

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

2024 • 4



«ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ
АКАДЕМИЯСЫ» РҚБ

«ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
ҰЛТТЫҚ ҒЫЛЫМ АКАДЕМИЯСЫ» РҚБ

БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ

РОО «НАЦИОНАЛЬНОЙ
АКАДЕМИИ НАУК РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН»

REPORTS

OF THE ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK

БАС РЕДАКТОР:

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

РЕДАКЦИЈАЛЫҚ АЛҚА:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

«Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясының баяндамалары»

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

Меншіктеуші: «Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы» Республикалық қоғамдық бірлестігі (Алматы қ.). Қазақстан Республикасының Ақпарат және қоғамдық даму министрлігінің Ақпарат комитетінде 29.07.2020 ж. берілген № KZ93ZYU00025418 мерзімдік басылым тіркеуіне қойылу туралы құалық.

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

Мерзімділігі: жылына 4 рет. Тиражы: 300 дана.

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

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

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР:

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

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

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

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

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

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

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

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

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

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

ЩЕПЕТКИН Игорь Александрович, доктор медицинских наук, профессор Университета штата Монтана (СПША), Н = 27

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

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

БАЙМУКАНОВ Дастанбек Асылбекович, доктор сельскохозяйственных наук, член-корреспондент НАН РК, главный научный сотрудник Департамента животноводства и ветеринарной медицины ТОО «Научно-производственный центр животноводства и ветеринарии» (Нур-Султан, Казахстан), Н = 1

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Доклады Национальной академии наук Республики Казахстан»

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

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

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

Периодичность: 4 раз в год. Тираж: 300 экземпляров

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

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

EDITOR IN CHIEF:

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

EDITORIAL BOARD:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

A. Istlyaup^{1*}, L. Myasnikova¹, A. Lushchik², 2024.

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

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

E-mail: assel.ist94@gmail.com

COMPUTER SIMULATION OF THE DENSITY OF STATE NaX (X = F, Cl) NANOOBJECTS

A. Istlyaup – PhD student, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan, E-mail: assel.ist94@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3423-5126>;

L. Myasnikova – candidate of physical and mathematical sciences, associated professor, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan, E-mail: myasnikova_ln@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3326-7206>;

A. Lushchik – doctor of physical and mathematical sciences, professor, Institute of Physics, University of Tartu, Tartu, Estonia, E-mail: aleksandr.lushchik@ut.ee, <https://orcid.org/0000-0003-2035-3420>.

Abstract. Modern science of solid-state physics is increasingly engaged in the research of nanomaterials and the development of nanotechnologies. Today, all kinds of theoretical methods and research technologies are intensively used to explain the meaning of experimental results dependent on the study of the properties of defects in solids. Improvement in this area is likely due to improvements in computer technology and the development of modern quantum chemical packages. This work presents the results of computer simulation of the density of states and total energy of NaX (X = F, Cl) nanoobjects within the framework of density functional theory (DFT). By studying the influence of structural defects and comparing them with macroscopic objects, nanosized NaX crystals with the structure of an ideal cubic crystal, a cubic crystal with point defects, changes in energy levels in the state density spectra of individual samples are observed. The obtained results of experiments on modeling NaX in various cluster compounds make it possible to classify these objects as quantum dots and further continue studies of alkali halide crystals in nanosized structures.

Key words: nanocrystals NaF and NaCl, density of state, total energy, specific energy, quantum dots.

©А. Истляуп^{1*}, Л. Мясникова¹, А. Лущик², 2024.

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

²Тарту университеті, Физика институты, Тарту, Эстония.

E-mail: assel.ist94@gmail.com

NaX (X = F, Cl) НАНООБЪЕКТЛЕРІНІҢ КҮЙ ТЫҒЫЗДЫҒЫН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

А. Истляуп – PhD докторант, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан, E-mail: assel.ist94@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3423-5126>;

Л. Мясникова – физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан, E-mail: myasnikova_ln@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3326-7206>;

А. Лущик – физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, Тарту университеті, Физика институты, Тарту, Эстония, E-mail: aleksandr.lushchik@ut.ee, <https://orcid.org/0000-0003-2035-3420>.

Аннотация. Қазіргі таңда қатты дене физикасы ғылымы наноматериалдарды зерттеу және нанотехнологияларды дамытуға баса назар қойып дамып келеді. Бүгінде теориялық әдістер мен зерттеу технологияларының барлық түрлері қатты денелердегі ақаулардың қасиеттерін зерттеуге байланысты эксперименттік нәтижелердің мағынасын түсіндіру үшін қарқынды қолданылады. Бұл саланың жақсаруы компьютерлік технологияның жетілдірілуіне және заманауи кванттық-химиялық пакеттердің дамуына байланысты болуы мүмкін. Бұл жұмыс NaX (X = F, Cl) нанобъектілерінің күй тығыздығы мен толық энергиясын компьютерлік модельдеу нәтижелерін тығыздықтың функционалдық теориясы (ТФТ) шеңберінде ұсынады. Құрылымдық ақаулардың әсерін зерттей отырып және оларды макроскопиялық объектілермен, идеал кубтық кристалының құрылымы бар наноөлшемді NaX кристалдарымен, нүктелік ақаулары бар кубтық кристалмен салыстыра отырып, жеке үлгілердің күй тығыздығы спектрлеріндегі энергия деңгейлерінің өзгеруі байқалды. Әртүрлі кластерлік қосылыстардағы пах модельдеу эксперименттерінің нәтижелері бұл нысандарды кванттық нүктелер ретінде жіктеуге және наноөлшемді құрылымдардағы сілтілі галоидты кристалдарды зерттеуді жалғастыруға мүмкіндік береді.

Түйін сөздері: NaF және NaCl нанокристалдары, күй тығыздығы, толық энергия, меншікті энергия, кванттық нүктелер.

А. Истляуп^{1*}, Л. Мясникова¹, А. Лущик², 2024.

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

²Институт Физики, университет Тарту, Тарту, Эстония.

E-mail: assel.ist94@gmail.com

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЯ НАНООБЪЕКТОВ NaX (X = F, Cl)

А. Истляуп – PhD докторант, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актөбе, Казахстан, E-mail: assel.ist94@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3423-5126>;

Л. Мясникова – кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актюбе, Казахстан, E-mail: myasnikova_ln@zhubanov.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-3326-7206>;

А. Лущик – доктор физико-математических наук, профессор, Институт Физики, университет Тарту, Тарту, Эстония, E-mail: aleksandr.lushchik@ut.ee, <https://orcid.org/0000-0003-2035-3420>.

Аннотация. Современная наука физика твердого тела все активнее занимается исследованиями наноматериалов и разработкой нанотехнологий. Сегодня все виды теоретических методов и исследовательских технологий интенсивно используются для объяснения смысла экспериментальных результатов, зависящих от изучения свойств дефектов в твердых телах. Улучшение в этой области, вероятно, связано с совершенствованием компьютерных технологий и разработкой современных квантово-химических пакетов. В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования плотности состояний и полной энергии нанобъектов NaX (X = F, Cl) в рамках теории функционала плотности (ТФП). Изучая влияние структурных дефектов и сравнивая их с макроскопическими объектами, наноразмерными кристаллами NaX со структурой идеального кубического кристалла, кубическим кристаллом с точечными дефектами, наблюдают изменения энергетических уровней в спектрах плотности состояния отдельных образцов. Полученные результаты экспериментов по моделированию NaX в различных кластерных соединениях позволяют классифицировать эти объекты как квантовые точки и в дальнейшем продолжить исследования щелочно-галогенидных кристаллов в наноразмерных структурах.

Ключевые слова: нанокристаллы NaF и NaCl, плотность состояния, полная энергия, собственная энергия, квантовые точки.

Кіріспе

Қазіргі уақытта сілтілі металл мен галогеннен тұратын наноөлшемді заттардың қасиеттері химия, физика, материалтану және электроника сияқты ғылымның әртүрлі салаларының мамандары тарапынан белгілі бір технологиялық қызығушылық тудырады (Gopikrishnan, 2012; Bichoutskaia, 2006; Fernandez-Lima, 2012; Istlyaup, 2023; Baker, 2013) мақаласында NaCl нанотүтікшелерінің қасиеттері зерттеліп, түтікше ұзарған сайын иондық байланыс иондар арасындағы тұрақтандыруды арттыруға негізгі үлес қосады деген қорытындыға келген. Сонымен қатар, түтікшелердің ұзындығын ұлғайту және енін азайту арқылы иондық сипаттаманың жоғарылауына ықпал етуге болады. (Fernandez-Lima, 2012) жұмысында бірқатар бейтарап кластерлер үшін $(\text{LiF})_{n=2,3,6}$ көлденен қималары алтыбұрышты және сегізбұрышты болатын нанотүтікшелердің құрылымдары үлкен LiF кристалдарының типтік кубтық формасының тұрақтылығына тең немесе одан үлкен тұрақтылықты көрсетеді деп тұжырымданады.

Алғашқы зерттеулерде адгезия, байланысу, құрылыс, беттік электронды күйлер және наноторлардағы әртүрлі эффектілер бойынша нәтижелер қарастырылған. Сонымен қатар, соққы әсерінен $\text{Na}_{14}\text{F}_{12}$ құрылымының фрагментациясы кезінде сілтілігалогидты кластерлердің деметализация процесі талданады. NaF

кластерлерінің кремний бетімен соқтығысуы кезінде жүретін реакциялар да зерттелген. (Lumeau, 2014) жұмысында фототерморелактивті шыныдағы NaF нанокристалдарын рентгендік дифракциялық зерттеу егжей-тегжейлі сипатталған. (Messaoudi, 2015; Mamula, 2018) жұмыстарында сілтілік металл галогенидтерінің электрондық, құрылымдық, термодинамикалық және динамикалық қасиеттері толық потенциал және жазықтық толқындардың псевдопотенциалы әдістерін қолдана отырып, бірінші принциптерден есептелді.

Заманауи электрониканың дамуы жаңа материалдарды ашуға негізделген, олардың ішінде көміртекті нанотүтікшелер ерекше орын алады. Олардың бірегей механикалық, термиялық және электрлік қасиеттері шағын электронды құрылғылар жасауға мүмкіндік береді, сондай-ақ басқа атомдар мен молекулаларды инкапсуляциялау қабілеті оларды наноэлектроникада қолдануға болатынын көрсетеді (Istlyaur, 2024 a). NaCl және NaF нанотүтіктері құрылғылар мен жаңа материалдар жасауға пайдаланылатын нанокұрылымдардың үлгілері болып табылады. Олар атомдары тор тәрізді орналасқан кристалды материалдардың түтіктері болып табылады (Baker, 2013; Fernandez-Lima, 2012). Мұндай құрылымдардың электрондық қасиеттерін зерттеу олардың физикалық қасиеттерін және түрлі салалардағы әлеуетті қолдануларын түсінуге көмектеседі. (Istlyaur, 2024 b) жұмысында тығыздық функционалдық теориясы негізінде NaF нанотүтіктерінің электрондық құрылымы мен энергиясы есептелді, ал алынған нәтижелер бұл құрылымдарды кванттық нүктелер ретінде сипаттауға мүмкіндік береді. NaCl кристалдары жиі тәжірибелік платформа ретінде қолданылады, себебі олардың құрылымы және өлшемдері эксперименттік жағдайларды реттеуге өте ыңғайлы. Нанотехнологиялар аясында кристалдардың беттерін және олардың реакциялық қабілеттерін зерттеу маңызды болып саналады. Жалпы, NaCl кристалдарын зерттеу қазіргі ғылымда маңызды болып табылады, себебі бұл материалдар ғылыми және технологиялық жаңалықтардың негізін қалайды (Zhanturina, 2022).

Жалпы қабылданған пікір бойынша, нанокұрылымдық объектілерге өлшемдері 1-ден 100 нм-ге дейінгі диапазонда жататын объектілер жатады. Негізінде, мұндай өлшемдік шектеудің біршама шартты сипаты бар. Нанобъектілердің басты ерекшелігі - олардың мөлшеріне байланысты олар ерекше қасиеттерге ие болуы (Bryukvina, 2018). Нанокристалды құрылымдардағы иондардың көпшілігі сыртқы қабатта орналасатындықтан, олардың көптеген қасиеттері бетінде байқалады. Көп жағдайда, бұл ерекше қасиеттер нанобъектілердің өлшемдері шартты түрде белгіленген 100 нм шегінен асқанда да байқалуы мүмкін. (Pandey, 1992) жұмысында NaF кристалының $2 \times 2 \times 2$ кубтық ұяшығының энергиясы Хартри-Фок әдісімен есептелген.

Нанотүтіктердің қасиеттерінің негізгі көрсеткіштерінің бірі – олардың күй тығыздығы (DOS – density of states). DOS жүйедегі электрондармен толтырылған энергияның таралуын көрсетеді және материалдың электрондық қасиеттерін түсінуге көмектеседі. NaCl және NaF нанокластерлерінің DOS зерттеулері олардың электрондық қасиеттерін түсінуге және оларды электроника мен оптикада

қолдану мүмкіндігін анықтауға көмектеседі (Baker, 2013; Fernandez-Lima, 2012), (Myasnikova, 2015).

Бұл жұмыста NaCl және NaF нанообъектілерінің күй тығыздығын, толық энергиясын 1 К температурасында анықтау үшін Atomistix ToolKit бағдарламасымен Virtual NanoLab (VNL ATK) арқылы компьютерлік модельдеу жасалды. Аталған бағдарлама бұған дейін бірнеше есептеу жұмыстарында сәтті тексерілгенін атап өткен жөн (Vemuri, 2022; Salih, 2020; Salih, 2021; Chen, 2022;).

Модельдеу шарттары (Материалдар мен әдістер).

Наножүйелерді, соның ішінде нанокристалдарды модельдеу үшін қатты денелер мен молекулаларды модельдеуге арналған әдістер қолданылады, мысалы, тығыздық функционалдық теориясы немесе Хартри-Фок әдісі, олар кванттық механиканың негізгі заңдылықтарын ескеруге мүмкіндік береді. Бірақ, наножүйелердің атомдық құрылымында ерекше айырмашылық бар: олардың шағын өлшемі беткі және шекаралық эффектілердің әсерін күшейтеді. Бұл әсерлер наноөлшемді объектілердің қасиеттерін басқаруда маңызды рөл атқарады, себебі олардың көп бөлігі сыртқы қабатта орналасады, ал көлемді материалдарда мұндай әсер елеусіз қалады.

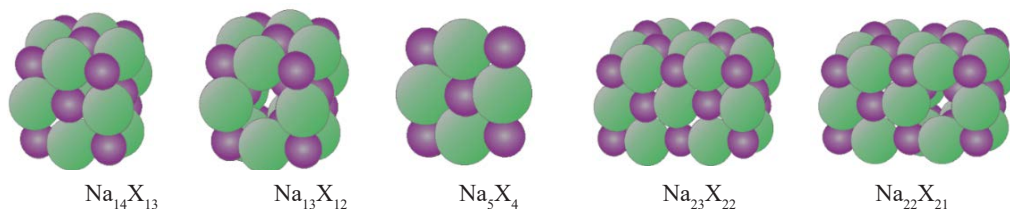
Электрондық қасиеттер тұрғысынан наножүйелерді сипаттайтын тағы бір маңызды ерекшелік – олардың кванттық тұтқырлық (quantum confinement) құбылысы. Бұл құбылыс нанобөлшектердің мөлшері азайған сайын айқынырақ болады, себебі электрондар қозғалысы күшті шектеулерге ұшырайды. Мұндай шектеулер электрондық толқындық функциялардың кеңістіктегі таралуын азайтады, бұл өз кезегінде кванттық эффектілерді айтарлықтай арттырады. Осыған байланысты нанобөлшектердің электрондық деңгейлері дискретті энергия күйлері түрінде болады, яғни олар энергетикалық деңгейлердің квантталуын көрсетеді.

Бұл дискретті күйлер нанобөлшектердің электрондық құрылымын молекулаларға ұқсас етеді және олар қатты денелердің құрылымынан айтарлықтай ерекшеленеді, әсіресе Ферми деңгейі аймағында. Ферми деңгейіне жақын энергия күйлері нанокұрылымдардың өткізгіштігі, оптикалық және электрондық қасиеттерін анықтайтын маңызды фактор болып табылады. Көлемді материалдарда Ферми деңгейі аймағындағы күйлер үздіксіз түрде орналасса, нанобөлшектерде олар дискретті болып келеді, бұл олардың электрондық тасымалдау қасиеттерін ерекше етеді.

Наножүйелердің осы қасиеттері оларды әртүрлі оптоэлектроника, катализ, энергетика және биомедицина сияқты салаларда қолдануға мүмкіндік береді, себебі олардың кванттық және беткі әсерлері көптеген қолданбалар үшін ерекше артықшылықтар береді.

Бұл жұмыста есептеулер Synopsis компаниясының DFT негізіндегі VNL ATK бағдарламасымен жүргізілді. Құрылған $\text{Na}_{14}\text{X}_{13}$ ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}$) кластері 27 ионнан тұрады, ол 1a-суретте көрсетілгендей, $(j, k, i) = (3, 3, 3)$ индекстері бар және O_h симметриясына ие теріс зарядталған кубты құрайды. $\text{Na}_{13}\text{X}_{12}$ кластері нанообъектінің орталық аймағынан Na^+ және X^- иондарын алып тастау арқылы

алынған (1b-сурет). Na_5X_4 объектісі 9 ионнан тұрады, ол 1c-суретте көрсетілгендей, $(j, k, i) = (3, 3, 1)$ индекстері бар жазықтықты құрайды. $\text{Na}_{23}\text{X}_{22}$ кластері $(j, k, i) = (3, 3, 5)$ индекстері бар, 45 ионнан тұратын параллелепипед пішінінде (1d-сурет). Ал $\text{Na}_{22}\text{X}_{21}$ нанообъектісі 1f-суретте көрсетілгендей, соңғы қабаттың ортасынан Na^+ және X^- иондарын алып тастау арқылы алынған.



Сурет 1. NaX кластерлерінің геометриясы. Кішкентай күлгін шар – галоген атомы, ал үлкен жасыл шар – натрий атомы

NaX нанокластерін компьютерлік модельдеу нүктелік тығыздықты жуықтауда тығыздықтың функционалдық теориясы аясында жүргізілді.

Электронның орны (x, y, z) толқындық функциямен сипатталады (x, y, z) . Белгілі бір нүктеде (x, y, z) электронды табу ықтималдығы $|\psi(x, y, z)|^2$ өрнегімен сипатталады, мұндағы жалпы ықтималдық $\int |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz$ шартына дейін бір қалыпқа келтірілген.

Өткізгіштік аймағының төменгі жағындағы электрондар қорапқа салынған бос бөлшектер (тиімді массасы бар) сияқты әрекет етеді. Өткізгіштік аймағының электрондарын қарастырайық, бірақ кемтіктердің де нәтижесі ұқсас болады. Біздің параболалық өткізгіштік аймағы үшін: $(E - E_0) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$. L_x -тен L_y -ге L_z арқылы тікбұрышты көлемдегі электрондар үшін шексіз шектеу потенциалы $U(x, y, z) = 0$ (қораптың ішінде және сыртында ∞) толқындық функция ψ шекаралардағы электрондар нөлге ұмтылып, аймақ ішіндегі гармоникалық функция түрінде болуы керек. Толқындық функцияны шешу:

$$\psi(x, y, z) = \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z),$$

мұндағы k_x, k_y және k_z – x, y және z бағыттарындағы электронға арналған толқындық векторлар. Қатты күйдегі нақты толқындық функция күрделірек және периодты (кристалдық тормен), бірақ жолақ жиектеріне жақын параболалық аймақтар үшін жақсы жуықтау болып табылады.

Шекаралық шарттардың орындалуы: x, y немесе $z=0$ кезінде синусоидалы функциялар нөлге айналады. Тік бұрышты аймақтың қарама-қарсы шекараларында x, y және z бағыттары үшін $\sin(k_x L_x) = 0, \sin(k_y L_y) = 0, \sin(k_z L_z) = 0$ болады. Рұқсат етілген толқын векторлары қанағаттандырады:

$$k_x L_x = \pi n_x, k_y L_y = \pi n_y, k_z L_z = \pi n_z,$$

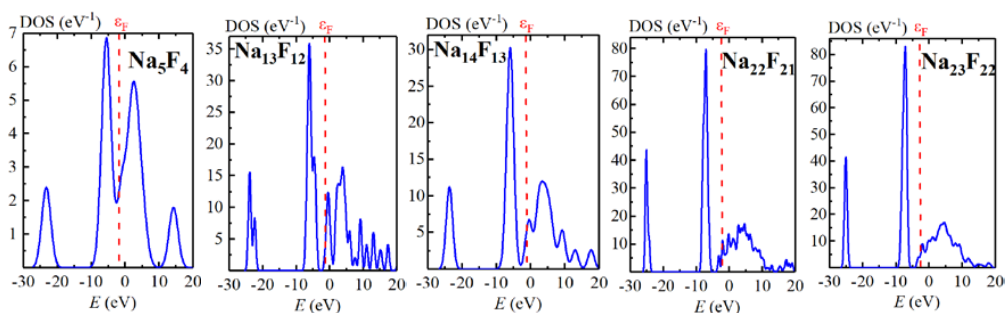
мұндағы n_x, n_y, n_z – бүтін сандар.

Нәтижелер мен талқылау.

Электрондық ішкі жүйені сипаттау кезінде тығыздықтың функционалдық теориясы толқындық функцияны электрондардың тығыздығымен алмастырумен ерекшеленеді. Сілтілік галогенидтердегі аниондық бос орынға түскен электронның құрылымдық және электрондық қасиеттері суперұяшық әдісімен электронды құрылымды есептеудің бірінші принциптерін қолдана отырып зерттелді. Қолданылған теориялық негіз арқылы (Hayal, 2017) F-орталығындағы байланысқан электрон диаметрі тор параметрінен екі есе үлкен сфера ішінде локализацияланғаны көрсетіледі.

Көптеген жағдайларда тығыздықтың функционалдық теориясы әдісі Хартри-Фок және Кон-Шэм формализмдерімен бірге қолданылады. Кон-Шэм формализмінің аясында статикалық сыртқы өрістегі бірнеше өзара әрекеттесетін электрондарды сипаттау мәселесі қандай да бір тиімді потенциалда қозғалатын тәуелсіз электрондардың қарапайым мәселесіне дейін азаяды. Қазіргі уақытта тығыздықтың функционалдық теориясы әдісі кванттық химияда да, қатты денелер физикасы саласында да негізгі тәсіл болып табылады.

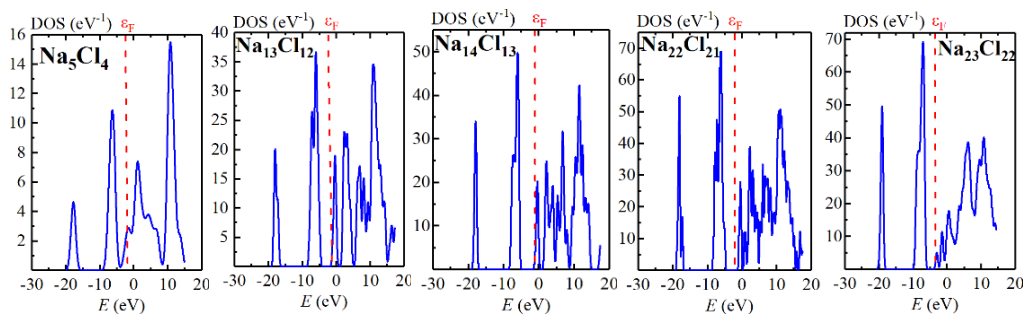
Компьютерлік модельдеу арқылы NaF нанокристалының әртүрлі кластерлік қосылыстарының (Na_5F_4 , $\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$, $\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$, $\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$) күй тығыздығы спектрлері алынды (2-сурет). Мәліметтерге сәйкес, энергия деңгейлері -30-дан 20 эВ аралығында орналасқан. Барлық NaF кристалының кластерлік қосылыстарында негізгі шыңдар -24-25 эВ нүктелерінде байқалады. Негізгі шыңдар Na_5F_4 , $\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$, $\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$ нанокристалдары үшін -6 эВ нүктесінде, ал $\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$, $\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$ нанокристалдары үшін -8 эВ нүктесінде байқалады. Бұл мәліметтер әртүрлі кластерлік құрылымдардың электрондық құрылымы арасындағы ұқсастықтарды және айырмашылықтарды түсінуге көмектеседі.



Сурет 2. NaF нанокристалдарының күй тығыздығының спектрлері

3-суретте NaCl нанокристалының әртүрлі кластерлік қосылыстарындағы (Na_5Cl_4 , $\text{Na}_{14}\text{Cl}_{13}$, $\text{Na}_{13}\text{Cl}_{12}$, $\text{Na}_{23}\text{Cl}_{22}$, $\text{Na}_{22}\text{Cl}_{21}$) күй тығыздығының спектрлері көрсетілген, олар ұқсас әдіспен -20-дан 15 эВ аралығындағы интервалда алынған. Na_5Cl_4 нанокристалының күй тығыздығы спектрі үш негізгі шыңнан тұрады, оның біріншісі -6,5 эВ нүктесінде, ал ең биік шыңы 11 эВ нүктесінде орналасқан. Негізгі

шың -18 эВ нүктесінде орналасқан және бұл барлық келесі нанокристалдарда да байқалады. $\text{Na}_{14}\text{Cl}_{13}$, $\text{Na}_{13}\text{Cl}_{12}$ және $\text{Na}_{22}\text{Cl}_{21}$ нанокристалдарының басты шыңы -6 эВ нүктесінде орналасса, $\text{Na}_{23}\text{Cl}_{22}$ нанокристалында бұл шың -6,5 эВ нүктесінде байқалады. Бұл нәтижелер, өз кезегінде, әртүрлі кластерлік құрылымдардың электрондық қасиеттерін зерттеуге және олардың ерекшеліктерін анықтауға мүмкіндік береді.



Сурет 3. of NaCl нанокристалдарының күй тығыздығының спектрлері

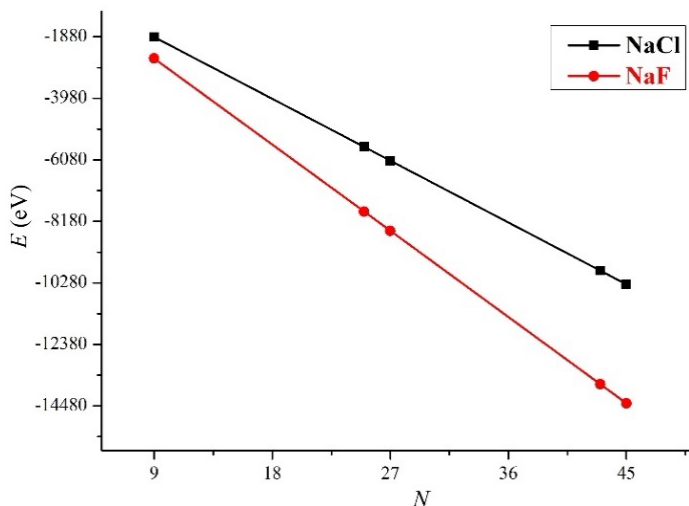
1-кестеде NaF және NaCl нанокристалдарының толық және меншікті энергиясының сандық деректері көрсетілген. NaCl нанокристалдық кластерлік қосылыстарының (Na_5Cl_4 , $\text{Na}_{13}\text{Cl}_{12}$, $\text{Na}_{14}\text{Cl}_{13}$, $\text{Na}_{22}\text{Cl}_{21}$, $\text{Na}_{23}\text{Cl}_{22}$) толық энергиясы -1884.05 эВ-тан -10331.78 эВ-қа дейін өзгереді, ал меншікті энергия -209.33 эВ-тан -229.59 эВ-қа дейінгі аралықта орналасқан. NaF нанокристалдық кластерлік қосылыстары (Na_5F_4 , $\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$, $\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$, $\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$) үшін толық энергия диапазоны -2618.73 эВ-тан -14391.09 эВ-қа дейін, ал меншікті энергия -290.97 эВ-тан -319.80 эВ-қа дейін өзгереді. Бұл деректер нанокристалдардың энергетикалық сипаттамаларын салыстыруға және олардың құрылымына байланысты энергия өзгерісін түсінуге мүмкіндік береді.

Кесте 1 – NaF және NaCl нанокристалдарының толық және меншікті энергиясы

Нанокристалл	Толық энергия, эВ	Меншікті энергия, эВ	Нанокристалл	Толық энергия, эВ	Меншікті энергия, эВ
Na_5Cl_4	-1,884.05	-209.33	Na_5F_4	-2,618.73	-290.97
$\text{Na}_{13}\text{Cl}_{12}$	-5,636.68	-225.46	$\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$	-7,846.92	-313.87
$\text{Na}_{14}\text{Cl}_{13}$	-6,109.61	-226.28	$\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$	-8,503.89	-314.95
$\text{Na}_{22}\text{Cl}_{21}$	-9,859.06	-229.28	$\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$	-13,734.37	-319.40
$\text{Na}_{23}\text{Cl}_{22}$	-10,331.78	-229.59	$\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$	-14,391.09	-319.80

4-суретте NaF (Na_5F_4 , $\text{Na}_{13}\text{F}_{12}$, $\text{Na}_{14}\text{F}_{13}$, $\text{Na}_{22}\text{F}_{21}$, $\text{Na}_{23}\text{F}_{22}$) және NaCl (Na_5Cl_4 , $\text{Na}_{13}\text{Cl}_{12}$, $\text{Na}_{14}\text{Cl}_{13}$, $\text{Na}_{22}\text{Cl}_{21}$, $\text{Na}_{23}\text{Cl}_{22}$) нанокристалдарының кластерлеріндегі элементтер санына байланысты толық энергиялардың графигінің құрылымы көрсетілген. Графикте екі кластерлік объект үшін нүктелердің түзу сызық

бойымен орналасқаны байқалады, яғни олардың арасында сызықтық тәуелділік бар екені анық көрінеді. Бұл сызықтық байланыс кластерлердің мөлшері мен олардың толық энергиясы арасындағы тура пропорцияны көрсетеді, бұл үлкен кластерлердің энергиясының айтарлықтай артуын көрсетеді.



Сурет 4. Толық энергияның NaCl және NaF нанообъектілерінің кластерлік қосылыстарындағы элементтер санына тәуелділігі

Есептеулер тығыздық функционалдық теориясы (DFT) шеңберінде жалпыланған градиентті функционал (GGA) әдісімен жүргізілді. Бұл әдістің сапалық тенденциялары бірқатар галогенидтер үшін алынған мәліметтермен жақсы үйлеседі. Сілтілі галоид иондары үшін энергетикалық аймақтың ені $F > Cl > Br > I$ қатарында азаяды. GGA осы аймақ ені тенденциясын ескере алатындықтан, барлық есептеулер осы жуықтауда орындалды. Оптимизация ATK Lusvardi_SiP_NaCaOF_2008 классикалық потенциалы арқылы жүргізілді, рұқсат етілген күш мәні 0.05 эВ/Å болды. Бұл әдіс есептеулердің дәлдігін қамтамасыз етіп, нанообъектілердің электрондық қасиеттерін зерттеуге мүмкіндік береді.

Қорытынды

Осы жұмыста Atomistix ToolKit бағдарламасымен Virtual NanoLab интерфейсінде модельдеу жүргізіліп, тығыздық функционалдық теориясы шеңберінде келесі зерттеулер жүзеге асырылды:

NaX ($X = \text{F}, \text{Cl}$) нанообъектілерінің әртүрлі кластерлік қосылыстарында (Na_4X_5 , $\text{Na}_{12}\text{X}_{13}$, $\text{Na}_{13}\text{X}_{14}$, $\text{Na}_{21}\text{X}_{22}$, $\text{Na}_{22}\text{X}_{23}$) күй тығыздығының спектрі мен толық энергиясы 1 K температурасында есептелді. Спектр нәтижелері энергия деңгейлерінің -30 эВ -тан 20 эВ -қа дейінгі диапазонда орналасқанын көрсетті.

Барлық зерттелген кластерлер үшін алғашқы айқын байқалатын тар энергия деңгейі NaF нанокристалында -25 эВ , ал NaCl нанокристалында -20 эВ

аймағында анықталды. Бұл негізгі деңгейлер электрондық құрылымның тұрақты ерекшеліктерін көрсетеді.

Кластерлік қосылыстардағы элементтер санына байланысты толық энергияның өзгеруін талдау нәтижелері олардың арасындағы тәуелділіктің сызықтық сипатта екенін көрсетті. Бұл үлкен кластерлердің энергиясы элементтер санына тура пропорционалды өсетінін білдіреді.

Зерттеу нәтижелерікүй тығыздығының айрықша сипаты бұл нанообъектілерді кванттық нүктелер ретінде қарастыруға мүмкіндік беретінін көрсетеді. Кванттық нүктелердің айрықша электрондық құрылымы олардың оптикалық, электрондық және кванттық құрылғыларда қолдану мүмкіндігін арттырады.

Әдебиеттер

Baker, M.D., Baker, A.D., Hanusa, C.R.H., Paltoo, K., Danzig, E., Belanger, J. (2013). Натрий хлориді нанотүтікшелеріндегі байланыс: Маделунг тұрақтылары және когезиялық энергиялар арқылы жана талдау. *Journal of Physical Chemistry*, 117(48), 25742–25747. DOI: 10.1021/jp405978d

Bichoutskaia, E., Pyper, N.C. (2006). LiF тізбектерінің құрылымы мен энергетикасы аз өлшемді сілтілігалоидты нанокристалдар үлгісі ретінде. *Chemical Physics Letters*, 423, 234–239. DOI: 10.1016/j.cplett.2006.03.043

Bryukvina, L., Ivanov, N., Nebogin, S. (2018). Литий және натрий нанобөлшектері арасындағы байланыстар мен LiF және NaF кристалдарындағы түсті орталықтардың гидроксид және магний иондары қоспаларымен түзілуі. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 120, 133–139. DOI: 10.1016/j.jpics.2018.04.001

Chen, Y., Nie, W., Peng, Z., Yu, F., Yang, J., Li, Y. (2022). Фермент тәрізді белсенділігі бар стронций оксидтері: бисфенолдарды жоғары сезімтал ажыратуға арналған колориметриялық сенсорлар массиві. *Sens. Actuators B: Chem.*, 364, 131869. DOI: 10.1016/j.snb.2022.131869

Fernandez-Lima, F.A., Henkes, A.V., da Silveira, E.F., Nascimento, M.A. (2012). Сілтілігалоидты нанотүтікшелер: құрылымы және тұрақтылығы. *Journal of Physical Chemistry*, 116, 4965–4969. DOI: 10.1021/jp208090j

Gopikrishnan, C.R., Jose, D., Datta, A. (2012). Сілтілі галогенидтердің электрондық құрылымы, тор энергиялары және Борн көрсеткіштері: бірінші принциптерден алынған нәтижелер. *AIP Advances*, 2, 2(1), 012131. DOI: 10.1063/1.3684608

Istlyaur A., Myasnikova L., Bezrukovs V., Žalga A., Popov A.I. (2024). Сілтілік металл йодиді кристалдарымен инкапсуляцияланған көміртект нанотүтікшелерінің электрлік қасиеттерін компьютерлік модельдеу. *Fizika Nizkikh Temperatur*, 50, 997 – 1004

Istlyaur A., Myasnikova L., Sergeyev D., Konuhova M., Popov, A.I. (2024). NaF нанотүтікшелерінің күй тығыздығы мен тыйым салынған аймағын компьютерлік модельдеу. *Low Temperature Physics*, 50(7), 569–573. DOI: 10.1063/10.0026283

Lumeau, J., Chamma, K., Glebova, L., Glebov, L. (2014). Фототерморелактивті шыныдағы NaF нанокристалдарын рентгендік дифракциялық зерттеу. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 405, 188–195. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2014.09.019

Mamula, B.P., Kuzmanović, B., Ilić, M.M., Ivanović, N., Novaković, N. (2018). Кейбір қарапайым иондық жүйелердің байланыс механизмі: Сілтілі галогенидтер мен гидридтердің Bader топологиялық талдауын қайта қарау. *Physica B: Condensed Matter*, 545, 146–151. DOI: 10.1016/j.physb.2018.06.008

Messaoudi, I.S., Zaoui, A., Ferhat, M. (2015). Сілтілі галогенидтердегі тыйым салынған аймақ және фондық таралу. *Physica Status Solidi B*, 252(3), 490–495. DOI: 10.1002/pssb.201451268

Myasnikova, A., Mysovskaya, A., Paklin, A., Shalaev, A. (2015). LiF және NaF кристалдарындағы мыс қоспасының құрылымы мен оптикалық қасиеттері: ab initio есептеулері. *Chemical Physics Letters*, 633, 218–222. DOI: 10.1016/j.cplett.2015.05.033

Pandey, R., Yang, X., Vail, J.M., Zuo, J. (1992). NaF кластерлерін бірінші принциптерден туындайтын жұптық потенциалдарды алу және модельдеу. *Solid State Communications*, 81(7), 549–552. DOI: 10.1016/0038-1098(92)90409-3

Safari, M., Maskaneh, P., Moghadam, A.D., Jalilian, J. (2016). Литий галогенидті моноқабаттар: Бірінші принциптер бойынша құрылымдық, электрондық және оптикалық қасиеттер. *Physica E*, 83, 426-433. DOI: 10.1016/j.physe.2016.01.025

Salih, E., Ayesh, A.I. (2020). NO, NO₂ және NH₃ газдарын анықтауға арналған зигзаг тәрізді графен наножилағының сезу өнімділігін арттыру. *Sensors*, 20, 3932. DOI: 10.3390/s20143932

Salih, E., Ayesh, A.I. (2021). Pt-қоспаланған қолтықтық графен наножилағы: CO және CO₂ газдарын анықтауға арналған сенсорлық DFT зерттеуі. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 125, 114418. DOI: 10.1016/j.physe.2020.114418

Shahrokhi, M., Mortazavi, B. (2018). Литий галогенидті моноқабаттар: Бірінші принциптерге негізделген көп денелі есептеулер. *Computational Materials Science*, 143, 103-111. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.11.003

Vemuri, S.K., Chaliyawala, H., Ray, A., Mukhopadhyay, I. (2022). Азотпен қоспаланған графен парақтарын әзірлеуге қуатты тәсіл: Теориялық және эксперименттік негіз. *Journal of Materials Science*, 57, 10714–10723. DOI: 10.1007/s10853-022-07239-z

Zhanturina, N., Aimaganbetova, Z., Drozdowski, W., Taimuratova, L., Seitmuratov, A. (2022) KBr және KCl кристалдарындағы термостимульденген люминесценцияның қармау орталықтарының параметрлерін анықтау. «ҚР ҰҒА баяндамалары» ғылыми журналы, (2), 99–107. <https://doi.org/10.32014/2022.2518-1483.151>

References

Baker, M.D., Baker, A.D., Hanusa, C.R.H., Paltoo, K., Danzig, E., Belanger, J. (2013). Bonding in Sodium Chloride Nanotubes: A New Analysis via Madelung Constants and Cohesive Energies. *Journal of Physical Chemistry*, 117(48), 25742–25747. DOI: 10.1021/jp405978d

Bichoutskaia, E., Pyper, N.C. (2006). Structure and energetics of LiF chains as a model for low dimensional alkali halide nanocrystals. *Chemical Physics Letters*, 423, 234–239. DOI: 10.1016/j.cplett.2006.03.043

Bryukvina, L., Ivanov, N., Nebogin, S. (2018). Relationships between lithium and sodium nanoparticles and color centers formation in LiF and NaF crystals with hydroxide and magnesium ions impurities. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 120, 133-139. DOI: 10.1016/j.jpcs.2018.04.001

Chen, Y., Nie, W., Peng, Z., Yu, F., Yang, J., Li, Y. (2022). Strontium oxides with enzyme-like activity: A colorimetric sensor array for highly sensitive discrimination of bisphenols. *Sens. Actuators B: Chem.*, 364, 131869. DOI: 10.1016/j.snb.2022.131869

Fernandez-Lima, F.A., Henkes, A.V., da Silveira, E.F., Nascimento, M.A. (2012). Alkali Halide Nanotubes: Structure and Stability. *Journal of Physical Chemistry*, 116, 4965–4969. DOI: 10.1021/jp208090j

Gopikrishnan, C.R., Jose, D., Datta, A. (2012). Electronic structure, lattice energies and Born exponents for alkali halides from first principles. *AIP Advances*, 2, 2(1), 012131. DOI: 10.1063/1.3684608

Istlyaup A., Myasnikova L., Bezrukovs V., Žalga A., Popov A.I. (2024). Computer simulation of the electrical properties of carbon nanotubes encapsulated with alkali metal iodide crystals. *Fizika Nizkikh Temperatur*, 50, 997 – 1004

Istlyaup A., Myasnikova L., Sergeyev D., Konuhova M., Popov, A.I. (2024). Computer simulation of the density of states and band structure of NaF nanotubes. *Low Temperature Physics*, 50(7), 569–573. DOI: 10.1063/1.5026283

Lumeau, J., Chamra, K., Glebova, L., Glebov, L. (2014). X-ray diffraction study of NaF nano-crystals in photo-thermo-refractive glass. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 405, 188–195. DOI: 10.1016/j.jnoncrysol.2014.09.019

Mamula, B.P., Kuzmanović, B., Ilić, M.M., Ivanović, N., Novaković, N. (2018). Bonding mechanism of some simple ionic systems: Bader topological analysis of some alkali halides and hydrides revisited. *Physica B: Condensed Matter*, 545, 146-151. DOI: 10.1016/j.physb.2018.06.008

Messaoudi, I.S., Zaoui, A., Ferhat, M. (2015). Band-gap and phonon distribution in alkali halides. *Physica Status Solidi B*, 252(3), 490–495. DOI: 10.1002/pssb.201451268

Myasnikova, A., Mysovskaya, A., Paklin, A., Shalaev, A. (2015). Structure and optical properties of

copper impurity in LiF and NaF crystals from ab initio calculations. *Chemical Physics Letters*, 633, 218-222. DOI: 10.1016/j.cplett.2015.05.033

Pandey, R., Yang, X., Vail, J.M., Zuo, J. (1992). Derivation of Pair Potentials from First Principles and Simulation of NaF Clusters. *Solid State Communications*, 81(7), 549-552. DOI: 10.1016/0038-1098(92)90409-3

Safari, M., Maskaneh, P., Moghadam, A.D., Jalilian, J. (2016). Lithium halide monolayers: Structural, electronic and optical properties by first principles study. *Physica E*, 83, 426-433. DOI: 10.1016/j.physe.2016.01.025

Salih, E., Ayesh, A.I. (2020). Enhancing the Sensing Performance of Zigzag Graphene Nanoribbon to Detect NO, NO₂, and NH₃ Gases. *Sensors*, 20, 3932. DOI: 10.3390/s20143932

Salih, E., Ayesh, A.I. (2021). Pt-doped armchair graphene nanoribbon as a promising gas sensor for CO and CO₂: DFT study. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 125, 114418. DOI: 10.1016/j.physe.2020.114418

Shahrokhi, M., Mortazavi, B. (2018). Lithium halide monolayer sheets: First-principles many-body calculations. *Computational Materials Science*, 143, 103-111. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.11.003

Vemuri, S.K., Chaliyawala, H., Ray, A., Mukhopadhyay, I. (2022). A powerful approach to develop nitrogen-doped graphene sheets: Theoretical and experimental framework. *Journal of Materials Science*, 57, 10714–10723. DOI: 10.1007/s10853-022-07239-z

Zhanturina, N., Aimaganbetova, Z., Drozdowski, W., Taimuratova, L., Seitmuratov, A. (2022). Determination of the parameters of capture centers of thermally stimulated luminescence in KBr and KCl crystals. *Scientific Journal «Reports of NAS RK»*, (2), 99–107. <https://doi.org/10.32014/2022.2518-1483.151>

CONTENTS

PHYSICS

- A. Bekeshev, A. Mostovoy, M. Akhmetova, L. Tastanova**
RESEARCH ON THE PROPERTIES OF EPOXY COMPOSITE MATERIALS
INCORPORATING MODIFIED MINERAL FILLERS.....5
- G. Yensebaeva, I. Makhambayeva, A.Seitmuratov, K. Kanibaikyzy,
Z. Suleimenova**
PROBLEMS ON THE PROPAGATION OF HARMONIC WAVES UNDER
RHEOLOGICAL VISCOUS PROPERTIES OF A MATERIAL.....16
- A.A. Zhadyranova, V. Zhumabekova, U. Ismail, D. Nassirova**
EXPLORING THE POTENTIAL OF YUKAWA USING THE FIZO EFFECT.....33
- A. Istlyaup, L. Myasnikova, A. Lushchik**
COMPUTER SIMULATION OF THE DENSITY OF STATE NaX (X = F, Cl)
NANOOBJECTS.....49
- G.T. Omarova, Zh.T. Omarova**
TO THE ORBITAL DYNAMICS WITH VARIABLE ECCENTRICITY.....61
- A.V. Serebryanskiy, Ch.T. Omarov, G.K. Aimanova, M.A. Krugov**
SPECTRAL OBSERVATIONS OF GEOSTATIONARY SATELLITES AT THE
ASSY-TURGEN OBSERVATORY IN KAZAKHSTAN.....69
- A.K. Shongalova, A. Sailaubek, A.E. Kemelbekova**
OBTAINING BULK CRYSTALS OF ANTIMONY OXYCHLORIDE AND
STUDYING ITS STRUCTURAL CHARACTERISTICS.....82
- S.A. Shomshekova, L.K. Kondratyeva, I.M. Izmailova, C.T. Omarov**
INFRARED OBSERVATIONS OF SYMBIOTIC STARS FROM A CISLUNAR
ORBIT: OBJECTIVES AND PROSPECTS.....90

CHEMISTRY

- A. Abdullin, ©N. Zhanikulov, B. Taimasov, E. Potapova**
INVESTIGATION OF CHEMICAL RESISTANCE OF ZINC-PHOSPHATE
CEMENT UNDER INFLUENCE OF AGGRESSIVE ENVIRONMENTS.....103
- G. Baisalova, Zh. Tukhmetova, B. Torsykbaeva, A. Shukirbekova, Zh. Ussen**
CHEMICAL CONSTITUENTS OF HEXANE EXTRACT OF LYTHRUM
SALICARIA L. ROOTS.....115

N. Bolatkyzy, A.B. Amangeldi, B.E. Dyusebaev, G.E. Berganayeva, M.A. Dyusebaeva STUDY OF AMINO ACIDS AND FATTY ACIDS IN THE COMPOSITION OF THE AERIAL PART OF RUBUS HYBRID.....	125
A.A. Duisenbay, E.K. Assembayeva, M.O. Kozhakhliyeva, D.E. Nurmukhanbetova, A.Zh. Bozhbanov PHYSICOCHEMICAL INDICATORS AND SAFETY OF SOURDOUGH BREAD.....	135
T.K. Jumadilov, G.T. Dyussebayeva, Zh.S. Mukatayeva, J.V. Gražulevicius INVESTIGATION OF ELECTROCHEMICAL AND CONFORMATIONAL PROPERTIES OF INTERPOLYMER SYSTEMS OF CATIONITE KU-2-8 AND ANIONITE P4VP.....	146
V.N. Kryuchkov, I.V. Volkova, A.V. Mozharova, L.K. Seidaliyeva, F.K. Nurbayeva, K.A. Jumasheva MORPHOLOGY OF THE MESONEPHROS IN CARP UNDER EXPERIMENTAL INTOXICATION.....	157
M.K. Kurmanaliev, Zh.D. Alimkulova, Zh.E. Shaikhova, S.O. Abilkasova NEW SORBENTS BASED ON TIACROWN ETHERS: PREPARATION AND APPLICATION FOR SILBER EXTRACTION.....	168
M.T. Telmanov, B.Kh. Khussain, A.Kh. Khussain, A.R. Brodskiy CREATION OF DIGITAL TWINS, INCLUDING THE DECARBONISATION MODULE, IN MODELLING AND VISUALISATION OF FLUE GAS CLEANING SYSTEMS IN INDUSTRIAL PLANTS.....	179

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

А. Бекешев, А. Мостовой, М. Ахметова, Л. Тастанова
ТҮРЛЕНДІРІЛГЕН МИНЕРАЛДЫ ТОЛТЫРҒЫШТАР ҚОСЫЛҒАН
ЭПОКСИДТІК КОМПОЗИТТІК МАТЕРИАЛДАРДЫҢ ҚАСИЕТТЕРІН
ЗЕРТТЕУ.....5

Г. Еңсебаева, И. Махамбаева, А. Сейтмұратов, Қ. Қанибайқызы, Ж. Сүлейменова,
МАТЕРИАЛДЫҢ РЕОЛОГИЯЛЫҚ ТҮТҚЫРЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ НЕГІЗІНДЕ
ГАРМОНИЯЛЫҚ ТОЛҚЫНДАРДЫҢ ТАРАЛУ ЕСЕБІ.....16

А.А. Жадыранова, В. Жумабекова, У. Исмаил, Д. Насирова
ФИЗО ЭФФЕКТИСІН ҚОЛДАНА ОТЫРЫП, ЮКАВА ПОТЕНЦИАЛЫН
ЗЕРТТЕУ.....33

А. Истляуп, Л. Мясникова, А. Лущик
NaX (X = F, Cl) НАНООБЪЕКТІЛЕРІНІҢ КҮЙ ТЫҒЫЗДЫҒЫН
КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ.....49

Г.Т. Омарова, Ж.Т. Омарова
АЙНЫМАЛЫ ЭКСЦЕНТРИСИТЕТІ БАР ОРБИТАЛЫҚ ДИНАМИКАҒА.....61

А.В. Серебрянский, Ч.Т. Омаров, Г.К. Айманова, М.А. Кругов
ҚАЗАҚСТАНДА АССЫ-ТҮРГЕН ОБСЕРВАТОРИЯСЫНДА ГЕОТҰРАҚТЫ
СЕРІКТЕРДІҢ СПЕКТРЛІК БАҚЫЛАУЛАРЫ.....69

А.Қ. Шонғалова, А. Сайлаубек, А.Е. Кемелбекова
СУРЬМА ОКСИХЛОРИДІНІҢ КӨЛЕМДІ КРИСТАЛДАРЫН АЛУ ЖӘНЕ
ОНЫҢ ҚҰРЫЛЫМДЫҚ СИПАТТАМАЛАРЫН ЗЕРТТЕУ.....82

С.А. Шомшекова, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова, Ч.Т. Омаров
АЙҒА ЖАҚЫН ОРБИТАДАҒЫ СИМБИОТИКАЛЫҚ ЖҰЛДЫЗДАРДЫҢ
ИНФРАҚЫЗЫЛ БАҚЫЛАУЛАРЫ: МІНДЕТТЕРІ МЕН БОЛАШАҒЫ.....90

ХИМИЯ

А. Абдуллин, Н. Жаникулов, Б. Таймасов, Е. Потапова
МЫРҒЫШ-ФОСФАТТЫ ЦЕМЕНТІНІҢ АГРЕССИВТІ ОРТАНЫҢ ӘСЕРІНЕ
ХИМИЯЛЫҚ ТӨЗІМДІЛІГІН ЗЕРТТЕУ.....103

Ғ. Байсалова, Ж. Тухметова, Б. Торсыкбаева, А. Шукирбекова, Ж. Усен
LYTHRUM SALICARIA L. ТАМЫРЛАРЫНЫҢ ГЕКСАНДЫ СЫҒЫНДЫСЫНЫҢ
ХИМИЯЛЫҚ КОМПОНЕНТТЕРІ.....115

- Н. Болатқызы, А.Б Амангелді, Б.Е Дюсебаев, Г.Е Берганаева,
М.А Дюсебаева**
RUBUS HYBRID ӨСІМДІГІНІҢ ЖЕР ҮСТІ БӨЛІГІНІҢ ҚҰРАМЫНАН АМИН
ЖӘНЕ МАЙ ҚЫШҚЫЛДАРЫН ЗЕРТТЕУ.....125
- А.А. Дуйсенбай, Э.К. Асембаева, М.О. Кожახиева, Д.Е. Нурмуханбетова,
А.Ж. Божбанов**
ҰЙЫТҚЫ ҚОСЫЛҒАН НАННЫҢ ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫҚ КӨРСЕТКІШТЕРІ
МЕН ҚАУІПСІЗДІГІ.....135
- Т.К. Джумадилов, Г.Т. Дюсембаева, Ж.С. Мукатаева, Ю.В. Гражулявичюс**
КАТИОНИТ КУ-2-8 ЖӘНЕ АНИОНИТ П4ВП ИНТЕРПОЛИМЕРЛІК
ЖҮЙЕЛЕРІНІҢ ЭЛЕКТРОХИМИЯЛЫҚ ЖӘНЕ КОНФОРМАЦИЯЛЫҚ
ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ.....146
- В.Н. Крючков, И.В. Волкова, А.В. Можарова, Л.К. Сейдалиева,
Ф.К. Нурбаева, К.А. Джумашева**
ЭКСПЕРИМЕНТТІК ИНТОКСИКАЦИЯ КЕЗІНДЕГІ ТҰҚЫ
МЕЗОНЕФРОСЫНЫҢ МОРФОЛОГИЯСЫ.....157
- М.Қ. Құрманалиев, Ж.Д. Алимқулова, Ж.Е. Шаихова, С.О. Әбілқасова,**
ТИАКРАУН-ЭФИРЛЕР НЕГІЗІНДЕГІ ЖАҢА СОРБЕНТТЕР: АЛУ ЖӘНЕ
КҮМІСТІ БӨЛУ ҮШІН ҚОЛДАНУ.....168
- М.Т. Тельманов, Б.Х. Хусаин, А.Х. Хусаин, А.Р. Бродский**
ЦИФРЛЫҚ ЕГІЗДЕРДІ ҚҰРУ, ДЕКАРБОНИЗАЦИЯ МОДУЛІМЕН БІРГЕ
ӨНЕРКӘСІПТІК КӘСІПОРЫНДАРДЫҢ ТҮТІН ГАЗДАРЫН ТАЗАРТУ
ЖҮЙЕЛЕРІН МОДЕЛЬДЕУ ЖӘНЕ ВИЗУАЛИЗАЦИЯЛАУ.....179

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

А. Бекешев, А. Мостовой, М. Ахметова, Л. Тастанова
ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ЭПОКСИДНЫХ КОМПОЗИТНЫХ
МАТЕРИАЛОВ С МОДИФИЦИРОВАННЫМИ МИНЕРАЛЬНЫМИ
НАПОЛНИТЕЛЯМИ.....5

**Г. Енсебаева, И. Махамбаева, А. Сейтмуратов, К. Канибайкызы,
Ж. Сулейменова**
ЗАДАЧИ О РАСПРОСТРАНЕНИИ ГАРМОНИЧЕСКИХ ВОЛН ПРИ
РЕОЛОГИЧЕСКИХ ВЯЗКИХ СВОЙСТВАХ МАТЕРИАЛА.....16

А.А. Жадыранова, В. Жумабекова, У. Исмаил, Д. Насирова
ИЗУЧЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ЮКАВЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭФФЕКТА
ФИЗО.....33

А. Истляуп, Л. Мясникова, А. Лущик
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЯ
НАНООБЪЕКТОВ NaX (X = F, Cl).....49

Г.Т. Омарова, Ж.Т. Омарова
К ОРБИТАЛЬНОЙ ДИНАМИКЕ С ПЕРЕМЕННЫМ
ЭКЦЕНТРИСИТЕТОМ.....61

А.В. Серебрянский, Ч.Т. Омаров, Г.К. Айманова, М.А. Кругов
СПЕКТРАЛЬНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ ГЕОСТАЦИОНАРНЫХ СПУТНИКОВ НА
ОБСЕРВАТОРИИ АССЫ-ТУРГЕНЬ В КАЗАХСТАНЕ.....69

С.А. Шомшекова, Л.Н. Кондратьева, И.М. Измайлова, Ч.Т. Омаров
ИНФРАКРАСНЫЕ НАБЛЮДЕНИЯ СИМБИОТИЧЕСКИХ ЗВЕЗД
С ОКОЛОЛУННОЙ ОРБИТЫ: ЗАДАЧИ И ПЕРСПЕКТИВЫ.....82

А.К. Шонгалова, А. Сайлаубек, А.Е. Кемелбекова
ПОЛУЧЕНИЕ ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛОВ ОКСИХОЛОРИДА СУРЬМЫ И
ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК.....90

ХИМИЯ

А. Абдуллин, Н. Жаникулов, Б. Таймасов, Е. Потапова
ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ СТОЙКОСТИ ЦИНК-ФОСФАТНОГО
ЦЕМЕНТА ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ АГРЕССИВНЫХ СРЕД.....103

- Г. Байсалова, Ж. Тухметова, Б. Торсыкбаева, А. Шукирбекова, Ж. Усен**
ХИМИЧЕСКИЕ КОМПОНЕНТЫ ГЕКСАНОВОГО ЭКСТРАКТА КОРНЕЙ
LYTHRUM SALICARIA L.....115
- Н. Болаткызы, А.Б Амангелди, Б.Е. Дюсебаев, Г.Е Берганаева,
М.А Дюсебаева**
ИССЛЕДОВАНИЕ АМИНОКИСЛОТ И ЖИРНЫХ КИСЛОТ В
СОСТАВЕ НАДЗЕМНОЙ ЧАСТИ *RUBUS HYBRID*.....125
- А.А. Дуйсенбай, Э.К. Асембаева, М.О. Кожахиева, Д.Е. Нурмуханбетова,
А.Ж. Божбанов**
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ И БЕЗОПАСНОСТЬ ХЛЕБА
С ЗАКВАСКОЙ.....135
- Т.К. Джумадилов, Г.Т. Дюсембаева, Ж.С. Мукатаева, Ю.В. Гражулявичюс**
ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ И КОНФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ
ИНТЕРПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ КАТИОНИТА КУ-2-8 И АНИОНИТА
П4ВП.....146
- В.Н. Крючков, И.В. Волкова, А.В. Можарова, Л.К. Сейдалиева,
Ф.К. Нурбаева, К.А. Джумашева**
МОРФОЛОГИЯ МЕЗОНЕФРОСА КАРПА ПРИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
ИНТОКСИКАЦИИ.....157
- М.К. Курманалиев, Ж.Д. Алимкулова, Ж.Е. Шаихова, С.О. Абилкасова**
НОВЫЕ СОРБЕНТЫ НА ОСНОВЕ ТИАКРАУН-ЭФИРОВ: ПОЛУЧЕНИЕ И
ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ СЕРЕБРА.....168
- М.Т. Телманов, Б.Х. Хусаин, А.Х. Хусаин, А.Р. Бродский**
СОЗДАНИЕ ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ, ВКЛЮЧАЯ МОДУЛЬ
ДЕКАРБОНИЗАЦИИ, ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ СИСТЕМ
ОЧИСТКИ ДЫМОВЫХ ГАЗОВ ПРОМЫШЛЕННЫХ
ПРЕДПРИЯТИЙ.....179

Publication Ethics and Publication Malpractice in the journals of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan

For information on Ethics in publishing and Ethical guidelines for journal publication see <http://www.elsevier.com/publishingethics> and <http://www.elsevier.com/journal-authors/ethics>.

Submission of an article to the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan implies that the work described has not been published previously (except in the form of an abstract or as part of a published lecture or academic thesis or as an electronic preprint, see <http://www.elsevier.com/postingpolicy>), that it is not under consideration for publication elsewhere, that its publication is approved by all authors and tacitly or explicitly by the responsible authorities where the work was carried out, and that, if accepted, it will not be published elsewhere in the same form, in English or in any other language, including electronically without the written consent of the copyright-holder. In particular, translations into English of papers already published in another language are not accepted.

No other forms of scientific misconduct are allowed, such as plagiarism, falsification, fraudulent data, incorrect interpretation of other works, incorrect citations, etc. The National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan follows the Code of Conduct of the Committee on Publication Ethics (COPE), and follows the COPE Flowcharts for Resolving Cases of Suspected Misconduct (http://publicationethics.org/files/u2/New_Code.pdf). To verify originality, your article may be checked by the originality detection service Cross Check <http://www.elsevier.com/editors/plagdetect>.

The authors are obliged to participate in peer review process and be ready to provide corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. All authors of a paper should have significantly contributed to the research.

The reviewers should provide objective judgments and should point out relevant published works which are not yet cited. Reviewed articles should be treated confidentially. The reviewers will be chosen in such a way that there is no conflict of interests with respect to the research, the authors and/or the research funders.

The editors have complete responsibility and authority to reject or accept a paper, and they will only accept a paper when reasonably certain. They will preserve anonymity of reviewers and promote publication of corrections, clarifications, retractions and apologies when needed. The acceptance of a paper automatically implies the copyright transfer to the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan.

The Editorial Board of the National Academy of sciences of the Republic of Kazakhstan will monitor and safeguard publishing ethics.

Правила оформления статьи для публикации в журнале смотреть на сайте:

www.nauka-nanrk.kz

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

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

Директор отдела издания научных журналов НАН РК *А. Ботанқызы*

Редакторы: *Д.С. Аленов, Ж.Ш. Әден*

Верстка на компьютере *Г.Д. Жадырановой*

Подписано в печать 13.12.2024.

Формат 60x88¹/₈. Бумага офсетная. Печать - ризограф.

12,5 п.л. Тираж 300. Заказ 4.