Nanoscience and Nanotechnology, National Centre for Scientific Research “Demokritos” (Greece). The analysis was carried out using a Siemens Spellman DF3 spectrometer with Cu-Kα radiation ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) in the 2θ range of 5–100° with a step size of 0.03°. To determine the phase composition of the samples, the obtained diffraction patterns were compared with standard data from the JCPDS (Joint Committee on Powder Diffraction Standards) database.

The morphology and elemental composition of the samples were determined at the Laboratory of Physicochemical Research Methods of the D.V. Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry using a JEOL JSM-6610LV scanning electron microscope. This instrument operates at an accelerating voltage of up to 30 kV and provides high-resolution imaging. The SDD Oxford X-Max 50 mm² X-ray detector installed on the microscope enabled elemental analysis of the samples by the EDS method.

The textural properties of the prepared catalysts and supports, including specific surface area, pore volume, and pore size distribution, were determined by the BET (Brunauer-Emmett-Teller) method using a GAPPV–Sorb 2800 instrument. Nitrogen with a purity of 99% and helium with a purity of 99% were used as carrier gases. The pore volume and average pore diameter of the samples were calculated by the BJH method using the desorption branch of the adsorption–desorption isotherms.

The main parameters of the performed process were calculated using the following equations:

$$X_{\text{CH}_4} (\%) = \frac{(F_{\text{CH}_4, \text{in}} - F_{\text{CH}_4, \text{out}})}{F_{\text{CH}_4, \text{in}}} \times 100\% \quad (2)$$

$$X_{\text{CO}_2} (\%) = \frac{(F_{\text{CO}_2, \text{in}} - F_{\text{CO}_2, \text{out}})}{F_{\text{CO}_2, \text{in}}} \times 100\% \quad (3)$$

Results and Discussion. Co-Al-Mg-Mn-based catalysts with different component ratios were prepared by the solution combustion synthesis method, and the catalytic activity of the following samples was investigated: 30Co-5Mg-10Al-5Mn/50 urea, 20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea, 12,5Co-12,5Mg-12,5Al-12,5Mn/50 urea, 3Co-3Mg-3Al-41Mn/50 urea.

The physicochemical characterization results showed that, among the investigated Co-Al-Mg-Mn catalyst series, the 20Co-20Al-5Mg-5Mn/50 urea sample possessed the most favorable structural and textural properties. According to Table 1, this catalyst was characterized by the highest specific surface area ($16.6 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$), the largest pore volume ($0.063 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$), and the greatest average pore diameter (22.9 nm). After the reaction, only a slight decrease in these parameters was observed, indicating that the porous structure of the catalyst was largely preserved under DRM conditions. Such textural features can facilitate the diffusion of reactants and improve the accessibility of active sites.

Table 1. Textural properties of Co–Al–Mg–Mn catalysts prepared by solution combustion synthesis.

Catalyst	S_{BET} ($\text{m}^2 \text{ g}^{-1}$)	Pore volume ($\text{cm}^3 \text{ g}^{-1}$)	Average pore diameter (nm)
30Co-5Mg-10Al-5Mn/50 urea	14,6	0,054	19,3
20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea (fresh)	16,6	0,063	22,9
12,5Co-12,5Mg-12,5Al-12,5Mn/50 urea	7,5	0,022	11,8
3Co-3Mg-3Al-41Mn/50 urea	7,4	0,063	10,0
20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea (spent)	16,0	0,052	21,1

X-ray phase analysis results (Figure 2) showed the formation of mixed oxide and spinel phases in the catalyst, such as CoAl_2O_4 , cobalt oxides, MgCo_2O_4 , and MgAl_2O_4 . The formation of these phases indicates strong interaction between cobalt species and the oxide matrix. Such a mixed oxide structure can contribute to limiting the agglomeration of the active phase at high temperatures and improving the thermal stability of the catalyst.

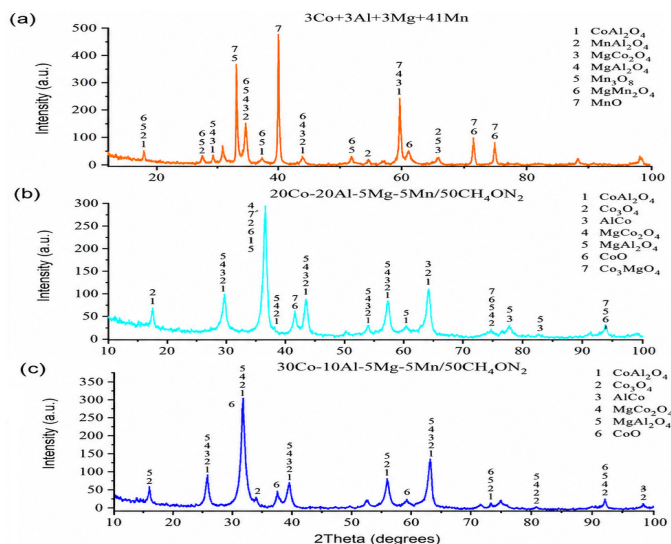


Figure 2. XRD patterns of Co–Al–Mg–Mn-based catalysts with different compositions prepared by the solution combustion synthesis (SCS) method: (a) 3Co-3Al-3Mg-41Mn/50urea, (b) 20Co-20Al-5Mg-5Mn/50urea, and (c) 30Co-10Al-5Mg-5Mn/50urea. The identified crystalline phases are marked by numbered label.

The catalyst morphology was also confirmed by SEM/EDS and TEM results. SEM images of the fresh catalyst (Figure 3a) showed a porous and irregularly aggregated morphology typical of the solution combustion synthesis method, while the EDS spectra confirmed the presence of Co, Al, Mg, Mn, and O elements in the sample. SEM images after the reaction (Figure 3b) indicated that the overall morphology of the catalyst was preserved, suggesting that no significant structural degradation occurred. TEM analysis showed that the catalyst mainly consisted of particles with sizes of approximately 20–30 nm. Such an aggregated nanostructure can ensure sufficient dispersion of the active phase and contribute to the preservation of structural stability under high-temperature conditions.

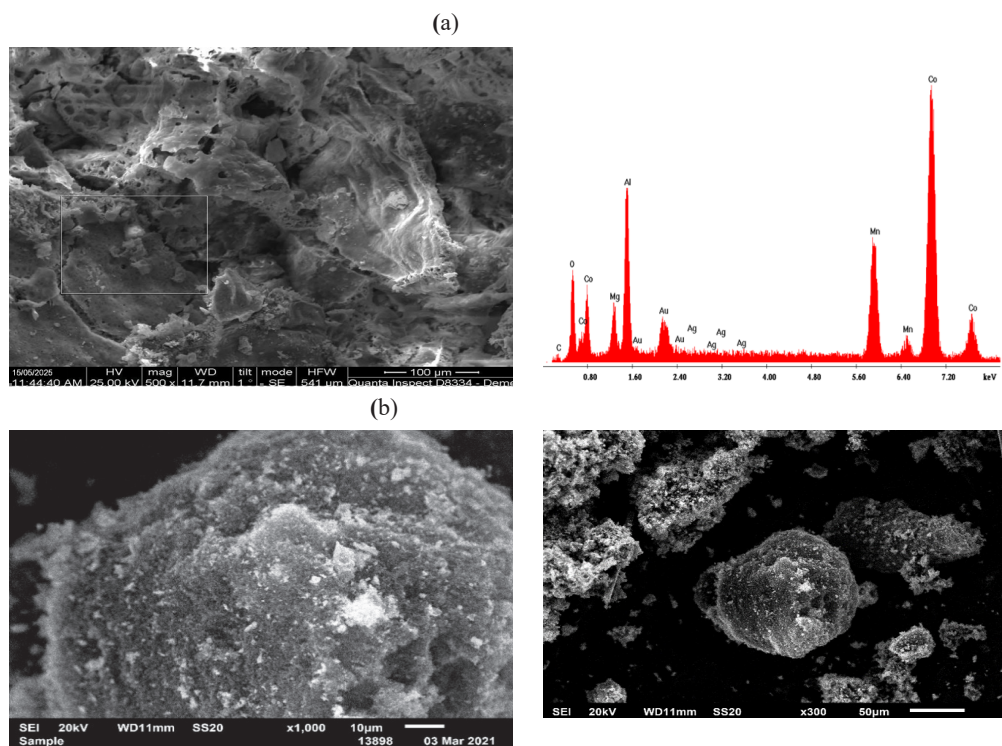


Figure 3. SEM micrographs and EDS spectrum of the Co-Al-Mg-Mn-based catalyst: (a) fresh catalyst and (b) spent catalyst after catalytic reaction, showing changes in surface morphology and elemental composition.

Thus, the physicochemical characterization confirmed that the 20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea catalyst exhibits several important features for DRM, such as a high specific surface area, developed mesoporosity, stable mixed oxide-spinel phases, and structural morphology retained after the reaction.

The study identified the 20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea sample as the most effective catalyst for the DRM reaction. Its catalytic properties were investigated at atmospheric pressure using a gas mixture containing 33,3% CH_4 , 33,3% CO_2 , and 33,3% Ar. As the temperature increased, the conversions of CH_4 and CO_2 also increased, reaching nearly

complete values in the high-temperature region (Figure 4a), which is associated with the endothermic nature of the DRM reaction. The increase in H_2 and CO selectivities with temperature (Figure 4b) indicated that syngas formation became predominant at elevated temperatures.

The effect of space velocity is presented in Table 2. Under the investigated conditions, the most favorable overall performance was observed at 1000 h^{-1} . At this space velocity, the CH_4 and CO_2 conversions reached 98,8%, while the H_2 and CO selectivities were 100,0% and 99,5%, respectively. As the space velocity increased, the contact time between the reactants and the catalyst surface decreased, resulting in lower conversion and selectivity. At lower space velocity, although the reactant conversion remained high, no additional advantage in terms of syngas quality was observed. The variation of the H_2/CO ratio in the range of 1,3-1,7 indicates that, along with the main DRM pathway, side reactions promoting hydrogen formation may also occur.

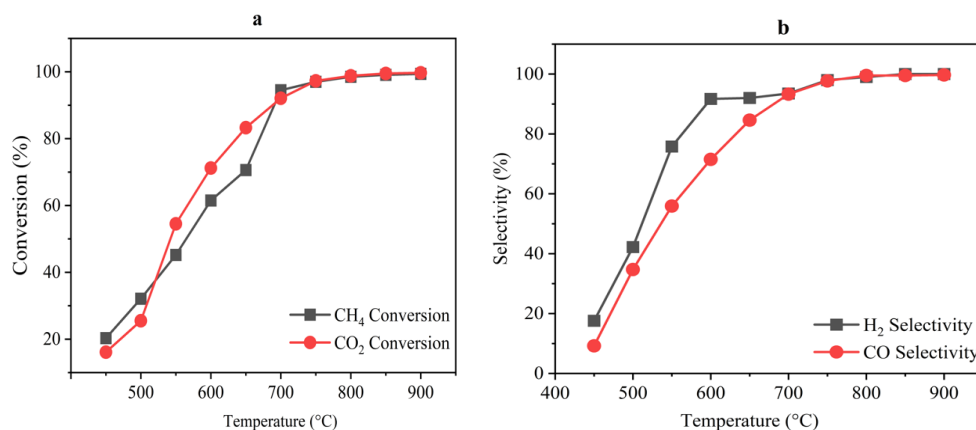


Figure 4. Temperature-dependent catalytic performance of the 20Co-20Al-5Mg-5Mn/50 urea catalyst in methane dry reforming: (a) CH_4 and CO_2 conversions; (b) H_2 and CO selectivities.

Table 2. Effect of gas hourly space velocity on the DRM performance of the 20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea catalyst.

Space velocity (h^{-1})	CO (%)	H_2 (%)	X_{CH_4} (%)	X_{CO_2} (%)	S_{H_2} (%)	S_{CO} (%)	H_2/CO
500	38,4	58,2	99,1	98,2	83,6	98,5	1,4
1000	39,7	65,5	98,8	98,8	100	99,5	1,7
1500	37,8	52,9	97,7	95,5	81,0	96,4	1,3
2000	37,5	47,7	99,1	95,5	72,6	96,2	1,3
3000	37,0	50,5	99,0	96,1	76,9	96,6	1,4
4000	33,0	51,3	94,9	91,9	79,7	92,5	1,6

In general, the high DRM activity of the 20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea catalyst is directly related to its favorable textural properties, stable mixed oxide structure, and morphology retained after the reaction. The high specific surface area and relatively large pores improve the accessibility of reactants, while Co-Al-Mg-Mn based mixed

oxides ensure the stability of the active phase at high temperatures. The combination of these factors indicates that this sample is the most effective DRM catalyst among the investigated series.

Conclusion. Co-Al-Mg-Mn-based multicomponent catalysts were prepared by the solution combustion synthesis method and investigated in the dry reforming of methane. XRD results showed the formation of CoAl_2O_4 , MgAl_2O_4 , MgCo_2O_4 , Co_3O_4 , CoO , and mixed metal oxide phases, while BET, SEM-EDS, and TEM analyses confirmed their porous aggregated morphology, favorable textural properties, and structural stability after the reaction. Among the investigated samples, the 20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea catalyst exhibited the best performance, with a specific surface area of $16,6 \text{ m}^2/\text{g}$, a pore volume of $0,063 \text{ cm}^3/\text{g}$, and an average pore diameter of $22,9 \text{ nm}$. In catalytic tests, this sample achieved CH_4 and CO_2 conversions of 98,8% and H_2 and CO selectivities of 100,0% and 99,5%, respectively, at a space velocity of 1000 h^{-1} . These results demonstrate that the SCS method is effective for preparing porous and active multicomponent catalysts, and that the 20Co-5Mg-20Al-5Mn/50 urea catalyst is a promising material for syngas production.

References

- Agún B., Abánades A. (2025) Comprehensive review on dry reforming of methane: Challenges and potential for greenhouse gas mitigation. *Int. J. Hydrog. Energy.* – No. 103. – P. 395-414. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.01.160> (in English).
- Awad M.M., Hussain I., Mustapha U., Ahmed Taialla O., Musa Alhassan A., Kotob E., Shafiu Abdullahi A.H., Ganiyu S.A., Alhooshani K. (2024) A critical review of recent advancements in catalytic dry reforming of methane: Physicochemical properties, current challenges, and informetric insights. *Int. J. Hydrog. Energy.* – No. 76. – P. 202-233. <https://doi.org/10.1016/J.IJHYDENE.2024.03.319> (in English).
- Colombo R., Moroni G., Negri C., Delen G., Monai M., Donazzi A., Weckhuysen B.M., Maestri M. (2024) Back Cover: Surface Carbon Formation and its Impact on Methane Dry Reforming Kinetics on Rhodium-Based Catalysts by Operando Raman Spectroscopy (*Angew. Chem. Int. Ed.* 46/2024). *Angew. Chem. Int. Ed.* – No.63(46). – P. 2024. <https://doi.org/10.1002/anie.202416803> (in English).
- Deganello F., Tyagi A.K. (2018) Solution combustion synthesis, energy and environment: Best parameters for better materials. *Prog. Cryst. Growth Charact. Mater.* – No. 64(2). – P. 23-61. <https://doi.org/10.1016/J.PCRYSGROW.2018.03.001> (in English).
- Escalante Y., Barroso M.N., Tarditi A.M., Múnera J. (2024) Exploring the potential of cobalt-based catalysts in the methane dry reforming for sustainable energy applications. *Mol. Catal.* – No.569. – P. 114575. <https://doi.org/10.1016/J.MCAT.2024.114575> (in English).
- Gao Y., Meng F., Cheng Y., Li Z. (2017) Influence of fuel additives in the urea-nitrates solution combustion synthesis of Ni-Al₂O₃ catalyst for slurry phase CO methanation. *Appl. Catal. A.* – No. 534. – P. 12-21. <https://doi.org/10.1016/J.APCATA.2017.01.016> (in English).
- Li G., Hao H., Jin P., Wang M., Yu Y., Zhang C. (2024) Dry reforming of methane over Ni/Al₂O₃ catalysts: Support morphological effect on the coke resistance. *Fuel.* – No.362. – P. 130855. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2024.130855> (in English).
- Liu K., Xing F., Xiao Y., Yan N., Shimizu K., Furukawa S. (2023) Development of a Highly Stable Ternary Alloy Catalyst for Dry Reforming of Methane. *ACS Catal.* – No.13(6). – P. 3541-3548. <https://doi.org/10.1021/acscatal.2c05488> (in English).
- Manabayeva A.M., Mäki-Arvela P., Vajglová Z., Martinez-Klimov M., Yevdokimova O., Peuronen A., Lastusaari M., Tirri T., Baizhumanova T.S., Kassymkan K., Kaumenova G.N., Brodskiy A.R., Sarsenova R.O., Shorayeva K.A., Murzin D.Y., Tungatarova S.A. (2024) Dry Reforming of Methane over Mn-modified Ni-based Catalysts. *Catal. Lett.* – No. 154(8). – P. 4780-4794. <https://doi.org/10.1007/s10562-024-04676-0> (in English).



Manabayeva A.M., Mäki-Arvela P., Vajglová Z., Martínéz-Klimov M., Tirri T., Baizhumanova T.S., Grigor'eva V.P., Zhumabek M., Aubakirov Y.A., Simakova I.L., Murzin D.Y., Tungatarova S.A. (2023) Dry Reforming of Methane over Ni-Fe-Al Catalysts Prepared by Solution Combustion Synthesis. *Ind. Eng. Chem. Res.* – No. 62(29). – P. 11439-11455. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c00272> (in English).

Shen D., Huo M., Li L., Lyu S., Wang J., Wang X., Zhang Y., Li J. (2020) Effects of alumina morphology on dry reforming of methane over Ni/Al₂O₃ catalysts. *Catal. Sci. Technol.* – No.10(2). – P. 510-516. <https://doi.org/10.1039/C9CY02093D> (in English).

Shi Y., Tian X., Deng Z., Shi W., Fan W., Wang F. (2024) Review and Outlook of Confined Ni Catalysts for the Dry Reforming of Methane Reaction. *Energy & Fuels.* – No. 38(3). – P. 1633-1656. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.3c03923> (in English).

Song P., Su T., Luo Y., Luo X., Ji H., Qin Z. (2024) Ni-Mg-Al Catalysts for Dry Reforming of Methane: Effect of Surface Properties on Coke Formation and CO₂ Activation. *Ind. Eng. Chem. Res.* – No. 63(37). – P. 16077-16090. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c01375> (in English).

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 Chem.* – No. 26(9). – P. 5103-5126. <https://doi.org/10.1039/D3GC05136F> (in English).

Tungatarova S.A., Manabayeva A.M., Abilmagzhanov A.Z., Baizhumanova T.S., Malgazhdarova M.K. (2025) Application of Catalysts Prepared by Solution Combustion Synthesis in Dry Reforming of Methane. *Molecules.* – No.30(23). – P. 4575. <https://doi.org/10.3390/molecules30234575> (in English).

Wang H., Cui G., Lu H., Li Z., Wang L., Meng H., Li J., Yan H., Yang Y., Wei M. (2024) Facilitating the dry reforming of methane with interfacial synergistic catalysis in an Ir@CeO_{2-x} catalyst. *Nat Commun.* – No. 15(1). – P. 3765. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-48122-6> (in English).

Xu Z., Park E.D. (2024) Recent Advances in Coke Management for Dry Reforming of Methane over Ni-Based Catalysts. *Catalysts.* – No.14(3). – P. 176. <https://doi.org/10.3390/catal14030176> (in English).

Yang E., Nam E., Jo Y., An K. (2023) Coke resistant NiCo/CeO₂ catalysts for dry reforming of methane derived from core@shell Ni@Co nanoparticles. *Appl. Catal. B.* – No.339. – P. 123152. <https://doi.org/10.1016/J.APCATB.2023.123152> (in English).

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.* – No.395. – P. 135168. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2025.135168> (in English).

Zhu H., Chen H., Zhang M., Liang C., Duan L. (2024) Recent advances in promoting dry reforming of methane using nickel-based catalysts. *Catal. Sci. Technol.* – No. 14(7). – P. 1712-1729. <https://doi.org/10.1039/d3cy01612a> (in English).

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

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

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

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

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

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

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

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

www.nauka-nanrk.kz

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

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

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

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

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