

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

2024 • 2



ҚАЙЫРЫМДЫЛЫҚ ҚОРЫ
HALYK
CHARITY FOUNDATION

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

БАЯНДАМАЛАРЫ

ДОКЛАДЫ

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

REPORTS

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

PUBLISHED SINCE JANUARY 1944

ALMATY, NAS RK



ЧФ «ХАЛЫҚ»

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Б А С Р Е Д А К Т О Р :

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

Р Е Д А К Ц И Я Л Ы Қ А Л Қ А :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

«Қазақстан Республикасы Ұлттық ғылым академиясының баяндамалары»

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

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

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

Мерзімділігі: жылына 4 рет. Тиражы: 300 дана.

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

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

ГЛАВНЫЙ РЕДАКТОР:

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

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ХАРИН Станислав Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, академик НАН РК, Казахстано-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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

PHYSICAL SCIENCES

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

ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 7–16

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.273>

© **M.B. Albatyrova***, **A.Zh. Alibek**, **A.S. Zhetpisbayeva**, 2024

Astana IT University, Astana, Kazakhstan.

E-mail: m.albatyrova@astanait.edu.kz

MODELING PHYSICAL PHENOMENA USING PYTHON

Albatyrova Merey Babaykyzy — Master in Natural Sciences, teacher of Department of Intelligent System and Cybersecurity, Astana IT University, Astana, Kazakhstan

E-mail: m.albatyrova@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0002-8075-9393;

Aigerim Alibek Zhenisbekkyzy — Master in Information Security, teacher of Department of Intelligent System and Cybersecurity, Astana IT University, Astana, Kazakhstan

E-mail: A.Zhenisbekkyzy@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0002-0869-9066;

Zhetpisbayeva Aliya Seilkhanovna — Master Degree Electrical Engineering, teacher of Department of Intelligent System and Cybersecurity, Astana IT University, Astana, Kazakhstan

E-mail: A.Zhetpisbayeva@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0004-9542-5817;

Abstract. The significance of this research topic lies in the need to the necessity to simulate rogue waves using information technology tools. This is especially crucial in the current trend towards finding connections between natural phenomena and programming. Rogue waves are massive in scale, appearing suddenly and significantly larger than the surrounding waves, seemingly emerging from nowhere. (Hager et al., 2024). By examining these scholarly data on waves, we can comprehend and forecast their behavior using physics and programming. Into the bargain, by altering the frequency, amplitude, and together with the parameters of the seed solutions in a programming language, we can achieve our outcomes. The immediate objective of this research project is to measure the methods for solving nonlinear differential integrable equations to model rogue waves, especially the Darboux transform (Albatyrova et al., 2023) and simulated the results in the multi-paradigm programming language Python. The Darboux transformation enables the creation of various intriguing solutions, such as soliton and rogue wave solutions, for nonlinear integrable equations. The central significance of the research is the use of programming languages for modeling nonlinear differential equations to establish a theoretical framework for experimentally manipulating three-dimensional rogue waves along with offering motivation for mitigating rogue wave disasters in marine environments in nature.

Keywords: nonlinear differential equation, rogue waves, Python, modeling, Darboux method, spin, spintronics, soliton

© М.Б. Альбатырова*, А.Ж. Алибек, А.С. Жетписбаева, 2024

Astana IT University, Астана, Қазақстан.

E-mail: m.alбатырова@astanait.edu.kz

PYTHON ПАЙДАЛАНУ АРҚЫЛЫ ФИЗИКАЛЫҚ ҚҰБЫЛЫСТАРДЫ МОДЕЛЬДЕУ

Альбатырова Мерей Бабайқызы — жаратылыстану ғылымдарының магистрі, «Зияткерлік жүйе және киберқауіпсіздік» кафедрасының оқытушысы, Астана IT Университеті, Астана, Қазақстан
E-mail: m.alбатырова@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0002-8075-9393;

Әйгерім Әлібек Жәнісбекқызы — ақпараттық қауіпсіздік магистрі, «Зияткерлік жүйе және киберқауіпсіздік» кафедрасының оқытушысы, Астана IT Университеті, Астана, Қазақстан
E-mail: A.Zhenisbekkyzy@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0002-0869-9066;

Жетписбаева Әлия Сейілханқызы — «Электротехника» мамандығы бойынша магистр, «Зияткерлік жүйелер және киберқауіпсіздік» кафедрасының оқытушысы, Астана IT Университеті, Астана, Қазақстан
E-mail: A.Zhetpisbayeva@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0004-9542-5817.

Аннотация. Зерттеу тақырыбының маңыздылығы ақпараттық технологияларды қолдана отырып, жойқын толқындарды модельдеу қажеттілігінде. Бұл әсіресе табиғи құбылыстар мен ақпараттық технологиялар арасындағы байланыстарды табудың қазіргі тенденциясында өте маңызды. Жойқын толқындар күтпеген жерден пайда болатын сияқты үлкен масштабқа ие, кенеттен пайда болады және қоршаған толқындардан едәуір үлкен. Толқындарды зерттеу арқылы біз олардың мінез-құлқын физика мен бағдарламалау арқылы түсініп, болжай аламыз. Сонымен қатар, бағдарламалық тілдегі бастапқы шарттардың жиілігін, амплитудасын және параметрлерін өзгерту арқылы біз әртүрлі нәтижелерге қол жеткіземіз. Бұл зерттеу жобасының тікелей мақсаты - осы толқындарды Дарбу әдісін қолданып, Python бағдарламалау тілінде модельдеу (Alбатырова et al., 2023). Дарбу түрлендіруі сызықтық емес интегралданатын теңдеулер үшін солитондар мен жойқын толқындар сияқты әртүрлі қызықты шешімдерді жасауға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: сызықсыз дифференциалды теңдеулер, жойқын толқындар, Python, модельдеу, Дарбу әдісі, спин, спинтроника, солитон

© М.Б. Альбатырова*, А.Ж. Алибек, А.С. Жетписбаева, 2024

Astana IT University, Астана, Қазақстан.

E-mail: m.alбатырова@astanait.edu.kz

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ PYTHON

Альбатырова Мерей Бабайқызы — магистр естественных наук, преподаватель кафедры интеллектуальных систем и кибербезопасности, Astana IT University, Астана, Қазақстан
E-mail: m.alбатырова@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0002-8075-9393;

Айгерим Алибек Женисбеккызы — магистр в области информационной безопасности, преподаватель кафедры интеллектуальных систем и кибербезопасности, Astana IT University, Астана, Казахстан

E-mail: A.Zhenisbekkyzy@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0002-0869-9066;

Жетписбаева Алия Сеилхановна — магистр электротехники, преподаватель кафедры интеллектуальных систем и кибербезопасности, Astana IT University, Астана, Казахстан

E-mail: A.Zhetpishbayeva@astanait.edu.kz; ORCID ID: 0009-0004-9542-5817.

Аннотация. Значимость данной темы исследования заключается в необходимости моделирования разрушающихся волн с использованием информационных технологий. Это особенно важно в современной тенденции нахождения связей между природными явлениями и программированием. Разрушающиеся волны имеют колоссальный масштаб, внезапно появляясь и значительно превышая по размерам окружающие волны, кажется, что они возникают из ниоткуда. Изучая волны, мы можем понять и прогнозировать их поведение, используя физику и программирование. Кроме того, изменяя частоту, амплитуду и параметры начальных условий в программном языке, мы можем получить различные результаты. Непосредственной целью данного исследовательского проекта является изучение методов решения нелинейных дифференциальных интегрируемых уравнений для моделирования этих волн, особенно метода Дарбу (Albatyrova et al., 2023), и моделирование результатов на языке программирования Python. Преобразование Дарбу позволяет создавать различные интересные решения, такие как солитоны и разрушающиеся волны для нелинейных интегрируемых уравнений. Основное значение исследования заключается в использовании языков программирования для моделирования нелинейных дифференциальных уравнений с целью создания теоретической основы для экспериментального управления трехмерными волнами, а также мотивации для предотвращения катастроф с роговыми волнами в морских условиях в природе.

Ключевые слова: нелинейное дифференциальное уравнение, разрушающиеся волны, Python, моделирование, метод Дарбу, спин, спинтроника, солитон

Introduction

The study of spins, modeling of rogue waves, spintronics, and nonlinear differential equations are interconnected through the need to solve complex nonlinear differential equations in the design and analysis of spintronic devices. This process enhances understanding and prediction of the dynamics of spins and waves within such systems, facilitating the development of new device types that operate more quickly and efficiently than traditional electronic devices. Researching and modeling the solutions to these equations helps in better comprehending their behavior.

Recently, many educational institutions have improved their theoretical and experimental physics courses through the integration of information technology. This summary describes our experience creating a course on theoretical physics using the Python programming language of choice. The main goal of this course is to prepare students to model physics problems using programming languages. In my article, I will demonstrate the use of a programming language to model nonlinear differential waves, highlighting the connection between physics and information technology.

Many reasons to choose Python were based on several significant advantages, such as its free availability, Python's syntax is clear and understandable, making it ac-

cessible even to those new to programming. Python also supports interactive plotting functions, such as those found in matplotlib. While object-oriented programming (Backer et al., 2007) is possible with Python, it is not required, meaning that the focus may be on solving physics problems with a computer rather than mastering the more complex aspects of Python. However, Python is also attractive to students with more advanced programming knowledge (Backer et al., 2007).

The paper (Gennadiy et al., 2023) investigated one notable example, where a study examining soliton dynamics in the nonlinear Schrödinger equation in Python. The time progression of the partial differential equation was calculated using a linear approach with explicit sampling of the spatial components. Object-oriented programming and silent compilation were used to speed up computing processes. The use of a specific package made it possible to conduct numerical studies of physical phenomena, where considered nonlinear Schrödinger equation

Methods and materials

The paper (Hemmen et al., 1984) explores the arrangement of all spins in ferromagnets at low temperatures. The concept of spin describes the rotation of a particle around its own axis. Quantum spin systems represent a fascinating area of physics. In these systems, spins act as nanoscale magnets and interact following the principles of quantum mechanics. Although these magnets are atomically small, the substantial rotation of electrons around their axis produces observable effects. Because spin systems serve as primary models for quantum magnetic insulators, they are applicable to various types of magnets (John et al., 2010).

Samuel Goudsmit's book chronicles his collaboration with the promising scientist George Uhlenbeck and their work with other notable scientists in discovering electron spin (Albatyrova et al., 2023). Their investigations into the Pauli exclusion principle, employing quantum numbers m_1 and m_2 , led to the revelation that elementary particles exhibit four degrees of freedom, which affirmed the presence of electron spin. This breakthrough also accounted for why the value of m is always either positive or negative one-half. Furthermore, they found that elementary particles possess intrinsic magnetic moments equal to the Bohr magneton (Li et al., 2016).

The physicist Werner Heisenberg was the first scientist to engage with the innovative ideas introduced by Uhlenbeck and Goudsmit. He applied the concept of spin to create a new approach to quantum mechanics, which later became recognized as Heisenberg's quantum mechanics (Li et al., 2016).

The swift advancement of technology in the 21st century has significantly miniaturized our devices, leading to rapid changes in their architecture. This evolution presents challenges for scientists in data storage and conservation. Traditionally, capacitors are used to store data through electron charges, but as these charges begin to diminish, an alternative is sought. In this scenario, scientists opt to utilize the spin of elementary particles to transmit information, taking advantage of the particles' inherent property of coherence for quicker data transfer. Yet, as storage units shrink, electron leakage occurs, resulting in data loss. Additionally, transmitting information via spin over long distances poses a challenge. To overcome these issues, researchers are increasingly turning to spintronics as a viable solution (Li et al., 2016).

Spintronics represents an innovative area within technology. This field focuses on studying electron spins, which can function both as information transmitters and data

carriers. Leveraging these characteristics of elementary particles, it is feasible to accelerate the transfer of information (Li et al., 2016).

In spintronics, electron spins are also utilized. This involves considering the rotational properties of electrons. Specifically, “spin up” is visualized as having the north pole at the top, while “spin down” represents the reverse orientation (Albatyrova et al., 2023).

Researchers have developed a novel method for data storage by substituting capacitors with a device composed of two ferromagnetic layers separated by an insulator. In the arrangement, the domains within the first ferromagnetic layer align their vectors uniformly when influenced by the presence of the insulator in the second layer. Electrons are allowed to pass only when both ferromagnetic layers are aligned in the same direction, which represents a ‘one’. If the alignments differ, it represents a ‘zero’. This type of insulator, known as a topological insulator, is set apart from other materials by its ability to induce a directed movement of electron spins on its surface. This spin characteristic is then utilized to facilitate information transfer.

The technique mentioned in (Albatyrova et al., 2023) can be applied to depict dynamic systems and provide an introduction to Lax pairs. From the research documented by (Myrzakulov et al., 2016), it is understood that the Kuralay IIA Equation is formulated as follows:

$$S_t - S\Lambda S_t - uS_x = 0, \quad (1)$$

$$u_x - \frac{1}{2}(S_t^2)_t = 0, \quad (2)$$

where $\mathbf{S} = (S_1, S_2, S_3)$ represents a spin vector, which has a length of $|\mathbf{S}| = 1$. The Lax pair for our model is presented as follows (Myrzakulov et al., 2022; Myrzakulov et al., 2016; Myrzakulov et al., 2022; Nugmanova et al., 2022)

$$\psi_x = Y\psi, \quad (3)$$

$$\psi_t = N\psi, \quad (4)$$

in which

$$Y = -i\lambda S, \quad (5)$$

$$N = \frac{2\lambda}{1 - 2\lambda} P, \quad (6)$$

where P we can identify as

$$P = 0.25([S, S_t] + 2idS), \quad (7)$$

in this context, d denotes a scalar potential. Also, the spin vector is expressed in matrix format

$$S = \begin{pmatrix} S_3 & S^- \\ S^+ & -S_3 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$S^\pm = S_1 \pm iS_2,$$

We examined the Darboux method, which is a convenient technique for generating fresh solutions to nonlinear integrable equations. As described in (Albatyrova et al., 2023), the Darboux transformation offers an entirely algebraic approach that allows for successive continuation (Baoqun et al., 1998).

However, the Darboux transformation method, used for solving certain nonlinear evolution equations, is comparatively simpler and more elementary, although it can still provide soliton solutions.

Soliton equations play a crucial role in various fields like nonlinear optics, deep water wave theory, and plasma physics. Many methods exist to derive exact solutions for these equations, including the backscattering method, bilinear method, Darboux transform method, and algebraic geometry method. Numerous intriguing exact solutions have been discovered, including the well-known pure soliton solution, finite band potential solution, and pole expansion solution. Among these approaches, the Darboux transformation has garnered increasing attention and has seen rapid development in theoretical studies of soliton and polarizable systems. As detailed in References (Myrzakulov et al., 2022; Nugmanova et al., 2022; Xinhui et al., 2023), the Darboux transformation offers a wholly algebraic and potent means of obtaining new solutions to nonlinear problems from existing ones (Chuanzhong et al., 2012).

The Darboux transformation is a robust algebraic technique frequently utilized to generate new solutions for nonlinear differential equations based on pre-existing ones. It proves especially useful in soliton theory for equations like the Korteweg-de Vries and nonlinear Schrödinger equations. An essential aspect of the Darboux transformation is its capability to form new soliton hierarchies and investigate their bi-Hamiltonian structures. These features are crucial for analyzing the integrability and solutions of such equations (Chuanzhong et al., 2012). Recently, the Darboux transformation has been used to obtain rogue wave solutions for the equations (Jieming et al., 2013).

The Darboux transformation is highly effective in deriving various solutions for the equations, which are beneficial in elucidating phenomena in nonlinear optics (Herbst et al., 2013).

In the article (Albatyrova et al., 2023), we achieved first fold Darboux transformation for the analyzed spin system. We will use the components of the spin matrix following expressions:

$$S^{+'} = S^+ + i \left(\frac{(\lambda_1^{-1} - \lambda_2^{-1}) \psi_1^* \psi_2}{\Delta} \right)_x, \quad (10)$$

$$S^{-'} = S^- - i \left(\frac{(\lambda_1^{-1} - \lambda_2^{-1}) \psi_1 \psi_2^*}{\Delta} \right)_x, \quad (11)$$

$$S'_{\ 3} = S_3 - i \left(\frac{(\lambda_1^{-1} |\psi_1| - \lambda_2^{-1} |\psi_2|)}{\Delta} \right)_x \quad (12)$$

we can recognize the unknown value as $\Delta = |\psi_1| + |\psi_2|$. With this information, we are now prepared to develop different types of rogue wave solutions using these values.

The next step is finding new rogue wave solutions for our model. To discover the exact solution, we select a solution to the linear spectral problem, denoted as $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$ in which

$$\psi_i = e^{i\theta_i}, \quad (13)$$

where

$$\psi_1 = e^{i\theta_1}, \quad (14)$$

$$\psi_2 = e^{i\theta_2}, \quad (15)$$

where θ is a parameter that influences the form and dynamics of the waves. We

will consider this parameter, with n, q, Δ variable parameters, as

$$\theta_1 = nx - qt - \Delta, \tag{16}$$

$$\theta_1 = -(nx - qt - \Delta), \tag{17}$$

According to the article (Mackenziey et al., 2019; Gilson et al., 2003), enhancing the parameter that multiplies the nonlinear term in the nonlinear Schrödinger equation, while keeping the initial condition $u(x, 0) = \text{sech}$ constant, results in bound states with progressively more solitons. This leads to much sharper spatial and temporal gradients, posing a tougher challenge for numerical methods than previously encountered, so we will take our seed solution by using expressions (13)-(17) in this form

$$S^+ = g \text{sech}(d(nx - lt + \phi)) \tanh(d(nx - lt + \phi)) e^{i(nx - qt - \Delta)}, \tag{18}$$

$$S^- = g \text{sech}(d(nx - lt + \phi)) \tanh(d(nx - lt + \phi)) e^{-i(nx - qt - \Delta)}, \tag{19}$$

where the sech function describes the soliton with a hyperbolic secant curve, known for its stability in form during propagation and interactions. The new outcomes by using expressions (10)-(12) obtained are presented as follows:

$$S^{+'} = g \text{sech}(d(nx - lt + \phi)) \tanh(d(nx - lt + \phi)) e^{i(nx - qt - \Delta)} + (\lambda_1^{-1} - \lambda_2^{-1}) n e^{-2i(nx - qt - \Delta)}, \tag{20}$$

$$S^{-'} = g \text{sech}(d(nx - lt + \phi)) \tanh(d(nx - lt + \phi)) e^{-i(nx - qt - \Delta)} + (\lambda_1^{-1} - \lambda_2^{-1}) n e^{2i(nx - qt - \Delta)}. \tag{21}$$

The wave's oscillatory characteristics are captured by an exponential term with a complex exponent. The Python code for this simulation will be presented, along with the corresponding results (Figures 1-2) for the expression (20)-(21). For the second rogue waves solutions (Gilson et al., 2003), we considered the next expressions

$$\psi_1 = e^{i\gamma_1}, \tag{22}$$

$$\psi_2 = e^{i\gamma_2}, \tag{23}$$

where θ is a parameter that influences the form and dynamics of the waves. We will consider this parameter, with n, q, Δ variable parameters, as

$$\gamma_1 = x^4 + t^4, \tag{24}$$

$$\gamma_2 = -(x^4 + t^4), \tag{25}$$

Expressions for the seed solutions

$$S^+ = \frac{m(j + lm^4 + rm^8)}{1 + qm^2}, \tag{26}$$

$$S^- = \frac{m(j - lm^4 + rm^8)}{1 + qm^2}, \tag{27}$$

here our new rogue wave expressions in the form of (28)-(29)

$$S^{+'} = \frac{m(j + lm^4 + rm^8)}{1 + qm^2} + \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right) x e^{i(x^4 + t^4)}, \tag{28}$$

$$S^{-'} = \frac{m(j - lm^4 + rm^8)}{1 + qm^2} + \left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right) x e^{-i(x^4 + t^4)}, \tag{29}$$

Results and discussion

As a result, through the application of traditional techniques for resolving non-linear integrable equations, new solutions for rogue waves were derived using the Python

programming language. This process allowed for the observation of three-dimensional visualization. We get 3D model (Figures 3–4) for the equations (28)–(29).

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
# Constants
g = 1.0, d = 1.0, l = 1.0, phi = 0.0, delta = 0.0, lambda_1 = 2.0, lambda_2 = 3.0,
m = 1.0, q = 0.0
# Define n and t ranges
n = np.linspace(-10, 10, 400)
t = np.linspace(0, 10, 400)
n, t = np.meshgrid(n, t)
# Compute the values
x = d * (n - l * t + phi)
term1 = g * (1 / np.cosh(x)) * np.tanh(x) * np.exp(1j * (n - q * t - delta))
term2 = (1/lambda_1 - 1/lambda_2) * m * np.exp(-2j * (n - q * t - delta))
S = term1 + term2
# Plotting
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.plot_surface(n, t, np.real(S), cmap='viridis') # Change np.real to np.imag or np.abs
for different properties
ax.set_title('Rogue wave with 1 solution')
ax.set_xlabel('n')
ax.set_ylabel('t')
ax.set_zlabel('(S+)')
plt.show()

```

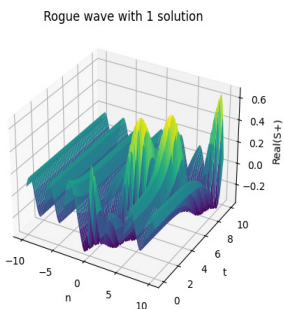


Figure 1. A visual representation of the new soliton solution

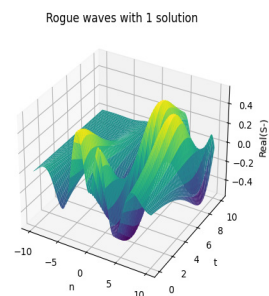


Figure 2. A visual representation of the new solution

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
# Constants m = 1.0, j = 1.0, l = 1.0, r = 0.1, q = 1.0, lambda_1 = 2.0, lambda_2 = 3.0
# Define x and t ranges

```



```

x = np.linspace(-0.5, 2.5, 400)
t = np.linspace(-0.5, 2.5, 400)
x, t = np.meshgrid(x, t)
# First term calculation
first_term = m * (j + 1 * m**4 + r * m**8) / (1 + q * m**2)
# Second term calculation (complex exponential)
coefficient = (1 / lambda_1 - 1 / lambda_2)
second_term = coefficient * x * np.exp(1j * (x**4 + t**4))
# S' expression
S = first_term + second_term
# Plotting
fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.plot_surface(x, t, np.real(S), cmap='viridis')
ax.set_title('Real Part of S+')
ax.set_xlabel('x')
ax.set_ylabel('t')
ax.set_zlabel('Real(S+)')
plt.show()

```

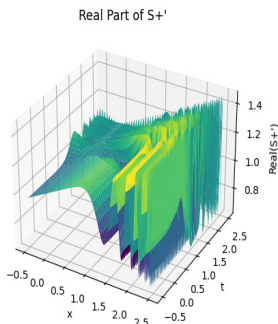


Figure 3. Simulation of the

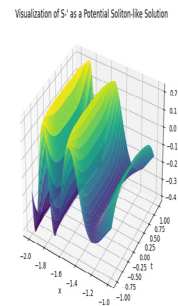


Figure 4. Simulation of the

This article delves into the computational modeling of physical phenomena utilizing the Python programming language. The investigation culminates in an examination of rogue waves as nonlinear differential equations. These waves are described by the nonlinear differential equation. Through the application of the Darboux method for solving the model, we obtained new solutions with new root equations

Conclusion

In conclusion, this research has demonstrated the importance of employing information technology tools to simulate rogue waves, aligning with the current trend of integrating natural phenomena with programming. We obtained the subsequent findings: (1) Novel seed solutions equations were employed for resolving our model (1)–(2), (2) Python was utilized for the emulation of a physical phenomenon, specifically rogue waves.

Through the manipulation of frequency, amplitude, and other parameters within a programming framework, significant outcomes can be achieved. This study has fo-

cused on employing the Darboux transform, a method for solving nonlinear differential integrable equations, to model rogue waves with Python. Using programming languages for such modeling not only establishes a theoretical foundation but also offers insights into mitigating rogue wave disasters in marine environments. By understanding and manipulating three-dimensional rogue waves, this research contributes to enhancing safety measures and minimizing the impact of rogue wave incidents in nature.

REFERENCES

- Albatyrova M.B., Sagidullayeva Zh.M. (2023). Rogue wave and soliton solution for the nonlinear integrable spin model. — Reports of the national academy of sciences of the republic of Kazakhstan. — ISSN 2224-522. — 2. — 346. — Pp. 19–26. — UDC 530.182. <https://doi.org/10.32014/2023.2518-1483.206>. (in ENG).
- Backer A. (2007). Computational Physics Education with Python. *Computing in Science & Engineering*. — 9 (3). — 30–33. <https://doi.org/10.1109/MCSE.2007.48> (in ENG).
- Baoqun L.U., Yong He., Guangjiong Ni. (1998). A Method for Obtaining Darboux Transformations. *Journal of Nonlinear Mathematical Physics*. — 5(2). — 140–148. <https://doi.org/10.2991/jnmp.1998.5.2.5>. (in ENG).
- Chuanzhong L.Iy., Jingsong He. (2012). Darboux transformation and positons of the Inhomogeneous Hirota and The Maxwell-bloch equation. arXiv: Exactly Solvable and Integrable System. — <https://doi.org/10.48550/arXiv.1210.2501>. (in ENG).
- Hager J. (2024, April 24). Primary cause for the formation of rogue waves found. *Polar Journal AG*. — <https://polar-journal.ch/en/2024/04/18/primary-cause-for-the-formation-of-rogue-waves-found/>. (in ENG).
- Hemmen J.L., Brito A.A.S., Wreszinski W.F. (1984). Spin Waves in Quantum Ferromagnet. *Journal of Statistical Physics*. — 37(1):187–213. — <http://dx.doi.org/10.1007/BF01012911>. (in ENG).
- Herbst B.M., Morris J.Ll., Mitchell A.R. (1985). Numerical experience with the nonlinear Schrödinger equation. *Solitons and Nonlinear Wave Equations*. — 60(2). — 282–305. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(85\)90008-7](https://doi.org/10.1016/0021-9991(85)90008-7). (in ENG).
- Gennadiy B. Yessica Y. Calderon-Segura (2023), Application of Python 3.9 framework to investigate the dynamics of vortex-solitons. *Programación Matemática y Software*. — 15(1): 1–8. — ISSN: 2007–3283. <https://doi.org/10.30973/progmat/2023.15.1/1>. (in ENG).
- Gilson C.J., Hietarinta J. Nimmo Y. Ohta. (2003). The Sasa-Satsuma higher order nonlinear Schrodinger equation and its bilinearization and multi-soliton solutions. — *Exactly Solvable and Integrable Systems*. — <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.68.016614>. (in ENG).
- John, B.P., Damian, J.J.F. (2010) *An Introduction to Quantum Spin System*. Lect. Notes Phys. 816. Berlin: Springer, Berlin Heidelberg, 11 p. ISBN: 1-280-38212-0. (in ENG).
- Jieming Yang, chuanzhong li, tiantian li, zhaoneng cheng (2013). Darboux Transformation and Solutions of the two-component Hirota-Maxwell-Bloch system. arXiv: Exactly Solvable and Integrable Systems. — <https://doi.org/10.1088/0256-307X/30/10/104201>. (in ENG).
- Li, X., Yang, J. (2016) First-principles design of spintronics materials // *National Science Review*. — Oxford: Oxford University Press. — №3. — Pp. 365–381. <http://dx.doi.org/10.1093/nsr/nww026>. (in ENG).
- Myrzakulov R., Nugmanova G., Sagidullayeva Zh., Serikbayev N., Yesmakhanova K., and Yerzhanov K. (2022). Integrable generalized Heisenberg ferromagnet equations in 1+1 dimensions: reductions and gauge equivalence, arXiv: Exactly Solvable and Integrable Systems. — <http://dx.doi.org/10.48550/arXiv.2205.02073>. (in ENG).
- Myrzakulov R., Nugmanova G., Yesmakhanova K., Yersultanova Z.S., Zhassybayeva M. (2016). Darboux Transformation and Exact Solutions of the Integrable Heisenberg Ferromagnetic Equation with Self-Consistent Potentials. — *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* 5. — 13(01). — <http://dx.doi.org/10.1142/s0219887815501340>. (in ENG).
- Myrzakulov R., Nugmanova, G., Sagidullayeva, Zh.M., Yesmakhanova, K. (2022). Soliton solutions of the Kuralay equation via Hirota bilinear method. *Symmetry*. — 14(7). — 1374. <http://dx.doi.org/10.3390/sym14071374>. (in ENG).
- Mackenziey J.A., Mekwi W.R. (2019). An hr-Adaptive Method for the Cubic Nonlinear Schrodinger Equation. *Numerical Analysis*. — <https://doi.org/10.48550/arXiv.1907.02472>. (in ENG).
- Nugmanova G.N., Sagidullayeva Zh.M., Serikbayev N.S., Myrzakulov R. (2022) Integrable Kuralay equations: geometry, solutions and Generalizations, *Symmetry*. — 14(7). — 1374. — 1–16. <http://dx.doi.org/10.3390/sym14071374>. (in ENG).
- Xinhui Wu., Jiawei Hu., Ning Zhang (2023). Solution of High-Order Nonlinear Integrable Systems Using Darboux Transformation. *Axioms*. — 12(11). — 1032. <https://doi.org/10.3390/axioms12111032>. (in ENG).

© N. Beissen^{1*}, H. Quevedo^{1,2,3}, S. Toktarbay¹, M. Zhakipova¹, M. Alimkulova¹,

2024

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

²Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico;

³Dipartimento di Fisica and ICRA, Università di Roma “La Sapienza”, Roma, Italy.

E-mail: nurzada.beissen@kaznu.edu.kz

CURVATURE EIGENVALUES OF THE Q-METRIC

Beissen Nurzada — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate professor, Dean of the Faculty of Physics and Technology, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: nurzada.beissen@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1957-2768>;

Quevedo Hernando — PhD, Professor al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan; Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Mexico, Dipartimento di Fisica and ICRA, Università di Roma “La Sapienza”, Roma, Italy

E-mail: quevedo@nucleares.unam.mx, <https://orcid.org/0000-0003-4433-5550>;

Toktarbay Saken — PhD, Associate professor, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: Saken.Toktarbay@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5699-4476>;

Zhakipova Madina — master, student of PhD doctoral, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: madina.zhakipova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2071-5911>;

Alimkulova Madina — master, student of PhD doctoral, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: m.alimkulova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4977-7980>.

Abstract. In this paper, we perform a detailed examination of the eigenvalues of the Riemann curvature tensor in a specific space-time configuration influenced by a distorted mass distribution. Our focus is on a metric characterized by two crucial parameters representing the mass and the quadrupole moment of the central gravitational source. This source is distinctly separated from the surrounding space-time by a naked singularity at the Schwarzschild radius for the given mass. Our results show that as the proximity to the central source increases, the effect of the quadrupole component becomes significantly more pronounced, leading to notable changes in the curvature eigenvalues. This includes cases where some eigenvalues switch signs, which we interpret as an indication of repulsive gravitational forces. These findings advance our understanding of the complex dynamics in such gravitational fields and emphasize the significant role that higher-order mass moments, such as the quadrupole, play in shaping space-time curvature. This research lays important groundwork for future studies on the behavior of gravitational fields under the influence of intricate mass distributions, particularly in extreme astrophysical conditions.

Keywords: Curvature eigenvalues, quadrupole moment, q-metric, repulsive gravity

© Н. Бейсен^{1*}, Э. Кеведо.^{1,2,3}, С. Токтарбай¹, М. Жакипова¹, М. Алимкулова¹,
2024

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

²Мексика автономды университетінің ядролық ғылымдар институты, Мехико,
Мексика;

³Физика және РАХО департаменті, Рим Сапиенца университеті, Рим, Италия.
E-mail: nurzada.beissen@kaznu.edu.kz

Q-МЕТРИКА ҚИСЫҚТЫҒЫНЫҢ МЕНШІКТІ МӘНДЕРІ

Бейсен Нұрзада — *Физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор*, әл-Фараби ат. ҚазҰУ-нің физика-техника факультеті деканы, Алматы, Қазақстан

E-mail: nurzada.beissen@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1957-2768>;

Кеведо Эрнандо — PhD, Профессор *әл-Фараби ат. ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан*; Мексика автономды университетінің ядролық ғылымдар институты, Мексика, Мехико қ. Физика және РАХО департаменті, Рим Сапиенца университеті, Рим, Италия

E-mail: quevedo@nucleares.unam.mx, <https://orcid.org/0000-0003-4433-5550>;

Токтарбай Сакен — PhD, *қауымдастырылған профессор, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан*

E-mail: Saken.Toktarbay@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5699-4476>;

Жакипова Мадина — *магистр, PhD студенті, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан*

E-mail: madina.zhakipova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2071-5911>;

Алимкулова Мадина — *магистр, PhD студенті, әл-Фараби ат. ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан*

E-mail: m.alimkulova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4977-7980>.

Аннотация. Бұл зерттеуде Риманның қисықтық тензорымен байланысты меншікті мәндеріне кеңістік пен уақыттың ерекше конфигурацияларында жан-жақты талдау жасалды. Бұл кеңістік пен уақыт массаның деформацияланған таралуына байланысты гравитациялық әсерді қамтиды. Біздің талдауымыздың кілті-орталық гравитациялық объекттің массасы мен квадруполалық моментін сипаттау үшін маңызды екі нақты параметрмен анықталған метрика. Бірегей нәрсе-бұл орталық объект сыртқы кеңістік уақытынан массаға сәйкес келетін Шварцшильд радиусында орналасқан жалаңаш сингулярлықпен бөлінген. Біздің нәтижелеріміз орталық көзге жақындаған сайын квадруполь компонентінің әсері айтарлықтай айқын болып, меншікті қисықтық мәндерінің әрекетін айтарлықтай өзгертетінін көрсетеді. Кейбір жағдайларда кейбір меншікті мәндердің белгісі өзгертетіні әсерлі-біз оны итергіш гравитациялық күштердің әрекетінің белгісі ретінде түсіндіреміз. Бұл идеялар осындай гравитациялық өрістерді басқаратын күрделі динамика туралы түсінігімізді кеңейтіп қана қоймайды, сонымен қатар квадруполь сияқты жоғары ретті массалық моменттерінің кеңістік пен уақыт қисығына тигізетін маңызды әсерлерін көрсетеді. Бұл зерттеу, әсіресе экстремалды астрофизикалық жағдайларда, массаның күрделі таралуының әсерінен гравитациялық өрістердің қасиетін одан әрі зерттеудің негізін қалауы мүмкін.

Түйін сөздер: қисықтықтың меншікті мәндері, квадрупольдік момент, q-метрика, тебуші гравитация

Зерттеу Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі Ғылым комитетінің (грант № AP14869876) қаржылық қолдауымен жүзеге

асырылды.

© Н. Бейсен^{1*}, Э. Кеведо.^{1,2,3}, С. Токтарбай¹, М. Жакипова¹, М. Алимкулова¹,
2024

¹Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан;

²Институт ядерных наук национальный автономный университет Мексики,
Мехико, Мексика;

³Департамент Физики и МЦРА, Римский университет «Ла Сапиенца», Рим,
Италия.

E-mail: nurzada.beissen@kaznu.edu.kz

СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ КРИВИЗНЫ Q-МЕТРИКИ

Бейсен Нурзада — Кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Декан физико-технического факультета Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: nurzada.beissen@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-1957-2768>;

Кеведо Эрнандо — PhD, Профессор Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан; Институт ядерных наук национальный автономный университет Мексики, Мексика, г. Мехико; 3Департамент Физики и МЦРА, Римский университет «Ла Сапиенца», Рим, Италия

E-mail: quevedo@nucleares.unam.mx, <https://orcid.org/0000-0003-4433-5550>;

Токтарбай Сакен — PhD, ассоциированный профессор, Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: Saken.Toktarbay@kaznu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-5699-4476>;

Жакипова Мадина — магистр, студент PhD, Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: madina.zhakipova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2071-5911>;

Алимкулова Мадина — магистр, студент PhD, Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: m.alimkulova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4977-7980>.

Аннотация. В этой статье проводится детальный анализ собственных значений тензора кривизны Римана в конкретной конфигурации пространства-времени, подверженной воздействию искаженного распределения массы. Наше внимание сосредоточено на метрике, характеризуемой двумя ключевыми параметрами, представляющими массу и квадрупольный момент центрального гравитационного источника. Этот источник явно отделен от окружающего пространства-времени обнаженной сингулярностью на радиусе Шварцшильда для данной массы. Наши результаты показывают, что с приближением к центральному источнику влияние квадрупольного компонента становится значительно более выраженным, что приводит к заметным изменениям собственных значений кривизны. Это включает случаи, когда некоторые собственные значения меняют знак, что мы интерпретируем как признак отталкивающих гравитационных сил. Эти выводы расширяют наше понимание сложной динамики в таких гравитационных полях и подчеркивают важную роль высших моментов массы, таких как квадруполь в формировании кривизны пространства-времени. Это исследование закладывает важную основу для будущих исследований поведения гравитационных полей под влиянием сложных распределений массы, особенно в экстремальных астрофизических условиях.

Ключевые слова: собственные значения кривизны, квадрупольный момент, q-метрика, отталкивающая гравитация

Introduction

General relativity stands as a foundational theory elucidating the dynamics of gravitational interactions. When dealing with compact celestial bodies, gravitational fields arise from mass distributions, which may exhibit either rotational or stationary characteristics. The most basic stationary solution to Einstein's equations is the Schwarzschild solution, portraying the gravitational field stemming from a spherically symmetric mass distribution. A significant feature of this solution, per Birkhoff's theorem, is its exclusivity as the sole spherically symmetric vacuum solution to Einstein's equations. This theorem also implies the absence of spherically symmetric gravitational waves.

Following the discovery of the Schwarzschild solution, Weyl (Weyl, 2012: 779–810) derived the most general stationary, axially symmetric vacuum solution, expressed in cylindrical coordinates. The Weyl solution is formulated as an infinite series with arbitrary coefficients, theoretically encompassing any axially symmetric solution. The solution's multipole moments are determined by these coefficients, as demonstrated through the calculation of relativistic and invariant Geroch multipole moments. Notably, the Schwarzschild solution emerges as a specific case within this framework, represented by an infinite series with predetermined coefficients.

An alternative approach, introduced by Erez and Rosen, involves considering only one additional multipole moment for the mass distribution. Specifically, the explicit metric expression for a mass possessing a quadrupole moment was derived. Presently, numerous solutions serve as generalizations of the Schwarzschild solution with a quadrupole (Frutos-Alfaro et al., 2018: 170826). This divergence arises from the absence of uniqueness theorems, allowing for multiple exact solutions describing the gravitational field corresponding to a point mass with a quadrupole.

This study concentrates on a particular solution, proposed as the simplest extension of the Schwarzschild solution incorporating a quadrupole (Quevedo, 2011: 1779–1787). This solution is derived by applying a Zipoy-Voorhees transformation to the Schwarzschild solution, resulting in the Zipoy-Voorhees metric, also known as the γ -metric or δ -metric. To underscore its interpretation as a quadrupolar metric (q-metric), we designate it as such.

Our investigation delves into the properties of the q-metric by scrutinizing the behavior of its associated Riemann curvature tensor. We employ the eigenvalues of the curvature tensor, scalar quantities offering coordinate-independent results, as proposed in (Quevedo, 2012: 35–52). This invariant approach facilitates the comparison of different metrics along a given hypersurface. Research in this area remains ongoing (Gutiérrez-Piñeres et al., 2019: 135003; Gutiérrez-Piñeres et al., 2022: 035015). The curvature eigenvalues have also been utilized to define the concept of repulsive gravity invariantly (Luongo et al., 2012: 1029–1031; Luongo et al., 2014: 084032). In our study, we employ this approach to identify regions within the q-metric's spacetime characterized by repulsive gravity effects.

This article unfolds as follows: Section II presents the q-metric and reviews its significant physical and geometric attributes. We interpret this vacuum solution as depicting the gravitational field of a naked singularity, implying that a mass distribution's quadrupole moment can be construed as a source of naked singularities. Section III elu-

cidates the methodology for calculating curvature eigenvalues using the formalism of differential forms and Cartan structure equations. In Section IV, we analyze the behavior of the q-metric's curvature eigenvalues, revealing locations within its spacetime where these eigenvalues transition from attractive to repulsive, indicative of repulsive gravity. Finally, Section V summarizes and discusses our findings.

Research object, materials and methods

The q-metric

We consider the line element of the q-metric in spherical coordinates (t, r, θ, φ) as follows (Boshkayev et al., 2016: 024024)

$$ds^2 = \left(1 - \frac{2m}{r}\right)^{1+q} dt^2 - \left(1 - \frac{2m}{r}\right)^{-q} \left[\left(1 + \frac{m^2 \sin^2 \theta}{r^2 - 2mr}\right)^{-q(2+q)} \left(\frac{dr^2}{1 - \frac{2m}{r}} + r^2 d\theta^2 \right) + r^2 \sin^2 \theta d\varphi^2 \right], \quad (1)$$

where m and q are constant parameters. In the limiting case $q = 0$, the q-metric reduces to the standard Schwarzschild metric in spherical coordinates. It is an exact solution of Einstein vacuum equations with the property of being asymptotically flat. The physical meaning of the parameters m and q can be determined by calculating the corresponding multipole moments. We use the Geroch relativistic definition of multipole moments, which leads to invariant results independently of the coordinates. The main mass multipole moments, $n = 0, 1$, are given by

$$\begin{aligned} M_0 &= (1 + q)m, \\ M_2 &= -\frac{m^3}{3}q(1 + q)(2 + q). \end{aligned} \quad (2)$$

Multipole moments of higher order are proportional to mq and, therefore, can be completely rewritten in terms of M_0 and M_2 . Consequently, the arbitrary parameters m and q determine the mass and quadrupole, which are the only independent multipole moments of the solution. In the limiting case $q = 0$, there remains only the monopole $M_0 = m$ as expected for the Schwarzschild spacetime. Moreover, as a consequence of the symmetry of the solution with respect to the equatorial plane, all odd multipole moments are identically zero.

Two important limits of the multipoles of the q-metric are $m \rightarrow 0$ with $q \neq 0$ and $q \rightarrow -1$ with $m \neq 0$. In both cases, all the multipole moments vanish identically and the corresponding limiting metric can be shown to be equivalent to the Minkowski metric. This means that the limit $M_0 = 0$ leads to a flat spacetime because it corresponds to the case in which no mass is present. This suggests that as q approaches zero, the spacetime tends towards flatness, indicating the absence of mass. Essentially, in the absence of mass, there can be no quadrupole, reflecting a physically reasonable condition.

The above results show that the q -metric describes the gravitational field of a spherically symmetric distribution of mass with total mass M_0 and quadrupole M_2 . By calculating the Newtonian limit of the q -metric with the corresponding quadrupole, one can show that positive (negative) values of M_2 correspond to prolate (oblate) mass distributions.

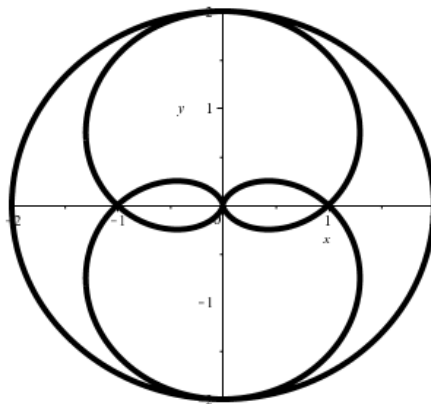
The presence of curvature singularities can be confirmed by examining the Kretschmann scalar $K = R_{\mu\nu\lambda\tau} R^{\mu\nu\lambda\tau}$, which in this case becomes

$$K = \frac{16m^2(1+q)^2}{r^{4(2+2q+q^2)}} \frac{(r^2 - 2mr + m^2 \sin^2 \theta)^{2(2q+q^2)-1}}{(1 - 2m/r)^{2(q^2+q+1)}} L(r, \theta), \tag{3}$$

With

$$L(r, \theta) = 3(r - 2m - qm)^2 (r^2 - 2mr + m^2 \sin^2 \theta) + q(2 + q)m^2 \sin^2 \theta \times [q(2 + q)m^2 + 3(r - m)(r - 2m - qm)]. \tag{4}$$

The limiting Schwarzschild case ($q = 0$) corresponds to the value $K = 48m^2 / r^6$, which shows only one singularity at $r = 0$. In general, the Kretschmann scalar (3) diverges at the origin ($r = 0$) and at the Schwarzschild radius ($r = 2m$), which represents the exterior curvature singularity. Since no horizons are present in this spacetime, the singularity at $r = 2m$



(c)
Fig. 1: Curvature singularities of the q -metric.

The singularities at $r = 2m$ and at $r = 0$ exist for any value of the parameter q . The singularity in the region $0 < r < 2m$ is present only for some values of the parameter q

is naked. The singularity at the origin is present for all real values of q . Moreover, the Kretschmann scalar diverges at the surfaces defined by the condition $r^2 - 2mr + m^2 \sin^2 \theta = 0$ for those values of q in the interval

$q \in \left(-1, -1 + \sqrt{3/2}\right] \setminus \{0\}$. Thus, we see that the presence of a quadrupole turns the Schwarzschild horizon into a naked singularity. In Fig 1, we illustrate the locations of singularities of the spacetime described by the q – metric. Of particular significance for our subsequent analysis is the singularity at $r = 2m$ separates the exterior spacetime, $r > 2m$, from the interior one $0 < r < 2m$. Therefore, in the following sections we will limit ourselves to the study of the exterior part of the spacetime.

Curvature eigenvalues

The primary reason for analyzing the eigenvalues of the Riemann curvature tensor is that these scalar quantities allow for an invariant characterization of gravitational interactions. To compute the eigenvalues, we will utilize the formalism of differential forms, wherein the line element of a metric with coordinates x^μ is represented in terms of local tetrads (1-forms) \mathcal{G}^a as (Bernard et al., 2009: 419; Hawking et al., 2023: 391)

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu \otimes dx^\nu = \eta_{ab} \mathcal{G}^a \otimes \mathcal{G}^b, (5)$$

where $\eta_{ab} = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$ is the local Lorentzian metric and the tetrads are given in terms of the tetrad vectors e^a_μ as

$$\mathcal{G}^a = e^a_\mu dx^\mu. (6)$$

The connection 1-form ω^a_b and the curvature 2-form are determined through the Cartan structure equations

$$d\mathcal{G}^a = -\omega^a_b \wedge \mathcal{G}^b, (7)$$

$$\Omega^a_b = d\omega^a_b + \omega^a_c \wedge \omega^c_b, (8)$$

where d is the exterior derivative and \wedge the exterior product. Finally, the components of the Riemann curvature tensor R_{abcb} are determined in terms of the components of the curvature 2-form as

$$\Omega^a_b = \frac{1}{2} R^a_{bcd} \mathcal{G}^c \wedge \mathcal{G}^d. \quad (9)$$

The non-zero components of the curvature tensor can be put together as a 6×6 matrix

$$R_{AB} = \begin{pmatrix} R_{0101} & R_{0102} & R_{0103} & R_{0123} & R_{0131} & R_{0112} \\ R_{0201} & R_{0202} & R_{0203} & R_{0223} & R_{0231} & R_{0212} \\ R_{0301} & R_{0302} & R_{0303} & R_{0323} & R_{0331} & R_{0312} \\ R_{2301} & R_{2302} & R_{2303} & R_{2323} & R_{2331} & R_{2312} \\ R_{3101} & R_{3102} & R_{3103} & R_{3123} & R_{3131} & R_{3112} \\ R_{1201} & R_{1202} & R_{1203} & R_{1223} & R_{1231} & R_{1212} \end{pmatrix} \quad (10)$$

Furthermore, since the components of the curvature tensor satisfy the symmetry $R_{abcd} = R_{cdab}$, the matrix R_{AB} is symmetric and contains only 21 independent components. If we take into consideration the algebraic Bianchi identity, the number of independent components is further reduced.

$$R_{a[bcd]} = 0, \quad (11)$$

which in terms of the components of the matrix R_{AB} can be expressed as

$$\mathbf{R}_{14} + \mathbf{R}_{25} + \mathbf{R}_{36} = 0, \quad (12)$$

the number of independent components reduces to 20, as expected for the Riemann tensor in four dimensions. The eigenvalues of the curvature tensor can then be easily determined as the eigenvalues of the matrix R_{AB} .

Results

We now proceed to calculate the curvature matrix for the q-metric. The components of the tetrad vectors can be selected as follows:

$$e^{\hat{0}}_0 = f_1^{\frac{1}{2}(1+q)}, e^{\hat{1}}_1 = f_1^{-\frac{1}{2}(1+q)} f_2^{-\frac{q}{2}(2+q)}, \quad (13)$$

$$e^{\hat{2}}_2 = f_1^{-\frac{q}{2}} f_2^{-\frac{q}{2}(2+q)}, e^{\hat{3}}_3 = f_1^{-\frac{q}{2}} r \sin \theta, \quad (14)$$

where

$$f_1 = 1 - \frac{2m}{r}, f_2 = 1 + \frac{m^2 \sin^2 \theta}{r^2 - 2mr}. \quad (15)$$

To avoid confusion, in the above equations, we have marked the indices related to local tetrads with a hat. The calculation of the connection 1-form and curvature 2-form is straightforward. Subsequently, the curvature matrix is constructed based on the non-vanishing components of the Riemann tensor. It turns out that the only non-zero components of the curvature matrix are: $R_{11}, R_{12}, R_{22}, R_{33}, R_{44}, R_{45}, R_{55}$, and R_{66} . We will limit ourselves to the analysis of the curvature on the equatorial plane $\theta = \pi / 2$, where the non-diagonal components of the curvature matrix vanish, i.e., $R_{12}(\theta = \pi / 2) = R_{45}(\theta = \pi / 2) = 0$. Consequently, the eigenvalues $\lambda_i, i = 1, 2, \dots, 6$, of the matrix R_{AB} coincide with the corresponding diagonal components. Finally, we determine that on the equatorial plane, the curvature eigenvalues can be represented as:

$$\lambda_1 = -\lambda_4 = \frac{(4m^2 + 5m^2q^2 + 8m^2q + m^2q^3 - 2mrq^2 - 8mrq - 6mr + 2r^2q + 2^2)m}{r^3(r^2 - 3mr + 2m^2)} \times f_1^q f_2^{q(2+q)} \quad (16)$$

$$\lambda_2 = -\lambda_5 = \frac{m(m^2q^3 + 4m^2q^2 + 5m^2q + 2m^2 - mrq^2 - 4mrq - 3mr + r^2q + r^2)}{r^3(2m^2 - 3mr + r^2)} \times f_1^q f_2^{q(2+q)} \quad (17)$$

$$\lambda_3 = -\lambda_6 = \frac{(mq^2 + 3mq + 2m - rq - r)m}{r^3(2m - r)} f_1^q f_2^{q(2+q)} \quad (18)$$

where the function f_2 is evaluated on the equatorial plane. We see that all the information about the curvature is contained in the eigenvalues λ_1 , λ_2 , and λ_3 . In the limiting case with

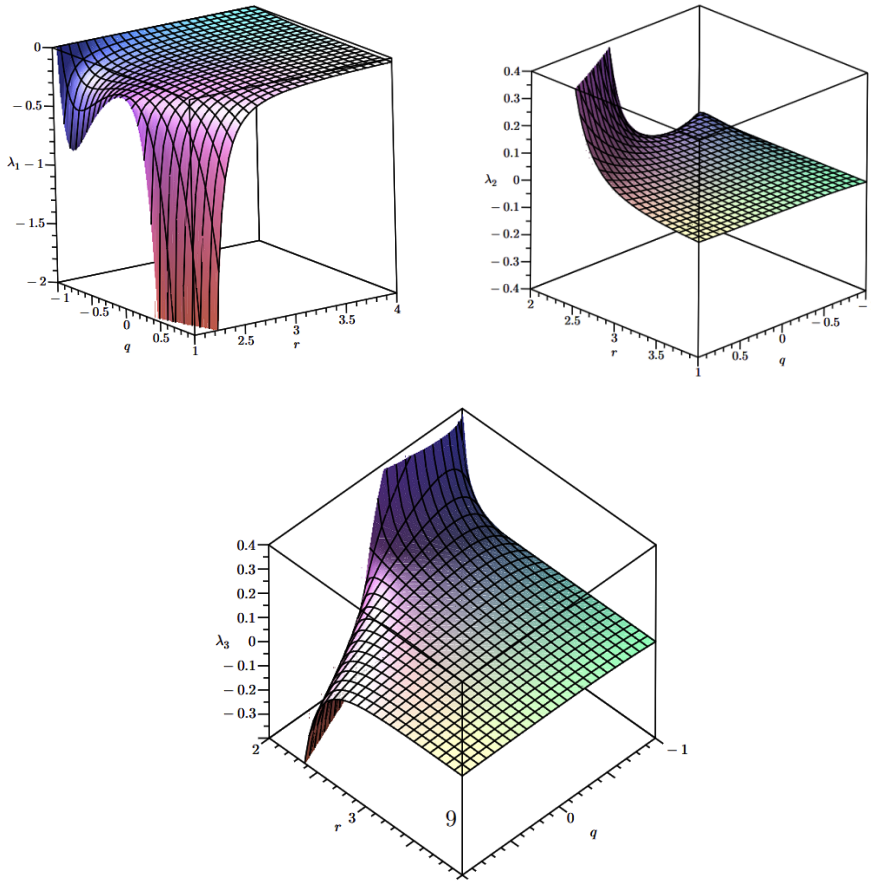


Fig. 2: The curvature eigenvalues of the q -metric as functions of the radial coordinate r and the quadrupole parameter q . The mass parameter has been chosen as $m = 1$

$q = 0$, the eigenvalues reduce to

$$\lambda_2 = \lambda_3 = \frac{m}{r^3}, \quad \lambda_1 = -\frac{2m}{r^2}, \tag{19}$$

which are the curvature eigenvalues of the Schwarzschild metric. Notice that all the eigenvalues vanish for $q = -1$ and arbitrary m and for $m = 0$ and arbitrary q , indicating that the resulting spacetime is flat. This confirms the result obtained above by using the expressions for the multipole moments and the q -metric.

Discussion

Now, we explore how each eigenvalue behaves concerning both the radial coordinate and the quadrupole parameter. The outcomes of our investigation are illustrated in Fig. 2. It becomes evident that all eigenvalues exhibit divergence as the hypersurface $r = 2m$ as the hypersurface is approached, signaling the presence of a curvature singularity. Furthermore, as the radial coordinate increases, the eigenvalues tend asymptotically to zero, confirming the asymptotic flatness property of the q-metric. The most intriguing behavior is observed at the singularity located at $r = 2m$ is approached. In fact, we see that λ_1 is always positive in the entire domain shown in Fig. 1. This is not true in the case of λ_2 and λ_3 . Indeed, we see that these eigenvalues reach a maximum value and then change their sign close to the curvature singularity located at $r = 2m$. This behavior will be investigated in the next section.

To understand the change of sign in the curvature eigenvalues λ_2 and λ_3 , we now consider a particular case for oblate, $q < 0$, and prolate, $q > 0$, mass configurations. The results are illustrated in Fig. 3. In the oblate case ($q = -0.5$), we see that λ_2 changes its sign as the singularity is approached. Instead, λ_3 increases its close to the singularity, without changing its sign. In the case of prolate objects ($q = 0.5$), the roles are interchanged and it is λ_3 , which changes its value from positive to negative. We obtained similar results for other arbitrary values of the quadrupole parameter q . We conclude that, in general, the eigenvalue λ_2 (λ_3) describes the change of behavior in the case of oblate (prolate) mass distributions.

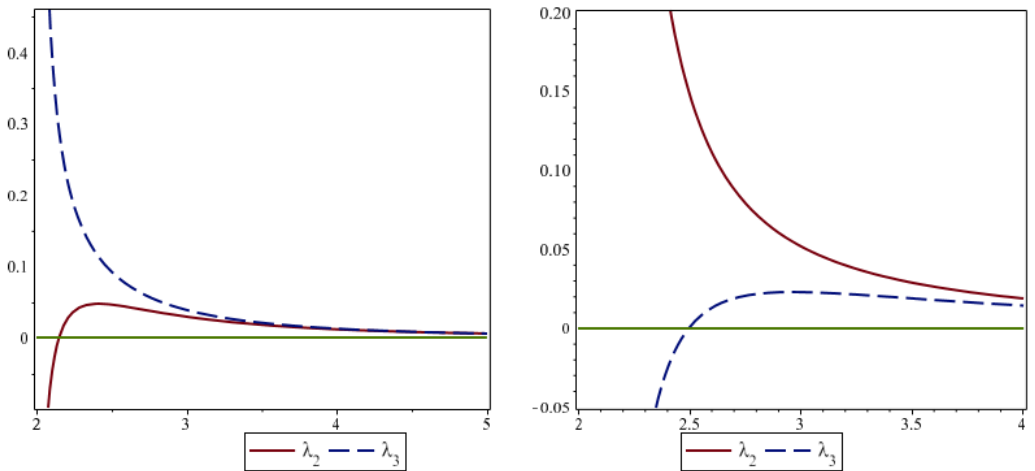


Fig. 3: The curvature eigenvalues λ_2 and λ_3 as functions of the radial coordinate r for $q = -0.5$ (left panel) and $q = 0.5$ (right panel)

For specificity, let's consider the scenario of an oblate object with $q = -0.5$.

From Fig. 3 (left panel), it is evident that λ_2 increases as the singularity is approached, reaching a maximum value at a specific radius $r = r_{rep}$ and subsequently decreases until it changes sign at $r = r_{\dot{u}}$. This behavior is interpreted as a manifestation of repulsive gravity. The repulsion is characterized by two critical radii: the repulsion radius, denoted as $r_{\dot{u}}$, which signifies the onset of repulsion, and the dominance radius, $r_{\ddot{u}}$, indicating where repulsive forces outweigh attractive ones. Generally, the repulsion radius can be defined as the location where the first local extremum appears in λ_2 as the object is approached from infinity, i.e.,

$$\left. \frac{\partial \lambda_2}{\partial r} \right|_{r=r_{\dot{u}}} = 0, \quad (20)$$

whereas the dominance radius is determined by the condition

$$\lambda_2 \Big|_{r=r_{\ddot{u}}} = 0. \quad (21)$$

In the particular case $q = -\dot{u}$, we obtain from the above conditions that $r_{\dot{u}} \approx 2.41m$ and $r_{\ddot{u}} \approx 2.15m$.

In Fig. 4, we show the behavior of the eigenvalue λ_2 as representing the intensity of the gravitational interaction. This illustration can be interpreted as follows. A free particle moving to the central object from any direction on the equatorial plane will experience first an increase of the gravitational attraction, which reaches a maximum at $r_{\dot{u}}$. Then, as the oblate object is further approached, the interaction decreases until it vanishes at $r_{\ddot{u}}$ and from this place on the particle starts to experience a repulsive force.

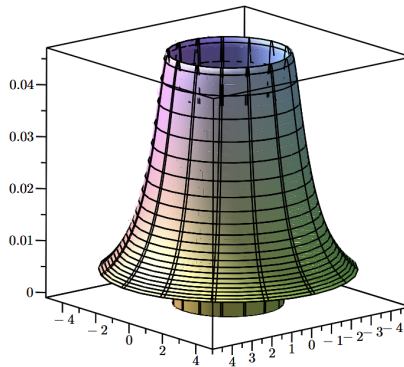


Fig. 4: Three-dimensional representation of the eigenvalue λ_2 on the equatorial plane of the q -metric

In the case of prolate objects ($q > 0$), similar conditions can be defined with λ_3 instead of λ_2 . For the particular case of a mass distribution with $q = \dot{u}$, we obtain $r_{\dot{u}} \approx 2.96m$ and $r_{\ddot{u}} \approx \dot{u} m$.

Conclusion

In this study, we have examined the curvature of the q-metric as a metric for gravitational interaction. To achieve this, we computed the eigenvalues of the Riemann curvature tensor using local tetrads and the formalism of differential forms, ensuring that the results are independent of the coordinate system.

We derived the explicit form of all curvature eigenvalues on the equatorial plane of the q-metric. Notably, we observed that some eigenvalues exhibit distinct behavior by transitioning from positive to negative values in a region close to the curvature singularity located at the hypersurface $r = 2m$. We interpret this phenomenon as indicative of repulsive gravity near the naked singularity described by the q-metric.

Using the curvature eigenvalues, we characterized repulsive gravity in terms of two specific distances: the repulsion radius, which marks the onset of repulsion, and the dominance radius, indicating where repulsion surpasses attraction.

Our analysis focused exclusively on the equatorial plane. Future research should explore the behavior of the eigenvalues as functions of the angular coordinate θ . This remains a significant task for subsequent studies.

REFERENCES

- Bernard F., Schutz K.Ü. (2009). *A First Course in General Relativity*. — Cambridge: Cambridge University Press. 2009. — 412 p. — ISBN 978-1-108-49267-6. (in Eng).
- Boshkayev K. et al. (2016). Motion of test particles in the field of a naked singularity // *Physical Review D*. — 2016. — V. 93. — №. 2. — P. 024024. — <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.90.084032> (in Eng).
- Frutos-Alfaro F., Quevedo H., Sanchez P.A. (2018). Comparison of vacuum static quadrupolar metrics // *Royal Society open science*. 2018. — Vol. 5. — N 5. — Pp. 170826. — <https://doi.org/10.1098/rsos.170826> (in Eng).
- Gutiérrez-Piñeres A.C., Quevedo H. (2019). C3 matching for asymptotically flat spacetimes // *Classical and Quantum Gravity*. 2019. — Vol. 36. — N 13. — Pp. 135003. — DOI:10.1088/1361-6382/ab2422 (in Eng).
- Gutiérrez-Piñeres A. C., Quevedo H. (2022). Darmois matching and C 3 matching // *Classical and Quantum Gravity*. 2022. — Vol. 39. — N 3. — Pp. 035015. — <https://doi.org/10.1088/1361-6382/ac45dc> (in Eng).
- Hawking S.W., Ellis G.F.R. (2023). *The large scale structure of space-time*. — Cambridge university press. 2023. — 391 p. — ISBN 978-1-009-25315-4. (in Eng).
- Luongo O., Quevedo H. (2012). Toward an invariant definition of repulsive gravity // *The Twelfth Marcel Grossmann Meeting: On Recent Developments in Theoretical and Experimental General Relativity, Astrophysics and Relativistic Field Theories (In 3 Volumes)*. 2012. — Pp. 1029–1031. — https://doi.org/10.1142/9789814374552_0122 (in Eng).
- Luongo O., Quevedo H. (2014). Characterizing repulsive gravity with curvature eigenvalues // *Physical Review D*. 2014. — Vol. 90. — N 8. — P. 084032. — <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.90.084032> (in Eng).
- Quevedo H. (2011). Mass quadrupole as a source of naked singularities // *International Journal of Modern Physics D*. 2011. — Vol. 20. — N 10. — Pp. 1779–1787. — <https://doi.org/10.1142/S0218271811019852> (in Eng).
- Quevedo H. (2012). Matching conditions in relativistic astrophysics // *The Twelfth Marcel Grossmann Meeting: On Recent Developments in Theoretical and Experimental General Relativity, Astrophysics and Relativistic Field Theories (In 3 Volumes)*. 2012. — Pp. 35–52. — https://doi.org/10.1142/9789814374552_0003

(in Eng).

Weyl H. (2012). Republication of: 3. On the theory of gravitation // General Relativity and Gravitation 2012. — Vol. 44. — N 3. — Pp. 779–810. — <https://doi.org/10.1007/s10714-011-1310-7> (in Eng).

© G. Beketova, N. Zhanturina*, Z. Aimaganbetova, A. Bekeshev, 2024

K. Zhubanov Aktobe Regional University.

E-mail: nzhanturina@zhubanov.edu.kz

OPTICAL PROPERTIES OF DOUBLE HALIDE PEROVSKITES BASED ON CESIUM

G. Beketova — PhD student, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan

E-mail: diko_2006@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9213-7586>;

N. Zhanturina — PhD, associate professor, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan

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

Z. Aimaganbetova — PhD, associate professor, K. Zhubanov Aktobe Regional University, Aktobe, Kazakhstan

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

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

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

Abstract. This review article describes a class of cesium-based double halide perovskites. Their potential use as solar cell elements and methods for obtaining these materials are considered. General method of synthesis of double halide perovskites is based on dissolved poly-crystalline powder of starting material in hydrohalic (HX, X = Cl or Br)/hypophosphorous acid mixed solvent. The Goldschmidt factors and the octahedral factor are calculated to analyze the stability of the crystal structure and spherical environment for a number of double perovskites. An analysis of the band gap, absorption spectra, and photoluminescence spectra was carried out. Double perovskites are wide-gap semiconductors with direct and indirect band gaps. The bandgap may vary depending on the acquisition method. Absorption spectra lie in the ultraviolet and visible region. Double halide perovskites with a broad absorption spectrum are potential solar cells. Photoluminescence maxima are located from 400 nm to 700 nm. The peak position depends on doping with different ions. The absorption and emission spectra undergo significant changes when mixing double halide perovskites with different cations and changing their ratio. Excellent activators are chromium, silver, magnesium. It is shown that the alloyed double halide perovskites exhibit improved optical properties due to the defect tolerance, synergetic effects and other factors.

Keywords: double halide perovskite, solar cells, bandgap, synthesis, Goldschmidt tolerance factor, absorption, photoluminescence, alloyed perovskites

© Г. Бекетова, Н. Жантурина*, З. Аймаганбетова, А. Бекешев, 2024

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті.

E-mail: nzhanurina@zhubanov.edu.kz

ЦЕЗИЙГЕ НЕГІЗДЕЛГЕН ҚОСАРЛАНҒАН ГАЛОИДТЫ ПЕРОВСКИТТЕРДІҢ ОПТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

Г. Бекетова — PhD докторант, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан
E-mail: diko_2006@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9213-7586>;

Н. Жантурина — PhD, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан

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

З. Аймаганбетова — PhD, қауымдастырылған профессор, Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан

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

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

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

Аннотация. Бұл шолу мақаласында цезий негізіндегі қосарланған галоидті перовскиттер класы сипатталған. Олардың күн батареяларының элементтері ретінде әлеуетті қолданылуы және осы материалдарды алу әдістері қарастырылады. Қос галогенді перовскиттерді синтездеудің жалпы әдісі гидрохаликалық (НХ, Х=Сl немесе Br)/гипофосфор қышқылының аралас еріткішіндегі бастапқы материалдың ерітілген поли-кристалды ұнтағына негізделген. Голдшмидт факторлары мен октаэдрлік фактор бірқатар қос перовскиттер үшін кристалдық құрылым мен сфералық ортаның тұрақтылығын талдау үшін есептелінген. Тыйым салынған зона еніне, жұтылу спектрлеріне және фотолюминесценция спектрлеріне талдау жүргізілді. Қосарланған перовскиттер-тікелей және жанама тыйым салынған зоналары бар кең зоналы жартылай өткізгіштер. Өткізу қабілеті алу әдісіне байланысты өзгеруі мүмкін. Жұтылу спектрлері ультрафиолет және көрінетін аймақта жатыр. Кең жұтылу спектрі бар қосарланған галоидті перовскиттер потенциалды күн батареялары болып табылады. Фотолюминесценцияның максимумдары 400 нм-ден 700 нм-ге дейін орналасқан. Шыңның орналасуы әр түрлі иондармен белсендірілуіне байланысты. Қосарланған галоидті перовскиттерді әртүрлі катиондармен араластыру және олардың арақатынасын өзгерту кезінде жұтылу және сәуле шығару спектрлері айтарлықтай өзгерістерге ұшырайды. Тиімді активаторлар-хром, күміс, магний. Легирленген қосарланған галоидті перовскиттер ақауларға төзімділікке, синергетикалық әсерлерге және басқа факторларға байланысты жақсартылған оптикалық қасиеттерге ие екендігі көрсетілген.

Түйін сөздері: қосарланған галоидті перовскиттер, күн ұяшықтары, тыйым салынған зона, синтез, Гольдшмидтің толеранттылық факторы,

жұтылу, фотолюминесценция, аралас перовскиттер

© Г. Бекетова, Н. Жантурина*, З. Аймаганбетова, А. Бекешев, 2024

Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова.

E-mail: nzhanaturina@zhubanov.edu.kz

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВОЙНЫХ ГАЛОИДНЫХ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ ЦЕЗИЯ

Г. Бекетова — PhD докторант, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актобе, Казахстан

E-mail: diko_2006@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9213-7586>;

Н. Жантурина — PhD, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актобе, Казахстан

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

З. Аймаганбетова — PhD, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актобе, Казахстан

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

А. Бекешев — кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, Актюбинский региональный университет им. К. Жубанова, Актобе, Казахстан

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

Аннотация. В данной обзорной статье описывается класс двойных галоидных перовскитов на основе цезия. Рассматривается их потенциальное применение в качестве элементов солнечных батарей и способы получения этих материалов. Общий метод синтеза двухгалогенидных перовскитов основан на растворении поликристаллического порошка исходного материала в смеси галогеноводородной кислоты (HX, X=Cl или Br) и фосфористоводородной кислоты. Коэффициенты Гольдшмидта и октаэдрические коэффициенты рассчитаны для анализа стабильности кристаллической структуры и сферического окружения для ряда двойных перовскитов. Был проведен анализ ширины запрещенной зоны, спектров поглощения и спектров фотолюминесценции. Двойные перовскиты представляют собой широкозонные полупроводники с прямой и непрямой запрещенной зоной. Ширина запрещенной зоны может варьироваться в зависимости от метода получения. Спектры поглощения лежат в ультрафиолетовой и видимой областях. Двойные галоидные перовскиты с широким спектром поглощения являются потенциальными солнечными элементами. Максимумы фотолюминесценции расположены в диапазоне от 400 до 700 нм. Положение пика зависит от легирования различными ионами. Спектры поглощения и излучения претерпевают значительные изменения при смешивании двухгалогенидных перовскитов с различными катионами и изменении их соотношения. Эффективными активаторами являются хром, серебро, магний. Показано, что легированные двойные галоидные перовскиты обладают улучшенными оптическими свойствами за счет устойчивости к дефектам, синергетических эффектов и других факторов.

Ключевые слова: двойные галоидные перовскиты, солнечные ячейки, запрещенная зона, синтез, фактор толерантности Гольдшмидта, поглощение, фотолюминесценция, смешанные перовскиты

Introduction

Recently, a lot of research has been carried out in the field of optical properties of perovskites, since they can have anisotropy, they are elements of galvanic, solar cells, due to their perfect optical and electrical properties.

We studied solid-phase synthesis methods, recorded photoluminescence spectra, excitation photoluminescence spectra of lanthanum perovskite, and studied changes in its optical properties when exposed to hydrostatic pressure (Zhanturina et al., 2023). It was shown that the study of luminescence spectra makes it possible to more deeply study transitions between electronic levels, the mechanisms of recombination of electrons and holes, and other processes that will make it possible to obtain materials with improved physicochemical properties.

The next step in improving materials for electroplating, electronics and other applications is the study of the properties of double halide perovskites.

Double halide perovskites are a class of crystalline materials that have a structure similar to perovskite (ABX_3), but with one or more ions replacing other ions in that structure, and contain halides (F⁻, Cl⁻, Br⁻, I⁻) in as anions X (Fig.1.)

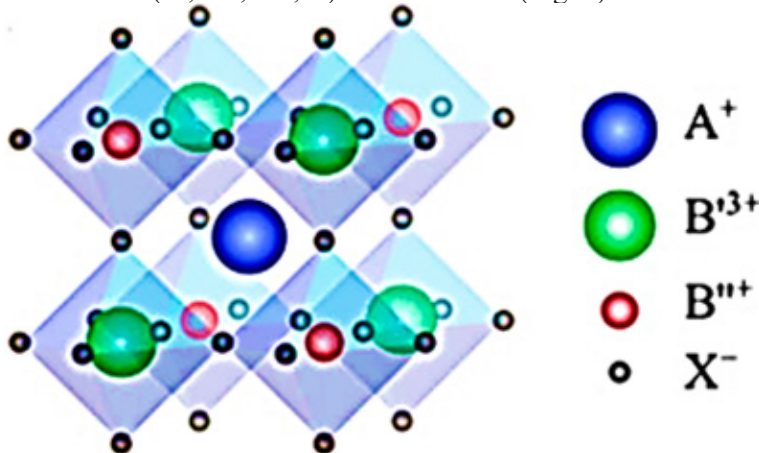


Figure 1 – The structure of double perovskite (Meyer et al., 2018).

By being able to select two different cations in the crystal lattice, finer tuning of structure and properties can be achieved, which can lead to materials with higher performance and new functionalities.

Inorganic halide double perovskites have the common formula $A_2B'(I)B''(III)X_6$ ($A = Cs^+$, Rb^+ ; $B'(I)=K^+$, Na^+ , Li^+ , Ag^+ , Cu^+ ; $B''(III) = In^{3+}$, Sb^{3+} , Bi^{3+} ; $X = Cl^-$, Br^- , I^-) are better than lead containing perovskites, which are environmentally friendly materials due to their low chemical stability and high toxicity.

These structures can have various properties such as optical, electrical and magnetic, making them interesting for a variety of applications including solar cells, optical devices and semiconductor electronics.

All inorganic halide perovskites are very popular due to their use in solar cells because of their photovoltaic and photoelectric properties, potential use in photodetectors

and light emitting diodes (LEDs) (Zhao et al., 2019). The photovoltaic properties of double perovskites are due to the fact that these materials emit in a very wide spectral range (400 nm–1100 nm) and have a high absorption coefficient, which makes it possible to achieve high efficiency solar cells, and low effective masses of carriers in these materials (Zelewski et al., 2019).

Their broadband properties attributed to self-trapped excitons (STEs). Their broad lines of emission and region of emission are the result of radiation recombination of excitons (Luo et al., 2018). The presence of self-trapped excitons is due to that fact, that type of material is semiconductor with the soft lattice. The $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$ and $\text{Cs}_2\text{Ag-InCl}_6$ perovskites have the emission with big half-width at room temperature (Han et al., 2019).

Band structure calculations show that many of these compounds have a band gap in the range promising for solar cell applications (Zhao et al., 2019).

Since the double halide perovskites are ionic crystals, their charge carriers in the form of electron-phonon coupling are strongly related to lattice vibrations. And this interaction helps to understand electrical and optical properties of double perovskites.

$\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ is halide double perovskite ($a \approx 10.47 \text{ \AA}$) with cubic structure and direct band gap with value of 3.3–3.5 eV. This double perovskite exhibits weak red photoluminescence, caused by the radiative relaxation of free and self-trapped excitons (Jackson et al., 2019). To increase luminescence intensity activators are used such as transition metal ions and lanthanides.

Transition metals such Mn^{2+} , Cr^{3+} and ions of Ag are used in alloyed structures to improve physical, chemical and structural properties of double halide perovskites for their potential use in the field of solar elements, phosphors, LED applications (Vargas et al., 2020).

Chromium doped $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ has a broad near infrared emission band ranging from 850 to 1350 nm. The range of emission of pure crystal is located between 400 and 800 nm. Broad emission spectra is attributed by Cr^{3+} 3d level transitions. Because of this range of emission this material can be used for biological applications. Chromium doped compounds are great of interest and are less investigated (Zhao et al., 2019).

Also of great interest in the study of double halide perovskites are mixed perovskites with three cations, which can significantly expand the absorption spectrum and increase the quantum yield of luminescence due to synergistic effects. For example, these are materials such as $\text{Cs}_2\text{Na}_x\text{Bi}_{1-x}\text{MnCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{Ag}_x\text{Na}_{1-x}\text{InCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{Cd}_x\text{Mn}_{1-x}\text{BiCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{Na}_x\text{Ag}_{1-x}\text{BiBr}_6$.

In this minireview, we aim at summarizing the recent advances in double halide perovskites and explore the synthesis, characterization and analyzing of structural and optical properties.

Synthesis methods of double halide perovskites

General method of synthesis of double halide perovskites is based on dissolved poly-crystalline powder of starting material in hydrohalic (HX, X = Cl or Br)/hypophosphorous acid mixed solvent (Igbari et al., 2019). After heating to 100–200 K, it should be slowly cooled at a rate 0.5 Celcius degrees in an hour (Zelewski et al., 2019).

For the $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$ main reagents are CsCl (2 mmol), AgCl (1 mmol) and BiCl₃ (1 mmol), which are dissolved in hydrochloric acid. By heating to 180 °C for 24 h in an autoclave, further cooling to room temperature with rate of 5–8 °C/h the material is ob-

tained. Final step is filtering and drying in vacuum at 80 °C for 12 h. (Han et al., 2019).

In some cases polycrystalline samples are obtained via solid state synthesis. For this procedure, starting materials – chlorides of composed metals are mixed by stoichiometry ratios and are placed in mortar agate with a pestle, then fired in a silica tube at 500 K for about 40 hours. This material is obtained in the form of pellets (Sun et al., 2021).

For obtaining $\text{Cs}_2\text{NaBiCl}_6:\text{Mn}^{2+}$ sample the following reagents are used: HCl, HBr, Bi_2O_3 , CsCl, NaCl, and $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. Obtained material should be washed by deionized water and dried. For latter process the filter flask is used, because it may be the photoreduction between the forms of Ag (Jackson et al., 2019).

For material $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6:\text{Cr}^{3+}$ the reagents are CsCl, AgCl, InCl_3 and CrCl_3 with the capacity 99.99 % from Aladdin. They are synthesized by high temperature solid-state reaction. The process has the following steps: firstly reagents are weighed by stoichiometric ratio, mixed in agate mortar during 1–2 hours. Then sample is heated at 400 °C for 96 hours in a muffle furnace. After cooling from room temperature the desired product in the form of powder is obtained (Zhao et al., 2019).

Also $\text{Cs}_4\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Bi}_2\text{Cl}_{12}$ ($x = 0-1$) can be synthesized by metal halides extraction (CsCl, MnCl_2 , CdCl_2 , and BiCl_3) in concentrated hydrochloric acid.

Results

Goldschmidt tolerance factor t

The crystallographic stability of perovskites is usually inferred by considering two representative parameters, the Goldschmidt tolerance factor (t) (Equation (1)). The Goldschmidt tolerance factor shows the stability of the crystal structure and indicates whether ions will be incorporated into the crystal lattice. For perovskite structures, the Goldschmidt factor should be in the range of approximately 0.8-1. Factor values that do not lie in the specified range indicate that a particular compound may be unstable or unsuccessful in terms of the formation of a crystal structure.

$$t = \frac{(r_A + r_X)}{\sqrt{2}(r_B + r_X)} \quad (1)$$

where r_A - ionic radii of A cations; r_B – mean ionic radii of B' and B'' cations, r_X – ionic radii of Br, Cl.

The octahedral factor μ shows how spherically surrounded the ions are in octahedra. Its value should usually be close to 1 (Equation (2)) (Wu et al., 2021)

$$\mu = \frac{r_B}{r_X} \quad (2)$$

We have calculated the values of t and μ for some double halide perovskites, as well as for alloyed structures (Table 1).

Table 1- Goldschmidt tolerance factor and octahedral factor for some double halide perovskites

		$t = \frac{(r_A + r_X)}{\sqrt{2}(r_B + r_X)}$	$\mu = \frac{r_B}{r_X}$
1	$\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$	0,8315	0,6354
2	$\text{Cs}_2\text{NaBiCl}_6$	0,8821	0,5414

3	$\text{Cs}_2\text{NaInCl}_6$	0,8821	0,5414
4	$\text{Cs}_2\text{LiBiCl}_6$	0,9576	0,4199
5	$\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$	0,8255	0,5867
6	$\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$	0,8398	0,6354
7	$\text{Cs}_2\text{NaBiBr}_6$	0,6395	0,5000
8	$\text{Cs}_2\text{CuBiBr}_6$	0,9498	0,3929
9	$\text{Cs}_2\text{AgSbCl}_6$	0,8398	0,6354
Alloyed perovskites			
1	$\text{Cs}_2\text{Li}_x\text{Bi}_{1-x}\text{MnCl}_6$	0,9172	0,4823
2	$\text{Cs}_2\text{Na}_x\text{Bi}_{1-x}\text{MnCl}_6$	0,8928	0,5232
3	$\text{Cs}_2\text{Ag}_x\text{Na}_{1-x}\text{InCl}_6$	0,8830	0,5398
4	$\text{Cs}_2\text{Cd}_x\text{Mn}_{1-x}\text{BiCl}_6$	0,8971	0,5155
5	$\text{Cs}_2\text{Na}_x\text{Ag}_{1-x}\text{BiBr}_6$	0,8521	0,5372

From the table you can see that, basically, all perovskites have factors lying in the indicated intervals. The exception is $\text{Cs}_2\text{NaBiBr}_6$. By mixing ions in alloyed structures, the stability of its crystal structure increases. In terms of the octahedral factor, the parameters of the spherical environment are higher for $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{AgSbCl}_6$, and the lowest for $\text{Cs}_2\text{LiBiCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{CuBiBr}_6$. This affects the optical and electrical properties of double perovskites.

Information about bandgap

According to (Igbari et al., 2019) bandgap values of double halide perovskites depend on the preparation method and calculation technique and are different for the same crystals. For $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ the bandgap is in the range 1.22–2.4 eV. Sample with characterization technique Tauc plot and prepared by solution process has the direct bandgap, while others are in the list with indirect bandgap. For $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$ the latter varies up to 2.85 eV. Incorporation of sodium increases bandgap to 3.07 eV in $\text{Cs}_2\text{NaBiBr}_6$ and to 3.73 eV in $\text{Cs}_2\text{NaBiCl}_6$.

$\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ has the direct bandgap in 2.32–3.53 eV range. Bandgap value for $\text{Cs}_2\text{CuInCl}_6$ is very low and around 1.0–1.5 eV. $\text{Cs}_2\text{AgSbCl}_6$ can be considered as the wide bandgap semiconductor and pretends to be the perspective solar element (2.24–2.6 eV).

Optical properties

Absorption

We analyzed and compared the absorption spectra of various double halide perovskites from different publications and compiled them into one graph for a visual description (Fig. 2).

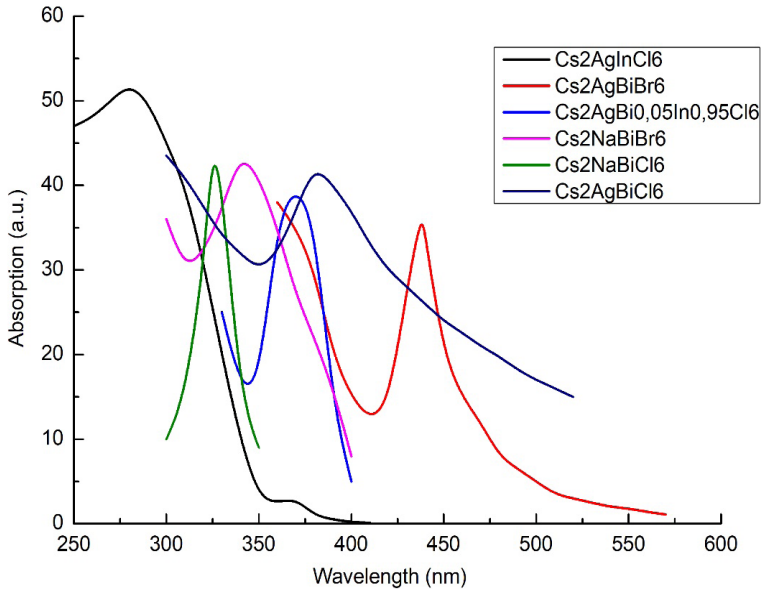


Figure 2 –Absorption spectra of different double halide perovskites (Han et al., 2019; Schmitz et al., 2020; Thawarkar et al., 2021; Dai et al., 2020; Yao et al., 2020).

The figure shows that the absorption spectra of various perovskites lie in different ranges. $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ has a narrow absorption band with a maximum at 280 nm; the band is not pronounced. We observe a long absorption tail and absorption peak at around 370 nm with low intensity, corresponding to the allowed transition and parity-forbidden transition, respectively (Han et al., 2019). The absorption band of $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ is in the visible region (438 nm), narrow with a half-width of about 50 nm and quite pronounced (Schmitz et al., 2020). Perovskite $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$ absorbs in the ultraviolet region (373 nm). The spectrum does not have a Gaussian shape and is asymmetrical. The absorption peak is followed by the tail extended to 700 nm (Thawarkar et al., 2021). When this perovskite is doped with iron, the absorption intensity increases. The presence of a tail indicates that the crystal is highly defective when doped with iron. The absorption of $\text{Cs}_2\text{NaBiBr}_6$ is similar to that of $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ and is located in the region of 340 nm; the spectrum is represented by a number of background maxima with low intensity in the region of 340–250 nm. When silver is added to perovskite, depending on the level of doping in the absorption region, the number of bands increases and the region stretches from 250 nm to 625 nm, which makes these materials potentially attractive for use as solar cells, albeit of low intensity and efficiency (Dai et al., 2020). The latest perovskites have this form of absorption due to the indirect bandgap and are not light-emitting materials with high quantum efficiency. The absorption spectrum in ultraviolet region of $\text{Cs}_2\text{NaBiCl}_6$ is at around 350 nm, accompanied by absorption peak due the excitons at 325 nm. It is formed due to ${}^6s_2 \rightarrow {}^6s_1p_1$ transitions of Bi^{3+} ions (Yao et al., 2020). Doping with silver affects the electronic structure of the crystal, while the absorption spectra are shifted to longer wavelengths and the half-width of the spectra becomes wider, while doping with magnesium

and europium has no effect on the intensity and position of the spectrum. When indium is added to $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$, that is, in the double perovskite $\text{Cs}_2\text{AgBi}_{1-x}\text{In}_x\text{Cl}_6$, at $x=0.95$, the band remains at 373 nm, but is deeper and more pronounced. Moreover, as the amount of indium decreases, the absorption maximum tends to disappear.

From the figure you can see that the addition of indium leads to a shift of the absorption band to the ultraviolet region, which is undesirable in the manufacture of solar cells.

From a comparison of absorption spectra, a pattern can be revealed that perovskites with Ag and Bi tend to absorb in the visible region or in the region close to the visible. And crystals with Na absorb more in the ultraviolet region.

Photoluminescence emission spectra

We analyzed and compared the photoluminescence spectra (PL) of various double halide perovskites from different publications and compiled them into one graph for a visual description (Fig. 3).

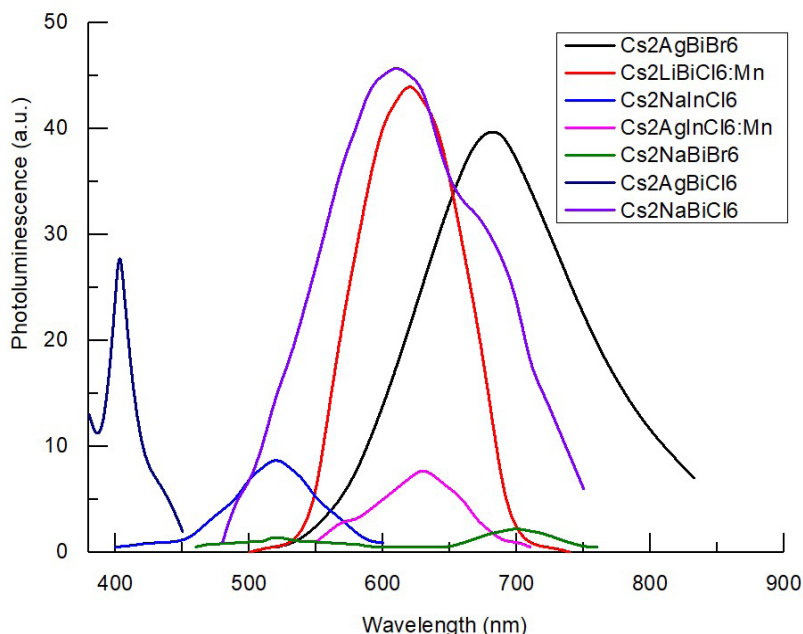


Figure 3 –Photoluminescence spectra of different double halide perovskites.

The PL band of the $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$ crystal lies at a maximum of 412 nm, and when doped with iron, the band shifts to shorter wavelengths (403 nm) (Thawarkar et al., 2021). Time-resolved spectroscopy studies show that the luminescence lifetime in a doped crystal decreases, indicating an increase in non-radiative relaxation.

In $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$ crystal activated by Mn, the emission band is observed at 630 nm (Jackson et al., 2019). The high value of the band gap of this material is caused by the covalency of the Ag–Cl bond and it has a three-dimensional electronic structure. When photons are absorbed, electron-hole pairs are instantly formed, which recombine in a short time at Mn^{2+} sites. The position of the emission band allows this crystal to be used as

a red phosphor, but the low quantum yield and lack of absorption at wavelengths greater than 350 nm are a major disadvantage of this perovskite. Compared to $\text{Cs}_2\text{NaBiCl}_6$ doped with magnesium, its quantum yield is almost 10 times lower. When doped with chromium ions, the luminescence band shifts to longer wavelengths and the band becomes wider.

The emission band of $\text{Cs}_2\text{NaBiCl}_6$ doped with silver lies in the region of 610 nm, while that of $\text{Cs}_2\text{NaBiCl}_6$ doped with magnesium is at 580 nm (Dai et al., 2020). The intensity saturation of this perovskite with Mn doping is at 14 %, Ag– 25 %.

$\text{Cs}_2\text{NaInCl}_6$ has an excitonic nature of emission, as evidenced by the photoluminescence excitation spectra and white emission in the region of 520 nm with low intensity. When silver is added to this material in the amount of Ag (60 %), the radiation intensity increases (Luo et al., 2018).

The luminescence band of the $\text{Cs}_2\text{LiBiCl}_6:\text{Mn}$ crystal was obtained at an excitation wavelength of 370 nm and is located in the region of 612 nm (orange-red) (Sun et al., 2021). This corresponds to the ${}^4\text{T}_1 \rightarrow {}^6\text{A}_1$ transition from the magnesium state, while the undoped crystal has a band at 730 nm from the Bi ion state.

It can be seen that when magnesium is added, the PL band shifts to shorter wavelengths.

The broad luminescence band of $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ is in the red region and located around 683 nm. This corresponds to transitions from the indirect zone (indirect bandgap) (Schmitz et al., 2020).

$\text{Cs}_2\text{NaBiBr}_6$ has a luminescence band with very low intensity with a maximum at 700 nm. However, by mixing silver and changing the ratio of components, high intensity can be achieved (Wu et al., 2021).

The large half-width of photoluminescence spectra in double perovskites may indicate several possible physical processes and characteristics of the material: unevenness in crystallite size, defects and imperfections in the structure, instability of the crystal structure. The PL intensity of alloyed perovskite with Ag/Na contamination is higher than that $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, where $\text{Cs}_2\text{NaBiBr}_6$ is not like the Ag based double halide perovskites, that has broad band luminescence in red region.

Total, from (Zhao et al., 2019; Luo et al, 2018; Jackson et al., 2019; Vargas et al., 2020; Su et al., 2021; Wu et al., 2021; Yao et al., 2020) it can be noted that alloyed perovskites with different ratio of Li, Bi, Mg, Na, Ag, In, Cd have a exhibit larger intensity compared to their single-component counterparts due to several reasons: enhanced defect tolerance, tunable bandgap, reduced nonradiative recombination, synergistic effects. Defects can decrease the PL intensity, alloying can mitigate these effects. Due to alloying the absorption range can became broader.

Conclusion

Double halide perovskites have improved galvanoptical properties compared to perovskites due to the combination of cations. These are semiconductors with wide band gaps in the rang from 1.3 eV to 3.53 eV. General method of synthesis of double halide perovskites is based on dissolved poly-crystalline powder of starting material in hydrohalic (HX, X=Cl or Br)/hypophosphorous acid mixed solvent. Analyzing the Goldschmidt factors and the octahedral factors for a number of double perovskites, we can conclude that, in general, many are located in the range from 0.8 to 1. The exception is $\text{Cs}_2\text{NaBiBr}_6$. In terms of the octahedral factor, the parameters of the spherical environment are higher for $\text{Cs}_2\text{AgInCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{AgBiCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{AgSbCl}_6$, and the lowest for $\text{Cs}_2\text{LiBiCl}_6$, $\text{Cs}_2\text{CuBiBr}_6$.

This affects the optical and electrical properties of double perovskites. The absorption spectra of these materials lie in the range from 250 nm to 450 nm, the emission spectra are 400–700 nm. The addition of indium leads to a shift of the absorption band to the ultraviolet region; perovskites with Ag and Bi tend to absorb in the visible region or in the region close to the visible. And crystals with Na absorb more in the ultraviolet region. The large width of the absorption spectrum is a good parameter for use as solar cells. It can be noted that alloyed perovskites with different ratio of Li, Bi, Mg, Na, Ag, In, Cd have an exhibit larger photoluminescence intensity, broad absorption spectrum compared to their single-component counterparts due to enhanced defect tolerance, tunable bandgap, reduced nonradiative recombination, synergistic effects. Alloyed double halide perovskites are very promising and interesting materials for further research and potential application in the field of LEDs, lasers, solar elements.

REFERENCES

- Dai Ch-M., Zhang T., Wu Yu-N., Chen Sh. (2020). Halide Double-Perovskite Light-Emitting Centers Embedded in Lattice-Matched and Coherent Crystalline Matrix., *Adv. Funct. Mater.* — 17:2000653. — DOI:10.1002/adfm.202000653 (in Eng.).
- Edson Meyer, Dorcas Mutukwa, Nyengerai Zingwe and Raymond Taziwa (2018). Lead-Free Halide Double Perovskites: A Review of the Structural, Optical, and Stability Properties as Well as Their Viability to Replace Lead Halide Perovskites *Metals, Metals.* — 8(9):667. — DOI:10.3390/met8090667 (in Eng.).
- Han P., Zhang X., Mao X., Yang B., Yang S., Feng Zh., Wei D., Deng W., Pullerits T., Han K. (2019). Size effect of lead-free halide double perovskite on luminescence property, *Sci China Chem.* — 62:1405–1413. — DOI:10.1007/s11426-019-9520-1 (in Eng.).
- Igbari F., Wang Zh-K., Liao L-Sh. (2019). Progress of Lead-Free Halide Double Perovskites, *Adv. Energy Mater.*, — 9(12):1803150. — DOI:10.1002/aenm.201803150 (in Eng.).
- Jackson D. Majher, Matthew B. Gray, T. Amanda Strom, Patrick M. Woodward (2019). Cs₂NaBiCl₆:Mn²⁺ - A New Orange-Red Halide Double Perovskite Phosphor, *Chem. Mater.* — 31(5):1738–1744. — DOI:10.1021/acs.chemmater.8b05280 (in Eng.).
- Luo J., Wang X., Li Sh., Liu J., Guo Y., Niu G., Yao L., Fu Y., Gao L., Dong Q., Zhao Ch., Leng M., Ma F., Liang W., Wang L., Jin Sh., Han J., Zhang L., Etheridge L., Wang J., Yan Y., Edward H. Sargent., Tang J. (2018). Efficient and stable emission of warm-white light from lead-free halide double perovskites, *Nature Lett.* — 563(7732):541–545. — DOI:10.1038/s41586-018-0691-0 (in Eng.).
- Schmitz A., Leander Schaberg L., Sirotinskaya S., Pantaler M., Doru C. Lupascu, Benson N., Bacher G. (2020). Fine Structure of the Optical Absorption Resonance in CsAgBiBr Double Perovskite Thin Films, *ACS Energy Lett.* — 5:559–565. — DOI:10.1021/acsenerylett.9b02781(in Eng.).
- Sun Y., Fernandez-Carrion A.J., Liu Y., Yin C., Ming X., Liu Bo-Mei., Wang J., Fu H., Kuang X., Xing X. (2021). Bismuth-Based Halide Double Perovskite Cs₂LiBiCl₆: Crystal Structure, Luminescence, and Stability, *Chem. Mater.* — 33:5905–5916. —DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.1c00854> (in Eng.).
- Thawarkar S., Sachin R.Rondiya, Nelson Y. Dzade, Khupse N., Jadkar S. (2021). Experimental and Theoretical Investigation of the Structural and Opto-electronic Properties of Fe-Doped Lead-Free Cs₂AgBiCl₆ Double Perovskite, *J. Chem.-A European.* — 27(26):7408–7417. — DOI: 10.1002/chem.202004902 (in Eng.).
- Vargas B., Diana T.Reyes-Castillo, Countino-Gonzalez E., Sanchez-Ake C., Ramos C., Falcony C., Solis-Ibarra D. (2020). Enhanced Luminescence and Mechanistic Studies on Layered Double-Perovskite Phosphors: Cs₄Cd_{1-x}MnxBi₂Cl₁₂, *Chem. Mater.* — 32(21):9307–9315. — DOI:10.1021/acs.chemmater.0c03167 (in Eng.).
- Wu H., Erbing A., Malin B. Johansson, Wang J., Kamal Ch., Odelius M., Erik M.J. Johansson (2021). Mixed-Halide Double Perovskite Cs₂AgBiX₆ (X=Br, I) with Tunable Optical Properties via Anion Exchange, *ChemSusChem.* — 14:4507–4515. — DOI:10.1002/cssc.202101146 (in Eng.).
- Yao M.-M., Wang L., Yao Ji-Song, Wang K-H., Chen Ch., Zhu B-Sh., Yang J-N., Wang J-J., Xu W-P., Zhang Q., Yao H-B (2020). Improving Lead-Free Double Perovskite Cs₂NaBiCl₆ Nanocrystal Optical Properties via Ion Doping, *Adv. Opt. Mater.* — 8:1901919. — DOI:10.1002/adom.201901919 (in Eng.).

Zelewski S.J., Urban J.M., Surrente A., Maude D.K., Kuc A., Schade L., Johnson R.D., Dollman M., Nayak P.K., Snaith H., Radaelli P., Kudrawiec R., Nicholas R.J., Plochocka P., Baranowski M. (2019). Revealing the nature of photoluminescence emission in the metal-halide double perovskite Cs₂AgBiBr₆, *J. Mater. Chem. C*. — 7:8350–8356. — DOI: 10.1039/C9TC02402F (in Eng.).

Zhanturina N., Beketova G., Gorecka N., Szczodrowski K., Lesniewski T., Aimaganbetova Z., Bizhanova K., Bekeshev A. (2023). Luminescence properties of LaAlO₃:Pr under hydrostatic pressure, *J. Crystals*. — 13(11):1558. — DOI:10.3390/cryst13111558 (in Eng.).

Zhao F., Song Zh., Zhao J., Liu Q. (2019). Double perovskite Cs₂AgInCl₆:Cr³⁺: broadband and near-infrared luminescent materials, *Inorg. Chem. Front.* — 6:3621–3628. — DOI:10.1039/c9qi00905a (in Eng.).

© S.B. Dubovichenko¹, N.A. Burkova², A.S. Tkachenko¹, D.M. Zazulin^{2*}, 2024

¹Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan;

²Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: denis_zazulin@mail.ru

TOTAL CROSS-SECTIONS AND RATE OF $n^{12}\text{C}$ RADIATIVE CAPTURE

Dubovichenko Sergey Borisovich — Laureate of the al-Farabi State Prize of the Republic of Kazakhstan in the field of science and technology, doctor of physical and mathematical sciences, Professor, head of laboratory of V.G. Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan

E-mail: dubovichenko@gmail.com, <http://orcid.org/0000-0002-7747-3426>;

Burkova Nataliya Aleksandrovna — doctor of physical and mathematical sciences, professor of department of theoretical and nuclear physics of Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: natali.burkova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3122-1944>;

Tkachenko Alessya Sergeyevna — Ph.D., researcher of V.G. Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan

E-mail: tkachenko.alessya@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9319-0135>;

Zazulin Denis Mikhailovich — candidate of physical and mathematical sciences, acting associate professor of al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: denis_zazulin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2115-6226>.

Abstract. The $n^{12}\text{C}$ capture reaction is included in the main chain of thermonuclear reactions of primordial nucleosynthesis ... $^{11}\text{B}(n,\gamma)^{12}\text{B}(\beta^-)^{12}\text{C}(n,\gamma)^{13}\text{C}(n,\gamma)^{14}\text{C}(n,\gamma)$... and is of significant interest for nuclear astrophysics. This reaction is one of the reactions of ^{12}C burning off and ^{13}C producing. The rate of the $^{12}\text{C}(n,\gamma)^{13}\text{C}$ reaction may be important for calculations related to stellar evolution. This reaction also occurs in nuclear and thermonuclear reactors, for example, thanks to the above chain of nuclear reactions, since structural elements containing boron can be used as neutron absorbers, etc. Therefore, we previously, within the framework of a modified potential cluster model with a classification of orbital states according to Young's diagrams and taking into account allowed and forbidden states, considered radiative $n^{12}\text{C}$ capture at energies from 10^{-5} keV to 5 MeV and considering a wide resonance at $E_x = 8.2$ MeV. Calculations were carried out for radiative capture to the ground state and three excited states of the ^{13}C nucleus. Then it was shown that only on the basis of $E1$ - and $M1$ -transitions from $n^{12}\text{C}$ scattering states, it is quite possible to explain the magnitude and shape of the experimental capture cross-sections. In this work, using the results of our earlier calculations, the total cross-section for capture to all 4 specified bound states is obtained. Based on these theoretical cross-sections, the rates of the $^{12}\text{C}(n,\gamma)^{13}\text{C}$ reaction, both partial and total, were calculated in the temperature range from 0.01 to $1 T_9$. The calculated reaction rate results were approximated by a simple expression to simplify their use in applied nuclear, thermonuclear and astrophysical problems.

Keywords: Nuclear astrophysics, $n^{12}\text{C}$ -system, low and astrophysical energies,

radiative capture, thermonuclear processes, potential cluster model, Young's diagrams

Acknowledgments. This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR20280974)

© С.Б. Дубовиченко¹, Н.А. Буркова², А.С. Ткаченко¹, Д.М. Зазулин^{2*}, 2024

¹В.Г. Фесенков атындағы Астрофизика институты, Алматы, Қазақстан;

²Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: denis_zazulin@mail.ru

ЖАЛПЫ БӨЛІМДЕРІ ЖӘНЕ ПРОЦЕСС ҚАРҚЫМЫ $n^{12}\text{C}$

Дубовиченко Сергей Борисович — ғылым және техника саласындағы әл-Фараби атындағы Қазақстан Республикасының Мемлекеттік сыйлығының лауреаты, физика-математика ғылымдарының докторы, профессор, В.Г. Фесенков атындағы Астрофизика институтының зертхана меңгерушісі, Алматы, Қазақстан

E-mail: dubovichenko@gmail.com, <http://orcid.org/0000-0002-7747-3426>;

Буркова Наталья Александровна — физика-математика ғылымдарының докторы, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің теориялық және ядролық физика кафедрасының профессоры, Алматы, Қазақстан

E-mail: natali.burkova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3122-1944>;

Ткаченко Алеся Сергеевна — Ph.D., атындағы Астрофизика институтының ғылыми қызметкері В.Г. Фесенкова, Алматы, Қазақстан

E-mail: tkachenko.alessya@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9319-0135>;

Зазулин Денис Михайлович — физика-математика ғылымдарының кандидаты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің теориялық және ядролық физика кафедрасының доцентінің, Алматы, Қазақстан

E-mail: denis_zazulin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2115-6226>.

Аннотация. $n^{12}\text{C}$ -басып алу реакциясы $\dots^{11}\text{B}(n,\gamma)^{12}\text{B}(\beta^-)^{12}\text{C}(n,\gamma)^{13}\text{C}(n,\gamma)^{14}\text{C}(n,\gamma)\dots$ біріншілік нуклеосинтездің термоядролық реакцияларының негізгі тізбегіне кіреді және ядролық астрофизика үшін маңызды қызығушылық тудырады. Бұл реакция ^{12}C жанып, ^{13}C түзу реакцияларының бірі. $^{12}\text{C}(n,\gamma)^{13}\text{C}$ реакциясының жылдамдығы жұлдыздар эволюциясына байланысты есептеулер үшін маңызды болуы мүмкін. Бұл реакция ядролық және термоядролық реакторларда да жүреді, мысалы, жоғарыда аталған ядролық реакциялар тізбегі арқасында, өйткені құрамында бор бар құрылымдық элементтер нейтронды сіңіргіштер ретінде және т.б. Сондықтан, біз, бұрын, Янг схемалары бойынша орбиталық күйлерді жіктеумен және рұқсат етілген және тыйым салынған күйлерді ескере отырып, модификацияланған потенциалды кластерлік модель шеңберінде, 10^{-5} кВ-тан 5 МэВ-қа дейінгі энергиялардағы $n^{12}\text{C}$ реакциясын қарастырдық $E_x = 8.2$ МэВ нүктесіндегі кең резонансты ескере отырып. Есептеулер ^{13}C ядросының негізгі күйінде және үш қозған күйінде түсірулер үшін жүргізілді. Содан кейін $n^{12}\text{C}$ шашырау күйлерінен $E1$ - және $M1$ - ауысу негізінде ғана тәжірибелік түсіру қималарының шамасы мен пішінін түсіндіруге толық болатыны көрсетілді. Бұл жұмыста біздің бұрынғы жұмысымыздың нәтижелерін пайдалана отырып, барлық көрсетілген 4 байланысқан күйге түсіру үшін жалпы қима алынды. Алынған теориялық көлденең қималары негізінде бұл реакцияның жартылай және жалпы жылдамдықтары 0.01-ден 1 T_9 -ға дейінгі температура диапазонында есептелді.

Есептелген жылдамдық нәтижелері оларды қолданбалы ядролық, термоядролық және астрофизикалық зерттеулерде қолдануды жеңілдету үшін қарапайым өрнек арқылы жуықталды.

Түйін сөздер: ядролық астрофизика, $n^{12}\text{C}$ -жүйесі, төмен және астрофизикалық энергиялар, радиацияны түсіру, термоядролық процестер, потенциалды кластерлік модель, Юнг схемасы

© С.Б. Дубовиченко¹, Н.А. Буркова², А.С. Ткаченко¹, Д.М. Зазулин^{2*}, 2024

¹Астрофизический институт имени В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан.

E-mail: denis_zazulin@mail.ru

ПОЛНЫЕ СЕЧЕНИЯ И СКОРОСТЬ РАДИАЦИОННОГО $n^{12}\text{C}$ ЗАХВАТА

Дубовиченко Сергей Борисович — лауреат Государственной премии Республики Казахстан имени аль-Фараби в области науки и техники, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией Астрофизического института им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан
E-mail: dubovichenko@gmail.com, <http://orcid.org/0000-0002-7747-3426>;

Буркова Наталья Александровна — доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и ядерной физики Казахского национального университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: natali.burkova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3122-1944>;

Ткаченко Алеся Сергеевна — Ph.D., научный сотрудник Астрофизического Института им. В.Г. Фесенкова, Алматы, Казахстан

E-mail: tkachenko.alessya@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9319-0135>;

Зазулин Денис Михайлович — кандидат физико-математических наук, и.о. ассоциированного профессора Казахского Национального Университета им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: denis_zazulin@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2115-6226>.

Аннотация. Реакция $n^{12}\text{C}$ -захвата входит в основную цепочку термоядерных реакций первичного нуклеосинтеза $\dots^{11}\text{B}(n,\gamma)^{12}\text{B}(\beta^-)^{12}\text{C}(n,\gamma)^{13}\text{C}(n,\gamma)^{14}\text{C}(n,\gamma)\dots$ и представляет существенный интерес для ядерной астрофизики. Эта реакция является одной из реакций выгорания ^{12}C и производства ^{13}C . Скорость реакции $^{12}\text{C}(n,\gamma)^{13}\text{C}$ может иметь значение для расчетов, связанных со звездной эволюцией. Также эта реакция протекает в ядерных и термоядерных реакторах, например, благодаря вышеприведенной цепочке ядерных реакций поскольку конструкционные элементы, содержащие бор могут использоваться в качестве поглотителей нейтронов и т.д. Поэтому нами ранее, в рамках модифицированной потенциальной кластерной модели с классификацией орбитальных состояний по схемам Юнга и с учетом разрешенных и запрещенных состояний, был рассмотрен радиационный $n^{12}\text{C}$ -захват при энергиях от 10^{-5} кэВ до 5 МэВ с использованием информации о широком резонансе при $E_x = 8.2$ МэВ. Были проведены расчеты для радиационных захватов на основное состояние и три возбужденных состояния ядра ^{13}C . Тогда было показано, что только на основе $E1$ - и $M1$ -переходов из состояний $n^{12}\text{C}$ рассеяния вполне удастся объяснить величину и форму экспериментальных сечений захватов. В данной работе, используя результаты нашей более ранней работы, получено суммарное сечение для захвата на все 4 указанные связанные состояния. На основе полученных теоретических сечений рассчитаны скорости этой реакции как парциальные, так и суммарные в области температур от 0.01 до $1 T_9$. Расчетные результаты для скоростей были аппроксимированы простым выражением, чтобы упростить их использование в прикладных ядерных, термоядерных и астрофизических исследованиях.

Ключевые слова: ядерная астрофизика, $n^{12}\text{C}$ -система, низкие и астрофизические энергии, радиационный захват, термоядерные процессы,

потенциальная кластерная модель, схемы Юнга

Introduction

The importance (from the point of view of nuclear physics and astrophysics) of the $n^{12}\text{C}$ -capture reaction at thermal and astrophysical energies is substantiated in sufficient detail in (Heil, 1998). In our previous work (Dubovichenko, 2021), four radiative captures were calculated for the ground state (GS) and three excited states (ES) of the ^{13}C nucleus, but the total cross-section for transitions to all specified bound states (BS) was not considered (Dubovichenko, 2021; Dubovichenko, 2019). Therefore, we will now return to studying this reaction based on the modified potential cluster model (MPCM) (Dubovichenko, 2019; Dubovichenko, 2015). The behavior of the total $n^{12}\text{C}$ -capture cross-section at energies from 10^{-5} keV to 5 MeV will be studied, taking into account the wide resonance at $E_x = 8.2$ MeV, and the reaction rate will be obtained at temperatures from 0.01 to 10 T_9 (where T_9 is the temperature in 10^9 K). Calculation methods are presented in (Dubovichenko, 2021) or (Dubovichenko, 2019; Dubovichenko, 2015). The magnetic moments of μ_1 and μ_2 of clusters are taken from (http://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?mud|search_for=atomnucl; Kelley, 2017), namely $\mu_n = -1.9130427\mu_0$ and zero for $\mu(^{12}\text{C})$. In present calculations, exact values of particle masses were used: $m_n = 1.00866491597$ a.m.u. (http://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?mud|search_for=atomnucl;), $m(^{12}\text{C}) = 12.0$ a.m.u. (http://cdf.e.sinp.msu.ru/services/ground/NuclChart_release.html), the value of the constant \hbar^2/m_0 is taken to be 41.4686 MeV \times fm 2 , where m is in a.m.u. This constant value has been used by us since the 80s of the last century and allows us to easily compare old and new results.

Model and calculation methods

As was shown in (Dubovichenko, 2021), possible Young orbital diagrams for a complete system of 13 nucleons have the form $\{1\} + \{444\} = \{544\} + \{4441\}$ (Neudachin, 1969). The first of them is compatible with the orbital momentums $L = 0, 2$ and is forbidden (forbidden state - FS), since there cannot be five nucleons in the s -shell. The second diagram is allowed (allowed state - AS) and is compatible with the orbital momentum $L = 1$, which is determined based on Eliot's rules (Neudachin, 1969). This state corresponds to the ground bound allowed state of the ^{13}C nucleus in the $n^{12}\text{C}$ channel with momentum and isospin $J^\pi, T = 1/2, 1/2$ (Ajzenberg-Selove, 1991) (for the ^{12}C is known that $J^\pi, T = 0^+, 0$ (Kelley, 2017)). Thus, the potential of a 2S -wave must contain a forbidden bound state, while 2P -waves have only allowed states in the $n^{12}\text{C}$ channel. Moreover, the bound allowed state for the $^2P_{1/2}$ -wave corresponds to the GS of the ^{13}C nucleus and has a channel binding energy equal to -4.94635 MeV (Ajzenberg-Selove, 1991).

In the calculations of the nuclear characteristics of the reaction under consideration, the cluster interaction potentials have the Gaussian form (Dubovichenko, 2019; Dubovichenko, 2015)

$$V(r, \dot{u}) = -V_{0,\dot{u}} \exp(-\dot{a}_{\dot{u}} r^2)$$

The potential parameters are fixed by the level binding energy and the value of the asymptotic constant (AC). The dimensionless AC, which we denote by C_w , and defined in terms of the Whittaker functions through expression $\psi_{-L}(r) = \sqrt{2k_0} C_w W_{-\dot{a}_{\dot{u}}, +1/2}(2k_0 r)$

(Plattner, 1981). Various works reviewed in (Dubovichenko, 2021) provide different results on ANC for GS and ESs. The results of their recalculation to C_w are given in Table 1. All these AC values were used previously to obtain $n^{12}\text{C}$ interaction potentials in BSs (Dubovichenko, 2021), the parameters of which are also given in Table 1.

Table 1. Parameters of potentials of bound states in the $n^{12}\text{C}$ -system and characteristics of bound states. FES is first excited state, SES is second excited state and TES is third excited state.

No	BS	E_x , MeV (Ajzenberg-Selove 1991)	J^π	E_b , MeV (Ajzenberg-Selove 1991)	$^{2S+1}L_J$	V_0 , MeV	α , fm^{-2}	C_w	R_{ch} , fm	R_m , fm	C_w , exp.
1	GS	0	1/2 ⁻	-4.94635	$^2P_{1/2}$	72.173484	0.2	1.52(1)	2.48	2.50	1.97(39)
2	FES	3.089443(20)	1/2 ⁺	-1.856907	$^2S_{1/2}$	98.575578	0.2	2.11(1)	2.49	2.67	2.12
3	SES	3.684507(19)	3/2 ⁻	-1.26184	$^2P_{3/2}$	681.80814	2.5	0.30(1)	2.47	2.44	0.33
4	SES	3.684507(19)	3/2 ⁻	-1.26184	$^2P_{3/2}$	357.908258	1.3	0.37(1)	2.48	2.46	0.33
5	TES	3.853807(19)	5/2 ⁺	-1.09254	$^2D_{5/2}$	263.174386	0.2	0.25(1)	2.49	2.61	0.20(4)

We usually consider that bound states for scattering potentials are only FSs (Dubovichenko, 2019; Dubovichenko, 2015), and if they are not present, then the depth of the potentials without the FS can be set equal to zero. In this case, it refers to the P -scattering potentials, while the S - and D -potentials have a bound forbidden state and, even at zero phase shifts, must have a non-zero depth. As a result, for the scattering potential in the $^2D_{3/2}$ wave, parameters with a depth of 105 MeV and a width of 0.2 fm^{-2} were used, which makes it possible to correctly describe the first resonance at the excitation energy of $E_x = 8.2(1)$ MeV (that is, at the energy above the threshold by 3.2(1) MeV) with a width of 1.1(1) MeV (Ajzenberg-Selove, 1991). The scattering potentials used and possible transitions to the BSs were considered in (Dubovichenko, 2021) and we will not present them here.

Results and discussions

Figure 1 presents the results of calculations of the cross-section for $E1$ and $M1$ radiative capture in the $n^{12}\text{C}$ system to the GS and 3 BS of the ^{13}C nucleus in the energy range up to 5 MeV. The solid curve shows the total cross-section for all transitions to the BSs with potentials from Table 1 and Tables 2–5 of (Dubovichenko, 2021). Since at energies from 10^{-5} to 10 keV the calculated cross-section is almost a straight line (solid curve in Figure 1), in this energy region it can be approximated by a simple function of the form

$$\sigma_{\text{p}} (\mu \text{b}) = \frac{A}{\sqrt{E(\text{keV})}} \quad (1)$$

with a constant $A = 19.4954 \mu\text{b} \times \text{keV}^{1/2}$, determined by one point in the cross-sections at a minimum energy equal to 10^{-5} keV. From approximation (1), one can obtain an estimate of the cross-section at a thermal energy of 25.3 meV ($1 \text{ meV} = 10^{-6} \text{ keV}$) equal to 3.87 mb, which completely coincides with the result of 3.87(3) mb (Firestone, 2016).

Next, the rate of the $n^{12}\text{C}$ -capture reaction was calculated, which in units of

$\text{cm}^3\text{mol}^{-1}\text{sec}^{-1}$ can be represented as (Angulo 1999)

$$N_A \langle \sigma v \rangle = 3.7313 \cdot 10^4 \mu^{-1/2} T_9^{-3/2} \int_0^{\infty} \sigma(E) E \exp(-11.605 E / T_9) dE$$

where E is given in MeV, the total cross-section $\sigma(E)$ is measured in μb , μ is the reduced mass in a.m.u. (Angulo, 1999).

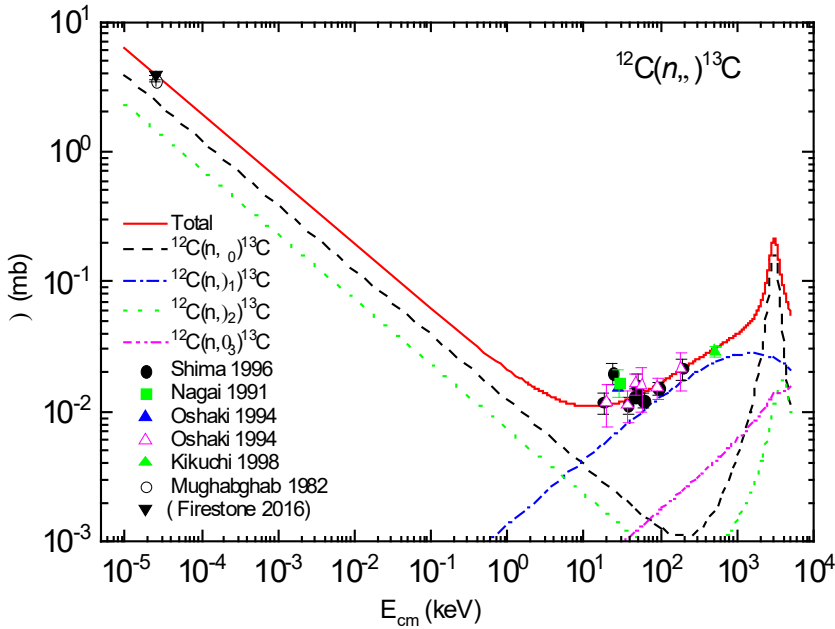


Figure 1. Cross-sections of radiative $n^{12}\text{C}$ -capture to the GS and 3 BS of the ^{13}C nucleus with potentials from Table 1 and Tables 2 – 5 of the work of (Dubovichenko, 2021). Experimental data taken from the works: ● – (Shima, 1996), ○ – thermal cross-section of capture to the GS of (Mughabghab, 1982), ■ – (Nagai, 1991), Δ and ▲ – (Ohsaki, 1994), ▲ – (Kikuchi, 1998), total thermal cross-section of ▼ – (Firestone, 2016).

To calculate the reaction rate, theoretical total cross-sections were used at energies from 10^{-5} keV to 5 MeV and the resulting total rate (see Figure 2 – solid curve) smoothly increases with increasing temperature at all temperatures considered. The dotted curve shows the reaction rate for capture to the GS, the dash-double-dotted curve – to the FES, the dash-dotted curve – to the SES, and the dashed curve – to the TES. Here, for comparison, a short-dotted curve shows the rate of neutron capture by the ^{12}C nucleus, obtained in (Kikuchi, 1998) taking into account only non-resonant processes, which coincides well with our results.

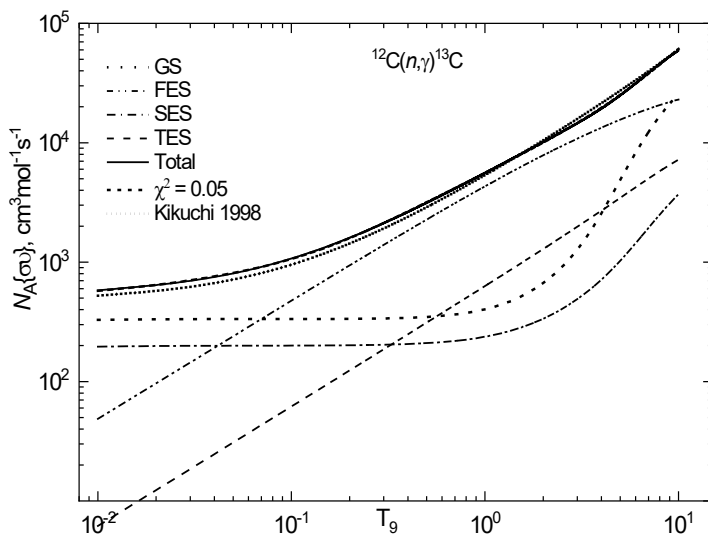


Figure 2. Total $n^{12}\text{C}$ -capture reaction rate. The short-dashed curve is the result of the approximation of the calculated rate at $\chi^2 = 0.05$, the short-dotted curve is the rate of $n^{12}\text{C}$ -capture from work (Kikuchi, 1998).

The reaction rate shown in Figure 2 as a solid curve can be approximated by a function of the form

$$N_A \langle \sigma v \rangle = a_1 / T_9^{2/3} \exp(-a_2 / T_9^{1/3}) \cdot (1.0 + a_3 T_9^{1/3} + a_4 T_9^{2/3} + a_5 T_9 + a_6 T_9^{4/3} + a_7 T_9^{5/3} + a_8 T_9^{6/3}) + a_9 / T_9^{1/3}$$

Table 2. Reaction rate approximation parameters.

i	a_i
1	25.93019
2	0.97648
3	240.9492
4	-676.4427
5	673.7797
6	922.6434
7	-991.6664
8	392.7353
9	85.51388

The parameters of such an approximation are given in Table 2. The result of the rate calculating with these parameters is shown in Figure 2 with the short-dashed curve with an average value of $\chi^2 = 0.05$. This curve merges with the solid one. During the

approximation, 1000 calculated points shown in Figure 2 were used, and to calculate χ^2 , the error in the calculated data was taken equal to 5 %.

Conclusions

Thus, the combinations of potentials used (Dubovichenko, 2021), which describe the main characteristics of the discrete and continuum spectra for the $n^{12}\text{C}$ system, make it possible to well reproduce the available data on experimental cross-sections for radiative $n^{12}\text{C}$ capture to the GS and the first three excited states at energies from 25.3 MeV to 0.5 MeV, that is, in the energy region covering almost seven orders of magnitude. All potentials considered do not have fitting parameters, which vary when calculating the total cross-sections - all these parameters are preliminarily fixed according to the characteristics of the BS and scattering processes of the $n^{12}\text{C}$ system.

REFERENCES

- Ajzenberg-Selove F. (1991). Energy levels of light nuclei $A = 13-15$. Nucl. Phys. A V.523.— Pp.1–196. — Doi: 10.1016/0375-9474(91)90446-D.
- Angulo C. et al. (1999). A compilation of charged-particle induced thermonuclear reaction rates. Nucl. Phys. A. — V.656(1). — Pp.3–183. — Doi: [https://doi.org/10.1016/S0375-9474\(99\)00030-5](https://doi.org/10.1016/S0375-9474(99)00030-5).
- Dubovichenko S.B., Burkova N.A. (2021). Reaction rate $n^{12}\text{C}$ at temperatures from 0.01 to 10 T_9 . Russ. Phys. Jour. — V.64. — №2. — Pp.216–227. — <https://doi.org/10.1007/s11182-021-02319-0>.
- Dubovichenko S.B. (2019). Radiative neutron capture. Primordial nucleosynthesis of the Universe. First English edition. Germany. Berlin/Munich/Boston. Walter de Gruyter Gmb H. — 310 p. — ISBN 978-3-11-061784-9. — <https://doi.org/10.1515/9783110619607-202>.
- Dubovichenko S.B. (2015). Thermonuclear processes in Stars and Universe. Second English edition, expanded and corrected. Germany, Saarbrücken: Scholar's Press. — 332 p. — ISBN 978-3-639-76478-9. — <https://www.morebooks.de/store/ru/book/thermonuclear-processes-in-stars/isbn/978-3-639-76478-9>.
- Firestone R.B., Revay Z.S. (2016). Thermal neutron radiative cross sections for ${}^6\text{Li}$, ${}^9\text{Be}$, ${}^{10,11}\text{B}$, ${}^{12,13}\text{C}$, and ${}^{14,15}\text{N}$. Phys. Rev. C. — V. 93. — Pp.054306–1. — 054306–12. — Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.054306>.
- http://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?mud|search_for=atomnuc
- Heil M. et al. (1998). The (n, γ) Cross Section of ${}^7\text{Li}$. Astrophys. J. — V.507. — Pp. 997–1002. — Doi: <http://dx.doi.org/10.1086/306367> //
- Igashira M., Ohsaki T. (2004). Neutron capture nucleosynthesis in the universe. Sci. Tech. Adv. Materials. V.5. — Pp. 567–573. — Doi: 10.1016/j.stam.2004.03.016 //
- Liu Z.H. et al. (2001). Asymptotic normalization coefficients and neutron halo of the excited states in ${}^{12}\text{B}$ and ${}^{13}\text{C}$. Phys. Rev. C. — V.64. — Pp. 034312–1. — 034312-5. — Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.64.034312>.
- Kelley J.H., Purcell J.E., Sheu C.G. (2017). Energy levels of light nuclei $A = 12$. Nucl. Phys. A. — V.968. — Pp.71–253. — <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2017.07.015>.
- http://cdf.e.sinp.msu.ru/services/ground/NuclChart_release.html
- Nagai Y. et al. (1996). Fast neutron capture reactions in nuclear astrophysics. Hyperfine Interactions. — V.103. — Pp. 43–48; — Doi: <https://doi.org/10.1007/BF02317341>
- Neudachin V.G., Smirnov Yu.F. (1969). Nuklonnie associacii v legkih yadrah. — Moskva: Nauka. — 414p. (In Russ.). — <https://bookmix.ru/book.phtml?id=2635496>
- Plattner G.R., Viollier R.D. (1981). Coupling constants of commonly used nuclear probes. Nucl. Phys. A. — V.365. — Pp. 8–12. — Doi: [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(81\)90384-5](https://doi.org/10.1016/0375-9474(81)90384-5).
- Shima T. et al. (1996). Experimental studies of keV energy neutron-induced reactions relevant to astrophysics and nuclear physics. — JAERI-C-97-004. — Pp.131–140. — <https://www.nds.iaea.org/publications/indc/indc-jpn-0178.pdf>.
- Mughabghab S.F., Lone M.A., Robertson B.C. (1982). Quantitative test of the Lane-Lynn theory of direct radiative capture of thermal neutrons by ${}^{12}\text{C}$ and ${}^{13}\text{C}$. Phys. Rev. C. — V.26. — Pp. 2698–2701. — Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.26.2698>.
- Nagai Y. et al. (1991). Neutron capture cross sections of light nuclei in primordial nucleosynthesis. Nucl. Instr. Meth. B. — V.56. — Pp.492–495. — Doi: [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(91\)96078-Y](https://doi.org/10.1016/0168-583X(91)96078-Y).

Ohsaki T. et al. (1994). New measurement of the $^{12}\text{C}(n,\gamma)^{13}\text{C}$ reaction cross section. *Astrophys. Jour.* — V.422. — Pp. 912–916. — Doi: 10.1086/173783.

Kikuchi T. et al. (1998). Nonresonant direct p - and d -wave neutron capture by ^{12}C . *Phys. Rev.C.* —V.57. —Pp.2724–2730. — Doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.57.2724>.

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC
OF KAZAKHSTAN
ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 52–62

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.277>

UDC 532.133

IRSTI 29.17.19

© A. Kassymov^{1*}, A. Adylkanova¹, A. Bektemissov¹, K. Astemessova²,
G. Turlybekova², 2024

¹Shakarim University of Semey, Semey, Kazakhstan;

²Kazakh National Technical University named K.I. Satbayev, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: kassymov.asb@gmail.com

INVESTIGATION OF VISCOSITY PROPERTIES OF TiO₂/Al₂O₃ HYBRID NANOFLUID BASED ON BIDISTILLED WATER FOR USE IN A HYBRID SO- LAR COLLECTOR

Kassymov Askar — PhD, acting associate professor. Shakarim University of Semey. 071412. Semey, Kazakhstan

E-mail: kassymov.asb@gmail.com. ORCID: 0000-0002-1983-6508;

Adylkanova Ainur — PhD student, Shakarim University of Semey. 071412. Semey, Kazakhstan

E-mail: aiko6a8383@mail.ru. ORCID: 0009-0006-6068-3941;

Bektemissov Anuar — PhD student, Shakarim University of Semey. 071412. Semey, Kazakhstan

E-mail: anuar.bektemissov@icloud.com. ORCID: 0000-0002-0364-4632;

Astemessova Kalamkas — PhD, senior lecturer. Kazakh National Technical University named after K.I. Satbayev. 050013. Almaty, Kazakhstan

E-mail: k.astemessova@satbayev.university. ORCID: 0000-0002-4143-6084;

Turlybekova Gulzhan — candidate of technical sciences, senior lecturer. Kazakh National Technical University named after K.I. Satbayev. 050013, Almaty, Kazakhstan

E-mail: g.turlybekova@satbayev.university. ORCID: 0000-0001-5522-4931.

Abstract. Nanofluid is a new class of liquid that is of great interest with potential wide application in industry and energy due to its high thermal conductivity. This class of liquid consists of dispersed nanoparticles of metals, metal oxides, and non-metal oxides in the volume of the base liquid. The use of this liquid as a coolant in hybrid solar collectors, in which cooling the solar panel is of key importance, is especially important. In addition to increasing the thermal conductivity of the nanofluid, the dispersed state of the nanofluid causes an increase in viscosity. The viscosity properties of the nanofluid determine the cost of pumping of coolant along the circuit of a hybrid solar collector, which affects the performance and its economic efficiency. Recently, hybrid nanofluids based on a combination of various metal oxides, non-metal oxides, and so on have become widely known. In this article, the viscosity of the hybrid nanofluid TiO₂/Al₂O₃-bidistilled water in mass concentrations of 0.5 %, 1 %, 2 % was studied. Kinematic viscosity was measured using a VPZh-4 capillary viscometer. It was found that in addition to the increase in the viscosity of the nanofluid with an increase in the total concentration of nanoparticles, an increase in the mass concentration of Al₂O₃ makes a more noticeable difference. For nanofluid TiO₂-bidistilled water, the increase in kinematic viscosity is 2 %, 3 % and 6 % for concentrations of 0.5 wt %, 1 wt %, 2 wt %. While the increase for TiO₂/Al₂O₃-bidistilled water hybrid nanofluids of similar total concentrations is 6 %, 18 %, 42 %. The

results obtained in this work can be used to evaluate the efficiency and improve the performance of a hybrid solar collector and improve modifications of solar panels.

Keywords: hybrid solar collectors, hybrid nanofluid, kinematic viscosity, coolant, solar energy

This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (grant no. AP19678220).

© **А. Касымов^{1*}, А. Адылканова¹, А. Бектемисов¹, К. Астемесова²,
Г. Турлыбекова², 2024**

¹Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті, Семей, Қазақстан;

²Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті,
Алматы, Қазақстан.

E-mail: kassymov.asb@gmail.com

ГИБРИДТІ КҮН КОЛЛЕКТОРЫНДА ҚОЛДАНУҒА АРНАЛҒАН БИДИСТИЛЬДЕНГЕН СУ НЕГІЗІНДЕГІ TiO_2/Al_2O_3 ГИБРИДТІ НАНОСҰЙЫҚТЫҢ ТҮТҚЫРЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ

Касымов Аскар Багдатович — PhD, қауымдастырылған профессор м.а., Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті. 071412. Семей, Қазақстан

E-mail: kassymov.asb@gmail.com. ORCID: 0000-0002-1983-6508;

Адылканова Айнура Жарылқасыновна — PhD докторант. Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті. 071412. Семей, Қазақстан

E-mail: aikoba8383@mail.ru. ORCID: 0009-0006-6068-3941;

Бектемисов Ануар Алмасбекович — PhD докторант. Семей қаласының Шәкәрім атындағы университеті. 071412. Семей, Қазақстан

E-mail: anuar.bektemissova@icloud.com. ORCID: 0000-0002-0364-4632;

Астемесова Каламкас Сериковна — PhD, аға оқытушы. Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, 050013, Алматы, Қазақстан

E-mail: k.astemessova@satbayev.university. ORCID: 0000-0002-4143-6084;

Турлыбекова Гулжан Капасовна — техника ғылымдарының кандидаты, аға оқытушы. Қ.И.

Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, 050013, Алматы, Қазақстан

E-mail: g.turlybekova@satbayev.university. ORCID: 0000-0001-5522-4931.

Аннотация. Наносұйықтық — жоғары жылу өткізгіштігінің арқасында өнеркәсіпте және энергетикада кең қолдану мүмкіндігі бар үлкен қызығушылық тудыратын сұйықтықтың жаңа класы. Сұйықтықтың бұл класы негізгі сұйықтық көлеміндегі металдардың дисперсті нанобөлшектерінен, металл оксидтерінен және металл емес оксидтерінен тұрады. Бұл сұйықтықты гибриді күн коллекторларында салқындатқыш ретінде пайдалану, әсіресе күн панелін салқындату маңызды болып табылады. Наносұйықтықтың жылу өткізгіштігін арттырумен қатар, наносұйықтықтың дисперстік күйі тұтқырлықтың жоғарылауын тудырады. Наносұйықтықтың тұтқырлық қасиеттері гибриді күн коллекторының тізбегі бойынша салқындатқышты айдау құнын анықтайды, бұл өнімділікке және оның экономикалық тиімділігіне әсер етеді. Соңғы уақытта әртүрлі металл оксидтерінің, бейметалл оксидтерінің және т.б. комбинациясы негізінде гибриді наносұйықтықтар кеңінен танымал болды. Бұл мақалада 0,5 %, 1 %, 2 % массалық концентрациялардағы TiO_2/Al_2O_3 -бидистильденген су гибриді наносұйықтықтың

тұтқырлығы зерттелді. Кинематикалық тұтқырлық ВПЖ-4 капиллярлық вискозиметр көмегімен өлшенді. Нанобөлшектердің жалпы концентрациясының жоғарылауымен наносұйықтықтың тұтқырлығының жоғарылауымен қатар, Al_2O_3 массалық концентрациясының жоғарылауы айтарлықтай айырмашылықты тудыратыны анықталды. TiO_2 -бидистилденген су наносұйықтығы үшін кинематикалық тұтқырлықтың артуы 0,5 масса %, 1 масса %, 2 масса % концентрациялары үшін 2 %, 3 % және 6 % құрайды. Жалпы концентрациясы ұқсас TiO_2/Al_2O_3 -бидистиль-денген су гибридіті наносұйықтықтардың өсімі 6 %, 18 %, 42 % құрайды. Бұл жұмыста алынған нәтижелерді гибридіті күн коллекторының тиімділігін бағалау және өнімділігін жақсарту және күн панельдерінің модификацияларын жақсарту үшін пайдалануға болады.

Түйін сөздер: гибридіті күн коллекторлары, гибридіті наносұйықтық, кинематикалық тұтқырлық, салқындатқыш, күн энергиясы

Бұл зерттеу Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитетімен қаржыландырылады (грант № AP19678220).

© А. Касымов^{1*}, А. Адылканова¹, А. Бектемисов¹, К. Астемесова²,
Г. Турлыбекова², 2024

¹ Университет имени Шакарима города Семей, Семей, Казахстан;

² Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан.

E-mail: kassymov.asb@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЯЗКОСТНЫХ СВОЙСТВ ГИБРИДНОЙ НАНОЖИДКОСТИ TiO_2/Al_2O_3 НА ОСНОВЕ БИДИСТИЛЛИРОВАННОЙ ВОДЫ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ГИБРИДНОМ СОЛНЕЧНОМ КОЛЛЕКТОРЕ

Касымов Аскар Багдатович — PhD, и.о. ассоциированного профессора. Университет имени Шакарима, Семей, Казахстан

E-mail: kassymov.asb@gmail.com. ORCID: 0000-0002-1983-6508;

Адылканова Айнура Жарылкасыновна — PhD докторант. Университет имени Шакарима, Семей, Казахстан

E-mail: aiko6a8383@mail.ru. ORCID: 0009-0006-6068-3941;

Бектемисов Ануар Алмасбекович — PhD докторант. Университет имени Шакарима, Семей, Казахстан

E-mail: anuar.bektemisov@icloud.com. ORCID: 0000-0002-0364-4632;

Астемесова Каламкас Сериковна — PhD, старший преподаватель. Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан

E-mail: k.astemessova@satbayev.university. ORCID: 0000-0002-4143-6084;

Турлыбекова Гулжан Капасовна — кандидат технических наук, старший преподаватель.

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

E-mail: g.turlybekova@satbayev.university. ORCID: 0000-0001-5522-4931.

Аннотация. Наножидкость — новый класс жидкости, представляющий огромный интерес потенциального широкого применения в промышленности и энергетике ввиду проявления высокой теплопроводности. Данный класс жидкости представляет собой диспергированные наночастицы металлов, оксидов металлов, оксидов неметаллов в объеме базовой жидкости. Особо актуально применение данной жидкости в качестве теплоносителя в гибридных солнечных

коллекторах, в которых охлаждение солнечной панели носит ключевое значение. Помимо увеличения теплопроводности наножидкости, дисперсное состояние наножидкости обуславливает увеличение вязкости. Вязкостные свойства наножидкости определяют затраты на перекачку теплоносителя по контуру гибридного солнечного коллектора, что отражается на производительности и его экономической эффективности. В последнее время приобретают широкую известность гибридные наножидкости на основе сочетания различных оксидов металлов, оксидов неметаллов и так далее. В данной статье исследована вязкость гибридной наножидкости $\text{TiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ -бидистиллированная вода в массовых концентрациях 0,5 %, 1 %, 2 %. Измерение кинематической вязкости производилось с помощью капиллярного вискозиметра ВПЖ-4. Было выявлено, что помимо увеличения вязкости наножидкости, с ростом общей концентрации наночастиц, увеличение массовой концентрации Al_2O_3 вносит более ощутимый характер. Для наножидкости TiO_2 -бидистиллированная вода увеличение кинематической вязкости составляет 2 %, 3% и 6 % для концентраций 0,5 масс. %, 1 масс. %, 2 масс.%. В то время как прирост для гибридных наножидкостей $\text{TiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ -бидистиллированная вода аналогичных общих концентраций составляет 6 %, 18 %, 42 %. Результаты, полученные в данной работе, могут быть использованы для оценки эффективности и повышения производительности гибридного солнечного коллектора, усовершенствования модификаций солнечных панелей.

Ключевые слова: гибридные солнечные коллекторы, гибридная наножидкость, кинематическая вязкость, теплоноситель, солнечная энергетика

Данное исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19678220).

Введение

Растущие выбросы парниковых газов налагают новые обязательства по уменьшению использования невозобновляемых источников энергии (твердое топливо, газ) и переходу к качественно новому способу генерации энергии. Одним из перспективных решений на данный момент является использование солнечных коллекторов, о чем говорит рост установленной мощности фотоэлектрических элементов в мире почти 18 раз за 10-летний период с 2010 года (Maka, Alabid, 2022).

Увеличение производительности солнечных коллекторов достигается как разработкой новых конструкционных особенностей (Shafieian и др., 2018; Sabahi и др., 2016), так и поиском более эффективных теплоносителей (Shareef и др., 2015; Vignarooban и др., 2015). В последнее время ведутся исследования в использовании в качестве теплоносителя наножидкости. Наножидкость представляет относительно новый класс жидкости, состоящий из базовой жидкости и наночастиц размером до 100 нм. Наножидкость получила широкий интерес ввиду проявления высокой теплопроводности по сравнению с базовой жидкостью. Применяются различные виды наночастиц: металлические, оксиды металлов, углеродные нанотрубки, наночастицы графена. Оксиды металлов и неметаллов получили широкое применение ввиду низкой стоимости и относительно высокой теплопроводности (Sarkar, 2011; Shackelford и др., 2000; Kim и др., 2007)

Увеличение теплопроводности является ключевым фактором производительности солнечных коллекторов. Как известно на сегодняшний день наножидкости демонстрируют высокие относительные показатели

теплопроводности. Широкую популярность приобретают гибридные наножидкости. Относительное увеличение теплопроводности гибридных наножидкостей согласно авторам (Singh и др., 2020; Wanatasanapan и др., 2020; Nandandi и др., 2016; Esfe и др., 2023) достигает значений до 70 %. Автором (Guan и др., 2023) было выявлено увеличение теплопроводности гибридной наножидкости на основе Cu-Ag50%/ Ag по сравнению с отдельными составляющими компонентами, что делает использование гибридной наножидкости привлекательным. Для стабилизации гибридных наножидкостей используются различные поверхностно-активные вещества. Например, авторами (Khairul и др., 2016; Xian и др., 2020) для стабилизации TiO_2 -Cu и TiO_2 -GnPs наночастиц в водном растворе этиленгликоля использовались сурфактанты SDBS и СТАВ. Автором (Akhgar и др., 2018) была приготовлена наножидкость MWCNT- TiO_2 /водный раствор этиленгликоля, стабилизированной ПАВом СТАВ. Соотношение наночастиц и ПАВ также отражается на теплофизических свойствах наножидкости, в частности на ее теплопроводности (Xia и др., 2014; Mostafizur и др., 2022) и химической стабильности (Choi и др., 2008).

Также к факторам эффективности коллекторов можно отнести перепад давления и мощность насоса, зависящим таких параметров как вязкость, скорости и плотности наножидкости (Said и др., 2014). Вязкость является важным теплофизическим параметром ввиду проявления наножидкостью как ньютоновского характера, так и неньютоновского (Yu и др., 2011; Halefadi и др., 2013; Aladag и др., 2012; Hernández и др., 2014). Рядом исследователей отмечено увеличение вязкости наножидкости (Babar и др., 2019; Rudyak и др., 2023). Авторами (Batchelor, 1977; Rashin и др., 2013; Nguyen и др., 2008; Kulkarni и др., 2006; Masoumi и др., 2009) разработаны эмпирические модели описания вязкости наножидкостей, представленные в основном зависимостью концентрации наночастиц, температурой жидкости. Некоторые авторы исследовали зависимость от агломерации и предложили теоретическое описание вязкости с учетом данного фактора (Suganthi и др., 2012; Аноор и др., 2009; Коса и др., 2018; Murshed и др., 2012). В ходе экспериментов, проведенных (Sundar и др., 2016), выявлен вклад базовой жидкости и температуры на вязкость наножидкости. Однако, несмотря на многочисленные предложенные теоретические (Einstein, 1906; Smoluchowski, 1916; Chen и др., 2007; Prasher и др., 2006) и эмпирические (Graf, 1984; Cheng и др., 2003; Hernández и др., 2014) модели, на данный момент отсутствуют общепринятое описание вязкости в гибридных наножидкостях.

В данной работе будет исследована вязкость наножидкости TiO_2 -бидистиллированная вода, Al_2O_3 -бидистиллированная вода, TiO_2 - Al_2O_3 – бидистиллированная вода в соотношении наночастиц 1:1. Предполагается определение влияния одного из компонентов на вязкость гибридной TiO_2 - Al_2O_3 наножидкости.

Материалы и методы

Наночастицы TiO_2 и Al_2O_3 были получены у производителя «Sigma-Aldrich». Согласно паспортным данным товара, размер наночастиц составляет не более 50 нм. Диспергация наножидкости производилась ультразвуковым гомогенизатором модели «JY92-IIDN» фирмы Scientz, мощностью до 900 Вт, частота – 20 кГц.

Получение наножидкости производилось с помощью двухэтапного метода.

Базовая жидкость – бидистиллированная вода. Были приготовлены несколько вариантов наножидкостей: TiO_2 - дистиллированная вода 0,5, 1, 2 масс.%, Al_2O_3 -дистиллированная вода 0,5, 1, 2 масс.%, $\text{TiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ -дистиллированная вода 0,5, 1, 2 масс.% в соотношении 1:1. Продолжительность диспергирования наночастиц была определена в 30 мин без выдержки между пульсами.

Существуют общеизвестные методы измерения вязкости: с помощью ротационного вискозиметра (определение динамической вязкости) (Hamid и др., 2018; Wanatasanapan и др., 2020) и капиллярного вискозиметра (определение кинематической вязкости) (Jarahnejad и др., 2015; Duangthongsuk и др., 2009). Определение кинематической вязкости с использованием капиллярного вискозиметра обусловлено низкой вязкостью жидкой среды. Например, капиллярный вискозиметр серии ВПЖ позволяет определять кинематическую вязкость жидкости вплоть до 0,6 сСт. В связи с этим обстоятельством капиллярный стеклянный вискозиметр ВПЖ-4 был выбран для проведения измерений вязкости наножидкости в данной работе. Принцип работы капиллярного вискозиметра основан на истечении жидкости через капилляр определенного диаметра, выбранного исходя из предполагаемой вязкости жидкости. Кинематическая вязкость рассчитывается по формуле:

$$\nu = \frac{g}{9,807} \cdot \tau \cdot K \quad (1)$$

где ν – кинематическая вязкость (сСт), g – ускорение силы тяжести в месте измерения (м/с^2), τ – время истечения жидкости (с.), K – постоянная вискозиметра.

Определение вязкости проводилось с помощью капиллярного вискозиметра ВПЖ-4 (диаметр капилляра 0,37 мм). Вязкость определялась по формуле (1), ускорение свободного падения принято $9,81 \text{ м/сек}^2$ (для города Семей). Измерения вязкости проводились при температуре 20 (293К), 30 (303 К), 40 (313 К), 50 (323 К), 60 (333 К). Термостатирование обеспечивалось термостатом марки LOIP-LT.

Результаты и обсуждение

Полученные результаты свидетельствуют о неоднозначном проявлении вязкостных свойств гибридной наножидкости. На рисунке 1 для TiO_2 -бидистиллированная вода 0,5 масс.% в разрезе температур (293К-333К), кинематическая вязкость дает рост на 2 % по отношению к базовой жидкости (бидистиллированная вода). Наножидкость Al_2O_3 -бидистиллированная вода 0,5 масс.% показывает увеличение вязкости почти в 4 раза на уровне 7,5 %. Гибридная наножидкость $\text{TiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ – бидистиллированная вода 0,5 масс.% принимает среднее значение увеличения между вышеуказанными наножидкостями в пределах 6 %.

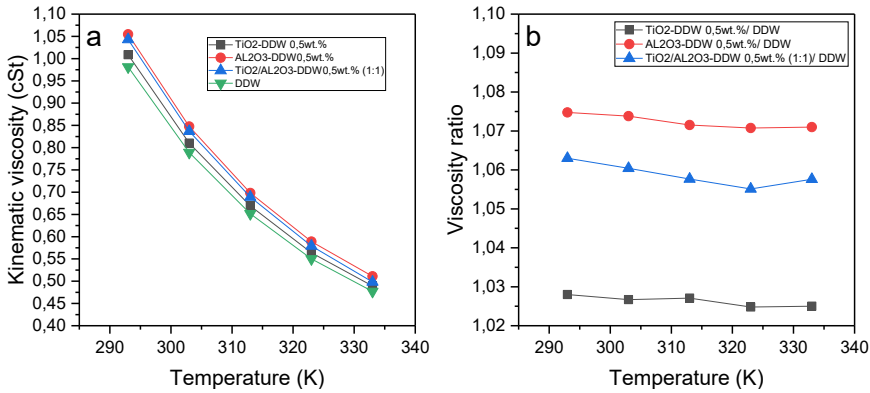


Рисунок 1 – Кинематическая вязкость (а) и отношение кинематической вязкости к бидистиллированной воде (б) для TiO₂-бидистиллированная вода, Al₂O₃-бидистиллированная вода, гибридной жидкости TiO₂/Al₂O₃-бидистиллированная вода концентрацией 0,5 масс.%

Однако на рисунке 2 можно заметить увеличение вязкости гибридной наножидкости TiO₂/Al₂O₃-бидистиллированная вода 1 масс. %, превышающей кинематическую вязкость Al₂O₃-бидистиллированная вода 1 масс.% противоположно случаю с 0,5 масс. %. Увеличение массовой концентрации на 0,5 % дало прирост кинематической вязкости для TiO₂/Al₂O₃-бидистиллированная вода 1 масс.% на 18 %, для TiO₂-бидистиллированная вода 1 масс.% порядка 3 %, для Al₂O₃-бидистиллированная вода 1 масс.% на 15 %.

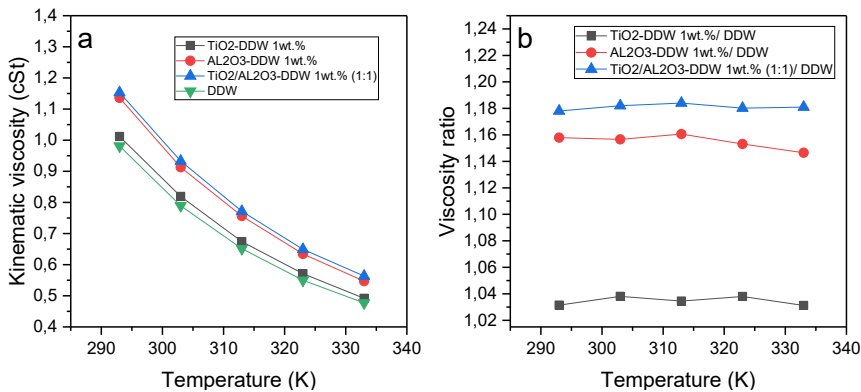


Рисунок 2 - Кинематическая вязкость (а) и отношение кинематической вязкости к бидистиллированной воде (б) для TiO₂-бидистиллированная вода, Al₂O₃-бидистиллированная вода, гибридной жидкости TiO₂/Al₂O₃-бидистиллированная вода концентрацией 1 масс.%

Тенденцию прироста кинематической вязкости можно наблюдать при дальнейшем увеличении массовой концентрации наночастиц до 2 масс. % (рис.3). Все более ощутимой становится разница кинематической вязкости наножидкостей Al₂O₃-бидистиллированная вода и TiO₂/Al₂O₃-бидистиллированная вода, составляющей 30 % и 42 % соответственно. Но в случае с TiO₂-бидистиллированная вода отмечен незначительный рост на уровне 6 %.

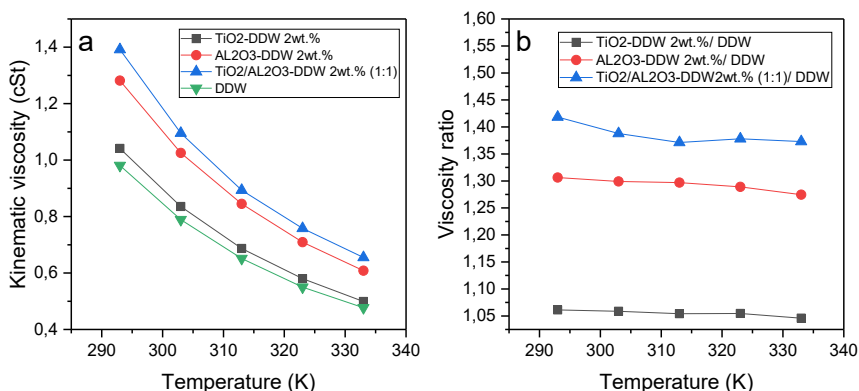


Рисунок 3 - Кинематическая вязкость (а) и отношение кинематической вязкости к бидистиллированной воде (б) для TiO₂-бидистиллированная вода, Al₂O₃-бидистиллированная вода, гибридной жидкости TiO₂/Al₂O₃-бидистиллированная вода концентрацией 2 масс.%

Таким образом, можно сделать вывод о существенном вкладе компонента Al₂O₃ в вязкостные характеристики наножидкости TiO₂/Al₂O₃-бидистиллированная вода, а именно увеличение массовой концентрации Al₂O₃ с 0,25 % до 1 % обуславливает почти 35-процентный прирост кинематической вязкости гибридной наножидкости (рис.4).

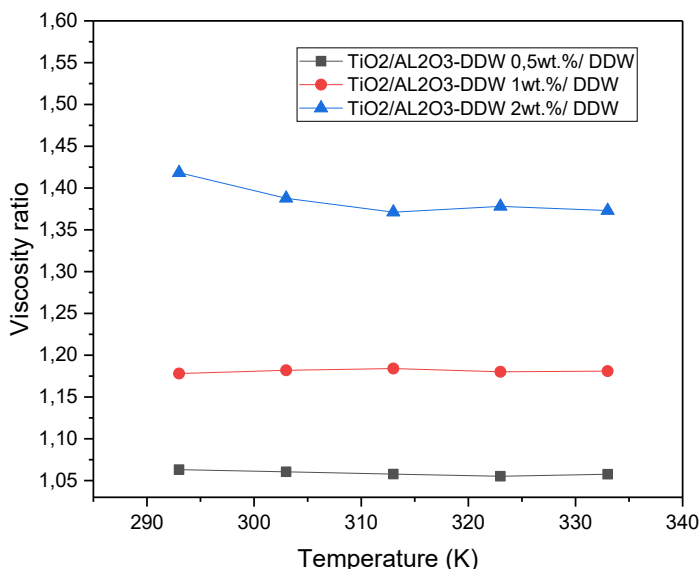


Рисунок 4 – Сравнение относительной вязкости TiO₂/Al₂O₃-бидистиллированная вода для концентраций 0,5 масс.%, 1 масс.%, 2 масс.%,

Заклучение

Произведены измерения кинематической вязкости наножидкости TiO_2 -дистиллированная вода, Al_2O_3 -дистиллированная вода, TiO_2 - Al_2O_3 – дистиллированная вода в соотношении наночастиц 1:1. Отмечено возрастание вязкости всех трех типов наножидкостей при увеличении массовой концентрации. При 0,5 масс. % рост кинематической вязкости незначительный. Проявление вязкостных свойств наножидкости TiO_2 -бидистиллированная вода при повышении концентрации наночастиц носит слабовыраженную направленность, характеризующуюся приростом кинематической вязкости в 6 %. Следует отметить, что при увеличении общей массовой концентрации кинематическая вязкость гибридной наножидкости превышала кинематическую вязкость отдельных компонентов. Наножидкость TiO_2 - Al_2O_3 – дистиллированная вода 2 масс. % показала увеличение на 42 %.

REFERENCES

- Akhgar A. & Toghraie D. (2018). An experimental study on the stability and thermal conductivity of water-ethylene glycol/ TiO_2 -MWCNTs hybrid nanofluid: developing a new correlation. — *Powder Technology*. — 338. — 806–818. DOI:10.1016/j.powtec.2018.07.086
- Aladag B., Halefald S., Doner N., Maré T., Duret S. & Estellé P. (2012). Experimental investigations of the viscosity of nanofluids at low temperatures. *Applied energy*. — 97. — 876–880. DOI: 10.1016/j.apenergy.2011.12.101 (in Eng.)
- Anoop K.B., Kabelac S., Sundararajan T. & Das S.K. (2009). Rheological and flow characteristics of nanofluids: Influence of electroviscous effects and particle agglomeration. — *Journal of applied physics*. — 106(3). DOI : 10.1063/1.3182807
- Babar, H., Sajid, M. U., & Ali, H. M. (2019). Viscosity of hybrid nanofluids: a critical review. *Thermal Science*. — 23(3 Part B). — 1713–1754. DOI: 10.2298/TSCI181128015B
- Batchelor G.K. (1977). The effect of Brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles. *Journal of fluid mechanics*. — 83(1). — 97–117. DOI:10.1017/S0022112077001062
- Chen H., Ding Y. & Tan C. (2007). Rheological behaviour of nanofluids. *New journal of physics*. — 9(10). — 367. DOI: 10.1088/1367-2630/9/10/367
- Cheng N.S. & Law A.W.K. (2003). Exponential formula for computing effective viscosity. *Powder technology*. — 129(1–3). — 156–160. DOI: 10.1016/S0032-5910(02)00274-7
- Choi C., Yoo H.S. & Oh J.M. (2008). Preparation and heat transfer properties of nanoparticle-in-transfer oil dispersions as advanced energy-efficient coolants. — *Current Applied Physics*. — 8(6). — 710–712. DOI: 10.1016/j.cap.2007.04.060
- Duangthongsuk W. & Wongwises S. (2009). Measurement of temperature-dependent thermal conductivity and viscosity of TiO_2 -water nanofluids. — *Experimental thermal and fluid science*. — 33(4). — 706–714. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2009.01.005
- Einstein A. (1906). A new determination of molecular dimensions. *Annln., Phys*. — 19. — 289–306.
- Esfe M.H., Alidoust S., Tamrabad S.N.H., Toghraie D. & Hatami H. (2023). Thermal conductivity of MWCNT- TiO_2 /Water-EG hybrid nanofluids: Calculating the price performance factor (PPF) using statistical and experimental methods (RSM). *Case Studies in Thermal Engineering*. — 48. — 103094. DOI: 10.1016/j.csite.2023.103094
- Harandi S.S., Karimipour A., Afrand M., Akbari M. & D’Orazio A. (2016). An experimental study on thermal conductivity of F-MWCNTs- Fe_3O_4 /EG hybrid nanofluid: effects of temperature and concentration. — *International Communications in Heat and Mass Transfer*. — 76. — 171–177. DOI: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2016.05.029
- Graf W.H. (1984). *Hydraulics of sediment transport*. Water Resources Publication.
- Guan H., Su Q., Wang R., Huang L., Shao C. & Zhu Z. (2023). Why can hybrid nanofluid improve thermal conductivity more? A molecular dynamics simulation. — *Journal of Molecular Liquids*. — 372. — 121178. DOI: doi.org/10.1016/j.molliq.2022.121178

- Halelfadl S., Estellé P., Aladag B., Doner N. & Maré T. (2013). Viscosity of carbon nanotubes water-based nanofluids: Influence of concentration and temperature. — *International Journal of Thermal Sciences*. — 71. — 111–117. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2013.04.013
- Hamid K.A., Azmi W.H., Nabil M.F., Mamat R. & Sharma K.V. (2018). Experimental investigation of thermal conductivity and dynamic viscosity on nanoparticle mixture ratios of TiO₂-SiO₂ nanofluids. — *International Journal of Heat and Mass Transfer*. — 116. — 1143–1152. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.09.087
- Hernández Battez A., Viesca J.L., González R., García A., Reddyhoff T. & Higuera-Garrido A. (2014). Effect of shear rate, temperature, and particle concentration on the rheological properties of ZnO and ZrO₂ nanofluids. *Tribology Transactions*. — 57(3). — 489–495. DOI: 10.1080/10402004.2014.881581
- Jarahnejad M., Haghighi E.B., Saleemi M., Nikkam N., Khodabandeh R., Palm B. & Muhammed M. (2015). Experimental investigation on viscosity of water-based Al₂O₃ and TiO₂ nanofluids. *Rheologica acta*. — 54. — 411–422. — DOI: 10.1007/s00397-015-0838-y
- Khairul M.A., Shah K., Doroodchi E., Azizian R. & Moghtaderi B. (2016). Effects of surfactant on stability and thermo-physical properties of metal oxide nanofluids. — *International Journal of Heat and Mass Transfer*. — 98. — 778–787. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.03.079
- Kim S.H., Choi S.R. & Kim D. (2007). Thermal conductivity of metal-oxide nanofluids: particle size dependence and effect of laser irradiation. — DOI: 10.1115/1.2427071
- Koca H.D., Doganay S., Turgut A., Tavman I.H., Saidur R. & Mahbubul I.M. (2018). Effect of particle size on the viscosity of nanofluids: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 82. — 1664–1674. DOI: 10.1016/j.rser.2017.07.016
- Kulkarni D.P., Das D.K. & Chukwu G.A. (2006). Temperature dependent rheological property of copper oxide nanoparticles suspension (nanofluid). *Journal of nanoscience and nanotechnology*. — 6(4). — 1150–1154. DOI: 10.1166/jnn.2006.187
- Maka A.O. & Alabid J.M. (2022). Solar energy technology and its roles in sustainable development. *Clean Energy*. — 6(3). — 476–483. DOI: doi.org/10.1093/ce/zkac023
- Masoumi N., Sohrabi N. & Behzadmehr A. (2009). A new model for calculating the effective viscosity of nanofluids. *Journal of Physics D: Applied Physics*. — 42(5). — 055501. DOI: 10.1088/0022-3727/42/5/055501
- Mostafizur R.M., Rasul M.G. & Nabi M.N. (2022). Effect of surfactant on stability, thermal conductivity, and viscosity of aluminium oxide–methanol nanofluids for heat transfer applications. *Thermal Science and Engineering Progress*. — 31. — 101302. DOI: 10.1016/j.tsep.2022.101302
- Murshed S.M., de Castro C.A. & Lourenço M.J.V. (2012). Effect of surfactant and nanoparticle clustering on thermal conductivity of aqueous nanofluids. *Journal of Nanofluids*. — 1(2). — 175–179. DOI: 10.1166/jon.2012.1020
- Nguyen C.T., Desgranges F., Galanis N., Roy G., Maré T., Boucher S. & Mintsa H.A. (2008). Viscosity data for Al₂O₃–water nanofluid—hysteresis: is heat transfer enhancement using nanofluids reliable?. *International Journal of thermal sciences*. — 47(2). — 103–111. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2007.01.033
- Prasher R., Bhattacharya P. & Phelan P.E. (2006). Brownian-motion-based convective-conductive model for the effective thermal conductivity of nanofluids. — DOI: 10.1115/1.2188509
- Rashin M.N. & Hemalatha J. (2013). Viscosity studies on novel copper oxide-coconut oil nanofluid. *Experimental Thermal and Fluid Science*. — 48. — 67–72. DOI: 10.1016/j.expthermflusci.2013.02.009
- Rudyak V.Y., Dashapilov G.R., Minakov A.V., & Pryazhnikov M.I. (2023). Comparative characteristics of viscosity and rheology of nanofluids with multi-walled and single-walled carbon nanotubes. *Diamond and Related Materials*. — 132. — 109616. DOI: 10.1016/j.diamond.2022.109616
- Sabahi H., Tofigh A.A., Kakhki I.M. & Bungypoor-Fard H. (2016). Design, construction and performance test of an efficient large-scale solar simulator for investigation of solar thermal collectors. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*. — 15. — 35–41. DOI: 10.1016/j.seta.2016.03.004
- Said Z., Saidur R., Rahim N.A. & Alim M.A. (2014). Analyses of exergy efficiency and pumping power for a conventional flat plate solar collector using SWCNTs based nanofluid. — *Energy and Buildings*. — 78. — 1–9. DOI: 10.1016/j.enbuild.2014.03.061
- Sarkar J. (2011). A critical review on convective heat transfer correlations of nanofluids. *Renewable and sustainable energy reviews*. — 15(6). — 3271–3277. DOI: 10.1016/j.rser.2011.04.025
- Shackelford J.F. & Alexander W. (2000). *CRC materials science and engineering handbook*. — CRC press. — DOI: 10.1201/9781420038408
- Shafieian A., Khiadani M. & Nosrati A. (2018). A review of latest developments, progress, and appli-

cations of heat pipe solar collectors. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 95. — 273–304. DOI: 10.1016/j.rser.2018.07.014

Shareef A.S., Abbod M.H. & Kadhim S.Q. (2015). Experimental investigation on a flat plate solar collector using Al₂O₃ nanofluid as a heat transfer agent. *International Journal of Energy and Environment*. — 6(4). — 317–330.

Singh J., Kumar R., Gupta M. & Kumar H. (2020). Thermal conductivity analysis of GO-CuO/DW hybrid nanofluid. *Materials Today: Proceedings*. — 28. — 1714–1718. DOI: 10.1016/j.matpr.2020.05.134

Smoluchowski M.V. (1916). Theoretische bemerkungen über die viskosität der kolloide. *Kolloid-Zeitschrift*. — 18(5). — 190–195.

Suganthi K.S. & Rajan K.S. (2012). Temperature induced changes in ZnO–water nanofluid: zeta potential, size distribution and viscosity profiles. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. — 55(25–26). — 7969–7980. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.08.032

Sundar L.S., Irurueta G.O., Ramana E.V., Singh M.K. & Sousa A.C.M. (2016). Thermal conductivity and viscosity of hybrid nanofluids prepared with magnetic nanodiamond-cobalt oxide (ND-Co₃O₄) nanocomposite. *Case studies in thermal engineering*. — 7. — 66–77. DOI: 10.1016/j.csite.2016.03.001

Vignarooban K., Xu X., Arvay A., Hsu K. & Kannan A.M. (2015). Heat transfer fluids for concentrating solar power systems—a review. *Applied energy*. — 146. — 383–396. DOI: 10.1016/j.apenergy.2015.01.125

Wanatasanapan V.V., Abdullah M.Z. & Gunnasegaran P. (2020). Effect of TiO₂-Al₂O₃ nanoparticle mixing ratio on the thermal conductivity, rheological properties, and dynamic viscosity of water-based hybrid nanofluid. *Journal of Materials Research and Technology*. — 9(6). — 13781–13792. DOI: 10.1016/j.jmrt.2020.09.127

Xia G., Jiang H., Liu R. & Zhai Y. (2014). Effects of surfactant on the stability and thermal conductivity of Al₂O₃/de-ionized water nanofluids. *International Journal of Thermal Sciences*. — 84. — 118–124. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2014.05.004

Xian H.W., Sidik N.A.C. & Saidur R. (2020). Impact of different surfactants and ultrasonication time on the stability and thermophysical properties of hybrid nanofluids. *International Communications in Heat and Mass Transfer*. — 110. — 104389. DOI: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2019.104389

Yu W., Xie H., Li Y. & Chen L. (2011). Experimental investigation on thermal conductivity and viscosity of aluminum nitride nanofluid. *Particuology*. — 9(2). — 187–191. DOI: 10.1016/j.partic.2010.05.014

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

ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 63–72

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.278>

УДК 517.977

© **A.E. Kemelbekova***, **D.M. Mukhamedshina**, **K.A. Mit'**, **R.S. Mendykhanov**,
A.K.Shongalova, 2024

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

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

CREATING AND RESEARCH ON PHOTOSENSITIVE STRUCTURES USING RARE EARTH METALS

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

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

Mukhamedshina D.M. — Candidate of Physics and Mathematics Sciences, Satbayev University, «Institute of Physics and Technology», Almaty, Kazakhstan

E-mail: d.mukhamedshina@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2513-6855>;

Mit' K.A. — Candidate of Physics and Mathematics Sciences, Satbayev University, «Institute of Physics and Technology», Almaty, Kazakhstan

E-mail: k.mit'@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0078-6723>;

Mendykhanov R.S. — undergraduate student at Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: r.mendykhanov@satbayev.university, <https://orcid.org/0009-0009-0463-7395>;

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

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

Abstract. The development of semiconductor photovoltaics in Kazakhstan, as a country that occupies one of the leading places in the world in terms of solar energy potential and has significant reserves of the necessary raw materials, is certainly relevant. Semiconductor solar cells have an important role to play in converting solar energy into electrical energy. However, in order for them to compete with other energy sources, their efficiency must be improved and their cost must be reduced. One of the ways to increase the efficiency of SCs is through texturing the silicon surface and using various anti-reflection coatings made of metal oxide semiconductors. Texturing the front surface of the solar cell can reduce reflection from 35 % to 11 %. In order to further reduce these losses, anti-reflective coatings are applied to the working surface of solar cells, which make it possible to achieve maximum absorption of incident solar radiation and reduce reflection in the spectral range of operation of silicon solar cells. Expanding the spectral range of sunlight used in photoconverters is a physically clear and theoretically promising path. Doping ZnO films with oxides of rare earth elements is one of the possibilities that contributes to expanding the working range of the solar spectrum, high transparency of coatings, chemical and thermal resistance and optimal refractive index. One of the important areas of modern energy is the widespread use of solar radiation. Semiconductor solar cells should play an important role in converting solar energy into electrical energy. However, in order for them to compete with other production methods, their efficiency

must be improved and their cost must be reduced. Wide opportunities in this area are provided by anti-reflection layers, which make it possible to reduce reflection in the spectral range of operation of silicon solar cells (SCs) and achieve maximum absorption of incident solar radiation. The problem of obtaining thin nano-sized layers of oxides of various metals deposited on the surface of a semiconductor wafer becomes urgent. Modern methods for producing thin films are not only a tool for their application, but also methods that make it possible to shape the composition, structure and properties of films, thereby giving them properties that are qualitatively different from the properties of the source material. Among the materials for anti-reflection coatings of silicon solar cells, rare-earth oxides stand out favorably because they have high transparency in the working range of the spectrum, chemical and thermal resistance, and have an optimal refractive index for these purposes.

Keywords: solar cells, zinc oxide, rare earth elements, europium, photoconverters
This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. BR18574141 “A comprehensive multi-purpose program to improve energy efficiency and resource-saving in the power and mechanical engineering for the industry of Kazakhstan”)

© А.Е. Кемелбекова*, Д.М. Мухамедшина, К.А. Мить, Р.С. Мендыханов, А.Қ. Шонғалова, 2024

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

СИРЕК ЖЕР МЕТАЛДАРЫН НЕГІЗІНДЕГІ ФОТОСЕЗІМТАЛ ҚҰРЫЛЫМДАРДЫ ЖАСАУ ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ

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

Мухамедшина Д.М. — физика-математика ғылымдарының кандидаты, аға ғылыми қызметкері.
Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан
E-mail: d.mukhamedshina@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2513-6855>;

Мить К.А. — физика-математика ғылымдарының кандидаты, аға ғылыми қызметкері. Satbayev University, Физика-техникалық институты, Алматы, Қазақстан
E-mail: k.mit@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0078-6723>;

Мендыханов Р.С. — Satbayev University магистранты, Алматы, Қазақстан
E-mail: r.mendykhanov@satbayev.university, <https://orcid.org/0009-0009-0463-7395>;

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

Аннотация. Күн энергетикасының әлеуеті бойынша әлемде жетекші орындардың бірін алатын және қажетті шикізаттың қомақты қоры бар ел ретінде Қазақстанда жартылай өткізгішті фотоэлектриктерді дамыту өзекті мәселе екені сөзсіз. Жартылай өткізгіш күн батареялары күн энергиясын электр энергиясына айналдыруда маңызды рөл атқарады. Бірақ олар басқа энергия көздерімен бәсекеге түсу үшін олардың тиімділігін арттырып, құнын төмендету керек. СК тиімділігін арттыру жолдарының бірі кремний бетін текстуралау және металл оксиді жартылай өткізгіштерден жасалған шағылысуға қарсы әртүрлі жабындарды қолдану болып табылады. Күн батареясының алдыңғы бетін текстуралау шағылуды 35 %-дан 11 %-ға дейін төмендетуі мүмкін. Бұл жоғалтуларды одан әрі азайту үшін күн

батареяларының жұмыс бетіне шағылысқа қарсы жабындар қолданылады, олар түсетін күн радиациясының максималды жұтылуына қол жеткізуге және кремнийлі күн элементтерінің жұмысының спектрлік диапазонында шағылуды азайтуға мүмкіндік береді. Фотоконвертерлерде қолданылатын күн сәулесінің спектрлік диапазонын кеңейту физикалық тұрғыдан анық және теориялық перспективалы жол болып табылады. Сирек жер элементтерінің оксидтері бар ZnO қабықшаларын қоспалау күн спектрінің жұмыс диапазонын, жабындардың жоғары мөлдірлігін, химиялық және термиялық төзімділігін және оңтайлы сыну көрсеткішін кеңейтуге ықпал ететін мүмкіндіктердің бірі болып табылады. Қазіргі энергетиканың маңызды бағыттарының бірі күн радиациясын кеңінен пайдалану болып табылады. Жартылай өткізгіш күн батареялары күн энергиясын электр энергиясына айналдыруда маңызды рөл атқаруы керек. Бірақ олардың басқа өндіріс әдістерімен бәсекеге түсуі үшін олардың тиімділігін арттырып, өзіндік құнын төмендету қажет. Бұл салада кең мүмкіндіктер рефлексияға қарсы қабаттармен қамтамасыз етілген, бұл кремнийлі күн элементтерінің (СК) жұмысының спектрлік диапазонында шағылуды азайтуға және түсетін күн радиациясын максималды сіңіруге қол жеткізуге мүмкіндік береді. Жартылай өткізгішті пластинаның бетінде тұндырылған әртүрлі металдардың оксидтерінің нано өлшемді жұқа қабаттарын алу мәселесі өзекті болып отыр. Жұқа қабықшаларды алудың заманауи әдістері оларды қолдану құралы ғана емес, сонымен қатар қабықшалардың құрамын, құрылымын және қасиеттерін пішіндеуге мүмкіндік беретін, сол арқылы оларға бастапқы материалдың қасиеттерінен сапалы түрде ерекшеленетін қасиеттерді беретін әдістер. Кремний күн батареяларын шағылыстыруға қарсы жабындарға арналған материалдардың ішінде сирек жер оксидтері жақсы ерекшеленеді, өйткені олар спектрдің жұмыс диапазонында жоғары мөлдірлікке, химиялық және термиялық төзімділікке ие және осы мақсаттар үшін оңтайлы сыну көрсеткішіне ие.

Түйін сөздер: күн батареялары, мырыш оксиді, сирек жер элементтері, европий, фототүрленгіштер

Бұл жұмысты Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті қаржылай қолдады (грант No BR18574141 Қазақстан өнеркәсібі үшін энергетикалық секторда және машина жасауда энергия тиімділігін арттыру және ресурстарды үнемдеу бойынша кешенді көп мақсатты бағдарлама).

© А.Е. Кемелбекова*, Д.М. Мухамедшина, К.А. Мить, Р. С. Мендыханов, ,
А.Қ. Шонғалова, 2024

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

E-mail: a.kemelbekova@sci.kz

СОЗДАТЬ И ИССЛЕДОВАТЬ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

Кемелбекова А.Е. — PhD, Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан
E-mail: a.kemelbekova@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0003-4813-8490>;

Мухамедшина Д.М. — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник. Satbayev University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан

E-mail: d.mukhamedshina@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2513-6855>;

Мить К.А. — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник. Satbayev

University, Физико-технический институт, Алматы, Казахстан

E-mail: k.mit'@sci.kz, <https://orcid.org/0000-0002-0078-6723>;

Мендыханов Р.С. — магистрант Satbayev University, Алматы, Казахстан

E-mail: r.mendykhanov@satbayev.university, <https://orcid.org/0009-0009-0463-7395>;

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

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

Аннотация. Развитие полупроводниковой фотоэнергетики в Казахстане как страны, занимающей по потенциалу солнечной энергии одно из ведущих мест в мире и обладающей значительными запасами необходимого сырья, является, безусловно, актуальным. Важную роль в преобразовании солнечной энергии в электрическую энергию должны сыграть полупроводниковые солнечные элементы. Однако, чтобы они могли конкурировать с другими способами получения энергии, необходимо повысить эффективность их работы и снизить стоимость. Одним из способов повышения эффективности СЭ используют как текстурирование поверхности кремния, так и использование различных антиотражающих покрытий из металлооксидных полупроводников. Текстурирование фронтальной поверхности солнечного элемента позволяет снизить отражение с 35 % до 11 %. С целью еще большего уменьшения этих потерь на рабочую поверхность солнечных элементов наносятся антиотражающие покрытия, которые позволяют достичь максимального поглощения падающего солнечного излучения и снизить отражение в спектральном диапазоне работы кремниевых солнечных элементов. Расширение спектрального интервала солнечного света, используемого в фотопреобразователях – физически ясный и теоретически перспективный путь. Легирование оксидами редкоземельных элементов пленок ZnO – одна из возможностей, которая способствует расширению рабочей области солнечного спектра, высокой прозрачности покрытий, химической и термической стойкости и оптимальному показателю преломления. Одним из важных направлений современной энергетики является широкое использование солнечного излучения. Важную роль в преобразовании солнечной энергии в электрическую должны сыграть полупроводниковые солнечные элементы. Однако, чтобы они могли конкурировать с другими способами получения, необходимо повысить эффективность их работы и снизить стоимость. Широкие возможности в этой области представляют антиотражающие слои, которые позволяют снизить отражение в спектральном диапазоне работы кремниевых солнечных элементов (СЭ) и достичь максимального поглощения падающего солнечного излучения. Актуальной становится задача получения тонких нано-размерных слоев оксидов различных металлов, нанесенных на поверхность полупроводниковой пластины. Современные методы получения тонких пленок являются не только инструментом для их нанесения, но и методами, которые позволяют формировать состав, структуру и свойства пленок, придавая им тем самым свойства, качественно отличающиеся от свойств исходного материала. Среди материалов для антиотражающих покрытий кремниевых СЭ выгодно выделяются оксиды редкоземельных элементов, которые обладают высокой прозрачностью в рабочей области спектра, химической и термической стойкостью и имеют оптимальный для этих целей показатель преломления.

Ключевые слова: солнечные элементы, оксид цинка, редкоземельные элементы, европий, фотопреобразователи

Эта работа была финансово поддержана Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант No BR18574141 «Комплексная многоцелевая программа по повышению энергоэффективности и ресурсосбережению в энергетике и машиностроении для промышленности Казахстана»).

Введение

Поликристаллические пленки оксида цинка уже долгое время являются одним их широко используемых материалов современной электроники. Высокий интерес к этому материалу связан с многообразием его уникальных физико-химических свойств, таких как люминесценция, наличие пьезо- и пироэффекта, амфотерные химические свойства, каталитическая активность, фотоэлектрические свойства и т.д.

Оксид цинка является широкозонным полупроводником ($E_g=3,37$ eV), который представляет чрезвычайно большой интерес для развития современной высокотемпературной микроэлектроники, оптоэлектроники, ультрафиолетовых детекторов, светодиодов и счетоводов, сенсоров газов (Ech-Chergui, 2023). Изучению свойств оксида цинка посвящено большое количество работ, в которых описываются различные методы формирования тонких пленок и способы модификации свойств полученных образцов. Введение ионов редкоземельного металла Eu^{3+} (европия) в пленки оксида цинка проявляется в появлении фоточувствительности вольт-амперных характеристик на излучение в видимом и инфракрасном диапазонах длин волн [da Fonseca et al., 2018; Oudhiaa et al., 2016; Xin Mei, 2018]. Пленки $\text{ZnO}:\text{Eu}^{3+}$, синтезированные золь-гель методом, могут быть использованы в оптоэлектронных приборах и, в частности, для создания солнечных элементов (Abdelkader Hafdallah et al., 2017; Er Ali Oğuz, 2011). Для синтеза тонких пленок $\text{ZnO}:\text{Eu}^{3+}$ используются различные технологии изготовления, такие как термическое распыление, реактивное магнетронное испарение, химическое осаждение из газовой фазы, золь-гель технология. Золь-гель технология обладает особыми преимуществами в отличие от других технологий, благодаря превосходному композиционному контролю, гомогенности на молекулярном уровне из-за смешивания жидких прекурсоров и низкой температуры кристаллизации.

Проработаны литературные данные по структурам оксида цинка с использованием редкоземельных металлов, созданные методами золь-гель технологии. Обоснован метод спрей-пиролиза для осаждения тонких пленок оксида цинка легированных ионами европия (Kumar et al., 2017), который основан на термическом разложении аэрозоля раствора. Возможность получения методом спрей-пиролиза покрытий различных площадей, однородных по толщине, обеспечивается перемещением сопла распылителя над подложкой. Преимущество также заключается в способности производить высокооднородные пленки большой площади при приемлемых (от 100 до 500 °C) значениях температуры технологического процесса, а также сравнительно невысокая стоимость процесса, относительно простой способ внедрения примеси (Petersen et al., 2011; Lehraki et al., 2012). К основным недостаткам данного метода следует отнести относительно высокие температуры (~ 400°C для ZnO), что не позволяет использовать его для гибких полимерных подложек. Посредством изменения концентрации примеси в растворе осуществляется варьирование процентного содержания примеси

легированного образца. Метод не требует использования вакуума на всех стадиях процесса (Mukhamedshina et al., 2017).

Материалы и основные методы

Для осаждения пленок оксида цинка, легированных ионами европия, использовались микроскопные слайды из стекла с размерами 75x25x1мм и пластины кремния р-типа с сопротивлением 5–10 Ом/см. Очистка поверхности подложек – один из наиболее важных технологических процессов. От чистоты поверхности подложки зависит однородность покрытия, его прочность и качество. При очистке использовали перекисно-аммиачный раствор, дистиллированную воду, ультразвуковую ванну.

В качестве исходного материала для получения оксида цинка был использован дигидрат ацетата цинка ($Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$). Золи были приготовлены с использованием изопропилового спирта и моноэтаноламина. Золи с концентрацией Eu вес. % были получены путем добавления соответствующего количества нитрата европия ($Eu(NO_3)_3$). Используемые растворы готовились на шейкере орбитального вращения ЛАБ-ПУ-01 (скорость вращения 150 об/мин). Растворение проводилось как при комнатной температуре, так и при нагреве до 50 °С, что в некоторых случаях являлось наиболее значимым условием гомогенизации получаемых растворов. Время приготовления растворов варьировалось от 20 минут до 1 часа. Осаждение пленок ZnO на подложку начиналось не позже 1 часа после приготовления растворов.

Синтез пленок методом спрей-пиролиза проводился на экспериментальной установке собственного производства при температуре подложки 400 ± 10 °С. Использовался пневматический аэрограф со сжатым воздухом в качестве газа для распыления под давлением 1,4 бар, при котором наблюдался наиболее равномерный поток распыляемого раствора. Газ-носитель (воздух) подается компрессором через фильтр и регулятор давления. Расстояние от сопла аэрографа до поверхности варьировалось в пределах 20–30 см. Диаметр распыляющего сопла является наряду с давлением газа-носителя фактором, определяющим величину капель распыляемого раствора. Увеличение толщины пленок ZnO проводилось последовательным циклическим осаждением. Время синтеза для одного слоя составляло 30 с, а для двадцати слоев – около 40 мин. Отжиг между нанесением отдельных слоев составлял 15 с. Далее полученные образцы при 400 °С подвергались отжигу в течение 15 мин. В ходе этих исследований было нанесено 20, 25, 30 и 50 слоев покрытия, поскольку целью было исследование тонких, но объемно сформированных структур.

Этапом окончательной обработки синтезируемых пленок ZnO являлся отжиг при температуре 400 °С в течение 1 часа с последующим медленным охлаждением.

Методика исследования синтезированных образцов

Для исследования оптических параметров полученных образцов были использованы спектрофотометры двулучевые СФ-256 УВИ (190–1200) нм и СФ-256 БИК (1100–2500) нм. По спектрам пропускания определены прозрачность пленок, ширина запрещенной зоны, показатель преломления, толщина пленки, плотность, коэффициент поглощения, пористость. Структура и состав осажденных пленок изучались на аналитическом сканирующем электронном микроскопе JSM-6490LA. Морфология поверхности тесно связана с механизмом роста и реальной структурой кристаллитов. Топография поверхности была исследована на атомно-

силовом микроскопе JSPM-5200 (JEOL, Japan) с применением полуконтактного AFM метода с использованием кантилеверов NSC35 ALBS при комнатной температуре. Электрические характеристики измерялись на установке собственного производства при температурах от комнатной до 300 °С.

Основные результаты

Был проведен ряд осаждений пленок оксида цинка и пленок оксида цинка, легированных ионами европия со слоями 20, 25, 30 и 50 слоев на стеклянные подложки. Как показали исследования на электронном микроскопе JSM-6490LA, приведенные на рисунке 1, наиболее отчетливо видна образовавшаяся кристаллическая структура на снимке с образца при 25 слоях осаждения.

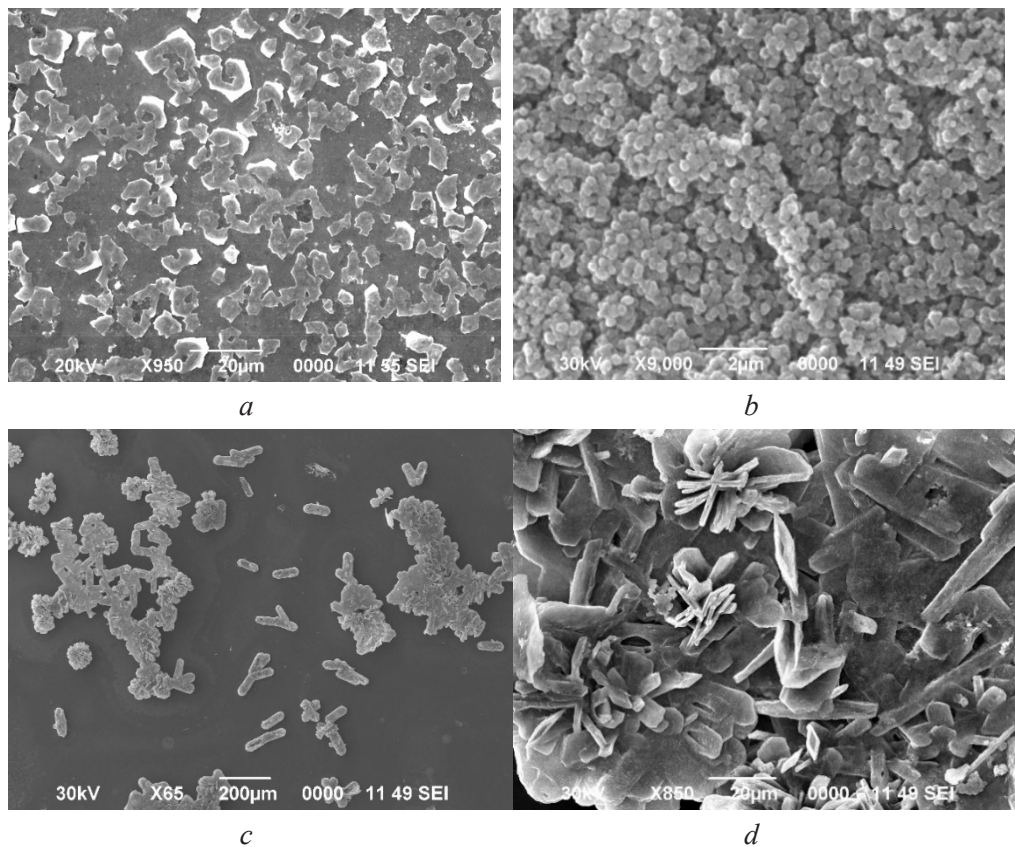


Рис 1. Морфология пленок ZnO с различными слоями осаждения а) 20 слоев, б) 25 слоев, в) 30 слоев, г) 50 слоев

Европий не обнаружен на снимках пленки оксида цинка при легировании европием 1 %.вес. при исследовании на электронном микроскопе. На рисунке 2 представлены изображения с СЭМ (а) и спектрограмма (б) пленок ZnO, легированных ионами европия 3 %, 5 % вес (рисунок 2 в, г).

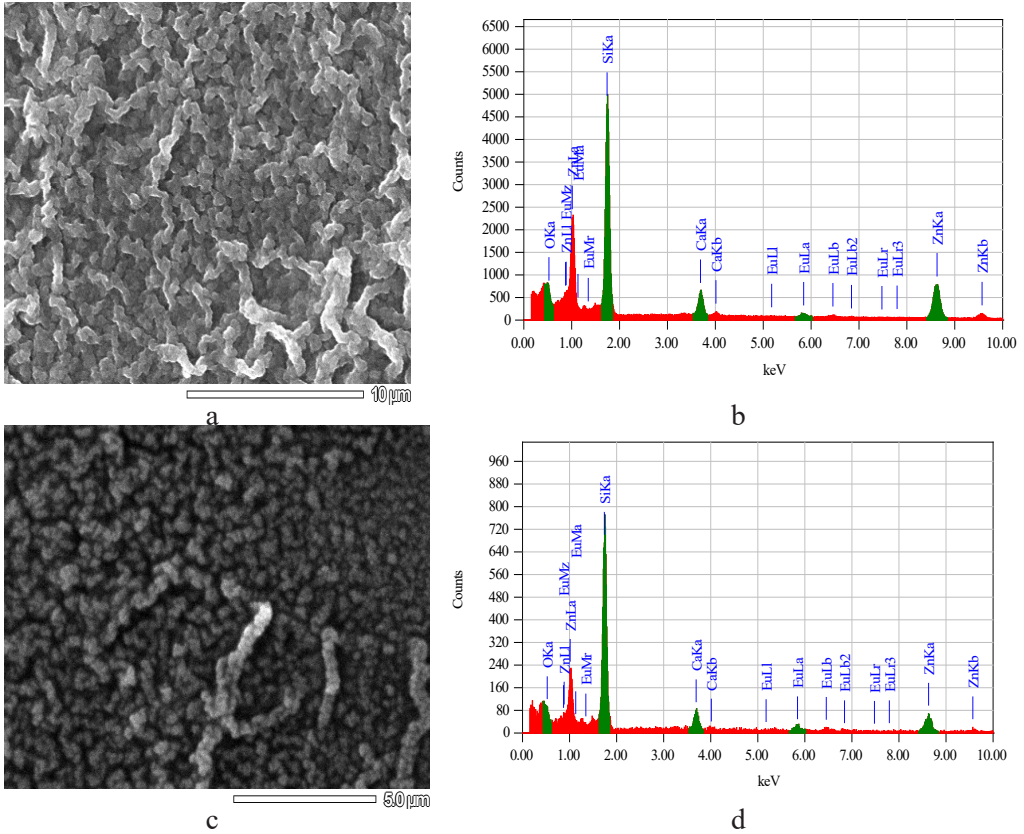


Рис 2. Изображения с СЭМ а) пленка цинка, б) спектрограмма пленок ZnO, легированных ионами европия 3% вес.,
 в) пленка цинка, д) спектрограмма пленок ZnO легированного ионами европия 5 % вес.

В таблице 1 приведены параметры топологии поверхности тонких пленок ZnO нелегированной и легированных ионами европия, где, R_a – средняя шероховатость; R_q – среднеквадратичная шероховатость; R_z – разность между максимумом и минимумом высоты анализируемого изображения

Таблица 1 – Параметры топологии поверхности тонких пленок ZnO, нелегированной и легированных ионами европия

Параметры шероховатости	Микроскопный слайд (стекло)	Концентрация оксида цинка и ионов европия в пленкообразующем растворе			
		1.1 мол/л Zn	0.1 % вес. Eu	0.3 %весEu	0.5 % вес.Eu
R_a , nm	2.31	4.28	36.6	13.2	3.77
R_q , nm	2.92	5.46	42.5	16.2	4.86
R_z , nm	19.0	39.8	197.0	89.4	31.9

В рисунке 4 проведены измерения спектров пропускания нелегированной пленки и легированных ионами европия ZnO на спектрофотометре СФ-256 УВИ.

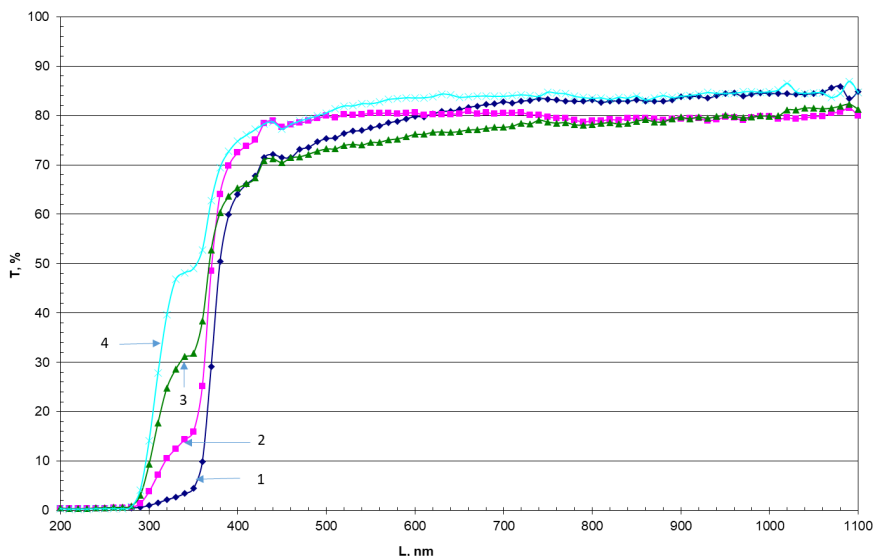


Рис 4. Спектры пропускания пленок ZnO, легированных ионами европия кривая 1 - пленка ZnO на стекле, кривая 2- пленка ZnO, легированная ионами европия 1 % вес., кривая 3 - пленка ZnO, легированная ионами европия 3 % вес., кривая 4 пленка ZnO, легированная ионами европия 5 % вес.

Наблюдаемое расширение ширины запрещенной зоны для легированного образца (кривые 2,3,4) по сравнению с нелегированным образцом (кривая 1), отнесено к эффекту Бурштейна-Мосса, в частности, обусловлено сдвигом края области собственного поглощения ZnO в сторону высоких частот при увеличении концентрации электронов. Также проведены измерения сопротивления образцов в температурном диапазоне от комнатной до 300 °С и проверена возможность чувствительности пленок, легированных ионами европия к различным газам.

Заключение

Таким образом, в ходе исследования было обнаружено, что структуры ZnO:RE являются чувствительными к излучению широкого спектрального диапазона. Полученные результаты свидетельствуют о смещении спектров пропускания в область малых длин волн при легировании ионами европия пленок оксида цинка, осажденных спрей-пиролизом, что позволяет расширить интервал фочувствительности солнечных элементов в будущем.

REFERENCES

- Ech-Chergui A.N. (2023). Spray pyrolysis-assisted fabrication of Eu-doped ZnO thin films for antibacterial activities under visible light irradiation // *Chemical Papers*. — 2023. — Т. 77. — №. 2. — Pp. 1047–1058.
- da Fonseca A.F.V., Siqueira R.L., Landers R., Ferrari J.L., Marana N.L., Sambrano J.R., Schiavon M.A. (2018). A theoretical and experimental investigation of Eu-doped ZnO nanorods and its application on dye sensitized solar cells // — *Journal of Alloys and Compounds*. — 2018. — Т. 739. — Pp. 939–947.

Oudhia A., Shukla N., Bose P., Lalwani R. & Choudhary A. (2016). Effect of various synthesis protocols on doping profile of ZnO: Eu Nanowires //Nano-Structures & Nano-Objects. — 2016. — T. 7. — Pp. 69–74.

Xin Mei. (2018). Effect of Eu doping on the structure, morphology and luminescence//Journal of Theoretical and Applied Physics. — 2018. — Vol.12. — Pp.177–182.

Hafdallah A., Azzedine A., Belhani H., Aida M.S. & Attaf N. (2017). Effect of the nozzle-substrate distance on the structural and optical properties of ZnO thin films deposited by spray pyrolysis technique // American Journal of Nano Research and Applications. — 2017. — T. 5. — №. 6. — Pp. 87–90.

ER A.O., Farha A.H., Gümüş C., Güneri E. & Ufuktepe Y. (2011). Morphology of zinc oxide thin films deposited by spray pyrolysis //Optoelectronics and advanced materials-Rapid communications. — 2011. — T. 5. — №. 12. — Pp. 1286–1291.

Kumar M. et al. (2017) Effect of structural defects, surface roughness on sensing properties of Al doped ZnO thin films deposited by chemical spray pyrolysis technique //Ceramics International. — (2017). — T. 43. — №. 4. — Pp. 3562–3568.

Petersen J., Brimont C., Gallart M., Schmerber G., Gilliot P., Ulhaq-Bouillet C., Dinia A. (2010). Correlation of structural properties with energy transfer of Eu-doped ZnO thin films prepared by sol-gel process and magnetron reactive sputtering //Journal of applied physics. — 2010. — T. 107. — №. 12.

Lehraki N., Aida M.S., Abed S., Attaf N., Attaf A., Poulin M. (2012). ZnO thin films deposition by spray pyrolysis solution properties. // Current Applied Physics. — 2012. — Vol.12. — Pp.1283–1287.

Mukhamedshina D., Mit' K., Chuchvaga N., Tokmoldin N. (2017). Fabrication and study of sol-gel ZnO films for use in Si-based heterojunction photovoltaic devices// Modern Electronic Materials. — 2017. — Pp.158–161.

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC
OF KAZAKHSTAN
ISSN 2224-5227
Volume 2. Number 350 (2024), 73–83
<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.279>

UDC 004.021

© **Y.T. Kozhagulov, D.M. Zhexebay, S.A. Sarmanbetov*, N.M. Ussipov,
K.T. Kopbay, 2024**

al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: sarmanbetov.sanzhar@gmail.com

IDENTIFICATION OF DIGITAL MODULATION BASED ON INFORMATIONAL ENTROPY

Kozhagulov Yeldos — Lead researcher, PhD, Lecturer of Department of Physics and Technology, Al-Farabi Kazakh National University. 050000. Almaty, Kazakhstan

E-mail: kazgu.kz@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5714-832X>;

Zhexebay Dauren — PhD, Al-Farabi Kazakh National University. 050000. Almaty, Kazakhstan

E-mail: zhexebay92@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3974-0896>;

Sarmanbetov Sanzhar — PhD candidate, Al-Farabi Kazakh National University. 050000. Almaty, Kazakhstan

E-mail: sarmanbetov.sanzhar@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1749-2163>;

Ussipov Nurzhan — PhD candidate, Al-Farabi Kazakh National University. 050000. Almaty, Kazakhstan

E-mail: ussipov.nurzhan@kaznu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-2512-3280>;

Kopbay Kymbat — PhD student, Al-Farabi Kazakh National University. 050000. Almaty, Kazakhstan

E-mail: kopbay.kymbat0827@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1583-2099>.

Abstract. The classification of communication signals in low signal-to-noise ratio (SNR) environments poses a significant challenge, particularly due to the dynamic and complex nature of these conditions. Traditional signal recognition methods, which are primarily effective in stable SNR scenarios, often fail to deliver reliable results when faced with fluctuating SNR levels. Addressing this critical gap, our research introduces a novel entropy-based methodology for identifying modulation types under variable SNR conditions. This innovative approach utilizes a diverse array of entropy measures to extract and differentiate signal characteristics, specifically targeting various phase modulation types such as BPSK, QPSK, 8PSK, 16PSK, 32PSK, and 64PSK. The versatility and adaptability of the proposed algorithm mark a significant departure from conventional feature extraction methods, enabling it to maintain high accuracy in environments where traditional approaches are less effective. Through extensive experimentation and analysis, our algorithm has demonstrated superior performance in challenging conditions, achieving robust and reliable signal classification even at SNRs as low as -4 dB. This advancement not only showcases the potential of entropy-based approaches in enhancing signal classification in complex communication systems but also sets a new benchmark for future research in the field. The implications of this study are far-reaching, offering practical solutions for improving the efficiency and reliability of communication technologies in real-world scenarios.

Keywords: entropy, modulation, classification, MPSK, SNR

© **Е.Т. Кожагулов, Д.М. Жексебай, С.А. Сарманбетов*, Н.М. Үсіпов,
К.Т. Көпбай, 2024**

әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: sarmanbetov.sanzhar@gmail.com

АҚПАРАТТЫҚ ЭНТРОПИЯНЫҢ НЕГІЗІНДЕ САНДЫҚ МОДУЛЯЦИЯНЫ АНЫҚТАУ

Кожагулов Елдос — жетекші ғылыми қызметкер, PhD докторы, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ физика және техника кафедрасының оқытушысы, Алматы, Қазақстан

E-mail: kazgu.kz@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5714-832X>;

Жексебай Даурен — PhD докторы, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан

E-mail: zheexebay92@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3974-0896>;

Сарманбетов Санжар — PhD кандидаты, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан

E-mail: sarmanbetov.sanzhar@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1749-2163>

Үсіпов Нұржан — PhD кандидаты, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, Алматы, Қазақстан

E-mail: ussipov.nurzhan@kaznu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-2512-3280>;

Көпбай Қымбат — PhD докторанты, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ. 050000. Алматы, Қазақстан

E-mail: kopbay.kymbat0827@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1583-2099>.

Аннотация. Сигнал-шу қатынасы (SNR) төмен орталардағы байланыс сигналдарының жіктелуі, әсіресе осы жағдайлардың динамикалық және күрделі сипатына байланысты айтарлықтай қиындық тудырады. Ең алдымен тұрақты SNR сценарийлерінде тиімді болатын дәстүрлі сигналды тану әдістері SNR деңгейлерінің құбылуымен бетпе-бет келгенде сенімді нәтижелерді бере алмайды. Осы маңызды олқылықты жою үшін біздің зерттеу айнымалы SNR жағдайында модуляция түрлерін анықтауға арналған жаңа энтропияға негізделген әдістемені енгізеді. Бұл инновациялық тәсіл BPSK, QPSK, 8PSK, 16PSK, 32PSK және 64PSK сияқты әртүрлі фазалық модуляция түрлеріне бағытталған сигнал сипаттамаларын шығару және саралау үшін әртүрлі энтропия түрлерін пайдаланады. Ұсынылған алгоритмнің әмбебаптығы мен бейімділігі дәстүрлі тәсілдер тиімділігі төмен орталарда жоғары дәлдікті сақтауға мүмкіндік беретін әдеттегі мүмкіндіктерді шығару әдістерінен айтарлықтай ауытқуды көрсетеді. Кең ауқымды эксперименттер мен талдаулар арқылы біздің алгоритм күрделі жағдайларда жоғары өнімділікті көрсетті, тіпті -4 дБ дейін төмен SNR-де сенімді және сенімді сигнал классификациясына қол жеткізді. Бұл прогресс күрделі байланыс жүйелеріндегі сигналдарды жіктеуді жақсартудағы энтропияға негізделген тәсілдердің әлеуетін көрсетіп қана қоймайды, сонымен қатар осы саладағы болашақ зерттеулер үшін жаңа бағдарды белгілейді. Бұл зерттеудің салдары кең ауқымды болып табылады, нақты әлемдегі сценарийлерде коммуникациялық технологиялардың тиімділігі мен сенімділігін арттыру үшін практикалық шешімдерді ұсынады.

Түйін сөздер: энтропия, модуляция, классификация, MPSK, SNR

© **Е.Т. Кожугулов, Д.М. Жексебай, С.А. Сарманбетов*, Н.М. Усипов, К.Т. Копбай, 2024**

Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан.

E-mail: sarmanbetov.sanzhar@gmail.com

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ЦИФРОВОЙ МОДУЛЯЦИИ НА ОСНОВЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ ЭНТРОПИИ

Кожугулов Елдос — ведущий научный сотрудник, кандидат технических наук, преподаватель физико-технического факультета Казахского национального университета имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: kazgu.kz@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5714-832X>;

Жексебай Даурен — кандидат биологических наук, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: zhexebay92@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3974-0896>;

Сарманбетов Санжар — кандидат технических наук, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: sarmanbetov.sanzhar@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1749-2163>;

Усипов Нуржан — докторант, КазНУ им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: ussipov.nurzhan@kaznu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-2512-3280>;

Копбай Кымбат — PhD студент КазНУ им. аль-Фараби. 050000. Алматы, Казахстан

E-mail: kopbay.kymbat0827@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1583-2099>.

Аннотация. Классификация сигналов связи в средах с низким отношением сигнал/шум (SNR) представляет собой серьезную проблему, особенно из-за динамического и сложного характера этих условий. Традиционные методы распознавания сигналов, которые в первую очередь эффективны в сценариях со стабильным отношением сигнал/шум, часто не дают надежных результатов при колебаниях уровней отношения сигнал/шум. Что-бы устранить этот критический пробел, наше исследование представляет новую методологию, основанную на энтропии, для определения типов модуляции в условиях переменного отношения сигнал/шум. Этот инновационный подход использует разнообразный набор энтропийных мер для извлечения и дифференциации характеристик сигнала, в частности, для различных типов фазовой модуляции, таких как BPSK, QPSK, 8PSK, 16PSK, 32PSK и 64PSK. Универсальность и адаптивность предложенного алгоритма существенно отличают его от традиционных методов извлечения признаков, позволяя ему сохранять высокую точность в средах, где традиционные подходы менее эффективны. Благодаря обширным экспериментам и анализу наш алгоритм продемонстрировал превосходную производительность в сложных условиях, обеспечив надежную и надежную классификацию сигналов даже при таких низких отношениях сигнал/шум, как -4 дБ. Это достижение не только демонстрирует потенциал энтропийных подходов в улучшении классификации сигналов в сложных системах связи, но и устанавливает новый ориентир для будущих исследований в этой области.

Значение этого исследования имеет далеко идущие последствия: оно предлагает практические решения для повышения эффективности и надежности коммуникационных технологий в реальных сценариях.

Ключевые слова: энтропия, модуляция, классификация, MPSK, SNR

Introduction

Currently, technological advances have made classification and identification an integral part of the data transmission industry. This is a relatively new area of research in signal analysis that continues to attract a lot of interest, which has led to its considerable prominence in recent years. Classification plays a key role in many applications, for example, in military and civilian communication systems including monitoring, radio-observation, electronic warfare, cognitive radio (CR) and software-defined radio (SDR) (Zhou et al., 2019; Zhao & Yang, 2017; Li & Ying, 2014). However, due to the high signal density, modulation classification (MC) is becoming an increasingly complex process, especially in communication systems with unknown parameters such as carrier frequency and sample duration. Furthermore, it cannot be denied that the complexity of recognition increases under various noise exposures, and the classification task at a low signal-to-noise ratio (SNR) is now widely studied in (Uys et al., 2017; Li. et al., 2016; Wang et al., 2018). Various algorithms have been proposed to solve this problem.

Classification algorithms are commonly bifurcated into two predominant categories: firstly, the decision theory approach, which is predicated upon the likelihood function (LB) as evidenced in source (Zheng & Lv, 2018), and secondly, the statistical pattern recognition methodology, which hinges on feature extraction (FB), as delineated in source (Huang et al., 2019). The latter, FB, has garnered widespread acceptance in the realm of classification due to its advantageous attributes, namely consistent performance stability and reduced computational complexity. This methodological approach generally encompasses two principal phases: the initial phase of feature selection and the subsequent phase of classifier development. Within the realm of feature extraction, this subsystem is tasked with isolating features that are representative of signal characteristics, achieved through the analysis of data within either the time domain or the transformation domain.

Recent advancements have seen the evolution of both feature types and extraction methodologies, giving rise to novel features being proposed and employed specifically for modulation recognition. Notable among these advancements, as indicated in references (Yan & Feng, 2017; Yan & Liu, 2018), is the successful classification of modulation signals such as MSK and MPSK through

the utilization of an image analysis approach, which involves the measurement of Hamming's distance. Further, reference (Zhao & Guo, 2011)] introduces a novel feature predicated upon fourth- and sixth-order cumulants, coupled with the development of a neural network classifier designed for the identification of a spectrum of nine signal types, encompassing MSK and MQAM signals.

An additional recognition algorithm, based on spectral analysis as detailed in source (Nemala & Patil, 2013), accentuates the characteristics inherent in both the power spectrum (Guo & Li, 2010) and the cyclic spectrum (Boutte & Santhanam, 2009) of signals within the frequency domain. This approach has the distinct advantage of mitigating noise effects in the transmission channel. However, it necessitates a considerable amount of prior signal knowledge and entails a relatively high level of computational complexity. Conversely, the constellation map methodology, as illustrated in source (Liu & Lin, 2009), offers a more straightforward approach. It effectively displays the structural characteristics of signals, boasting advantages such as simplicity, intuitiveness, and a lower dependency on the signal-to-noise ratio (SNR). Various types of modulation can be used in the data transmission environment to ensure the most efficient and correct delivery of communication signals. Data delivery is carried out using a modulated signal which in turn is a complex signal with variable parameters depending on the transmitted information. A well-known method for determining the complex characteristics of signals is information entropy (Jeon & Chehri, 2020; Zhanabaev & Kozhagulov, 2018). The advantage of the entropy feature extraction method is that it provides a high level of noise immunity and stability. According to the simulation results in (Li & Guo, 2015), the algorithm based on entropy characteristics demonstrates good anti-noise characteristics and can give a detailed description of the characteristics of radar signals in a complex environment with a low signal-to-noise ratio (SNR). In reference (Zhang & Li, 2018), the authors concluded that the algorithm for feature extraction based on the entropy cloud can reach 100 % recognition rate even at SNR of -11 dB. A number of experiments related to various entropy methods have also shown that complex signals such as BPSK, QPSK, as well as QAM signals are more complex in the detection process. The article (Liu & Guan, 2017) indicates that new functions are rarely proposed that can complete the classification of MPSK and MQAM signals. In this regard, our research efforts are focused on the identification of modulation types using a new algorithm of calculating the probabilistic space for various feature extraction methods.

This paper is organized as follows: Section 2 summarizes extraction methods and algorithms. Section 3 describes experimental data, results, which are analysed in detail. Section 4 provides conclusions and possible directions for future research.

Method

Theory of Entropy

Currently, there are many different approaches to signal identification, but

undoubtedly, all approaches consist of two components: feature extraction and a classifier. No classifier system can work without certain input data, especially with incorrect functions.

In the well-known theory of information, “entropy” is a measure of the uncertainty of various events. Usually, as entropy increases, the signals become less stable. It can be used to determine the internal characteristics of signals, for example, to describe the distribution of uncertainty and calculate various statistics to determine the degree of signal complexity. Thus, the entropy feature extraction method is well suited for extracting features of the classification of modulated signals.

In this paper, four different entropies are selected to perform feature extraction algorithms.

The entropy analysis algorithm selects functions based on the uncertainty of the information; it does not require knowledge of the signal parameters. It has a relatively small amount of computation, so it is a fairly simple algorithm for extracting features.

Typically, the structure for classification includes three parts, feature extraction, feature selection, and classifier. We will consider feature extraction including entropy functions.

The principles and methods of information theory have become an integral part of probability theory and statistics and have found application in various fields. The concept of entropy has a special meaning in the field of information theory and was introduced by Shannon. Shannon’s entropy is a measure of the uncertainty of some system. It should be emphasized that Shannon perceived information as signals that are necessary, useful for the recipient. Unhelpful signals are noise, interference from Shannon’s point of view. If the signal at the output of the communication channel is an exact copy of the signal at the input, then this means the absence of entropy from the standpoint of the information theory. No noise means maximum information. Shannon’s entropy looks like as follows (Liu & Guan, 2017):

$$H(\mathbf{p}) = H(p_1, p_2, \dots, p_n) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad (1)$$

where $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n)$ shows the existing probability of each event in the collection, provided that

$$0 \leq p_i \leq 1, \quad \sum_{i=1}^n p_i = 1 \quad (2)$$

According to the definition of the entropy function, $H(\mathbf{p})$ has the follow-

ing properties:

1. Symmetry.

The value $H(\mathbf{p})$ of remains unchanged with an arbitrary change in the order of the components $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n$ of the probability vector $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n)$, that is, the entropy result refers only to the general statistical properties of the X set.

2. Nonnegativity

The value of the entropy function is always a non-negative quantity, namely:

$$H(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n) \geq 0 \tag{3}$$

3. Reliability property

The entropy value must be zero when a certain event occurs in the set.

4. Extreme property

In the X set, when each event has the same probability, it obtains the maximum entropy. When every event in X set has the same probability $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = \dots = \mathbf{p}_n = \frac{1}{n}$, the entropy reaches its maximum value. As follows:

$$H(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n) \leq H\left(\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right) = \log n \tag{4}$$

Using the definition of Shannon’s entropy, exponential entropy was introduced to construct a two-dimensional feature entropy to improve signal recognition (Li et al. 2016). Assuming that the probability of an event is \mathbf{p}_i , the amount of information can be written as:

$$\Delta I_{exp}(\mathbf{p}_i) = e^{1-\mathbf{p}_i} \tag{5}$$

Exponential entropy can be defined as follows:

$$H(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^n \mathbf{p}_i e^{1-\mathbf{p}_i} \tag{6}$$

From formulas (5) and (6) it can be seen that in comparison with generally accepted information $\Delta I(\mathbf{p}_i) = \log \log \left(\frac{1}{\mathbf{p}_i}\right)$ the new concept $\Delta I_{exp}(\mathbf{p}_i)$ has the same meaning. In the time domain of definition $[0,1]$, the $\Delta I_{exp}(\mathbf{p}_i)$ is a monotonically decreasing function and its range is $[1, e]$. When the probabilities \mathbf{p}_i of all events are equal, the H_{exp} will receive the maximum value.

To investigate further applications of entropy and to calculate the uncertainty of the generalized distribution, Alfréd Rényi proposed a new entropy, which looks like as follows:

$$R^\alpha(\mathbf{p}) = \frac{1}{1-\alpha} \log \frac{\sum_i \mathbf{p}_i^\alpha}{\sum_i \mathbf{p}_i} \tag{6}$$

where the parameter q determines the order of Rényi's entropy, $q \in (0, 1) \cup (1, \infty)$ or $q \in \{0, 1, \infty\}$. With $q = 1$, the Rényi's entropy limit can degenerate into Shannon's entropy, so Rényi's entropy is a generalization of Shannon's entropy. The entropy of Tsallis is a generalization of the standard Boltzmann and Gibbs' entropy [23]. It can be defined as:

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^N p_i^q}{q - 1} \quad (7)$$

In formula (7), k - some positive constant that defines the unit of measurement of entropy, and in physical formulas it is a beam of dimensions, such as the Boltzmann constant. From the point of view of the entropy optimization problem, this constant is insignificant, therefore, for simplicity, $k = 1$ is often taken. N - the total number of elements of the set of probabilities, and p_i - the corresponding probabilities. When the order is 1, the entropy of Tsallis is converted to the Shannon's entropy.

Proposed algorithm

In the process of extracting features, the target signal can be affected by noise, and the amplitude of the signal has a certain property of fuzziness and randomness. The extracted characteristic of the signal is not stable, but fluctuates within a certain range. It is difficult to accurately and completely describe the characteristics of the target signal. To solve this problem, an algorithm for determining the probability was proposed, which divides into regions in the coordinate IQ (I - in-phase signals, Q - quadrature signal). The steps of the proposed algorithm are as follows.

The probability is determined by the following formula (Figure 2):

$$p_j = \frac{\sum_{i=1}^N Z(\varphi_i)}{N}$$

where $\varphi_i = \arctan\left(\frac{Q_i}{I_i}\right)$, $Z(\varphi) = \begin{cases} 1; \varphi \in \Phi_j \\ 0; \varphi \notin \Phi_j \end{cases}$, Φ_j is the collection of sets of each sector

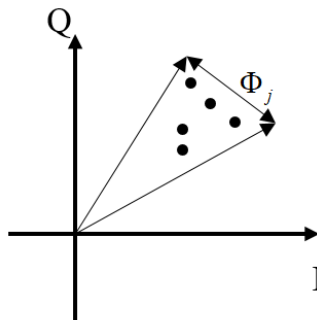


Figure 2. Probability method

In the IQ coordinate, we divide the region $Z(\varphi)$ into equal sectors Φ_j , where the angle is determined by $\varphi_i = \arctan\left(\frac{Q_i}{I_i}\right)$. After that, we calculate the sum of all points as follows:

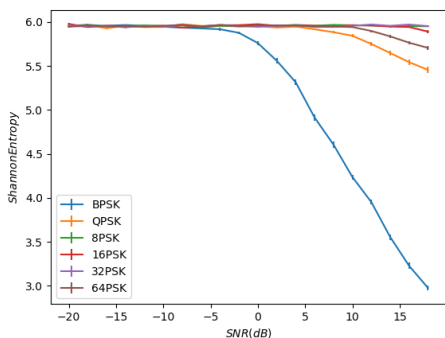
$$Z(\varphi) = \begin{cases} 1; \varphi \in \Phi_j \\ 0; \varphi \notin \Phi_j \end{cases}$$

If the points fall into the sector Φ_j , we will denote it as 1. After determining the total number of points in the sector j , dividing by the total number of points N , we calculate the probability in this sector.

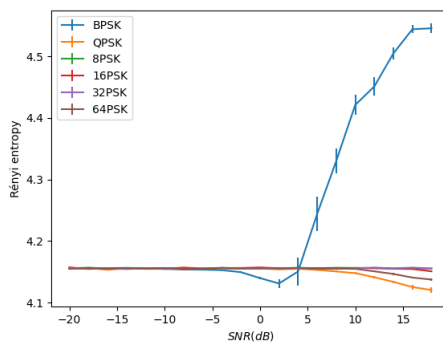
Results and Discussion

To increase the variety of signal datasets, a new dataset called Hisar-Mod2019.1 was used. The dataset includes 26 modulation types from 5 different modulation families, which are analogue, FSK, pulse amplitude modulation (PAM), PSK, and quadrature amplitude modulation (QAM).

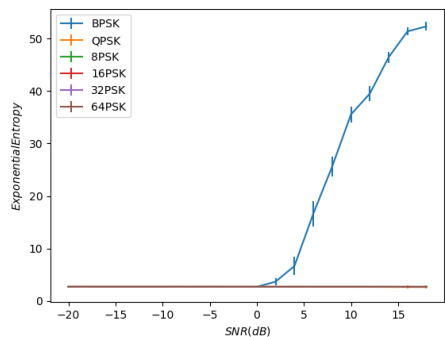
To extract entropy features, experiments are carried out for each signal at different SNRs and the average value of its information entropy is obtained. The change curve of different entropy with SNR is shown in Figure 3.



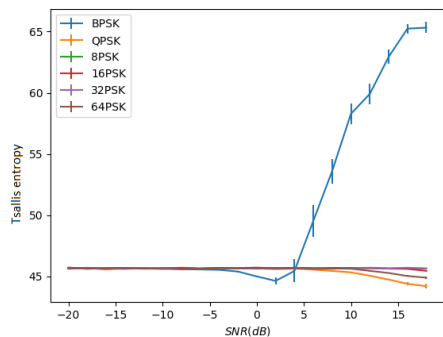
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 3. The change curve of different entropy with SNR. (a) Shannon's entropy; (b) Rényi's entropy; (c) Exponential entropy; (d) Tsallis entropy

Figure 3 shows that most of the entropy decreases with increasing SNR and begins to stabilize. This is due to the fact that as the SNR increases, the degree of signal interference decreases, and when the signal SNR reaches a certain level, the change in the entropy value is mainly caused by the randomness of the signal symbols. As shown in Figure 3a, Shannon's entropy distinguishes well BPSK, QPSK, 16PSK, 64PSK signals and easily classifies these signals, the distance between other signals is relatively small, and the entropy value does not change significantly depending on the SNR signal. Exponential entropy distinguishes BPSK, 64PSK signals. Compared to Shannon's entropy, exponential entropy has poor classification ability for various modulation signals.

Figures 3b,c show that Rényi's and Tsallis entropy distinguish BPSK, QPSK and 64PSK signals. However, the overlapping of 8PSK and 32PSK signals is more serious and they are difficult to separate by the Rényi's, exponential and Tsallis entropy. Compared to the above types of entropy, Shannon's entropy can more effectively distinguish 8PSK and 32PSK signals.

Conclusion

This article mainly explores the method of identification of modulated signals based on entropy. First of all, according to the HisarMod2019.1 database, a kind of signal model was derived. The distribution of each type of signal for each entropy feature is obtained, and then the possibility of classification is carried out by observing the distribution in the space of entropy features. 4 types of entropy were viewed: Shannon's entropy, Rényi's entropy, Tsallis entropy and exponential entropy. The application of Shannon's entropy showed the best result compared to other types of entropy. Due to the variety of available entropy and the complexity of determining the types of modulation, an algorithm for selecting features was proposed for classification based on the results of entropy changes. We checked the effectiveness of the algorithm by comparing it with other results.

In particular, we can classify 6 commonly used modulation types: BPSK, QPSK, 8PSK, 16PSK, 32PSK, and 64PSK. Modelling of various signal-to-noise ratios confirms the effectiveness of the algorithm.

REFERENCES

- Boutte D., Santhanam B. (2009) "A hybrid ICA-SVM approach to continuous phase modulation recognition", *IEEE Signal Processing Letters*. — 16(5): 402–405. — DOI: 10.1109/LSP.2009.2017267.
- Guo Z., Li S. (2010). "One-dimensional frequency-domain features for aircraft recognition from radar range profiles", *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*. — 46(4): 1880–1892. — DOI: 10.1109/TAES.2010.5595582.
- Huang S. et al. (2019). "Automatic modulation classification using contrastive fully convolutional network", *IEEE Wireless Communications Letters*. — 8(4): 1044–1047. — DOI: 10.1109/LWC.2019.2917761.
- Li J., Ying Y. (2014). "Radar signal recognition algorithm based on entropy theory", *The 2014 2nd International Conference on Systems and Informatics (ICSAI 2014)*. — Pp. 718–723. —DOI: 10.1109/ICSAI.2014.7009379.

Li Y. et al. (2016). "Communication Modulation Signal Recognition Algorithm Based on Entropy Cloud Characteristics", *International Journal of Signal Processing, Image Processing and Pattern Recognition*. — 9(5): 373–380.

Liu Y., Lin Z., Zhongpei Z. (2009). "High order QAM signals recognition based on layered modulation", *Proceedings of the International Conference on Communications, Circuits and Systems (ICCCAS '09)*. — Pp. 73–76.

Li J., Guo J. (2015) "A new feature extraction algorithm based on entropy cloud characteristics of communication signals", *Mathematical problems in engineering*, 2015. — DOI: 10.1155/2015/324979.

Liu T., Guan Y., Lin Y. (2017). "Research on modulation recognition with ensemble learning". — *Journal of Wireless Communications and Networking*. — 179. <https://doi.org/10.1186/s13638-017-0949-5>.

Nemala S. K., Patil K., Elhilali M. (2013). "A multistream feature framework based on bandpass modulation filtering for robust speech recognition", *IEEE Transactions on Audio, Speech and Language Processing*. — 21(2): 416–426. — DOI: 10.1109/TASL.2012.2222433.

Jeon G., Chehri A. (2020). "Entropy-Based Algorithms for Signal Processing", *Entropy*. — 22. — 621. <https://doi.org/10.3390/e22060621>.

Uys L. Y. et al. (2017). "The performance of feature-based classification of digital modulations under varying SNR and fading channel conditions", *2017 IEEE AFRICON*, IEEE. — Pp. 198–203.

Yan X., Feng G., Wu H.-C., Xiang W., Wang Q. (2017). "Innovative robust modulation classification using graph-based cyclic-spectrum analysis", *IEEE Communications Letters*. — 21(1): 16–19. — DOI: 10.1109/LCOMM.2016.2616344.

Yan X., Liu G., Wu H.-C., Feng G. (2018). "New automatic modulation classifier using cyclic-spectrum graphs with optimal training features", *IEEE Communications Letters*. — 22(6): 1204–1207. — DOI: 10.1109/LCOMM.2018.2833518.

Wang H. et al. (2018). "A new method of cognitive signal recognition based on hybrid information entropy and DS evidence theory", *Mobile Networks and Applications*. — 23(4): 677–685. — DOI: 10.1007/s11036-017-0932-1.

Zhao X., Guo C., Li J. (2016). "Mixed recognition algorithm for signal modulation schemes by high-order cumulants and cyclic spectrum", *J. Electron. Inform. Technol.* — 38(3): 674–680.

Zhou S. et al. (2019). "A robust modulation classification method using convolutional neural networks", *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing*. — 2019. — (1): 1–15. — DOI: 10.1186/s13634-019-0632-2.

Zhao Y., Yang X., Lin Y. (2017). "A new recognition method for M-QAM signals in software-defined radio", *Proceedings of the 2017 IEEE International Conference on Software Quality, Reliability and Security Companion (QRS-C)*. — IEEE. — Pp. 271–275.

Zhanabaev Z.Zh., Kozhagulov Y.T., Khokhlov S.A., Agishev A.T., Zhexebay D.M. (2018). "Informational and entropic criteria of self-similarity of fractals and chaotic signals", *International Journal of Mathematics and Physics*. — 90(1): 90–96.

Zhang Z., Li Y., Jin S., Zhang Z., Wang H., Qi L., Zhou R. (2018). "Modulation Signal Recognition Based on Information Entropy and Ensemble Learning", *Entropy*. — 20. — 198. <https://doi.org/10.3390/e20030198>.

Zheng J., Lv Y. (2018). "Likelihood-based automatic modulation classification in OFDM with index modulation", *IEEE Transactions on Vehicular Technology*. — 67(9): 8192–8204. — DOI: 10.1109/TVT.2018.2856642.

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC
OF KAZAKHSTAN
ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 84–94
<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.280>

UDC 524.82; 524.83; 524.85

© Y. Myrzakulov*, A. Bulanbayeva, 2024

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

E-mail: ymyrzakulov@gmail.com.

A REGULAR BLACK HOLE SOLUTIONS AND THEIR THERMODYNAMICS

Myrzakulov Yerlan — PhD in Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan
E-mail: ymyrzakulov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0160-0422>;

Bulanbayeva Arailym — Master's student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan
E-mail: arai_bul@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-6541-3902>.

Abstract. Black holes are intriguing objects in astrophysics and theoretical physics, with their enigmatic nature posing significant challenges to our understanding of the universe. Black holes are a natural consequence of the complete gravitational collapse of matter, and there is now a wealth of observational evidence supporting the existence of black holes in the Universe. However, general relativity predicts the existence of a space-time singularity at the center of a black hole, where predictability is lost and standard physics fails. It is widely believed that the spacetime singularity is a symptom of the limitations of general relativity and must be solved within the framework of the quantum theory of gravity. Since there are no mature and reliable candidates for a quantum theory of gravity yet, researchers are exploring the still unknown possibilities of a quantum theory of gravity by exploring models of black holes without singularity and models of gravitational collapse without singularity. In this study, we explore regular solutions of black holes, which deviate from the conventional Schwarzschild paradigm. These regular solutions offer insights into the fundamental properties of black holes beyond the classical framework. One key aspect of our investigation is the thermodynamic behavior of these regular black hole solutions. By analyzing the thermodynamic quantities associated with these solutions, including mass and temperature, we uncover unique characteristics that distinguish them from their Schwarzschild counterparts. Understanding the thermodynamics of regular black holes is essential for unraveling the intricate interplay between gravity and quantum mechanics at extreme scales. Our study reveals that regular black hole solutions exhibit distinctive thermodynamic features compared to Schwarzschild black holes. Notably, the presence of an additional horizon in regular black holes alters their thermodynamic properties, leading to novel phenomena such as phase transitions and critical behavior. Through detailed analyses, we shed light on the underlying mechanisms governing the thermodynamics of regular black holes. Furthermore, we investigate the stability of regular black holes by examining their heat capacity. Our findings indicate intriguing correlations between heat capacity, temperature, and the presence of multiple horizons. We observe that regular black holes undergo phase transitions from stable to unstable states, providing valuable insights into

their dynamical behavior and evolutionary processes. The implications of our research extend beyond theoretical physics, impacting diverse fields ranging from cosmology to quantum gravity. By elucidating the thermodynamic characteristics and stability properties of regular black holes, we contribute to a deeper understanding of the nature of spacetime and the fundamental laws governing the universe. Our findings pave the way for future investigations into the rich phenomenology of black hole physics and its broader implications for our understanding of the cosmos.

Keywords: Regular black holes, thermodynamics, Schwarzschild solution, quantum corrections, two horizons, Hawking temperature

Acknowledgments. *This research has been funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP22682760).*

© **Е.М. Мырзақулов***, **А.С. Бұланбаева**, 2024

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия Ұлттық Университеті, Астана, Қазақстан.

E-mail: ymyrzakulov@gmail.com

ҚАРА ҚҰРДЫМ ШЕШІМДЕРІ ЖӘНЕ ОНЫҢ ТЕРМОДИНАМИКАСЫ

Мырзақулов Ерлан Муратбаевич — PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ жалпы және теориялық физика кафедрасының аға оқытушысы, Астана, Қазақстан

E-mail: ymyrzakulov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0160-0422>;

Бұланбаева Арайлым Саятқызы — Магистрант, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ жалпы және теориялық физика кафедрасы, Астана, Қазақстан

E-mail: arai_bul@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-6541-3902>.

Аннотация. Қара құрдымдар — астрофизика мен теориялық физикадағы қызықты объекттер, олардың жұмбақ табиғаты біздің Ғаламды түсінуімізге айтарлықтай қиындықтар туғызады. Қара құрдымдар материяның толық гравитациялық күйреуінің салдары болып табылады және қазіргі таңда Ғаламдағы қара құрдымдардың бар екенін растайтын көптеген бақылау дәлелдері бар. Алайда, жалпы салыстырмалылық теориясы қара құрдымның ортасында кеңістіктік-уақыттық сингулярлықтың болуын болжайды және классикалық физика жұмыс істемейді. Кеңістіктік-уақыттық сингулярлық жалпы салыстырмалылықтың шектелуінің салдары болып табылады. Оны кванттық гравитациялық теория шеңберінде шешу керек деген пікір кең таралған. Кванттық гравитация теориясын құруға әлі жетілген және сенімді қара құрдымдар болмағандықтан, зерттеушілер кванттық гравитация теориясының әлі белгісіз мүмкіндіктерін сингулярлықсыз қара құрдым модельдерін зерттеу арқылы анықтайды. Бұл зерттеуде Шварцшильд шешімінен ауытқыған қара құрдымдардың тұрақты шешімдерін зерттейміз. Бұл тұрақты шешімдер классикалық шеңберден тыс қара құрдымдардың негізгі қасиеттері туралы түсінік береді. Зерттеуіміздің негізгі аспектілерінің бірі — бұл қарапайым қара құрдым шешімдерінің термодинамикалық әрекеті. Масса мен температураға байланысты термодинамикалық шамаларды талдау арқылы біз оларды Шварцшильд метрикасынан ерекшелендіретін бірегей сипаттамаларды ашамыз. Қара құрдымдардың термодинамикасын түсіну гравитациялық күші мен кванттық механика арасындағы күрделі өзара әрекетті шешу үшін өте маңызды.

Біздің зерттеуіміз қара құрдым шешімдерінің Шварцшильд қара құрдымдарымен салыстырғанда ерекше термодинамикалық ерекшеліктерді көрсететінін көрсетеді. Атап айтқанда, қара құрдымдарда қосымша көкжиектің болуы олардың термодинамикалық қасиеттерін өзгертеді, бұл фазалық ауысулар жаңа құбылыстарға әкеледі. Талдаулар арқылы біз тұрақты қара құрдымдардың термодинамикасын басқаратын негізгі механизмдерге жарық түсіреміз. Сонымен қатар, біз тұрақты қара құрдымдардың тұрақтылығын олардың жылу сыйымдылығын зерттеу арқылы зерттейміз. Біз тұрақты қара құрдымдардың тұрақты күйден тұрақсыз күйге фазалық ауысулардан өтетінін байқаймыз, бұл олардың динамикалық мен эволюциялық процестері туралы құнды түсініктер береді. Біздің зерттеуіміздің салдары теориялық физиканың шеңберінен шығып, космологиядан кванттық гравитацияға дейінгі әртүрлі салаларға әсер етеді. Қарапайым қара құрдымдардың термодинамикалық сипаттамалары мен тұрақтылық қасиеттерін түсіндіре отырып, біз ғарыштық уақыттың табиғатын және ғаламды басқаратын іргелі заңдарды тереңірек түсінуге үлес қосамыз. Біздің қорытындыларымыз болашақта қара құрдым физикасының бай феноменологиясы мен оның ғарышты түсінудегі кеңірек әсерлерін зерттеуге жол ашады.

Түйін сөздер: Тұрақты қара құрдымдар, термодинамика, Шварцшильд шешімі, кванттық түзетулер, екі горизонт, Хокинг температурасы

Алғыс. *Ғылыми жұмысқа Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті (грант № AP22682760) қаржылай қолдау көрсетті.*

© Е.М. Мырзакулов*, А.С. Буланбаева, 2024

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

E-mail: ymyrzakulov@gmail.com

РЕШЕНИЯ РЕГУЛЯРНОЙ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ И ИХ ТЕРМОДИНАМИКА

Мырзакулов Ерлан Муратбаевич — PhD, старший преподаватель кафедры общей и теоретической физики ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

E-mail: ymyrzakulov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-0160-0422>;

Буланбаева Арайлым Саятқызы — магистрант кафедры общей и теоретической физики ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

E-mail: arai_bul@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-6541-3902>.

Аннотация. Черные дыры представляют собой увлекательные объекты в астрофизике и теоретической физике, их загадочная природа создает значительные вызовы для нашего понимания Вселенной. Черные дыры являются естественным следствием полного гравитационного коллапса материи, и сегодня существует множество наблюдательных доказательств, подтверждающих существование черных дыр во Вселенной. Однако общая теория относительности предсказывает существование пространственно-временной сингулярности в центре черной дыры, где предсказуемость теряется и стандартная физика не работает. Широко распространено мнение, что пространственно-временная сингулярность является симптомом ограниченности общей теории относительности и должна быть решена в рамках квантовой теории гравитации. Поскольку пока не существует зрелых и

надежных кандидатов на создание квантовой теории гравитации, исследователи изучают все еще неизвестные возможности квантовой теории гравитации, исследуя модели черных дыр без сингулярности и модели гравитационного коллапса без сингулярности. В данном исследовании исследуем решения регулярных черных дыр, отклоняющиеся от классической парадигмы Шварцшильда. Эти решения предоставляют уникальные исследования основных свойств черных дыр за пределами классической модели. Одним из ключевых аспектов нашего исследования является термодинамическое поведение этих регулярных черных дыр. Анализируя термодинамические величины, связанные с этими решениями, такие как масса и температура показаны уникальные характеристики, отличающие их от классических черных дыр Шварцшильда. Понимание термодинамики регулярных черных дыр необходимо для раскрытия сложного взаимодействия между гравитацией и квантовой механикой на крайне малых масштабах. Исследование показывает, что решения регулярных черных дыр обладают характерными термодинамическими особенностями по сравнению с черными дырами Шварцшильда. Особенно наличие дополнительного горизонта в регулярных черных дырах изменяет их термодинамические свойства, приводя к новым явлениям, таким как фазовые переходы и критическое поведение. С помощью детального анализа показаны механизмы, определяющие термодинамику регулярных черных дыр. Более того, исследуем стабильность регулярных черных дыр, рассматривая их теплоемкость. Результаты указывают на увлекательные взаимосвязи между теплоемкостью, температурой и наличием нескольких горизонтов. Мы наблюдаем, что регулярные черные дыры проходят фазовые переходы от стабильного к нестабильному состоянию, предоставляя ценные сведения о их динамическом поведении и эволюционных процессах. Выводы исследования выходят за пределы теоретической физики, оказывая воздействие на различные области от космологии до квантовой гравитации. Раскрывая термодинамические особенности и свойства стабильности регулярных черных дыр, вносим вклад в глубокое понимание природы пространства-времени и фундаментальных законов, управляющих Вселенной. Результаты открывают путь для будущих исследований в области богатой феноменологии черных дыр и ее более широких последствий для нашего понимания космоса.

Ключевые слова: регулярные черные дыры, термодинамика, решение Шварцшильда, квантовые поправки, два горизонта, температура Хокинга

Благодарности. Данное исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP22682760).

Введение

Бардин (Bardeen, 1968) представил первую модель обычной черной дыры, основанную на концепциях Сахарова и Глинера (Sakharov, 1966; Gliner, 1966) Эти черные дыры обладают горизонтом, но лишены центральной сингулярности. Это точное решение для черных дыр возникает при сочетании гравитации с нелинейным полем материи, и это первое исследование Айона, Беато и Гарсии (Ayon-Beato et al., 1999; Ayon-Beato et al., 2005; Ayon-Beato et al., 2000) после 30 лет использования модели Бардина. На текущий момент существует множество решений для обычных черных дыр, однако большинство из них опираются на

предложение Бардина (Bronnikov, 2001; Zaslavskii, 2009; Lemos et al., 2011; Balart et al., 2014; Balart et al., 2014; Xiang et al., 2013; Singh et al., 2017; Fernando, 2017). Обобщения обычных черных дыр в Эйнштейн-Гаусс-Бонне гравитации (ЭГБ гравитация) (Kumar et al., 2019; Kumar et al., 2020; Ghosh et al., 2018; Ghosh et al., 2020), 4 мерный ЭГБ гравитации (Ghosh et al., 2021; Singh et al., 2020; Singh et al., 2020), массивной гравитации (Singh et al., 2020), а также их вращающиеся аналоги с использованием алгоритма Ньюмана-Яниса (Bambi et al., 2013; Ghosh, 2015), а также другие вращающиеся черные дыры представлены в (Toshmatov et al., 2014; Ghosh et al., 2015; Neves et al., 2014). Термодинамика черных дыр широко исследована для разнообразных черных дыр в различных контекстах (Kumar et al., 2023; Paul et al., 2023; Soroushfar et al., 2023; Paul et al., 2023; Mandal et al., 2023; Pourhassan et al., 2022; Myrzakulov et al., 2023; Upadhyay et al., 2023; Singh et al., 2022; Sudhanshu et al., 2022).

В данной работе представлен новый класс решений для регулярной черной дыры, который характеризуется параметрами массы, параметра отклонения и произвольного параметра. При отключении параметра отклонения данное решение совпадает с черной дырой Шварцшильда. В отличие от Шварцшильдовских решений, у этой черной дыры присутствуют два горизонта. Термодинамические параметры подвергаются изменениям из-за наличия экспоненциального множителя в массе. В рамках исследования также проводится анализ стабильности черной дыры, оценивается её теплоемкость и характеристики. Выявляется, что черная дыра переходит через фазовый переход второго порядка из состояния стабильности в состояние неустойчивости при достижении определенного критического значения радиуса горизонта.

Структура статьи организована следующим образом. Анализируем новое регулярное решение для черной дыры, которое обобщает черную дыру Шварцшильда в предельном случае, а также будем исследовать структуру горизонта черной дыры. Будем рассматривать тепловые свойства черной дыры, вычисляя её массу и температуру Хокинга. Заметим, что пиковое значение температуры возрастает с параметром отклонения и расходится при нулевом значении этого параметра. Исследуем стабильность черной дыры, анализируя сигнатуру теплоемкости.

В данном случае фазовый переход второго рода наступает при достижении критического значения. В завершение мы представляем наши результаты в последнем разделе.

Материалы и основные методы

В данной работе исследуется новый класс решений уравнения Эйнштейна, описывающий черные дыры и обобщающий решение для черной дыры Шварцшильда. Рассматривается обычная метрика черной дыры, использующая экспоненциальную функцию распределения (Balart et al., 2014), представленную как:

$$ds^2 = -f(r)dt^2 + \frac{1}{f(r)}dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2), \quad (1)$$

где

$$f(r) = 1 - \frac{2M}{r} \left(\frac{2}{1 + e^{k/r}} \right)^b, \quad f(r) = 1 - \frac{2M}{r} \left(\frac{2}{1 + e^{\frac{k}{r}}} \right)^b \quad (2)$$

где k и M соответственно являются параметрами отклонения и массы. Метрика черной дыры зависит от произвольного параметра b , контролирующего регулярность и условие слабой энергии. Таким образом, решение для черной дыры характеризуется массой M , параметром отклонения k и параметром b , и сводится к решению для черной дыры Шварцшильда при $k = 0$ и $b = 1$.

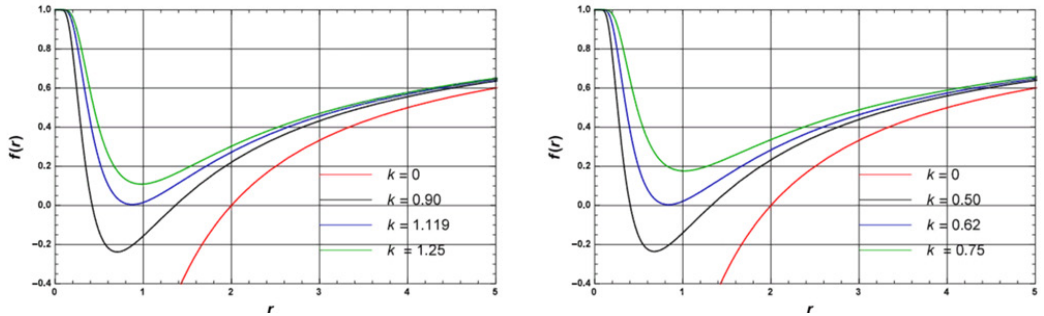


Рисунок - 1. График зависимости функции $f(r)$ от радиуса горизонта при различных значениях параметра отклонения k и фиксированной массе $M = 1$ при $b = 1$ (слева) и $b = 2$ (справа).

Анализ графика показывает, что решение имеет два горизонта для $k < 1.119$ (пороговое значение (k_c)), вырожденный горизонт для $k = 1.119$ (пороговое значение (k_c)) и отсутствие горизонта для $k > 1.119$ (пороговое значение (k_c)). Размер горизонта уменьшается с увеличением параметра отклонения k и параметра b .

Далее проводится анализ энергетических условий для решения (2). Условие слабой энергии предписывает, что $T_{\phi} t^a t^b \geq 0$ для всех времениподобных векторов t^a , то есть локальная плотность энергии не может быть отрицательной. Доминирующее энергетическое условие (DEC) утверждает, что $T_{\phi} t^a t^b \geq 0$ и $T^{\phi} t_b$ должно быть пространственно-подобным для любого времениподобного вектора t^a , следовательно, условие слабой энергии требует $\rho \geq 0$ и $\rho + P_i \geq 0$

$$\rho + P_2 = \rho + P_3 = \frac{Mbk^2 (be^{\frac{k}{r}} - 1)e^{\frac{k}{r}}}{r^5 \left(1 + e^{\frac{k}{r}}\right)^{b+2}} \quad (3)$$

Таким образом, черная дыра удовлетворяет условию слабой энергии при выключенном параметре b .

Масса черной дыры может быть выражена как $f(r_+) = 0$, где r_+ – радиус горизонта, и это представлено уравнением:

$$M_+ = \frac{r_+}{2} \left(\frac{1 + e^{\frac{k}{r_+}}}{2} \right)^b. \quad (4)$$

Выражение для массы (4) сводится к массе черной дыры $M_+ = r_+/2$ при $k = 0$.

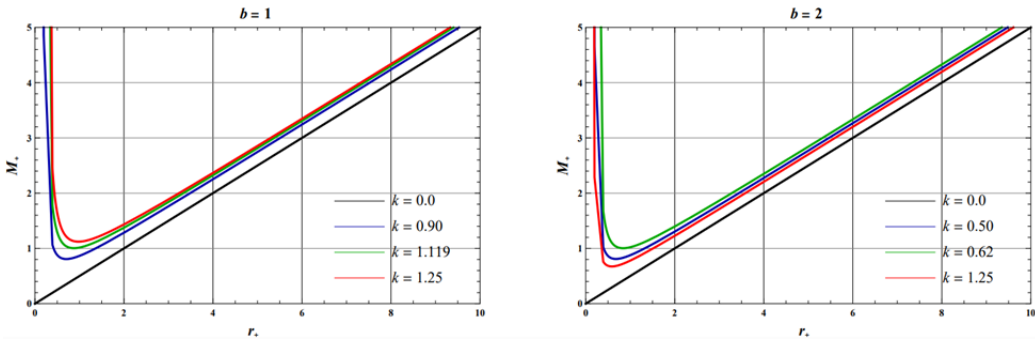


Рисунок – 2. График зависимости массы от радиуса горизонта r_+ для различных значений параметра отклонения k при фиксированной массе $M = 1$, где $b = 1$ (слева) и $b = 2$ (справа).

Температура черной дыры (температура Хокинга) связана с поверхностной гравитацией κ , $T = \frac{\kappa}{2\pi}$ выраженной как $T = \kappa/2\pi$. Тогда температура черной дыры вычисляется следующим образом:

$$T_+ = \frac{f'(r_+)}{4\pi} = \frac{r_+ - \frac{bke^{k/r_+}}{e^{k/r_+} + 1}}{4\pi r_+^2}. \quad (5)$$

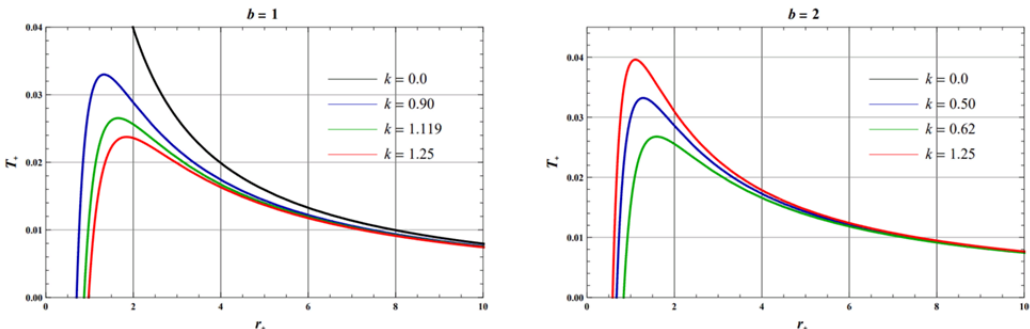


Рисунок – 3. График зависимости температуры от радиуса горизонта r_+ для различных значений параметра отклонения k при фиксированной массе $M = 1$, где $b = 1$ (слева) и $b = 2$ (справа).

Температура имеет пик, который увеличивается с параметром отклонения k , а при $k = 0$ она совпадает с температурой черной дыры Шварцшильда.

$$T_+ = \frac{1}{4\pi r_+}. \quad (6)$$

Результаты

Далее проводится анализ стабильности черной дыры, который осуществляется через изучение ее теплоемкости (C_+). Стабильность обозначается положительным значением $C_+ > 0$, в то время как отрицательное значение $C_+ < 0$ свидетельствует о нестабильности. Теплоемкость черной дыры определяется следующим образом (Chaturvedi et al., 2017):

$$C_+ = \frac{\partial M_+}{\partial T_+} = \left(\frac{\partial M_+}{\partial r_+} \right) \left(\frac{\partial r_+}{\partial T_+} \right) \quad (7)$$

Подставляя значения массы (4) и температуры (5) в (7), теплоемкость черной дыры выражается как:

$$C_+ = \frac{\pi 2^{1-b} r^3 \left(\frac{1}{e^{k/r} + 1} \right)^{-b-1} (-bke^{k/r} + e^{k/r} + r)}{r^2 (e^{k/r} + 1)^2 - bke^{k/r} (2r(e^{k/r} + 1) + k)}. \quad (8)$$

При $k = 0$ это соответствует случаю Шварцшильда, указывая на термодинамическую нестабильность черной дыры Шварцшильда.

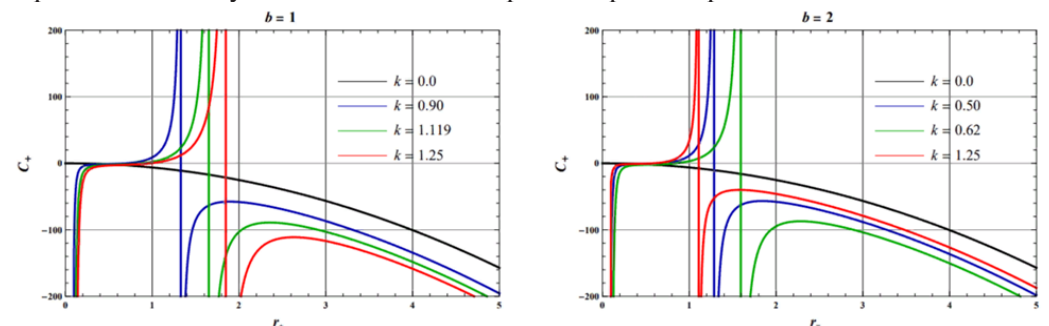


Рисунок – 4. График зависимости теплоемкости от радиуса горизонта r_+ для различных значений параметра отклонения k при фиксированной массе $M = 1$, где $b = 1$ (слева) и $b = 2$ (справа).

Теплоемкость черной дыры имеет два вида поведения: положительную теплоемкость при $r_+ > r_c$ (критическое значение), свидетельствуя о термодинамической стабильности, и отрицательную теплоемкость, указывающую

на нестабильность черной дыры. Скачкообразность теплоемкости происходит при $r_+ = r_c$, предшествуя фазовому переходу второго рода. Замечательно, что эта скачкообразность возникает при максимальной температуре Хокинга, сопровождаемой резким увеличением теплоемкости. Следовательно, происходит фазовый переход от менее массивной к более массивной конфигурации, что отражается в теплоемкости черной дыры.

Закключение

В данной статье исследуется обычное решение для черной дыры, которое сходится к черной дыре Шварцшильда в случае $k = 0$. Экспоненциальное дополнение $e^{\frac{k}{r}}$ вносится с учетом квантового аспекта и идентифицируется как функция распределения вероятностей. Новое решение для черной дыры отличается наличием двух горизонтов в отличие от одного у черной дыры Шварцшильда. Также проведено исследование термодинамических характеристик, таких как масса и температура, связанных с данной черной дырой. Анализ стабильности черных дыр осуществляется через расчет теплоемкости, приводящий к выявлению расходимости теплоемкости при значении, при котором температура Хокинга достигает максимума.

REFERENCES

- Ayon-Beato E., Garcia A. (1999). Non-Singular Charged Black Hole Solution for Non-Linear Source // *General Relativity and Gravitation*. — Vol. 31. — Pp. 629–633. DOI:10.1023/A:1026640911319 (in Eng.).
- Ayon-Beato E., Garcia A. (2005). Four-parametric regular black hole solution // *General Relativity and Gravitation*. — Vol. 37. — Pp. 635–641. DOI:10.1007/s10714-005-0050-y (in Eng.).
- Ayon-Beato E., Garcia A. (2000). The Bardeen model as a nonlinear magnetic monopole // *Physics Letters B*. — Vol. 493, No. 1–2. — Pp. 149–152. DOI:10.1016/S0370-2693(00)01125-4 (in Eng.).
- Bronnikov K.A. (2001). Regular magnetic black holes and monopoles from nonlinear electrodynamics // *Physical Review D*. — Vol. 63. — No.4. — P. 044005. DOI:10.1103/PhysRevD.63.044005 (in Eng.).
- Bardeen J. (1968). Non-singular general – relativistic gravitational collapse // *Proceedings of the International Conference GR5, Tbilisi, USSR*. — P. 174 (in Eng.).
- Balart L., Vagenas E.C. (2014). Regular black hole metrics and the weak energy condition // *Physics Letters B*. — Vol. 730. — Pp. 14–17. DOI:10.1016/j.physletb.2014.01.024 (in Eng.).
- Balart L., Vagenas E.C. (2014). Regular black holes with a nonlinear electrodynamics source // *Physical Review D*. — Vol. 90. — No. 12. — P. 124045. DOI:10.1103/physrevd.90.124045 (in Eng.).
- Bambi C., Modesto L. (2013). Rotating regular black holes // *Physics Letters B*. — Vol. 721. — No. 4–5. — Pp. 329–334. DOI:10.1016/j.physletb.2013.03.025 (in Eng.).
- Chaturvedi P., Singh N.K., Singh D.V. (2017). Reissner-Nordstrom metric in unimodular theory of gravity // *International Journal of Modern Physics D*. — Vol. 26. — No. 08. — P. 1750082. DOI:10.1142/s0218271817500821 (in Eng.).
- Fernando S. (2017). Bardeen-de Sitter black holes // *International Journal of Modern Physics D*. — Vol. 26. — No. 07. — P. 1750071. DOI:10.1142/s0218271817500717 (in Eng.).
- Gliner E.B. (1966). Algebraic Properties of the Energy–momentum Tensor and Vacuum–like States of Matter // *Soviet Physics Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — Vol. 22. — Pp. 378–382 (in Eng.).
- Shosh S.G., Singh D.V., Maharaj S.D. (2018). Regular black holes in Einstein-Gauss-Bonnet gravity // *Physical Review D*. — Vol. 97. — No. 10. — P. 104050. DOI:10.1103/physrevd.97.104050 (in Eng.).
- Shosh S.G., Kumar A., Singh D.V. (2020). Anti-de Sitter Hayward black holes in Einstein-Gauss-Bonnet gravity // *Physics of the Dark Universe*. — Vol. 30. — P. 100660. DOI:10.1016/j.dark.2020.100660 (in Eng.).

- Ghosh S.G., Singh D.V., Kumar R., Maharaj S.D. (2021). Phase transition of AdS black holes in 4D EGB gravity coupled to nonlinear electrodynamics // *Annals of Physics*. — Vol. 424. — P. 168347. DOI:10.1016/j.aop.2020.168347 (in Eng.).
- Ghosh S.G. (2015). A nonsingular rotating black hole // *The European Physical Journal C*. — Vol. 75. — No. 11. — P. 532. DOI:10.1140/epjc/s10052-015-3740-y (in Eng.).
- Ghosh S.G., Maharaj S.D. (2015). Radiating Kerr-like regular black hole // *The European Physical Journal C*. — Vol. 75. — No. 1. — P. 7. DOI:10.1140/epjc/s10052-014-3222-7 (in Eng.).
- Kumar A., Singh D.V., Ghosh S.G. (2019). D-dimensional Bardeen-AdS black holes in Einstein-Gauss-Bonnet theory // *The European Physical Journal C*. — Vol. 79. — No. 3. — P. 275. DOI:10.1140/epjc/s10052-019-6773-9 (in Eng.).
- Kumar A., Singh D.V., Ghosh S.G. (2020). Hayward black holes in Einstein-Gauss-Bonnet gravity // *Annals of Physics*. — Vol. 419. — P. 168214. DOI:10.1016/j.aop.2020.168214 (in Eng.).
- Kumar J., Upadhyay S., Sudhanshu H.K. (2023). Small black string thermodynamics // *Physica Scripta*. — Vol. 98. — No. 9. — P. 095306. DOI:10.1088/1402-4896/aceec3 (in Eng.).
- Lemos J.P.S., Zanchin V.T. (2011). Regular black holes: Electrically charged solutions, Reissner-Nordström outside a de Sitter core // *Physical Review D*. — Vol. 83. — No. 12. — P. 124005. DOI:10.1103/physrevd.83.124005 (in Eng.).
- Mandal S., Upadhyay S., Myrzakulov Y., Yergaliyeva G. (2023). Shadow of the 5D Reissner-Nordström AdS black hole // *International Journal of Modern Physics A*. — Vol. 38. — No. 08. — P. 2350047. DOI:10.1142/S0217751X23500471 (in Eng.).
- Myrzakulov Y., Myrzakulov K., Sudhaker U., Singh D.V. (2023). Quasinormal modes and phase structure of regular AdS Einstein-Gauss-Bonnet black holes // *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*. — Vol. 20. — No. 07. — P. 2350121. DOI:10.1142/S0219887823501219 (in Eng.).
- Neves J.C.S., Saa A. (2014). Regular rotating black holes and the weak energy condition // *Physics Letters B*. — Vol. 734. — Pp. 44–48. DOI:10.1016/j.physletb.2014.05.026 (in Eng.).
- Toshmatov B., Ahmedov B., Abdurjabbarov A., Stuchlík Z. (2014). Rotating regular black hole solution // *Physical Review D*. — Vol. 89. — No. 10. — P. 104017. DOI:10.1103/physrevd.89.104017 (in Eng.).
- Paul P., Upadhyay S., Singh D.V. (2023). Charged AdS black holes in 4D Einstein-Gauss-Bonnet massive gravity // *The European Physical Journal Plus*. — Vol. 138. — P. 566. DOI:10.1140/epjp/s13360-023-04176-x (in Eng.).
- Paul P., Upadhyay S., Myrzakulov Y., Singh D.V., Myrzakulov K. (2023). More exact thermodynamics of nonlinear charged AdS black holes in 4D critical gravity // *Nuclear Physics B*. — Vol. 993. — P. 116259. DOI:10.1016/j.nuclphysb.2023.116259 (in Eng.).
- Pourhassan B., Dehghani M., Upadhyay S., Sakalli İ., Singh D.V. (2022). Exponential corrected thermodynamics of Born-Infeld BTZ black holes in massive gravity // *Modern Physics Letters A*. — Vol. 37. — No. 33n34. — P. 2250230. DOI:10.1142/S0217732322502303 (in Eng.).
- Sakharov A.D. (1966). The Initial Stage of an Expanding Universe and the Appearance of a Nonuniform Distribution of Matter / *Soviet Physics Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — Vol. 22. — Pp. 241–249 (in Eng.).
- Singh D.V., Singh N.K. (2017). Anti-evaporation of Bardeen de-Sitter black holes // *Annals of Physics*. — Vol. 383. — P. 600–609. DOI:10.1016/j.aop.2017.06.009 (in Eng.).
- Singh D.V., Ghosh S.G., Maharaj S.D. (2020). Clouds of strings in 4D Einstein-Gauss-Bonnet black holes // *Physics of the Dark Universe*. — Vol. 30. — P. 100730. DOI:10.1016/j.dark.2020.100730 (in Eng.).
- Singh D.V., Siwach S. (2020). Thermodynamics and P - V criticality of Bardeen-AdS black hole in 4D Einstein-Gauss-Bonnet gravity // *Physics Letters B*. — Vol. 808. — P. 135658. DOI:10.1016/j.physletb.2020.135658 (in Eng.).
- Singh B.K., Singh R.P., Singh D.V. (2020). Extended phase space thermodynamics of Bardeen black hole in massive gravity // *The European Physical Journal Plus*. — Vol. 135. — No. 10. — P. 862. DOI:10.1140/epjp/s13360-020-00880-0 (in Eng.).
- Singh D.V., Shukla A., Upadhyay S. (2022). Quasinormal modes, shadow and thermodynamics of black holes coupled with nonlinear electrodynamics and cloud of strings // *Annals of Physics*. — Vol. 447. — No. 1. — P. 169157. DOI:10.1016/j.aop.2022.169157 (in Eng.).
- Sudhanshu H.K., Upadhyay S., Singh D.V., Kumar S. (2022). Corrected Thermodynamics of $(2+1)D$ Black Hole Conformally Coupled to a Massless Scalar // *International Journal of Theoretical Physics*. — Vol. 61. — P. 248. DOI:10.1007/s10773-022-05231-6 (in Eng.).
- Soroushfar S., Farahani H., Upadhyay S. (2023). Non-perturbative correction to thermodynamics of

conformally dressed 3D black hole // *Physics of the Dark Universe*. — Vol. 42. — P. 101272. DOI:10.1016/j.dark.2023.101272 (in Eng.).

Xiang L., Ling Y., Shen Y.G. (2013). Singularities and the finale of black hole evaporation // *International Journal of Modern Physics D*. — Vol. 22. — No. 12. — P. 1342016. DOI:10.1142/s0218271813420169 (in Eng.).

Upadhyay S., Mandal S., Myrzakulov Y., Myrzakulov K. (2023). Weak deflection angle, greybody bound and shadow for charged massive BTZ black hole // *Annals of Physics*. — Vol. 450. — P. 169242. DOI:10.1016/j.aop.2023.169242 (in Eng.).

Zaslavskii O.B. (2009). Regular black holes with flux tube core // *Physical Review D*. — Vol. 80. — No. 6. — P. 064034. DOI:10.1103/physrevd.80.064034 (in Eng.).

© **D.M. Nassirova¹, V.O. Kurmangaliyeva², A.A. Gazizova^{1*}**, 2024

¹Kazakh National Pedagogical University named after Abay, Almaty, Kazakhstan;

²Kazakh National University named after al-Farabi, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: askarkyzy_94@mail.ru

SOURCES OF ENERGY IN COMPACT STARS

D.M. Nassirova — Doctor PhD (Physics), department of Physics KazNPU named Abay; Almaty, Kazakhstan

E-mail: diana-nasirova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3349-0128>;

V.O. Kurmangaliyeva — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, department of theoretical and nuclear physics KazNU named Al-Farabi; Almaty, Kazakhstan

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

A.A. Gazizova — doctoral student (Physics), department of Physics KazNPU named Abay; Almaty, Kazakhstan

E-mail: askarkyzy_94@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-4849-5118>.

Abstract. The problems of stellar evolution remain topical in astrophysics. The processes occurring in matter at all stages of stellar evolution hold many mysteries. One of them is the source of radiation energy in compact stars. The work is devoted to some features of such stars, and calculations are presented on the example of white dwarfs. The peculiarities of the internal structure of white dwarfs, nuclear crystal and peculiarities of the process of crystallization of stellar matter as one of the sources of energy are con-sidered. The second source of energy is considered to be the process of matter flowing from one object to another — accretion. We give a numerical comparative estimate of the magnitude of the released energy during the falling of matter on the surface and during thermonuclear combustion of hydrogen. For compact stars, in particular, white dwarfs, the characteristics of matter are determined by the properties of a degenerate electron gas (fermi gas). The pressure of the degenerate gas contributes to the processes necessary for the stability of white dwarfs. The degenerate state of matter occurs at extreme states inherent in compact stellar objects. In this case it is a nuclear crystal, when the electron shells are “generalized” under the action of high pressure and high density. This is a case, in which the electron shells of a nuclear crystal are “socialized” by pressure and high den-sity. Since white dwarfs are deprived of their own thermonuclear energy sources, they radiate at the expense of heat reserves contained in the matter of the star. The sources of radiation and energy also play an important role in the theory of stellar stability. In this connection, the study of the processes occurring in compact stars is important for deter-mining the properties of matter for fundamental physics.

Keywords: superdense stars, crystallization energy, degenerate gas, accretion, nuclear crystal

© Д.М. Насирова¹, В.О. Курмангалиева², А.А. Ғазизова^{1*}, 2024

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

²әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: askarkyzy_94@mail.ru

ШАҒЫН ЖҰЛДЫЗДАРДАҒЫ ЭНЕРГИЯ КӨЗДЕРІ

Д.М. Насирова — PhD докторы (физика), Абай атындағы ҚазҰПУ-дың физика кафедрасы; Алматы, Қазақстан

E-mail: diana-nasirova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3349-0128>;

В.О. Курмангалиева — физика-математика ғылымдарының кандидаты, әл-Фараби атындағы ҚазҰУ-дың теориялық және ядролық физика кафедрасы; Алматы, Қазақстан

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

А.А. Ғазизова — Абай атындағы ҚазҰПУ, физика кафедрасының докторанты (физика); Алматы, Қазақстан

E-mail: askarkyzy_94@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-4849-5118>.

Аннотация. Астрофизикадағы жұлдыздар эволюциясының мәселелері бүгінгі таңда өте өзекті болып отыр. Жұлдыздық эволюцияның барлық кезеңдерінде материяда болатын процестер көптеген құпияларды жасырады. Соның бірі – ықшам жұлдыздардағы сәулелену энергиясының көзі. Мақала ықшам жұлдыздардың кейбір ерекшеліктеріне арналып, ақ ергежейлілерді мысалға ала отырып, есептеулер берілген. Ақ ергежейлілердің ішкі құрылымының ерекшеліктері, ядролық кристалл және энергия көздерінің бірі ретінде жұлдызды заттың кристалдану процесінің ерекшеліктері қарастырылады. Екінші энергия көзі бір заттың екінші объектіге — аккрецияға ағу процесін қарастырады. Аспан денесінің бетіне зат түскенде және сутегінің термоядролық жануы кезінде бөлінетін энергия мөлшерінің сандық салыстырмалы бағалаулары келтірілген. Ықшам жұлдыздар, атап айтқанда ақ ергежейлілер үшін заттың сипаттамалары азғындалған электрон газының (Ферми газы) қасиеттерімен анықталады. Азғындалған газдың қысымы ақ ергежейлілердің тұрақтылығы үшін қажетті процестерге ықпал етеді. Заттың азғындалған күйі ықшам жұлдызды объектілерге тән экстремалды күйлерде болады. Бұл жағдайда біз жоғары тығыздық пен қатты қысымның әсерінен электронды қабықшалар «жалпыланған» кезіндегі ядролық кристалл туралы айтып өттік. Ақ ергежейлілердің өздерінің термоядролық энергия көздері болмағандықтан, олар жұлдыз заттарындағы жылу қорынан сәуле шығарады. Сәуле шығару және энергия көздері жұлдыздардың тұрақтылық теориясында да маңызды рөл атқарады. Осыған байланысты ықшам жұлдыздарда болатын процестерді зерттеу материяның қасиеттерін анықтауда іргелі физика үшін маңызды болып саналады.

Түйін сөздер: аса тығыз жұлдыздар, кристалдану энергиясы, азғындалған газ, аккреция, ядролық кристалл

© Д.М. Насирова¹, В.О. Курмангалиева², А.А. Газизова^{1*}, 2024

¹Казахский национальный педагогический университет им. Абая, Алматы, Казахстан;

²Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан.
E-mail: askarkyzy_94@mail.ru

ИСТОЧНИКИ ЭНЕРГИИ В КОМПАКТНЫХ ЗВЕЗДАХ

Д.М. Насирова — доктор PhD (физики), кафедра физики КазНПУ им. Абая; Алматы, Казахстан

E-mail: diana-nasirova@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3349-0128>;

В.О. Курмангалиева — кандидат физико-математических наук, кафедра теоретической и ядерной физики КазНУ им. аль-Фараби; Алматы, Казахстан

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

А.А. Газизова — докторант (физики), кафедра физики КазНПУ имени Абая; Алматы, Казахстан

E-mail: askarkyzy_94@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0004-4849-5118>.

Аннотация. Проблемы эволюции звезд в астрофизике остаются актуальными. Процессы, протекающие в материи на всех этапах звездной эволюции, кроют в себе немало загадок, одна из которых является источником энергии излучения в компактных звездах. Работа посвящена некоторым особенностям таких звезд, расчеты представлены на примере белых карликов. Рассмотрены особенности внутреннего строения белых карликов, ядерный кристалл и особенности протекания процесса кристаллизации звездного вещества как один из источников энергии. Вторым источником энергии рассматривается процесс перетекания вещества одного объекта во второе – аккреция. Дается численная сравнительная оценка величины выделяемой энергии при падении вещества на поверхность и при термоядерном горении водорода. Для компактных звезд, в частности, белых карликов характеристики вещества определяются свойствами вырожденного электронного газа (ферми-газа). Давление вырожденного газа дает вклад в процессы, необходимые для устойчивости белых карликов. Вырожденное состояние вещества наступает при экстремальных состояниях, присущих компактным звездным объектам. В этом случае речь идет о ядерном кристалле, когда электронные оболочки «обобществляются» под действием высокого давления и высокой плотности. Поскольку белые карлики лишены собственных термоядерных источников энергии, то они излучают за счёт запасов тепла, содержащегося в материи звезды. Источники излучения и энергии играют важную роль также и в теории устойчивости звезд. В связи с этим изучение процессов, протекающих в компактных звездах, важно для определения свойств вещества для фундаментальной физики.

Ключевые слова: сверхплотные звезды, энергия кристаллизации, вырожденный газ, аккреция, ядерный кристалл

Введение

Согласно теории об эволюции звезд, в начальный период своей жизни белый карлик считается не таким уж и холодным, речь идет о температурах, порядка . Вещество белого карлика представляет собой вырожденный электронный газ и от

температуры не зависит (Shapiro & Teukolsky, 1983; Bombaci, 1996).

Наш анализ будет касаться существования ядерной кристаллической решетки. Если учесть, что звезда достаточно «горячая» и ее температура больше некоторой, то можно утверждать, что никакой кристаллической решетки в этом случае не существует. И, получается, что ядра как бы «растворены» в вырожденной Ферми-жидкости.

В белых карликах все электроны обобществлены. «Голые» ядра образуют своеобразную кристаллическую структуру. Каждое ядро может колебаться около положения равновесия в своей ячейке, а размеры его определяются равенством сил электрического отталкивания положительно заряженных ядер и сил притяжения к газу отрицательно заряженных электронов. Электронный газ в белых карликах сжат тяготением всего вещества карлика, и его концентрация гораздо больше чем в металлах (Haensel & Potekhin, 2007).

Таким образом, белый карлик представляет собой шар, построенный из кристаллической решетки ядер и вырожденного электронного газа, для которых характерна высокая упорядоченность энергетического распределения частиц. В центре плотность достигает, а во внешних слоях – . Температура внутри белого карлика считается почти постоянной благодаря высокой теплопроводности вырожденного электронного газа (Yakovlev, 2016; Шварцшильд, 2019).

Электронный вырожденный газ излучать не может. Чтобы излучить энергию, электрон должен перейти из некоторого энергетического состояния в более низкое. Но все возможные состояния электронов заняты, соответственно, переходы с излучением энергии невозможны. Ядра же решетки находятся в невырожденном состоянии, могут переходить из одного состояния в другое, излучая кванты света и поддерживая этим температуру белого карлика (Lattimer & Prakash, 2004; Takibaev, 2013; Takibaev & Kurmangaliyeva, 2020).

Излучая энергию ядра, решетки охлаждаются постепенно. Темп охлаждения белого карлика зависит от типа ядер его решетки – если речь идет о тяжелых ядрах, охлаждение идет быстрее (для решетки из ядер гелия время охлаждения составляет около двух миллиардов лет).

Остывание звезды приводит к тому, что ядра образуют кристаллическую решетку (Брук, 2018).

Как в случае обычных кристаллов, процесс образования ядерной решетки сопровождается выделением тепла. Источниками энергии белого карлика является энергия, выделяющаяся при кристаллизации белого карлика, которая перерабатывается в излучение и запас тепловой энергии. Тепловая энергия будет в белом карлике независимо от состояния материи (будь она жидкой либо кристаллической) (Angeles & Joseph, 2010).

Сами ядра, погруженные в вырожденный электронный Ферми-газ, считаются невырожденными, их кинетическая энергия определяется температурой (Norman, 2012; Шкловский, 1984).

Более массивные белые карлики имеют меньший радиус и большую концентрацию вырожденного электронного газа. С увеличением массы давление газа электронов растет медленнее, чем увеличивается сила тяготения. Существует верхний предел массы белого карлика ($M_{\text{Chandrasekhar}}$), найденный С. Чандрасекаром, при котором давление вырожденного газа электронов еще уравновешивает гравитационное

давление (Takibayev & Nasirova, 2018).

Методы исследования и обсуждение результатов

Учитывая основные параметры, которым даны описания в первой части работы, можно сопоставить расчеты

$$M \approx \left(\frac{\hbar c}{G}\right)^{3/2} \cdot \frac{5}{6} \frac{1}{m_p^2}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 3.14} \approx 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

$$M \approx \left(\frac{\hbar c}{G}\right)^{3/2} \cdot \frac{5}{6} \frac{1}{m_p^2} = \left(\frac{1.05 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{6.67 \cdot 10^{-11}}\right)^{3/2} \cdot \frac{5}{61.67 \cdot 10^{-27} \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}} \approx 2.8 \cdot 10^{30} \text{ кг};$$

$$M \approx 1,4M_{\odot} \text{ (масса белого карлика)}$$

Зная массу белого карлика, можно рассчитать его плотность:

$$\rho = n \cdot m_p \approx \left(\frac{p_e}{\hbar}\right)^3 m_p \approx \frac{m_p}{\left(\frac{2\hbar}{m_e c}\right)^3} \approx \frac{1.67 \cdot 10^{-27}}{\left(\frac{2 \cdot 1.05 \cdot 10^{-34}}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8}\right)^3} \approx \frac{1.67 \cdot 10^{-27}}{4.56 \cdot 10^{-4} \cdot 10^{-33}} \approx 4 \cdot 10^6 \text{ г/см}^3$$

Оценки радиуса белого карлика дают:

$$R \approx \left(\frac{3}{4\pi} \frac{1.4M_{\odot}}{\rho}\right)^{1/3} \approx \left(\frac{3}{3 \cdot 3.14} \cdot \frac{1.4 \cdot 2 \cdot 10^{30}}{4 \cdot 10^9}\right)^{1/3} \approx 5.5 \cdot 10^6 \text{ м}$$

Далее можем дать оценку по энергии, которая выделится при кристаллизации. Для данного анализа мы, конечно, не учитываем, что плотность материи звезды меняется с глубиной.

$$E = kT_{\text{пл}} n_{\text{я}} R^3$$

В зависимости от массы белого карлика меняется и температура, для нашего случая $T_{\text{пл}} = 100273 \text{ К}$

$n_{\text{я}}$ – концентрация ядер (для случая с углеродом)

R – радиус белого карлика;

$$M = \rho \cdot V = \rho \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 = n_{\text{я}} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 \cdot \frac{M}{N_A}$$

$$\text{здесь } n_{\text{я}} = \frac{\rho \cdot N_A}{M} = \frac{4 \cdot 10^9 \cdot 6 \cdot 10^{23}}{12 \cdot 10^{-3}} = 2 \cdot 10^{35}$$

ρ – плотность белого карлика.

Еще Киржницем был сделан вывод о том, что кристаллизация любого вещества, независимо от того, что вода, расплав железа или сверхплотная кулоновская плазма приводит к выделению тепла. Следовательно, это может влиять на динамику светимости белого карлика и замедлить остывание ядра белого карлика (Takibayev & Boshkayev, 2017).

Энергия кристаллизации примет следующее значение, что в целом сопоставимо с порядками:

$$E = kT_{\text{пл}} n_{\text{я}} R^3 \approx 4,6 \cdot 10^{37} \text{ Дж} \approx 28,7 \cdot 10^{19} \text{ эВ}$$

Говоря об энергии кристаллизации нужно подчеркнуть, что в веществе белого карлика происходит фазовый переход первого рода, данный процесс может

понижать его температуру примерно на порядок.

Данная энергия в конечном итоге перерабатывается в излучение. Поэтому можно утверждать, что этот процесс дает вклад в хоть и слабое, но излучение белого карлика. Конечно, это не единственный источник энергии звезды, здесь стоит отметить и запас тепловой энергии в недрах звезды, она не учитывает состояние звездного вещества. Поскольку белые карлики лишены собственных термоядерных источников энергии, то они излучают за счёт запасов своего тепла, а также если отсутствует процесс аккреции, который тоже может быть еще одним источником светимости белых карликов.

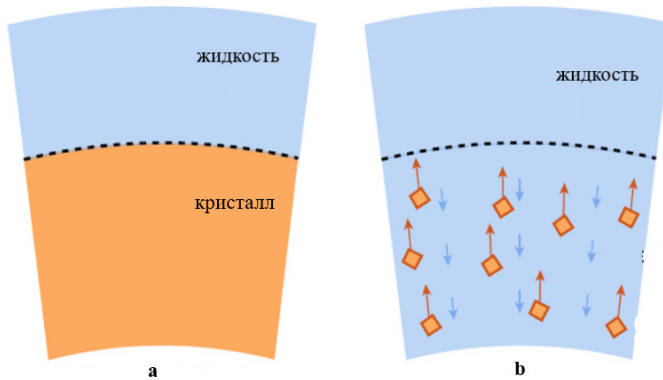


Рисунок 1

Рисунок 1 - Сценарий кристаллизации ядра белого карлика. а - кристаллизация углеродно-кислородного ядра без примесей, b - кристаллизация ядра при наличии примесей (Bdard & Blouin, 2024).

В работе (Bdard & Blouin, 2024) авторы отмечают о том, что возможно существование внутреннего источника энергии, т.к. по законам термодинамики, тепло, выделяющееся при кристаллизации, недостаточно. По мнению авторов (Shen et al., 2023. The Q Branch Cooling Anomaly Can Be Explained by Mergers of White Dwarfs and Subgiant Stars), в белых карликах с избыточным содержанием нейтронов процесс кристаллизации при охлаждении белых карликов развивается по иному сценарию. В материи с содержанием, где преобладают нейтроны, возможно формирование миникристаллов, обладающих плавучестью. Они в свою очередь поднимаются к поверхности белого карлика и там вновь переходят в жидкое состояние. По итогу в центре карлика не формируется твердое кристаллическое ядро, но возникают конвекционные потоки, состоящие из перемещающихся вверх кристаллов и струй более тяжелой жидкой фазы, которую эти кристаллы вытесняют и заставляют опускаться к центру белого карлика. Согласно вычислениям авторов (Bdard & Blouin, 2024) такие процессы приводят к эффективному высвобождению гравитационной энергии, которое может достигать до одной тысячной светимости Солнца.

Анализируя физические процессы в компактных звездах, на примере белого карлика, можно рассмотреть еще один источник энергии – аккреция. В астрофизике аккреция представляет собой процесс захвата вещества из окружающего пространства гравитационным полем небесного тела с его последующим падением

части вещества на поверхность тела. Данный термин описывает захват и падение межзвездных и межпланетных газа и пыли на поверхность звезд и планет. Перетекание вещества в тесных двойных звездных системах с одного компонента на другой тоже относится к аккреции. Аккреция вещества на конечные продукты звездной эволюции — белые карлики, нейтронные звезды и черные дыры — сопровождается значительным выделением гравитационной энергии в виде электромагнитного излучения.

Дадим сравнительную оценку для двух процессов, сформулировав задачу следующим образом: в каком случае энерговыделения будет больше – при падении вещества на поверхность звезды или при горении водорода?

Учитывая, что в процессе эволюции звезда отбрасывает свои верхние слои, массу белого карлика возьмем равной массе Солнца – $M = 1,98 \cdot 10^{30}$ кг, радиус $R=2500$ км, и на ее поверхность падает $m=1$ кг вещества.

$$|E_n| = \frac{GMm}{R} = \frac{6.67 \cdot 10^{-11} \cdot 1.98 \cdot 10^{30}}{2500} = 5 \cdot 10^{17} \text{ Дж}$$

Полученное значение сравним с эффективностью термоядерных реакций: . Получается, что при падении вещества на поверхность звезды энергии выделяется сравнительно больше, чем при термоядерных реакциях (см.Рис.2)? Это значение очень приблизительное, нам нужно было знать только разницу в порядках, и наша оценка считается достаточно грубой.

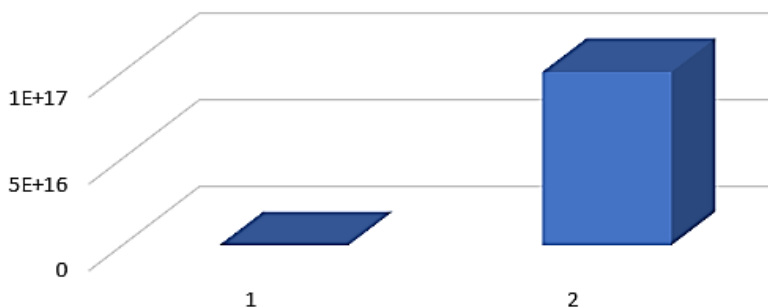


Рисунок 2

Рисунок 2 – сравнительная диаграмма разниц энергии термоядерных реакций с энергией, выделяющейся при падении вещества на поверхность звезды.

Заключение

То, что компактные звезды являются конечными продуктами звездной эволюции, не говорит о том, что в них не могут идти различные физические процессы. Напротив, именно они скрывают множество загадок своего строения. Представленные в работе численные оценки характерных энергий, имеющих разное происхождение, возможно, не очень надежны пока, но, тем не менее, такие оценки позволяют делать акцент на процессах, которые являются наиболее вероятными и важными на каждой стадии эволюции компактных звезд.

REFERENCES

- M. Angeles Perez-Garcia, Joseph Silk, Jirina R. (2010). Stone. Dark Matter, Neutron Stars, and Strange Quark Matter //Physical Review Letters. — Pp. 141101–04.
- Antoine Bdard, Simon Blouin, Sihao Cheng (2024). Buoyant crystals halt the cooling of white dwarf stars // *Nature*. — <https://doi.org/10.1038/s41586-024-07102-y>.
- Y.M. Brook (2018). Phase transformations in superdense matter. Experience in modeling white dwarfs and neutron stars. — No.1. — 05–44
- Bombaci I. (1996). The maximum mass of a neutron star. *Astrophysics*. — p.305
- Haensel P., Potekhin A.Y., Yakovlev D.G., (2007). *Neutron Stars 1: Equation of State and Structure*. Astrophysics and Space. — Science Library. — p. 326
- Lattimer J.M., Prakash M. (2004). The physics of neutron stars. *Science*. — 304(5670). — 536–542. — <https://doi.org/10.1126/science.1090720>.
- Norman K. (2012). *Glendenning, Compact Stars: Nuclear Physics, particle Physics and general relativity*. — Springer. New York. — <https://doi.org/10.1007/978-1-4684-0491-3>
- Yakovlev D.G. (2016). General relativity and neutron stars. - *Int. J. Mod. Phys.* — A 31. — 1641017. — <https://doi.org/10.1142/S0217751X16410177> 72.
- Takibayev N., Boshkayev K. (2017). Neutron stars: Physics, properties and dynamics. — *Neutron Stars: Physics, Properties and Dynamics*. — Pp. 1–278. — <https://novapublishers.com/shop/neutron-stars-physics-properties-and-dynamics/>
- Takibayev N., Nasirova D., Kato K., Kurmangaliyeva V. (2018). Excited nuclei, resonances and reactions in neutron star crusts. In: *Journal of Physics Conference Series*. — Vol. 940. — P. 012058. — <https://doi.org/10.1088/1742-6596/940/1/012058>
- Takibayev N., Kato K., Nasirova D. (2013). Excited Nuclei in Neutron Star Crusts // *Adv.Studies Theor. Phys. Bulgaria*. — Vol.7. — № 4. — Pp. 151–161. — doi: <https://doi.org/10.12988/astp.2013.13014>
- Takibayev N., Kurmangaliyeva V., Kato K. Vasilevsky V.S. (2020). Few-Body Reactions and Processes in Neutron Star Envelopes. —Pp. 157–161. — Springer, Cham. — https://doi.org/10.1007/978-3-030-32357-8_28.
- Shapiro S.L., Teukolsky S.A. (1983). *Black Holes, White Dwarfs and Neutron Stars*. Wiley-VCH. — New York (1983). — <https://doi.org/10.1002/9783527617661>
- Schwarzschild M. (2019). The structure and evolution of stars. — Ed. 4. — p.432
- Shklovsky I.S. (1984). *Stars: their birth, life and death*.— 3rd ed., reprint.— M.: Nauka, The Main editorial office of the physical and mathematical literature. — 384 p.

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC
OF KAZAKHSTAN
ISSN 2224-5227
Volume 2. Number 350 (2024), 103–115
<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.282>
УДК 52-17: 520.82: 520.88: 519.688
МРПТИ 41.51.27(41):41.23.17

© A. Serebryanskiy^{1*}, A. Khalikova², 2024

¹Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan;

²Ulugh Beg Astronomical Institute, Tashkent, Uzbekistan.

SEARCH FOR VARIABLE STARS IN MONITORING AND SURVEY PHOTOMETRIC OBSERVATIONS USING MACHINE LEARNING METHODS

Serebryanskiy A. — Fesenkov Astrophysical Institute, Almaty, Kazakhstan

E-mail: alex@fai.kz <https://orcid.org/0000-0002-4313-7416>;

Khalikova A. — Ulugh Beg Astronomical Institute, Tashkent, Uzbekistan

E-mail: akhalikov@astrin.uz <https://orcid.org/0000-0001-9624-9852>;

Abstract: As a result of photometric survey and monitoring campaigns, several hundred CCD images are obtained in one night of observations, each of which, depending on the parameters of the telescope, may contain up to several thousand sources (stars, asteroids and other objects of near-Earth space). To effectively use such an array of data in order to detect variable stars and transient events, an effective method of Big Data analyzing is needed. In this paper, we present a method for detecting variable stars in photometric survey and monitoring observation campaigns using machine learning algorithms. It is shown that the determination of all possible characteristics of the variability of time series (light curves), followed by selection of most relevant parameters, followed by decomposition into principal components and the search for the most informative among them (reducing the dimension of the problem), allows us to apply the binary classification method using the Random Forest algorithm at a level of precision not worse than 70 % for variable stars identification.

Keywords: photometrical survey; variable stars; methods of machine learning

© А. Серебрянский^{1*}, А. Халикова², 2024

¹ Фесенков атындағы Астрофизика Институты, Алматы, Қазақстан;

² Улуг Бег Астрономиялық Институты, Ташкент, Өзбекстан.

E-mail: alex@fai.kz

МАШИНАЛЫҚ ОҚЫТУ ӘДІСТЕРІН ҚОЛДАНЫП ШОЛУ ЖӘНЕ МОНИТОРИНГТІ ФОТОМЕТРЛІК БАҚЫЛАУЛАРЫНАН АЙНЫМАЛЫ ЖҰЛДЫЗДАРДЫ ІЗДЕУ

Серебрянский А. — Фесенков атындағы Астрофизика Институты, Алматы, Қазақстан

E-mail: alex@fai.kz <https://orcid.org/0000-0002-4313-7416>;

Халикова А. — Улуг Бег Астрономиялық Институты, Ташкент, Өзбекстан

E-mail: akhalikov@astrin.uz <https://orcid.org/0000-0001-9624-9852>.

Аннотация. Бір түнде фотометрлік шолу және мониторинг науқандарын жүргізудің нәтижесінде бірнеше жүздеген Зарядталған байланыс аспабы (ЗБА) - бейнелерін алынады, олардың әрқайсысында телескоптың параметрлеріне байланысты бірнеше мыңға дейінгі объектілер болуы мүмкін (жұлдыздар, астероидтар және жерге жақын ғарыш кеңістігінің басқа объектілері). Айнымалы жұлдыздар мен өтпелі оқиғаларды анықтау мақсатында осындай массивті тиімді пайдалану үшін, яғни үлкен мәліметтер массивін талдауға тиімді әдіс қажет. Мақалада, машиналық оқыту алгоритмдерін қолдана отырып, шолу және мониторингті фотометрлік бақылауларынан айнымалы жұлдыздарды анықтаудың алгоритмі берілген. Уақыттық қатарлардардың (жарқырау қисықтарын) айнымалылығының барлық сипаттамаларын анықтауға, содан кейін тиісті параметрлерді таңдау, оларды негізгі құраушыларға бөлу және олардың ішінен ең ақпараттысын іздеуге (тапсырма өлшемін азайту), Random Forest алгоритмін қолдану айнымалы жұлдыздарды анықтау дәлдігінің 70 % кем емес деңгейде, жіктеу әдісін қолдануға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: фотометрлік шолулар; айнымалы жұлдыздар; машиналық оқыту әдістері.

© А. Серебрянский^{1*}, А. Халикова², 2024

¹ Астрофизический институт им. Фесенкова, Алматы, Казахстан;

² Астрономический институт им. Улугбека, Ташкент, Узбекистан.

E-mail: alex@fai.kz

ПОИСК ПЕРЕМЕННЫХ ЗВЕЗД В МОНИТОРИНГОВЫХ И ОБЗОРНЫХ ФОТОМЕТРИЧЕСКИХ НАБЛЮДЕНИЯХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Серебрянский Александр — Астрофизический институт им. Фесенкова, Алматы, Казахстан

E-mail: alex@fai.kz <https://orcid.org/0000-0002-4313-7416>;

Халикова А. — Астрономический институт им. Улугбека, Ташкент, Узбекистан

E-mail: akhalikov@astrin.uz <https://orcid.org/0000-0001-9624-9852>.

Аннотация. В результате проведения фотометрических обзорных и мониторинговых кампаний за одну ночь наблюдений получают несколько сотен ПЗС-изображений на каждом из которых, в зависимости от параметров телескопа, может быть до нескольких тысяч источников (звезд, астероидов и других объектов околоземного космического пространства). Для эффективного использования такого массива данных с целью обнаружения переменных звезд и транзиентных событий, необходим эффективный метод анализа большого массива данных. В данной статье представлен алгоритм обнаружения переменных звезд в данных фотометрических обзорных и мониторинговых кампаниях наблюдений с использованием алгоритмов машинного обучения. Показано, что определение всех возможных характеристик переменности временных рядов (кривых блеска) с последующей селекцией релевантных параметров, разложением их по главным компонентам и поиском среди них наиболее информативных (сокращение размерности задачи), позволяет применить методику классификации с использованием алгоритма Random Forest на уровне не хуже 70 % точности идентификации переменных звезд.

Ключевые слова: фотометрические обзоры; переменные звезды; методы машинного обучения

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

Введение

За все время фотометрических ПЗС наблюдений, проводимых в АФИФ, накопился большой объем наблюдательных данных с продолжительностью отдельных серий наблюдений до нескольких часов (Shomsheкова и др., 2022). В рамках создаваемого АстроХаба ожидается многократный рост объема таких данных наблюдений. Такой фотометрический материал очень важен для задач поиска новых переменных звезд с разнообразной природой их переменности, а также для поиска потенциальных транзиентных событий.

Такие серии наблюдений проводились с целью исследований отдельных интересующих объектов и, как результат, очень большое количество объектов, попадающих в поле, оставались без внимания из-за невозможности их анализа без процесса автоматизации поиска объектов в поле с последующей их фотометрией. Решение такой задачи стало возможным с разработкой и внедрением конвейерного алгоритма анализа данных ПЗС-наблюдений (Serebryanskiy и др., 2018: 37–47).

С помощью него были получены кривые блеска нескольких тысяч звезд для каждой серии наблюдений. Понятно, что просмотр всех кривых блеска на предмет поиска среди них переменных звезд и транзиентных событий становится задачей сложной, а результаты такого поиска подвержены человеческому фактору, включая субъективность выбора. С вводом в строй телескопов с большим полем обзора (в этом случае количество звезд в поле может достигать десятки тысяч) и началом систематического мониторинга на обсерватории Ассы-Тургень, задача становится еще более затратной.

В этой связи встал вопрос о разработке алгоритма автоматизации процесса поиска переменных звезд. Наиболее привлекательным видится поиск решения с привлечением алгоритмов машинного обучения. Такие задачи решаются в разных проектах разнообразными методами (Soraisam и др., 2020: 112; Kim и др., 2016; Giles и др., 2019: 834–849; Webb и др., 2020: 3077–3094; Naul и др., 2018: 151–155).

Материалы и методы

В представленной работе предлагается решение задачи поиска переменных звезд на основе бинарного алгоритма селекции. Другими словами, мы решаем задачу – определить, есть ли в кривой блеска какая-то особенность («переменная») или звезду можно считать стационарной («постоянная») в пределах точности полученных фотометрических оценок, которые определяются по уровню шума в кривых блеска.

Поскольку мы имеем дело с наземными фотометрическими наблюдениями, ожидать точность фотометрии на уровне 10^{-3} магнитуды и выше не приходится и, следовательно, все типы переменных звезд с вариациями блеска ниже данного предела попадают под класс «постоянные».

Если обозначить количество звезд в поле ПЗС кадра, для которых получены кривые блеска, как N_{stars} , то мы имеем вектор значений $\mathbf{y} = \{y_1, \dots, y_{N_{stars}}\}$, где $y_i=1$, если звезда переменная, и $y_i=0$ в противном случае.

Такую задачу классификации можно реализовать, если для каждой из кривой блеска получить некоторые характеристики, отражающие поведение и статистику кривых блеска, с последующим анализом этих характеристик и выявления переменных звезд по совокупности характерных признаков.

В данной работе мы представляем один из возможных способов решения поставленной задачи на примере одной серии фотометрических ПЗС наблюдений, полученных на телескопе Цейсс-1000 «Восточный» ТШАО 26 января 2022 года. Целью наблюдений была фотометрия астероида 153591 (2001 SN263). Наблюдения проводились в третьем биннинге (процедура усреднения сигнала на аппаратном уровне, на ПЗС камере по количеству пикселей), с экспозицией 40 сек., в фильтре R Джонсона-Коузина. Общая продолжительность наблюдений порядка 4.5 часов (количество ПЗС кадров порядка 300).

В результате выполнения потоковой фотометрии было получено более 500 кривых блеска. Поскольку этот массив данных не слишком большой, была проведена визуальная инспекция каждой кривой блеска и выявлено 6 явно переменных звезд. Эти звезды в последующем были использованы нами как индикаторы правильности работы алгоритма классификации. В качестве метода такой классификации был выбран алгоритм «Random Forest», относящийся к классу алгоритмов «supervised learning» (обучение с «наставником»). Для построения успешной модели

классификации с использованием этого алгоритма, количества наблюдаемых кривых блеска, учитывая число переменных звезд среди них, недостаточно. Кроме того, недостаточно представлено и все разнообразие возможных переменных звезд. Поэтому было принято решение применить в качестве обучающего материала искусственно сгенерированные кривые блеска, продолжительность, диапазон звездных величин и статистические параметры шума которых наиболее близко отражают реальные наблюдения. При этом в искусственных кривых блеска есть возможность смоделировать любой тип переменности, в любом диапазоне амплитуд. Всего было сгенерировано 4263 кривые блеска, среди которых 263 кривые блеска относятся к переменным звездам.

Для определения индексов переменности существует несколько возможностей. Одной из них является использование пакетов FATS (Nun и др., 2017) или FEETS (Cabral и др., 2018: 213–220) (<https://feets.readthedocs.io/en/latest/tutorial.html>). Детальное описание одной из методик поиска переменных звезд по кривым блеска дано также в работе (Richards и др., 2011). Другой возможностью является использование пакета TSFRESH (Christ и др., 2018: 72–77), разработанного на базе пакета FRESH (Christ и др., 2017) (www.github.com/blue-yonder/tsfresh) с более широким спектром применения. Мы остановились на второй возможности, поскольку общее количество различных параметров переменности временных серий в TSFRESH на порядок больше чем в FEETS, а их интерпретация проста. Кроме того, было показано, что для успешной классификации временных серий наиболее плодотворным является подход, при котором сначала вычисляются все возможные ее характеристики, а уже потом применяются различные алгоритмы фильтрации для выделения наиболее существенных из них.

В настоящее время наиболее полным набором извлекаемых характеристик временных серий среди всех пакетов в открытом доступе обладает именно TSFRESH, который создавался согласно курсу разработок «Интернет вещей» и «Индустрия 4.0». Кроме того, в пакете реализовано большое количество методов проверки различных статистических гипотез и моделей. Общее количество параметров в TSFRESH порядка 800. Не все из этих параметров применимы для анализа кривых блеска. Для селекции необходимых параметров в пакете предусмотрена специальная процедура, позволяющая сократить их число до, приблизительно, 300. Это количество параметров сравнимо с количеством переменных звезд и сопоставимо с общим числом звезд, что может привести к хорошо известному отрицательному эффекту при использовании алгоритма «Random Forest» – хорошей аппроксимации тестовых данных, но к обнаружению ложных переменных в реальных данных. Кроме того, среди 300 параметров есть множество тех, которые можно считать зависимыми друг от друга или очень близкими по смыслу между собой. Следовательно, необходимо выделить среди них наиболее важные и независимые параметры. Пакет TSFRESH позволяет это сделать с помощью процедуры *permutation_importance()*, которая случайным образом переставляет параметры переменности и, тем самым, определяет, какой из параметров наиболее важен. Тем не менее, опыт показал, что это не самый лучший способ первоначальной селекции параметров. Так, при выбрасывании одного параметра распределение по их важности меняется, а также из-за зависимости друг от друга некоторых параметров их ранжирование по важности тоже не является

независимым.

Для решения этой проблемы мы применили метод разложения на главные компоненты (PCA – Principal Component Analysis). Вкратце смысл этого подхода заключается в том, чтобы найти такое линейное преобразование из пространства наших параметров в пространство некоторых других параметров, при котором сохранялась бы информативность. При этом размерность нашего пространства параметров может быть значительно сокращена.

Таким образом, в предложенном подходе есть два набора неопределенных параметров – параметры алгоритма «Random Forest» и количество главных параметров (principal components) в алгоритме PCA. О выборе значений этих параметров будет сказано ниже.

Результаты

Всего было использовано 4263 искусственно сгенерированных данных. Среди них 4000 кривых блеска для постоянных звезд, в кривых блеска которых присутствует случайный шум, зависящий от звездной величины и «красный» шум для моделирования влияния инструментальных эффектов. Остальные 263 звезды – это переменные звезды с различным типом переменности, разными амплитудами и периодами.

Каждая искусственная кривая блеска содержит 300 значений звездной величины с равномерной выборкой по времени. Средние значения звездной величины, ее дисперсия и значения ошибок в каждой смоделированной кривой блеска были взяты максимально близко соответствующими реальным наблюдениям. Построив зависимость стандартного отклонения от среднего значения, и ошибки от среднего значения, мы аппроксимировали их полиномом третьего порядка. Таким образом, мы получили 1000 значений звездных величин в диапазоне от 13 до 19, и соответствующие им величину дисперсии и ошибки, которые оказались в диапазоне 0.007–0.122 магнитуд. Затем, случайным образом выбрав звездную величину, к искусственной кривой блеска (как переменной, так и постоянной) добавлялся нормальный шум с помощью пакета *numpy.random.normal*, с дисперсией соответствующей магнитуде звезды. Затем к полученной кривой блеска добавлялся шум с гауссовским распределением, со спектром, имеющим степенной закон с произвольными показателями, из пакета *colorednoise*. Параметры выбирались таким образом, чтобы окончательный вид кривых блеска максимально был похож на реальные кривые блеска.

Каждая кривая блеска (m_j , где j соответствует номеру звезды) представляет собой матрицу значений размерностью $3 \times N_{\text{data}}$, где первые три размерности соответствуют времени наблюдений, звездной величине и ошибке определения звездной величины (t , mag , Δmag), а N_{data} – это общее количество точек в кривой блеска. Для уменьшения влияния шума каждая кривая блеска проходит операцию избавления от вылетающих значений. Далее кривые блеска нормируются:

$$m_j^t = \frac{m_j - \bar{m}_j}{\sigma_{m_j}}$$

На заключительном этапе нормированные кривые блеска сглаживаются скользящим средним с шириной окна 5 минут (при экспозиции 40 сек. Это соответствует сглаживанию приблизительно по 7-8 точкам).

Для реализации алгоритма TSFRESH все кривые блеска представлены в единой матрице размерностью $3 \times N_{\text{total}}$, где первые три размерности соответствуют идентификационному номеру звезды (ID), времени наблюдений (t) и магнитуде (mag), а значение $N_{\text{total}} = N_{\text{data}} \times N_{\text{stars}}$. Весь массив представляется в виде формата *pandas.DataFrame*.

Для получения полного (исчерпывающего) списка параметров в TSFRESH используется процедура *ComprehensiveFCParameters()*. Для выделения среди них релевантных параметров используется процедура *extract_relevant_features()*, на вход которой передается массив кривых блеска, а также вектор с идентификацией переменных звезд, *y*. При этом, для ускорения вычислений, используется многопроцессорность вычислений, реализуемых процедурой *Multiprocessing Distributor()*. В результате мы получаем матрицу параметров размерностью $N_{\text{par}} \times N_{\text{stars}}$.

Пространство параметров после селекции может достигать размерности нескольких сотен (обычно порядка 200, в нашем случае). Кроме того, даже среди этих отобранных параметров не все являются полностью независимыми. Следовательно, при применении алгоритма «Random Forest» возникает проблема чрезмерной аппроксимации. Эту проблему можно решить методом уменьшения размерности параметрического пространства, используя, например, метод разложения нашей матрицы параметров размерности $N_{\text{par}} \times N_{\text{stars}}$ на главные компоненты. Для этого мы используем процедуру PCA метода *sklearn.decomposition* из пакета *sklearn* (Pedregosa и др., 2011: 2825–2830). Смысл разложения на главные компоненты заключается в том, чтобы найти такое представление, используя линейное преобразование, при котором наши данные можно перевести из пространства размерности равному количеству параметров в пространство меньшей размерности (количество компонент) с максимальным сохранением информативности. В этом случае количество параметров (компонент) можно сократить на порядок.

Здесь следует отметить, что для процедуры разложения на главные компоненты важным является нормирование всех параметров, поскольку процесс PCA заключается в поиске такого разложения, при котором остается максимальным значения вариации, а значения параметров могут сильно отличаться друг от друга. Процесс нормировки параметров (главных компонент) осуществляется методом *StandardScaler()* метода *sklearn.preprocessing*.

На этом этапе есть возможность выбора значения одного из гиперпараметров задачи – количества интересующих нас главных компонент. Для выбора оптимального количества главных компонент сначала параметр *n_components* задается равным 0.99, то есть такое их количество, при котором мы сохраняем 99 % вариации для изначальной размерности задачи. Затем мы можем сократить их количество, рассмотрев зависимость вариации от компоненты. Для этих целей используем процедуру *PCA.explained_variance_ratio()*. На рисунке 1 слева показана зависимость кумулятивной суммы вариации от количества используемых главных компонент матрицы, а на рисунке 1 справа показана зависимость вариации от каждой компоненты отдельно. Мы видим резкий рост суммарной вариации для первых ~20 главных компонент, а затем этот рост замедляется. Тоже самое можно сказать о значении вариации для каждой из компонент – ее изменение существенно лишь для первых ~20 компонент. Например, 20 % всей информации содержится в первой главной компоненте, в то время как вторая компонента вносит 8 % ин-

формации и т.д. Порядка 60 % от первоначальной вариации содержится в первых 20 компонентах. При увеличении количества главных компонент возникает риск чрезмерной аппроксимации.

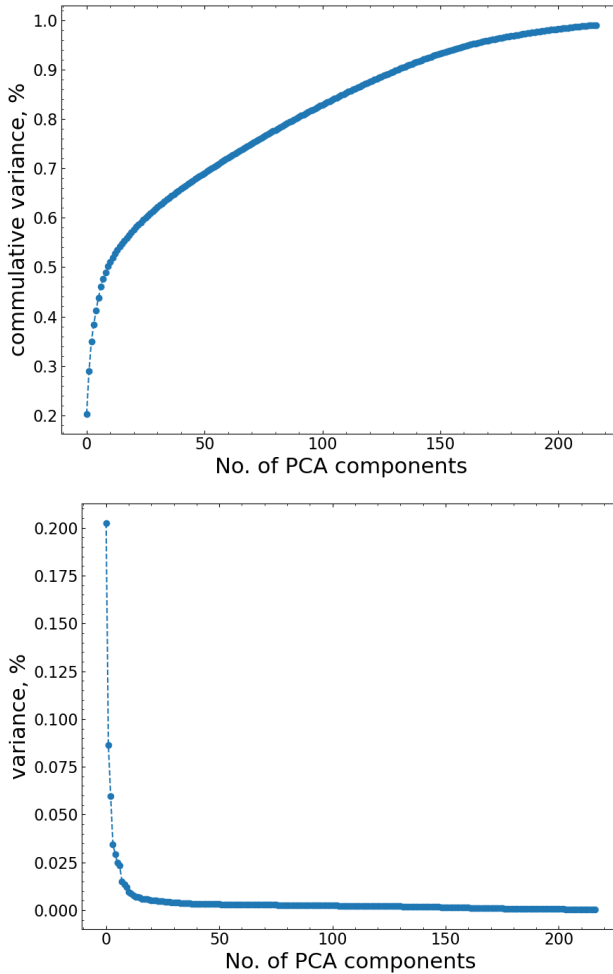


Рисунок 1. Зависимость суммарной вариации от количества главных компонент (слева) и значения вариации для каждого параметра (справа).

Для дальнейшего анализа мы оставим 20 первых главных компонент и будем использовать это 20-ти мерное пространство новых параметров для классификации переменных звезд.

Алгоритм «Random Forest» имеет несколько параметров, выбор которых может быть критичен для удовлетворительной работы алгоритма. В число этих параметров входит количество «деревьев» ($n_estimators$), то есть количество отдельных алгоритмов идентификации в ансамбле, по которому строится окончательное решение. Следующие параметры – это максимальная глубина ветвления (max_depth), минимальное количество данных, при котором еще возможно ветвление ($min_samples_split$) и минимальное количество «листьев», которое можно считать отдельным классом ($min_samples_leaf$).

Поиск значений оптимальных параметров можно осуществить с помощью процедуры сетки поиска с использованием алгоритма кросс-проверки (cross validation, CV). Для этого используется процедура *GridSearchCV()* метода *sklearn.model_selection*. Сначала мы разбиваем наши данные на две части – часть для «обучения» алгоритма (60 % от общего количества данных) и часть для его тестирования (оставшиеся 40 %) с использованием процедуры *train_test_split()* метода *sklearn.model_selection*.

Далее задаем сетку приблизительных значений параметров алгоритма для поиска их оптимальных значений. Например: $n_estimators = \{10, 100, 200, 300\}$, $max_depth = \{5, 8, 15, 25, 30, 40\}$, $min_samples_split = \{2, 5, 10, 15, 100\}$, $min_samples_leaf = \{1, 2, 5, 10\}$.

Эту процедуру можно повторять итерационно для задания все более точной сетки (с более мелким шагом) и таким образом определить точные оптимальные значения параметров.

В результате таких расчетов были получены следующие оптимальные значения параметров алгоритма Random Forest для наших данных: $max_depth = 30$, $min_samples_leaf = 1$, $min_samples_split = 2$, $n_estimators = 300$.

На этом этапе есть возможность еще больше сократить число параметров если рассмотреть важность вклада каждого из них в процесс классификации. Для этого используется метод случайной перестановки параметров среди звезд и сравнение результатов классификации с реальными метками постоянных и переменных звезд. Если параметр не является ключевым, то его значение не сильно будет влиять на результат классификации при случайной его перестановке. Для оценки важности параметра можно использовать метод *permutation_importance()* метода *sklearn.inspection*. Результат такой оценки показан на рисунке 2.

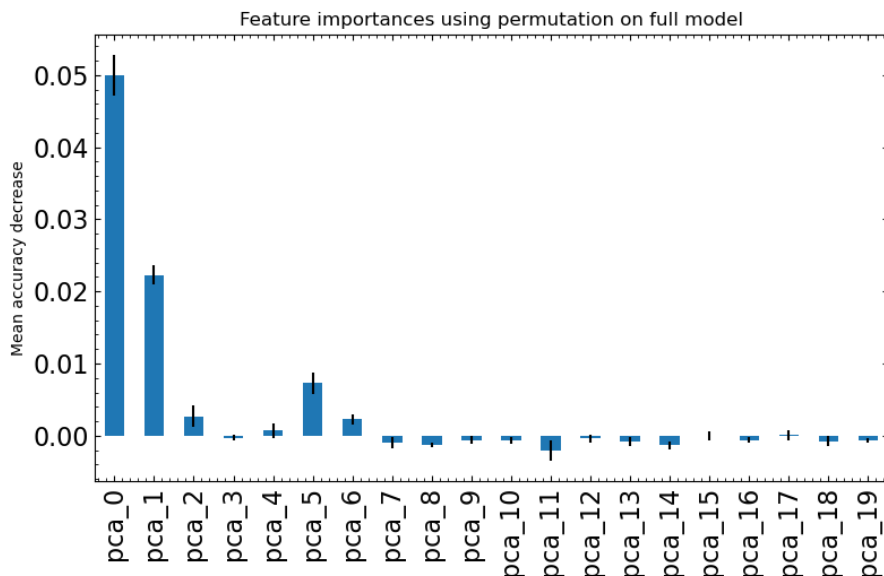


Рисунок 2. Среднее значение падения точности классификации при случайной перестановке главных компонент (параметров). Показан результат при использовании 20 главных компонент.

Оценку точности алгоритма классификации можно получить несколькими показателями, одним из которых является так называемая матрица ошибок (*confusion matrix*). Поскольку у нас задача бинарная, то есть интересует вопрос, является ли звезда переменной или нет (1 – да, 0 – нет) то такая матрица имеет размерность 2×2 , где элементы (1,1) «False-False» – не переменная звезда классифицируется как неперемнная, (1,2) «False-True» – неперемнная звезда классифицируется как переменная, (2,1) «True-False» – переменная звезда классифицируется как неперемнная и (2,2) «True-True» – переменная звезда классифицируется как переменная.

Пример получаемой матрицы ошибок показан на рисунке 3. Из рисунка 3, в частности, следует, что точность алгоритма классификации звезд как действительно постоянных («False-False») составляет 99 %, а точность классификации переменных («True-True») 72 %. При этом только 2 % звезд среди постоянных ошибочно классифицируются как переменные (True-False) и 21 % звезд из переменных алгоритм классифицирует как постоянные («False-True»). Общая точность алгоритма из метода *sklearn.metrics* процедурой *accuracy_score* получилась равной 97%.

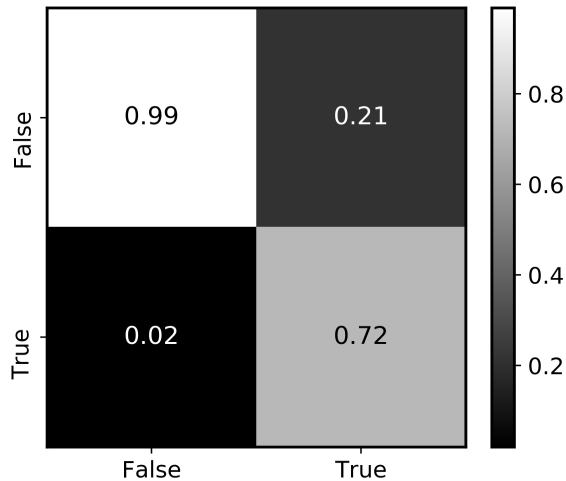


Рисунок 3. Матрица ошибок при классификации звезд по искусственным данным (кривым блеска).

Еще одним индикатором точности алгоритма классификации в бинарной задаче является метрика AUC (Area Under Curve). Ее расчет реализован в методе *sklearn.metrics* в процедурах *roc_curve()* и *auc()*. Смысл данной метрики заключается в оценке точности срабатывания алгоритма в целом. В нашем случае точность по критерию AUC получилась равной 85 %. Но у него есть недостаток – с его помощью в нашем случае невозможно оценить, сколько среди переменных звезд было ложно идентифицировано как постоянные, а это очень важно, чтобы не пропустить в реальных данных действительно переменные звезды.

Результат классификации звезд по искусственным кривым блеска показан на рисунке 4.

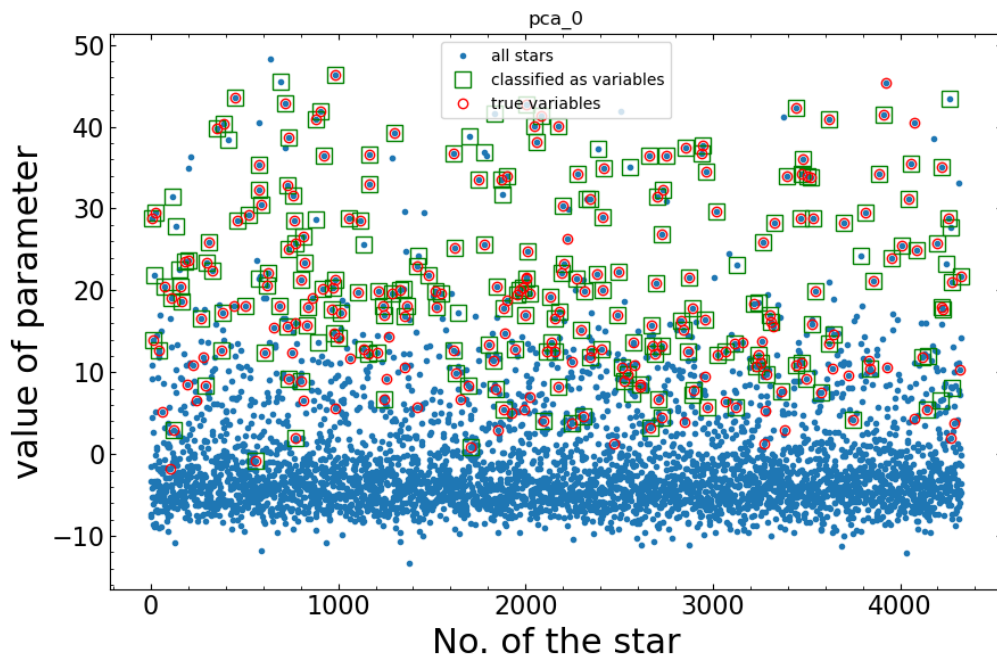


Рисунок 4. Срабатывание методики классификации переменных звезд с использованием искусственных данных (кривых блеска) на примере первой главной компоненты PCA.

Полученная таким образом модель «Random Forest» может быть использована для классификации звезд кандидатов в переменные в реальных наблюдениях. Для этого кривые блеска звезд проходят такую же процедуру селекции и сглаживания, как и искусственные данные, а характеристики кривых блеска уже определяются не через процедуру *extract_relevant_features()*, а с использованием процедуры *extract_features()*, где в качестве одного из входных параметров используется список из параметров, которые использовались при анализе искусственных данных. Это можно сделать, используя процедуру *feature_extraction.settings.from_columns()*. Здесь следует отметить, что из-за различных факторов не все характеристики, которые были определены для искусственных данных успешно определяются на реальных кривых блеска. Поэтому полученные характеристики для реальных кривых блеска необходимо проверять на наличие неопределенных значений и заполнять их либо средним значением, либо наиболее часто встречающимися значениями, либо нулями. Пример срабатывания классификации с применением модели «Random Forest» на реальных данных показан на рисунке 5.

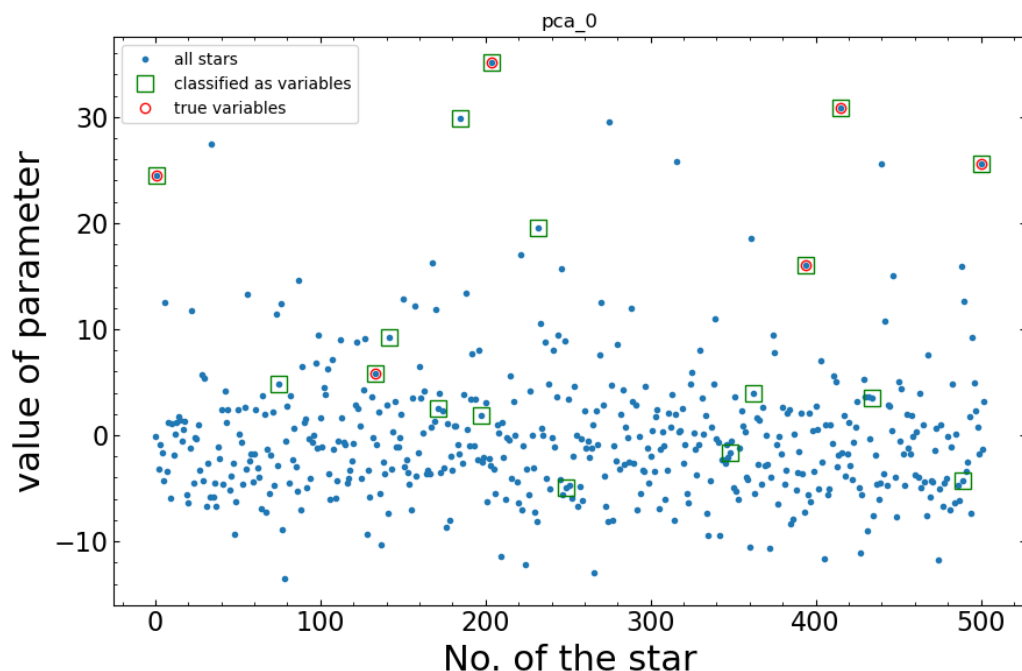


Рисунок 5. Срабатывание методики классификации переменных звезд с использованием реальных данных (кривых блеска) на примере главной компоненты PCA

Заключение

В данной работе предлагается алгоритм классификации звезд по признакам переменности на основе алгоритма «Random Forest» для автоматизации процесса поиска переменных звезд в базе данных фотометрических ПЗС наблюдений, имеющейся в АФИФ, а также для использования методики в будущем, при проведении поисковых и мониторинговых наблюдений на телескопах АФИФ, имеющих большое поле зрения в рамках проекта создания АстроХаба. Ожидается, что в результате таких наблюдений количество кривых блеска, получаемых в одну ночь наблюдений, может быть порядка 10 000.

Для получения хорошего результата критичным является адекватное моделирование искусственных данных с использованием информации о статистике и точности фотометрии, а также характере и уровне шума как можно близким к реальным условиям наблюдений. Большое значение имеет представительность каждого типа переменности и соответствующий диапазон амплитуд и периодов в искусственных данных. При адекватном моделировании ожидается хороший результат применения алгоритма «Random Forest». В частности, на данном этапе точность классификации переменных звезд около 70 %, а общая точность методики порядка 85 %.

В данной работе в качестве инструмента определения характеристик кривых блеска использовался пакет *TSFRESH*, который не является профессиональным для астрономов при работе с кривыми блеска. Возможно также использование характеристик из пакета *FEETS*, однако количество параметров в нем значительно меньше.

В работе (Khalikova и др., 2022) была показана возможность использования метода кластерного анализа на основе статистической информации из кривых блеска

для селекции переменных звезд, который может быть использован как альтернатива или как дополнение к описанному тут методу. Кроме того, применяемое в статье (Khalikova и др., 2022) статистическое представление кривых блеска может быть использовано в качестве входных параметров для алгоритма «Random Forest», или как входные данные для алгоритмов на основе нейронных сетей. Эта работа запланирована нами на ближайшее время.

ЛИТЕРАТУРА

Cabral J.B., Sánchez B., Ramos F., Gurovich S., Granitto P., Vanderplas J. (2018). From FATS to feets: Further improvements to an astronomical feature extraction tool based on machine learning. *Astronomy and Computing*. “Astronomy and Computing”. — 25. — 213–220. DOI: https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/2018A&C....25..213C/doi:10.1016/j.ascom.2018.09.005 (in Eng.)

Christ M., Braun N., Neuffer J., Kempa-Liehr A.W. (2018). Time Series FeatuRe Extraction on basis of Scalable Hypothesis tests (tsfresh -- A Python package). “Neurocomputing”. — 307. — 72–77. DOI: [10.1016/j.neucom.2018.03.067](https://doi.org/10.1016/j.neucom.2018.03.067) (in Eng.)

Christ M., Kempa-Liehr A.W., Feindt M. (2017). Distributed and parallel time series feature extraction for industrial big data applications. — ArXiv e-print 1610.07717, <https://arxiv.org/abs/1610.07717> (in Eng.)

Giles D., Walkowicz L. (2019). Systematic serendipity: a test of unsupervised machine learning as a method for anomaly detection. (2019). “MNRAS”. — 484. — 1. — 834–849. Doi: [10.1093/mnras/sty3461](https://doi.org/10.1093/mnras/sty3461) (in Eng.)

Khalikova A.V., Gaynullina E.R., Serebryanskiy A.V. (2022). Hunting for overlooked eccentric eclipsing binaries from ASAS-3 survey. “New Astronomy”. — 97. — 101875. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.newast.2022.101875> (in Eng.)

Kim Dae-Won, Bailer-Jones C.A.L.A (2016). package for the automated classification of periodic variable stars. (2016). “Astronomy and Astrophysics”. — 587. — A18, Doi: [10.1051/0004-6361/201527188](https://doi.org/10.1051/0004-6361/201527188) (in Eng.)

Shomshekova S., Izmailova I., Umirbayeva A., Omarov C. (2022). A method for digitization of archival astrophotplates of the Fesenkov Astrophysical Institute. *New Astronomy*, 97. — 101881. — November 2022. Doi: <https://doi.org/10.1016/j.newast.2022.101881> (in Eng.)

Naul B., Boom J.S., Pérez F., van der Walt S. (2018). A recurrent neural network for classification of unevenly sampled variable stars, “Nature Astronomy”. — 2. — 151–155. Doi: [10.1038/s41550-017-0321-z](https://doi.org/10.1038/s41550-017-0321-z) (in Eng.)

Nun I., Protopapas P., Sim B., Zhu M., Dave R., Castro N., Pichara K. (2017). FATS: Feature Analysis for Time Series, Astrophysics Source Code Library. — record ascl:1711.017 (in Eng.)

Shomshekova S., Izmailova I., Umirbayeva A., Omarov C. (2022). A method for digitization of archival astrophotplates of the Fesenkov Astrophysical Institute. *New Astronomy*, 97. — 101881. — November 2022. Doi: <https://doi.org/10.1016/j.newast.2022.101881> (in Eng.)

Serebryanskiy A., Serebryakov S., Ergeshev A. (2018). Methodology of pipeline data reduction for astrometry and photometry of a large array of CCD observations. (2018). — “NEWS of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan, Physico-Mathematical Series”. — 3. — 319. — 37–47 (in Eng.)

Soraisam M.D., Saha A., Matheson T., Lee Chien-Hsiu, Narayan G., Vivas A.K., Scheidegger C., Oppermann N., Olszewski E.W., Sinha S., Desantis S.R. (2020). ANTARES Collaboration. (2020). A Classification Algorithm for Time-domain Novelty in Preparation for LSST Alerts. Application to Variable Stars and Transients Detected with DECam in the Galactic Bulge, “The Astrophysical Journal”. — 892. — 2. — 112, Doi: [10.3847/1538-4357/ab7b61](https://doi.org/10.3847/1538-4357/ab7b61) (in Eng.)

Richards J.W., Starr D.L., Butler N.R., Bloom J.S., Brewer J.M., Crellin-Quick A., Higgins J., Kennedy R., Rischard M. (2011). On Machine-learned Classification of Variable Stars with Sparse and Noisy Time-series Data. “*The Astrophysical Journal*”. — Volume” 733. — 10. DOI: [10.1088/0004-637X/733/1/10](https://doi.org/10.1088/0004-637X/733/1/10) (in Eng.)

Pedregosa F., Varoquaux G., Gramfort A., Michel V., Thirion B., Grisel O., Blondel M., Prettenhofer P., Weiss R., Dubourg V., Vanderplas J., Passos A., Cournapeau D., Brucher M., Perrot M., Duchesnay E (2011). Scikit-learn: Machine Learning in Python, *Journal of Machine Learning Research*. — 12. — 85, 2825–2830 (in Eng.)

Webb S., Lochner M., Muthukrishna D., Cooke J., Flynn C., Mahabal A., Goode S., Andreoni I., Pritchard T., Abbott T.M.C. (2020). Unsupervised machine learning for transient discovery in deeper, wider, faster light curves. — “MNRAS”. — 498. — 3. — 3077–3094. Doi: [10.1093/mnras/staa2395](https://doi.org/10.1093/mnras/staa2395) (in Eng.)

CHEMISTRY

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

ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 116–126

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.283>

UDC 541.13

© **B.S. Abzhalov^{1*}, A.B. Bayeshov², A.K. Mamyrbekova¹,
S.A. Dzhumadullayeva¹, M.O. Altynbekova¹, 2024**

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

²D.V. Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: bagdat.abzhalov@ayu.edu.kz

INFLUENCE OF AC FREQUENCY AND DENSITY ON THE ELECTROCHEMICAL BEHAVIOR OF BISMUTH ELECTRODE IN AN ACID MEDIUM

Abzhalov B.S. — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Ecology and Chemistry, Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkistan, Kazakhstan

E-mail: bagdat.abzhalov@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0001-7983-2392>;

Bayeshov A.B. — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of the National Academy of the Republic of Kazakhstan, Head of the Laboratory of Electrochemical technologies of the D.V. Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan

E-mail: bayeshov@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-0745-039X>;

Mamyrbekova A.K. — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Laboratory Disciplines, Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkistan, Kazakhstan

E-mail: aizhan.mamyrbekova@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0003-2798-9755>;

Dzhumadullayeva S.A. — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Ecology and Chemistry, Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkistan, Kazakhstan

E-mail: sveta.jumadullayeva@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0003-2673-2915>;

Altynbekova M.O. — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Ecology and Chemistry, Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, Turkistan, Kazakhstan

E-mail: minash.altynbekova@ayu.edu.kz <https://orcid.org/0000-0002-8856-1990>.

Abstract. There is a significant literature on the use of various forms of transient current for electrochemical machining of non-ferrous and ferrous metals. This interest is due to the fact that alternating current affects the state of the near-electrode space (equalizing pH, removing diffusion restrictions, changing the composition of discharged particles, etc.). This causes nonstationary potential values and changes in the conditions of electrooxidation and electroreduction. It can be used advantageously to obtain the desired product with the required properties. In this work, the electrochemical behavior of bismuth in aqueous solutions

under the influence of alternating current in an acidic environment was studied. The technique used was the electrochemical dissolution of bismuth in an aqueous solution of hydrochloric acid under the influence of a sinusoidal alternating current. The results and subsequent discussion focused on the effect of AC frequency and density on the dissolution current efficiency of the bismuth electrode. It has been shown that an increase in the frequency of the current on the bismuth electrode leads to a decrease in the effective current efficiency of the dissolution of the bismuth electrode from 37.1 % to 26.8 %. It was found that the bismuth electrode dissolves to form Bi (III) ions. As a result of the studies, it was found that with increasing frequency and density of alternating current, the current efficiency decreases. The results of the experiments were processed using mathematical processing. These data were used to derive regression equations describing the dependence of the effective current efficiency on the electrolysis parameters.

Keywords: bismuth, titanium, electrolyte, electrode processes, effective current density, alternating current, electrolysis

© **Б.С. Абжалов¹, А.Б. Бешов², А.К. Мамырбекова¹,
С.А. Жұмаділлаева¹, М.О. Алтынбекова¹, 2024**

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

²Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты, Алматы, Қазақстан.

E-mail: bagdat.abzhalov@ayu.edu.kz

ҚЫШҚЫЛ ОРТАДА ВИСМУТ ЭЛЕКТРОДЫНЫҢ ЭЛЕКТРОХИМИЯЛЫҚ ҚАСИЕТІНЕ АЙНЫМАЛЫ ТОКТЫҢ ЖИЛІГІ МЕН ТЫҒЫЗДЫҒЫНЫҢ ӘСЕРІ

Абжалов Б.С. — химия ғылымдарының кандидаты, Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті Экология және химия кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Түркістан, Қазақстан

E-mail: bagdat.abzhalov@ayu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0001-7983-2392>;

Бешов А.Б. — химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академигі, Д.В. Сокольский атындағы жанармай, катализ және электрохимия институты Электрохимиялық технология лабораториясының меңгерушісі, Алматы, Қазақстан

E-mail: bayeshov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0745-039X>;

Мамырбекова А.К. — химия ғылымдарының кандидаты, Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті Зертханалық пәндер кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Түркістан, Қазақстан

E-mail: aizhan.mamyrbekova@ayu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2798-9755>;

Жұмадуллаева С.А. — химия ғылымдарының кандидаты, Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті Экология және химия кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Түркістан, Қазақстан

E-mail: sveta.jumadullayeva@ayu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-2673-2915>;

Алтынбекова М.О. — химия ғылымдарының кандидаты, Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті Экология және химия кафедрасының қауымдастырылған профессоры,

Түркістан, Қазақстан

E-mail: minash.altynbekova@ayu.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0002-8856-1990>.

Аннотация. Түсті және қара металдарды электрохимиялық өңдеу үшін әртүрлі формадағы стационарлы емес токтарды қолдану бойынша айтарлықтай әдебиеттер бар. Бұл қызығушылық айнымалы токтың электродтық кеңістіктің күйіне әсер етуіне байланысты (рН теңестіру, диффузиялық шектеулерді жою, разрядталған бөлшектердің құрамын өзгерту және т.б.). Бұл стационарлық емес потенциал мәндерін және электрліу тотығу және электрлік тотықсыздану жағдайларының өзгеруін тудырады. Оны қажетті қасиеттері бар қажетті өнімді алу үшін тиімді пайдалануға болады. Бұл жұмыста қышқыл ортадағы айнымалы ток әсерінен сулы ерітінділердегі висмуттың электрохимиялық қасиеттері зерттелді. Жүргізілген жұмыста синусоидалы айнымалы токтың әсерінен висмутты тұз қышқылының сулы ерітіндісінде электрохимиялық еріту қарастырылды. Нәтижелер мен кейінгі талқылаулар висмут электродының еруінің тиімді ток тығыздығына айнымалы ток жиілігі мен ток тығыздығының әсерін қарастыруға арналды. Висмут электродындағы ток жиілігінің жоғарылауы висмут электродының еруінің тиімді ток тиімділігінің 37,1 %-дан 26,8 %-ға дейін төмендеуіне әкелетіні көрсетілген. Висмут электродының V_i (III) иондарын түзе отырып ерітіндігі анықталды. Зерттеулер нәтижесінде айнымалы токтың жиілігі мен ток тығыздығы артқан сайын тиімді ток бойынша шығымының төмендейтіні анықталды. Тәжірибе нәтижелері математикалық есептеулер арқылы өңделді. Бұл деректер тиімді ток шығымының электролиз параметрлеріне тәуелділігін сипаттайтын регрессия теңдеулерін шығару үшін пайдаланылды.

Түйін сөздер: висмут, титан, электролит, электродтық процестер, тиімді ток тығыздығы, айнымалы ток, электролиз

© Б.С. Абжалов¹, А.Б. Баешов², А.К. Мамырбекова¹,
С.А. Джумадуллаева¹, М.О. Алтынбекова¹, 2024

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

²Институт топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан.

E-mail: bagdat.abzhalov@ayu.edu.kz

ВЛИЯНИЕ ЧАСТОТЫ И ПЛОТНОСТИ ПЕРЕМЕННОГО ТОКА НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВИСМУТОВОГО ЭЛЕКТРОДА В КИСЛОЙ СРЕДЕ

Абжалов Б.С. — кандидат химических наук, ассоциированный профессор кафедры «Экология и химия» Международного казахско-турецкого университета имени Ходжи Ахмеда Ясави, Туркестан, Казахстан

E-mail: bagdat.abzhalov@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0001-7983-2392>;

Баешов А.Б. — доктор химических наук, профессор, академик НАН РК, Заведующий лабораторией электрохимической технологии института топлива, катализа и электрохимии имени Д.В. Сокольского, Алматы, Казахстан

E-mail: bayeshov@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0003-0745-039X>;

Мамырбекова А.К. — кандидат химических наук, ассоциированный профессор кафедры Лабораторных дисциплин Международного казахско-турецкого университета имени Ходжи Ахмеда Ясави, Туркестан, Казахстан

E-mail: aizhan.mamyrbekova@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0003-2798-9755>;

Джумадуллаева С.А. — кандидат химических наук, ассоциированный профессор кафедры «Экология и химия» Международного казахско-турецкого университета имени Ходжи Ахмеда Ясави, Туркестан, Казахстан

E-mail: sveta.jumadullayeva@ayu.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0003-2673-2915>;

Алтынбекова М.О. — кандидат химических наук, ассоциированный профессор кафедры «Экология и химия» Международного казахско-турецкого университета имени Ходжи Ахмеда Ясави, Туркестан, Казахстан

E-mail: minash.altynbekova@ayu.edu.kz <https://orcid.org/0000-0002-8856-1990>.

Аннотация. Существует значительная литература по использованию различных форм нестационарного тока для электрохимической обработки цветных и черных металлов. Такой интерес обусловлен тем, что переменный ток влияет на состояние приэлектродного пространства (выравнивание pH, снятие диффузионного ограничения, изменение состава разряжающихся частиц и т.д.). Это вызывает нестационарность значения потенциала и изменение условий электроокисления и электровосстановления. Его можно выгодно использовать для получения желаемого продукта с необходимыми свойствами. В настоящей работе было исследовано электрохимического поведения висмута в водных растворах под действием переменного тока в кислой среде. Используемая методика заключалась в электрохимическом растворении висмута в водном растворе соляной кислоты под действием синусоидального переменного тока. Результаты и последующее обсуждение были сосредоточены на влиянии частоты и плотности переменного тока на выход по току растворения висмутового электрода. Показано, что увеличение частоты тока на висмутовом электроде приводит к снижению эффективного выхода по току растворения висмутового электрода с 37,1 % до 26,8 %. Установлено, что висмутовый электрод растворяется с образованием ионов $\text{Bi}(\text{III})$. В результате проведенных исследований установлено, что с увеличением частоты и плотности переменного тока выход по току снижается. С помощью математической обработки обработаны результаты проведенных экспериментов. Эти данные были использованы для вывода уравнений регрессии, описывающих зависимость эффективного выхода по току от параметров электролиза.

Ключевые слова: висмут, титан, электролит, электродные процессы, эффективная плотность тока, переменный ток, электролиз

Introduction

Bismuth is a metal that is widely used in a number of areas of modern production, including metallurgy, pharmacology, electrical engineering, and

others. In order to produce new materials, including non-ferrous metals and bismuth-based alloys, it is necessary to significantly improve the efficiency of the production process and metallurgical processes, to utilise raw materials in an integrated and full manner, and to develop new technological processes that are both environmentally friendly and effective (Marcus & Oudar, 2002). The successful completion of these tasks is contingent upon a comprehensive examination of the theoretical underpinnings of the physicochemical properties of metals and their combinations, the implementation of fundamental research, and the development of highly effective technologies that leverage contemporary advancements in physics and chemistry (Barakat et al., 1983).

Until recently, reagent methods have been employed in the processing of bismuth and its compounds, as well as bismuth ingots, which are utilized in a multitude of technological fields and the extraction of valuable components from them (Abzhalov & Abdivaliev, 2017). The use of electrochemical methods in solving these technological problems, the development of new effective methods for the processing of bismuth and its compounds and their production in medicine and veterinary medicine can be promising (Abzhalov, Tuleshova & Baeshov, 2022). The use of electrochemical environmentally friendly methods allows you to create waste-free, low-waste technologies, reduce reagent consumption and simplify the technological scheme (Abzhalov et al., 2016).

In recent years, there has been a significant increase in the study of the electrochemical properties of metals and their compounds in the non-stationary mode. This is due to the fact that the results of the theory and practice of electrolysis in non-stationary mode can facilitate an in-depth study of the mechanism of electrochemical processes in the system, the implementation of new technological methods and, in many cases, the elimination of passivation of the electrode and the activation of the anode melting process (Kostin, Kublanovskii & Zabludovskii, 1989).

In this context, the study of the electrochemical properties of bismuth in aqueous solutions in a non-stationary mode of electrolysis is of great theoretical and practical importance. Based on the research, there is an opportunity to develop fundamentally new methods for the synthesis of essential bismuth compounds and the separation of bismuth from used alloys (Shavlov & Ryabtseva, 2007).

Materials and methods

In the case of using alternating current for the electrosynthesis of substances, when scaling the process, it is necessary to take into account the peculiarities of the passage of alternating current through the electrolyte solution and between the electrodes. It is mandatory to preserve the experimentally found value of current density and interelectrode distance.

During the electrolysis with alternating current was used a metal bismuth electrode and a small area titanium wire, designed in the form of a rectangular plate with a working surface of 0.001 m².

The bismuth and titanium electrodes, except for the work surface, were covered with organic glass to make them easier to work with during the experiment. This allows the electrodes to be completely immersed in the electrolyte. The electrodes were placed at a distance of 20 mm from each other (Cho et al., 2023).

The polarization of the electrodes with alternating current was performed using a German Leybold sinusoidal alternating current source (Figure 1).

A potential barrier appears at the interface between the metal and the semiconductor or two semiconductors. The contact potential difference is equal to the difference in the work output of the two contacting materials. In accordance with the condition of thermodynamic equilibrium, the process of charge carrier exchange commences immediately upon contact between the metal and the semiconductor, and continues until the electrochemical potential levels have been levelled. The resulting double electric layer prevents further flow of charge carriers (Chuai et al., 2022). In the metal, the thickness of this layer is very small in comparison with the field in the semiconductor.

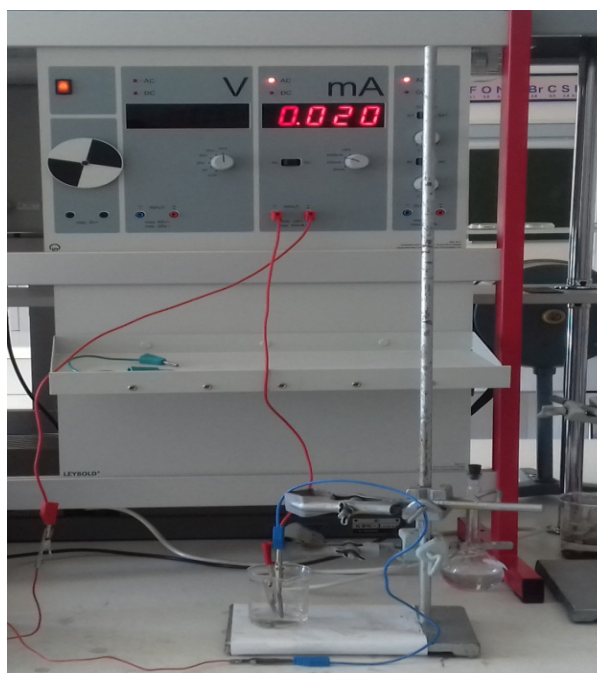


Figure 1 - LEYBOLD alternating current power source: (6644071 Demonstrations of electrochemistry)

The electrochemical behaviour of bismuth in a solution of hydrochloric acid was initially investigated under the influence of a symmetric alternating current of 50 Hz (Sandnes et al., 2007). These experiments were conducted in a glass electrochemical cell, with the electrode spaces remaining unsegregated. The duration of the main experiments was 30 minutes. A bismuth plate with a working

surface area of $12 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$ and a titanium wire were employed as the electrodes. The current output (CO) of metal dissolution was determined from the weight loss of the electrode, with the calculation for the anode half-cycle of the alternating current (Majidzade & Aliyev, 2021). The effect of such parameters as the current density on a titanium electrode on the current yield of bismuth dissolution was investigated (Javadova et al., 2023).

Results and discussion

The investigation of the electrochemical dissolution of a bismuth electrode under alternating current polarization in a pair with a titanium electrode yielded the results depicted in Figures 2 and 3.

The results are explained by the characteristics of the rectifying contact of titanium dioxide-electrolyte, as well as high dielectric permittivity of titanium dioxide (Barakat et al., 1983).

Titanium dioxide is an n-type indirect-gap semiconductor with a very wide band gap, which is the reason for the long lifetime of minority carriers. The equation describing the transient process of resorption of minority carriers is as follows:

$$\frac{dQ}{dt} = -i(t) - \frac{Q}{\tau} \quad (1)$$

It is well established that the electrical conductivity of a material is directly proportional to the concentration of current carriers.

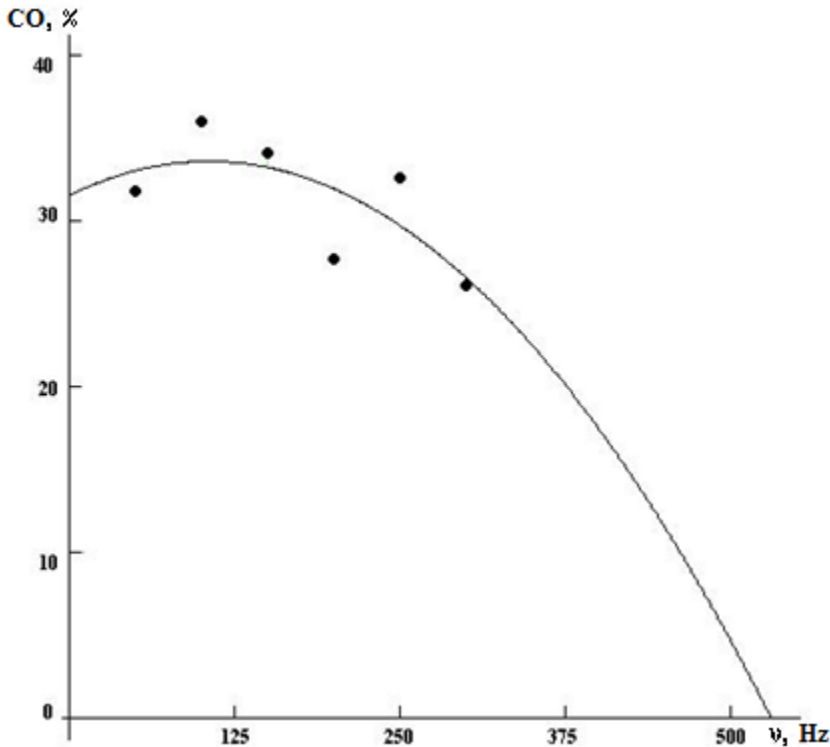


Figure 2 Illustrates the dependence of the CO on the frequency of the applied voltage:
 $J_{Bi} = 100 \text{ A/m}^2$, $J_{Ti} = 44 \text{ kA/m}^2$, $t = 25 \text{ }^\circ\text{C}$, $C = 1 \text{ n}$.

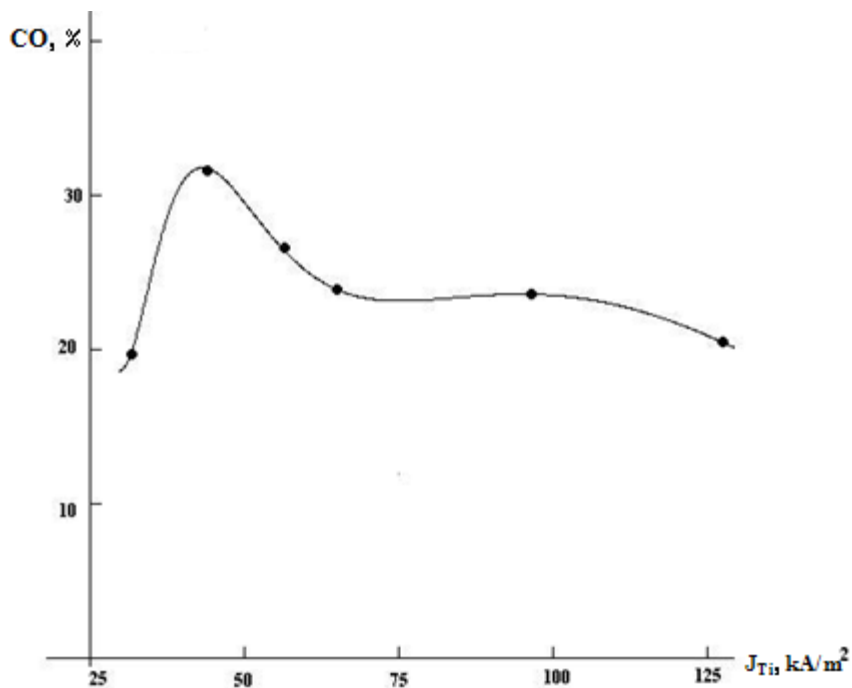


Figure 3 - Dependence of CO on the effective current density on titanium:

$J_{Bi} = 100 \text{ A/m}^2$, $C = 1 \text{ n}$, $t = 25 \text{ }^\circ\text{C}$, $\nu = 50 \text{ Hz}$.

$$\sigma = kQ \quad (2)$$

Thus, taking into account Ohm's law for the chain segment,

$$i(t) = \sigma \cdot U(t) \quad (3)$$

we find the connection between the concentration of charge carriers, voltage and current

$$i(t) = kQU(t) \quad (4)$$

After substituting (4) into (1), we obtain

$$\frac{dQ}{dt} = -kQU(t) - \frac{Q}{\tau} = -Q \left(kU(t) + \frac{1}{\tau} \right) \quad (5)$$

From the obtained expression, it can be seen that the time constant of the transient process is dependent on the applied electric voltage. The applied electric stress can be directly proportional to the density of the effective current on the titanium electrode (Yang & Hu, 2005). Assuming that the current density is sufficiently large,

$$\tau' = \delta / J \quad (6)$$

A theoretical derivation of the current-current dependences on the current density on the titanium electrode and the frequency was conducted using a rough model of the sharp cut, as illustrated in Figure 4.

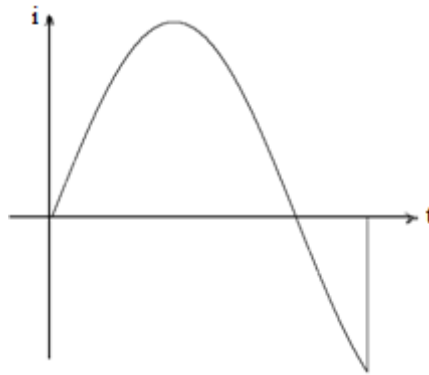


Figure 4 - To the derivation of formula (8).

The mathematical model is a response function that connects the optimization parameter characterizing the results of the experiment with the variable parameters that are varied during the experiments. Assuming the shape of the current as a sinusoid with a cut, we easily find the average current:

$$\int_{\tau'}^{\tau'/2} \sin \omega t \, dt = -\frac{1}{\omega} (\cos \pi - \cos \omega \tau') \quad (7)$$

$$1 + \cos \omega \tau' = 2 \cos^2 \left(\frac{\omega \tau'}{2} \right) \quad (8)$$

Intuitively chosen formula

$$CO = C \cdot \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 + \sigma j^2}} \right) \quad (9)$$

where σ and C are constants.

In addition to the resorption time of minority charge carriers, the inertia of

the rectifying transition is due to the high dielectric constant of titanium dioxide, which is influenced by the shunting capacitance of the capacitor formed (Motoyama, Fukunaka & Kikuchi, 2005).

If we take into account only the shunt capacitance, then the frequency dependence is described by the formula

$$CO = \frac{K}{\sqrt{1 + (\omega\tau)^2}} \quad (10)$$

Conclusion

It was thus demonstrated that the current efficiency is dependent on the frequency and density of the alternating current, as well as the effective output of the dissolution current of the bismuth electrode. The results of the conducted studies indicated that an increase in the frequency of the variable on the bismuth electrode results in a decrease in the current output, from 37.1 % to 26.8 %. It was also established that the bismuth electrode dissolves to form Bi (III) ions (Agapescu et al., 2013). The results of the experiments, which were carried out with the help of mathematical processing, were used to derive regression equations that describe the dependence of the effective current efficiency on the parameters of electrolysis.

REFERENCES

- Abzhalov B.S. & Abdivaliev R.T. (2017). Research of dissolution of bismuth in water solutions of hydrochloric acid at polarization by an industrial alternating current. — *Bulletin of Karaganda University. Series: Chemistry*. (2). — 52–58.
- Abzhalov B.S., Tuleshova, E.Z., & Baeshov, A.B. (2022). Method for Producing Bismuth Oxychloride. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. — 56(6). — 978–981. <https://doi.org/10.1134/S004057952206001X>
- Abzhalov, B.S., Baeshov A.B., Jumadullayeva S.A., Altinbekova M.O., Abdivaliev R.T. & Abduvaliyeva U.A. (2016). Dissolution of Bismuth in water solutions of nitric acid at polarization by asymmetrical current. — *News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Series Chemistry and Technology*. — 2(416). — 109–113.
- Agapescu C., Cojocaru A., Cotarta A. & Visan T. (2013). Electrodeposition of bismuth, tellurium, and bismuth telluride thin films from choline chloride–oxalic acid ionic liquid. — *Journal of Applied Electrochemistry*. — 43. — 309–321.
- Barakat Y., David D., Beranger G. & Coddet C. (1983). Composition and Conduction Properties of Titanium Oxides Electroformed in Different Electrolytes. — *Physical Chemistry of the Solid State: Applications to Metals and Their Compounds*. — 421–428.
- Cho H.D., Lee J., Kim D.Y., Chung S.Y. & Lee J.K. (2023). Enhanced Photoresponse of High Crystalline Bi₂Se₃ Thin-Films Using Patterned Substrates. — *ACS Applied Materials & Interfaces*. — 15(18). — 22274–22281.
- Chuai Y.H., Zhu C., Yue D. & Bai Y. (2022). Epitaxial growth of Bi₂Se₃ infrared transparent conductive film and heterojunction diode by molecular beam epitaxy. — *Frontiers in Chemistry*. — 10. — 847972.
- Kostin N.A., Kublanovskii V.S. & Zabludovskii V.A. (1989). Impul'snyi elektroliz. *Pulse Electrolysis*. — *Kiev: Naukova Dumka*.
- Marcus P. & Oudar J. (Eds.). (2002). *Corrosion mechanisms in theory and practice*. — Pp. 243–286. — New York: Marcel Dekker.

- Majidzade V.A. & Aliyev A.S. (2021). Electrodeposition of $\text{Ni}_3\text{Bi}_2\text{Se}_2$ thin semiconductor films. — *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*. — 40(4). — 1023–1029.
- Motoyama M., Fukunaka Y. & Kikuchi S. (2005). Bi electrodeposition under magnetic field. — *Electrochimica acta*. — 51(5). — 897–905.
- Javadova S.P., Majidzade V.A., Jafarova S.F., Aliyev T.A., Aliyev A.S. & Tagiyev D.B. (2023). Electrochemical behavior of Bismuth ions in citrate solutions. — *Azerbaijan Chemical Journal*. — (4). — 5–12.
- Shavlov A.V. & Ryabtseva A.A. (2007). The mechanism of metal corrosion acceleration in ice caused by structural transformations and crystallization of water. — *Russian Journal of Physical Chemistry A*. — 81(7). — 1035–1040.
- Sandnes E., Williams, M.E., Bertocci, U., Vaudin, M.D., & Stafford, G.R. (2007). Electrodeposition of bismuth from nitric acid electrolyte. *Electrochimica acta*. — 52(21). — 6221–6228.
- Yang M. & Hu Z. (2005). Electrodeposition of bismuth onto glassy carbon electrodes from nitrate solutions. — *Journal of electroanalytical chemistry*. — 583(1). — 46–55.

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

ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 127–139

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.284>

ӨОЖ 665.7.038+665.75

FTAXA 61.51.35+61.51.29

© **Y.G. Gilazhov, D.K. Kulbatyrov*, M.D. Urazgalieva, K.R. Maksot, 2024**

Non-profit JSC «Atyrau Oil and Gas University named after Safi Utebayev», Atyrau,
Kazakhstan.

E-mail: dkkd@mail.ru

EFFICIENCY OF OXYGENATES ON INCREASE OF OCTANE NUMBER OF STRAIGHT-RUN GASOLINE

Gilazhov Yessengali — Doctor of Technical Sciences, Professor of the Institute of Petrochemical Engineering and Ecology, Non-profit JSC «Atyrau Oil and Gas University named after Safi Utebayev», Atyrau, Kazakhstan

E-mail: gilazhov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3046-4845>;

Kulbatyrov Dauren — Doctoral student at the Institute of Petrochemical Engineering and Ecology, Non-profit JSC «Atyrau Oil and Gas University named after Safi Utebayev», Atyrau, Kazakhstan

E-mail: dkkd@mail.ru. <https://orcid.org/0000-0002-9463-149X>;

Urazgalieva Madina — Master's degree, leading researcher of the Institute of Petrochemical Engineering and Ecology, Non-profit JSC «Atyrau Oil and Gas University named after Safi Utebayev», Atyrau, Kazakhstan

E-mail: madina-uraz@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0026-3137>;

Maksot Kamila — Master's student of the Institute of Petrochemical Engineering and Ecology, Non-profit JSC «Atyrau Oil and Gas University named after Safi Utebayev», Atyrau, Kazakhstan

E-mail: kamilla.maksot@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-7213-2387>.

Abstract. The active human impact on nature, particularly the use of fossil fuels, has resulted in significant anthropogenic emissions of greenhouse gases. The increasing demand for and use of oil and gas products is causing various serious environmental problems worldwide. Exhaust gases from internal combustion engines account for the majority of chemical pollution in the environment. The global trend in improving the environmental and operational properties of automotive gasoline is the use of multifunctional additives, mainly oxygenates — oxygen-containing substances (alcohols, ketones, esters, etc.). At the same time, the antidetonation properties of tertiary acetylene alcohols are hardly studied. An interesting fact is that tertiary acetylene alcohol, like all known antidetonators, in the composition of its molecule tertiary alkyl radicals, hydroxyl radicals and acetylene unsaturated group, which is able to break the detonation front. Research and development of new oxygenated additives for gasoline based on tertiary acetylene alcohols is an important and urgent task. In the present work, the properties of a new oxygenate - dimethyl ethynyl carbinol (DMEC), as a gasoline octane increasing additive are investigated. Comparative effectiveness of oxygenates - methyl tert-butyl ether (MTBE) and DMEC on increasing the octane number of straight-run gasoline is shown. The study of influence of oxygenates as MTBE and DMEC on increase of octane number of straight-run gasoline showed that increase of octane number of gasoline at addition of DMEC and binary additive is higher than at addition of MTBE. According to the results

of the research, tertiary acetylene alcohol - DMEC can be proposed as an oxygenate for automotive gasoline. The use of DMEC allows to expand the resources of high-octane components, reduce the toxicity of gasoline and exhaust gases, increase the production of high-quality commercial gasoline for automotive engines.

Keywords: gasoline, oxygenate, octane number, dimethylethynylcarbinol, methyl tert-butyl ether, detonation

«This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan grant number AP148044/0222».

© Е.Г. Гилажов, Д.К. Кулбатыров*, М.Д. Уразғалиева, К.Р. Мақсот, 2024
«С.Өтебаев атындағы Атырау мұнай және газ университеті» КЕАҚ, Атырау,
Қазақстан.

E-mail: dkkd@mail.ru

ТІКЕЛЕЙ АЙДАУДАН АЛЫНҒАН БЕНЗИННІҢ ОКТАН САНЫН АРТТЫРАТЫН ОКСИГЕНАТТАРДЫҢ ТИІМДІЛІГІ

Гилажов Есенғали Гилажұлы — техника ғылымдарының докторы, Мұнайхимия инженериясы және экология институтының профессоры, «С. Өтебаев атындағы Атырау мұнай және газ университеті» КЕАҚ, Атырау, Қазақстан

E-mail: gilazhov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3046-4845>;

Кулбатыров Даурен Қамысбайұлы — Мұнайхимия инженериясы және экология институтының докторанты, «С. Өтебаев атындағы Атырау мұнай және газ университеті» КЕАҚ, Атырау, Қазақстан

E-mail: dkkd@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9463-149X>;

Уразғалиева Мадина Демегенқызы — магистр, Мұнайхимия инженериясы және экология институтының жетекші ғылыми қызметкері, «С. Өтебаев атындағы Атырау мұнай және газ университеті» КЕАҚ, Атырау, Қазақстан

E-mail: madina-uraz@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0026-3137>;

Мақсот Камила Русланқызы — Мұнайхимия инженериясы және экология институтының магистранты, «С. Өтебаев атындағы Атырау мұнай және газ университеті» КЕАҚ, Атырау, Қазақстан

E-mail: kamilla.maksot@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-7213-2387>.

Аннотация. Адамның табиғатқа жасаған белсенді әрекетінен, атап айтқанда қазба отындарын пайдаланудан парниктік әсері бар зиянды газдардың айтарлықтай антропогендік шығарындыларына әкелді. Мұнай-газ өнімдеріне сұраныстың артуы және оларды пайдалану әлемдегі әртүрлі экологиялық проблемаларды тудырды. Қоршаған ортаның химиялық ластануының негізгі бөлігі ішкі жану қозғалтқыштарын пайдаланудан шыққан газдар болып табылады. Автомобиль бензиндерінің экологиялық және пайдалану қасиеттерін жақсартудағы әлемдік үрдіс көпфункционалды қоспаларды, негізінен оксигенаттарды — құрамында оттегі бар заттарды (спирттер, кетондар, эфирлер және т.б.) пайдалану болып табылады. Сонымен қатар, үшіншілік ацетилен спирттерінің детонацияға қарсы қасиеттері тіпті дерлік зерттелмеген. Бір қызығы, үшіншілік ацетилен спиртінде, оның молекуласының құрамында барлық белгілі антидетонаторлар сияқты үшіншілік алкил радикалдары, гидроксил радикалдары, қанықпаған ацетиленді топтар детонация фронтын бұзуға қабілетті. Үшіншілік ацетилен спирттері негізінде құрамында оттегі бар жаңа бензин қоспаларын зерттеу және әзірлеу маңызды және өзекті міндет болып табылады. Бұл жұмыста жаңа оксигенат — диметилэтинилкарбинолдың (ДМЭК) қасиеттері бензиннің октан санын арттыратын қоспа ретінде зерттелген. Тікелей

айдаудан алынған бензиннің октан санын арттыру үшін оксигенаттардың — метил-терт-бутил эфирінің (МТБЭ) және ДМЭК салыстырмалы тиімділігі көрсетілген. МТБЭ және ДМЭК сияқты оксигенаттардың тікелей айдаудан алынған бензиннің октан санының жоғарылауына әсерін зерттеу ДМЭК және бинарлық қоспаларды қосқан кезде бензиннің октан санының жоғарылауы МТБЭ қосқанға қарағанда жоғары екенін көрсетті. Зерттеу нәтижелері бойынша, үшіншілік ацетилен спирті — ДМЭК-ті, автомобиль бензиндеріне арналған оттекті қоспа ретінде ұсынуға болады. ДМЭК-ті қолдану жоғары октанды компоненттердің ресурстарын кеңейтуге, бензиндер мен пайдаланудан шығатын газдардың уыттылығын төмендетуге, автомобиль қозғалтқыштары үшін жоғары сапалы тауарлық бензин шығаруды арттыруға мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: бензин, оксигенат, октан саны, диметилэтинилкарбинол, метил-трет-бутиловый эфирі, детонация

«Осы зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті қаржыландырады грант No AP148044/0222».

© **Е.Г. Гиладжов, Д.К. Кулбатыров*, М.Д. Уразгалиева, К.Р. Максот**, 2024

НАО «Атырауский университет нефти и газа имени С. Утебаева», Атырау, Казахстан.

E-mail: dkkd@mail.ru

ЭФФЕКТИВНОСТИ ОКСИГЕНАТОВ НА ПОВЫШЕНИЕ ОКТАНОВОГО ЧИСЛА ПРЯМОГОННОГО БЕНЗИНА

Гиладжов Есенгали Гиладжович — доктор технических наук, профессор Института нефтехимической инженерии и экологии, НАО «Атырауский университет нефти и газа им. С. Утебаева», Атырау, Казахстан

E-mail: gilazhov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3046-4845>;

Кулбатыров Даурен Камысбаевич — докторант Института нефтехимической инженерии и экологии, НАО «Атырауский университет нефти и газа им. С. Утебаева», Атырау, Казахстан;

E-mail: dkkd@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9463-149X>;

Уразгалиева Мадина Демегеновна — магистр, ведущий научный сотрудник Института нефтехимической инженерии и экологии, НАО «Атырауский университет нефти и газа им. С. Утебаева», Атырау, Казахстан

E-mail: madina-uraz@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0026-3137>;

Максот Камила Русланкызы — магистрант Института нефтехимической инженерии и экологии, НАО «Атырауский университет нефти и газа им. С. Утебаева», Атырау, Казахстан

E-mail: kamilla.maksot@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-7213-2387>.

Аннотация. Активные воздействия человека на природу, в частности использование ископаемого топлива, привели к существенным антропогенным выбросам вредных газов с парниковым эффектом. *Возрастание спроса на нефтегазовые продукты и их использование вызывает различные серьезные экологические проблемы в мире. Основную часть химического загрязнения окружающей среды составляют выхлопные газы двигателей внутреннего сгорания.* Мировая тенденция в улучшении экологических и эксплуатационных свойств автомобильных бензинов является использование многофункциональных присадок, в основном оксигенатов — кислородсодержащих веществ (спиртов, кетонов, эфиров и др.). В то же время почти не изучены антидетонационные

свойства третичных ацетиленовых спиртов. Интересным фактом является то, что третичный ацетиленовый спирт, как все известные антидетонаторы, в составе своей молекулы имеет третичные алкильные радикалы, гидроксильные радикалы и ацетиленовую непредельную группу, которая способна разрывать фронт детонации. Исследование и разработка новых кислородсодержащих присадок к бензинам на основе третичных ацетиленовых спиртов, является важной и актуальной задачей. В настоящей работе исследованы свойства нового оксигената – диметилэтинилкарбинола (ДМЭК), как добавка, повышающая октановые числа бензина. Показана сравнительная эффективность оксигенатов — метил-трет-бутилового эфира (МТБЭ) и ДМЭК на повышение октанового числа прямогонного бензина. *Исследование влияния оксигенатов, как МТБЭ и ДМЭК на повышение октанового числа прямогонного бензина показали, что повышение октанового числа бензина при добавлении ДМЭК и бинарной присадки выше, чем при добавлении МТБЭ. По результатам исследований третичного ацетиленового спирта — ДМЭК, можно предложить, как кислородсодержащую добавку для автомобильных бензинов. Применение ДМЭК позволяет расширить ресурсы высокооктановых компонентов, снизить токсичность бензинов и отработанных газов, увеличить выпуск высококачественного товарного бензина для автомобильных двигателей.*

Ключевые слова: бензин, оксигенат, октановое число, диметилэтинилкарбинол, метил-трет-бутиловый эфир, детонация

«Настоящее исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан грант No AP AP148044/0222»

Кіріспе

Адамның табиғатқа белсенді әрекетінен, атап айтқанда қазба отындарды пайдаланудан антропогендік парниктік әсері бар зиянды газдардың айтарлықтай шығарындыларына әкелді. Парниктік эффект тудыратын осындай антропогендік газдардың шығарындылары атмосфераның химиялық құрамының өзгеруіне әкеліп соқтырды, нәтижесінде төменгі газ қабатын жабатын «атмосфералық көрпеге» ұқсас «парниктік эффект» пайда болды. Қазіргі уақыттағы қолданылатын қозғалтқыштар отыны сапасына қойылатын талаптардың қатаюына қарамастан, бензин жанған кезде пайда болған зиянды газдар, әлі де басты экологиялық проблема болып табылады.

Автомобиль компаниялары мен үкіметтер автомобильдердің зиянды шығарындыларының мөлшеріне шектеу қоюға тырысқанына қарамастан, бүкіл әлемде автомобиль көлігінен қауіпті шығарындылар үнемі өсіп келеді. Теориялық тұрғыдан алғанда, автомобиль қозғалтқыштарының тиімділігін арттыру жоспарлары осы саладағы жаңадан ашылған жаңалықтармен қатар жүзеге асырылуы керек: бүгінде автомобиль шығарындылары 30 жыл бұрынғы автомобиль шығарындыларына қарағанда шамамен 20 есе таза, ал әрбір көлік құралына отын шығыны шамамен 14 % - ға азайды. Дегенмен, бүгінгі күні көліктердің саны бірнеше есе өсті және әрбір көлік 10 жыл бұрынғыға қарағанда шамамен 21 % - ға көп жолды жүріп өтеді, яғни ашылған ашылған жаңалықтар ластану мәселелерін шешпей отыр. Автокөлік шығарындылары халықтың денсаулығына ғана емес, сонымен қатар қалалардың экологиясына және жалпы биосфераға теріс әсер ететін қауіпті заттардың тұрақты шығарындыларын қамтиды. Дамыған елдердегі (Lan et

al., 2022; Ershov et al., 2021; Sun et al., 2022; Beig et al., 2021) жалпы көзқарас энергияны үнемдеуге, мотор отынын пайдалануға, қоршаған ортаны қорғауға, ұтқырлық жүйелеріне, экологиялық таза энергетикалық заттарды, сондай-ақ мотор отындарын пайдалануға бағытталған. Жоғары жылу өнімділігі бар бензин қозғалтқыштарын жақсарту және пайдаланылған газдардың аз шығарылуы негізгі шешуші қозғаушы күштер болып саналады.

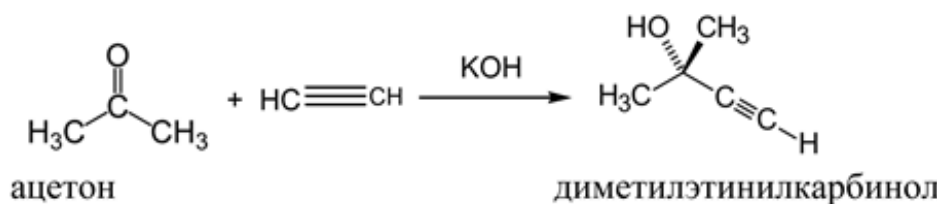
Автомобиль бензиндерінің экологиялық және пайдалану қасиеттерін жақсартудың негізгі әлемдік үрдісі көпфункционалды қоспаларды, негізінен оксигенаттарды пайдалану болып табылады. Бүгінгі таңда барлық дамыған елдерде оксигенаттар металлорганикалық антидетонаторлар мен бензиндердің жоғары октанды компоненттеріне негізгі балама ретінде қарастырылады. Отын құрамында оттегінің болуы зиянды шығарындылар - көміртегі тотығын 30 % - ға, ал жанбаған көмірсутектерді 15 % - ға төмендетуге мүмкіндік береді. Отынның детонацияға қарсы қасиеттерін арттыру үшін қолданылатын оксигенаттардың ішінде спирттер, қарапайым және күрделі эфирлер, сондай-ақ ацеталдар ең көп таралған. Детонацияға қарсы қасиеттерін арттыру мақсатында бензиндерге мұнай фракцияларын өндеудің қайталама әдістерін (каталитикалық крекинг, изомерлеу, алкилдеу) қолдану арқылы алынған компоненттер (Максимов және т.б., 2015; Опарина және т.б., 2018) қосылады немесе отынға арнайы жоғары октанды қоспалар енгізіледі.

Бүгінгі күнге дейін үшіншілік ацетилен спирттерінің детонацияға қарсы қасиеттері зерттелмеді. Құрамында оттегі бар үшіншілік ацетилен спирттері негізінде жаңа бензин қоспаларын зерттеу және әзірлеу өзекті міндет болып табылады.

Бұл жұмыстың мақсаты оксигенаттардың — метил-tert-бутил эфирінің (МТБЭ) және диметилэтинилкарбинолдың (ДМЭК) тікелей айдаудан алынған бензиннің октан санын арттыруға әсерін зерттеу болып табылады.

Зерттеу материалдары мен әдістері

ДМЭК алифатты ацетилен спирті Фаворский реакциясы жағдайында ацетонды («ЭКОС-1» АҚ өндірген МЕМСТ 2603–79, а.ү.т.) және ацетиленді (МЕМСТ 5457–75 бойынша өнеркәсіптік баллоннан алынған) конденсациялау әдісімен алынды (1-сурет).



Сурет 1. Диметилэтинилкарбинол алу реакциясының сызбасы

Реакция тетрагидрофуран еріткішінде ұнтақ калий гидроксиді қатысында қысыммен реакторда жүзеге асырылды.

ДМЭК синтезі үшін бастапқы заттарға «ЭКОС-1» АҚ өндірген ТШ 2633-012-44493179-98 ацетонды және «Сода-хлорат» ЖШҚ өндірген МЕМСТ 9285–78

калий гидроксидін қолдандық. Синтезделген ДМЭК-тің физикалық-химиялық қасиеттері әдеби деректерге сәйкес келеді (Щелкунов және т.б., 1975; Academic dictionaries and encyclopedias, 2024). Құрамында 99,9 % негізгі зат бар МТБЭ оксигенатын «Компонент-реактив» өндірген. Зерттеу үшін «Атырау мұнай өңдеу зауыты» ЖШС өндіретін тікелей айдаудан алынған бензин (ТАБ) пайдаланылды. Ұсынылған қоспалары бар бензин композицияларының октандық санын анықтау бензиннің детонациялық беріктігін өлшегіште экспресс-әдіспен SHATOX SX-100K октанометрінде («SHATOX» ҰЕҰ өндіруші фирмасы, Ресей Ғылым академиясының Сібір бөлімі, химия ғылымдары институты (РГА СБ ХФИ)) жүргізілді. Салыстыру эталондары ретінде МЕМСТ Р 51866–2002 (ЕН 228–99) және ТШ 4215-002-60283547-2006 сәйкес параметрлер пайдаланылды. Зерттеу нәтиже-лері үш сынақ қайталануының орташа мәндерін алды.

Нәтижелер

МТБЭ және ДМЭК оксигенаттарының бензиннің октандық санын арттыруға әсері «Атырау мұнай өңдеу зауыты» ЖШС өндірген ТАБ октандық санының өсуі бойынша анықталды. Құрамында оттегі бар қоспалардың (оксигенаттардың) тиімділігі жоғары октанды компоненттер ретінде оларды бензинге 3-тен 15% - ға дейінгі концентрацияда (көлем) енгізу арқылы зерттелді.

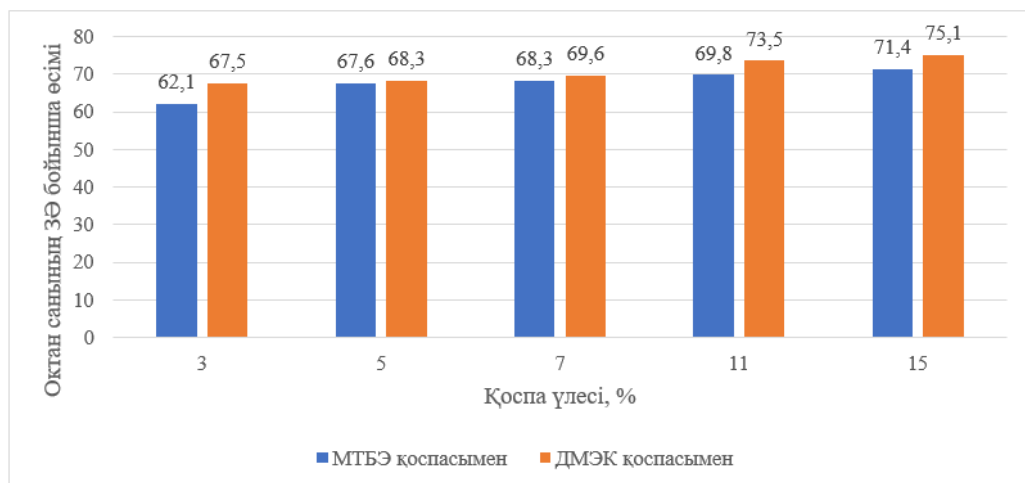
Зерттеу әдісімен (ЗӘ) және мотор әдісімен (МӘ) октан санын (ОС) анықтау бойынша МТБЭ және ДМЭК қоспасының нәтижелері 1, 2-кестелерде және 2 және 3-суреттерде ұсынылған.

Кесте 1. МТБЭ қосқан кезде тікелей айдаудан алынған бензиннің октандық санының өзгеруі

Қоспаның үлесі, %	Октан саны, ЗӘ			Октан саны, МӘ		
	қоспасыз	қоспамен	ОС өсімі	қоспасыз	қоспамен	ОС өсімі
3	56,5	62,1	+5,6	52,8	55,1	+2,3
5		67,6	+11,1		58,1	+5,3
7		68,3	+11,8		58,9	+6,1
11		69,8	+13,3		59,8	+7,0
15		71,4	+14,9		61,4	+8,6

Кесте 2. ДМЭК қосқан кезде тікелей айдаудан алынған бензиннің октандық санының өзгеруі

Қоспаның үлесі, %	Октан саны, ЗӘ			Октан саны, МӘ		
	қоспасыз	қоспамен	ОС өсімі	қоспасыз	қоспамен	ОС өсімі
3	56,5	67,5	+11,0	52,8	58,1	+5,3
5		68,3	+11,8		58,9	+6,1
7		69,6	+13,1		59,6	+6,8
11		73,5	+17,0		63,5	+10,7
15		75,1	+18,6		65,3	+12,5



Сурет 2. МТБЭ және ДМЭК қосу кезінде тікелей айдаудан алынған бензинінің октандық санының 3Э бойынша өзгеруі

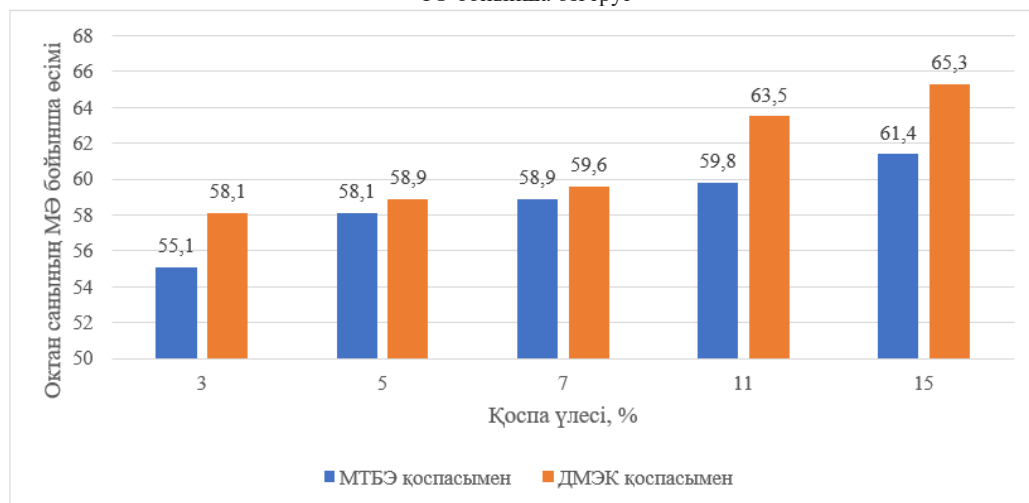
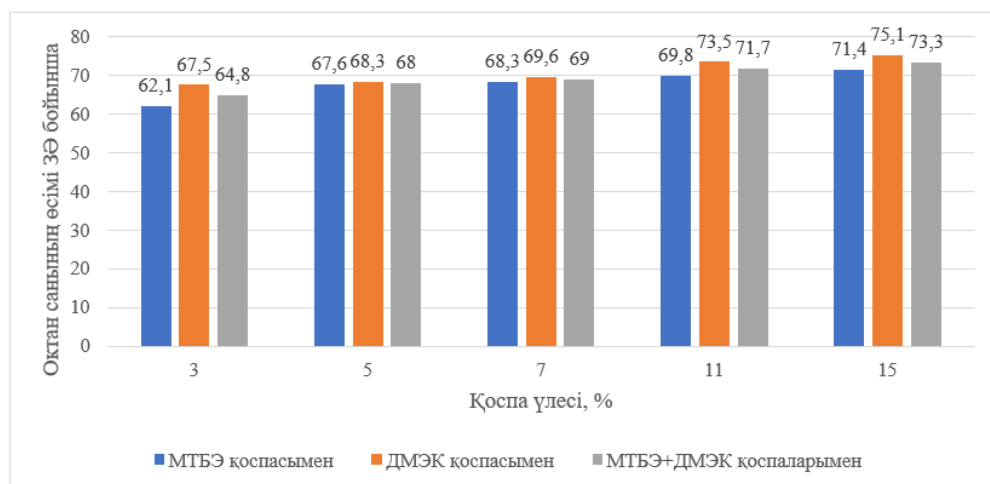


Рисунок 3. МТБЭ және ДМЭК қосу кезінде тікелей айдаудан алынған бензинінің октандық санының МЭ бойынша өзгеруі

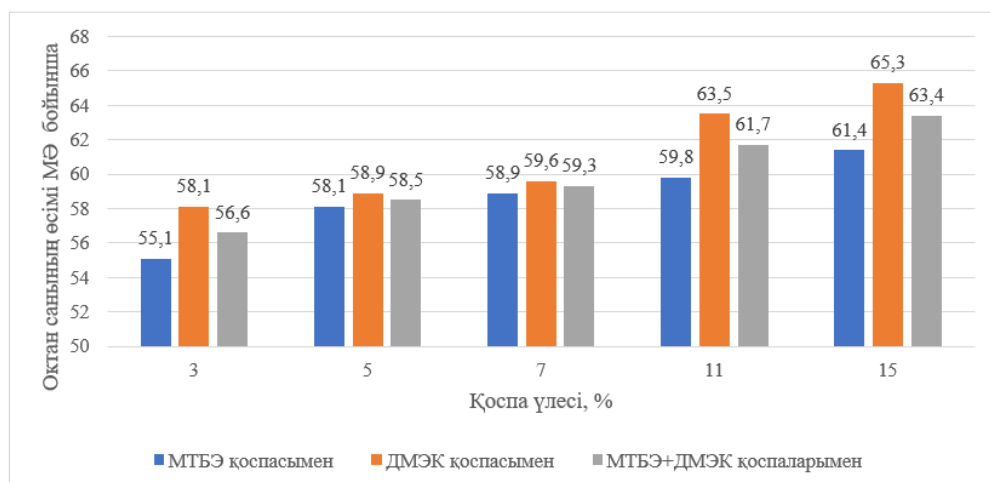
Тікелей айдаудан алынған бензинге МТБЭ+ДМЭК = 1:1 көлемде араластырылған қоспасының октандық сандардың өзгеруі 3-кестеде және 4 және 5-суреттерде көрсетілген.

Кесте 3. Тікелей айдаудан алынған бензинге МТБЭ+ДМЭК = 1:1 қосқанда октандық санының өзгеруі

Бензин	МТБЭ + ДМЭК = 1:1 үлесі, %	Октан саны, ЗЭ, МЕМСТ 8226-82			Октан саны, МӨ, МЕМСТ 511-82		
		қоспасыз	қоспамен	ОС өсімі	қоспасыз	қоспамен	ОС өсімі
ТАБ	3	56,5	64,8	+8,3	52,8	56,6	+3,8
	5		68,0	+11,5		58,5	+5,7
	7		69,0	+12,5		59,3	+6,5
	11		71,7	+15,2		61,7	+8,9
	15		73,3	+16,8		63,4	+10,6



Сурет 4. МТБЭ+ДМЭК = 1:1 қоспаларын қосу кезінде тікелей айдаудан алынған бензинінің ЗЭ бойынша октандық санының өзгеруі



Сурет 5. МТБЭ+ДМЭК = 1:1 қоспаларын қосу кезінде тікелей айдаудан алынған бензинінің МӨ бойынша октандық санының өзгеруі

Талқылау

Қазіргі уақытта бензин бастапқы өндірістің энергия көздері арасында жетекші орындардың бірін алады. Адамзатқа оған деген қажеттілік, оның жоғары сапасына байланысты, көмірсутектердің басқа фракцияларына қарағанда көбірек. Сондықтан автомобиль бензинінің пайдалану қасиеттеріне өте жоғары талаптар қойылып және бензин сапасын арттыру мәселесі химия өнеркәсібінің өзекті мәселелерінің бірі болып табылады. Қазіргі заманғы автомобильдерге 92, 95 және 98 қозғалтқыштарының октандық сандарымен сипатталатын детонацияға қарсы қасиеттері бар жоғары октанды отын қажет. Детонацияға төзімді жоғары өнімді төзімді бензинді каталитикалық крекинг, изомерлеу, алкилдеу процестерін терең түрлендіру арқылы алады, немесе бензинге арнайы жоғары октанды қоспаларды енгізу арқылы қол жеткізіледі.

Мұнай-газ өнімдеріне сұраныстың артуы және оларды пайдалану әлемдегі әртүрлі экологиялық проблемаларды тудырады. Қоршаған ортаның химиялық ластануының негізгі бөлігі ішкі жану қозғалтқыштарының істен шыққан газдары болып табылады. Қозғалтқыш цилиндрлерінде болатын физикалық-механикалық процестердің нәтижесінде бірнеше улы компоненттерден тұратын күрделі қосылыстар (Капустин және т. б., 2021) бөлінеді.

Автомобиль бензиндерінің экологиялық және пайдалану қасиеттерін жақсартудағы негізгі әлемдік үрдіс көпфункционалды қоспаларды, негізінен оксигенаттарды — құрамында оттегі бар заттарды (спирттер, кетондар, эфирлер және т.б.) пайдалану болып табылады. 20 жылдан астам уақыт бойы МТБЭ отынның толық жануына ықпал ететін және бензиннің детонацияға қарсы қасиеттерін арттыратын негізгі оксигенат болып табылады (зерттеу әдісі бойынша октан саны 115–135 бірлік). Метанол мен изобутиленнен әлемдік МТБЭ өндірісі жылына 20 миллион тонна деңгейінде. Метанол туындысы, МТБЭ бензин құрамын өзгерту үшін қажет қосымша оттегімен қамтамасыз ететін ең көп таралған қоспа. Бұл қоспа қазіргі уақытта АҚШ-та сатылатын бензиннің шамамен 30% -ның құрамында кездеседі (Davis et al., 2001). Іштен жану қозғалтқыштарынан шығатын зиянды шығарындыларды азайту, отынның детонациясына төзімділікті арттыру және жаңартылатын отынды пайдалану үшін негізгі бензинге көптеген оттегі бар қоспалар қосылады (Сакмак et al., 2018). Изобутанол қоспасының модификацияланбаған ұшқыннан тұтанатын қозғалтқыштардың метанол-бензин отынына әсері зерттелген. Изобутанол қоспалары баламалы отын ретінде ұшқыннан тұтанатын қозғалтқышты іске қосу үшін қолданыстағы метанол-бензин қатынасымен араластырудың өміршең нұсқасы болып табылады (Hazim Sharudin et al., 2017). Іс жүзінде әртүрлі мұнай өңдеу ағындарының қоспасы болып табылатын базалық бензинге нормативтік құжаттарда белгіленген ең төменгі октандық талаптарға сай болу үшін октан көтергіш қоспалар қосылады. Қытайда көмір негізіндегі метанол бензинге октанды күшейтетін қоспа ретінде кеңінен қолданылады (Chongming Wang et al., 2019). Шолуда (Badia et al., 2021) қазіргі заманғы ұшқыннан тұтанатын автомобиль қозғалтқыштары үшін перспективалы бензин формулаларында қолдануға болатын химиялық молекулалар туралы деректерді береді. Скрининг барысында жоғары октанды компоненттерге изопарафиндер, олефиндер, ароматика, спирттер, эфирлер, күрделі эфирлер, кетондар, фурандар және карбонаттар жатады. Арилбутилацеталдардың (Опарина және т.б., 2020) октан саны жеткілікті жоға-

ры (110 – ға дейін ЗӘ бойынша) екені көрсетілген және детонацияға төзімділікті арттыру үшін автомобиль бензиндеріне перспективті қоспалар қатарынан болуы мүмкін. Бензин мен дизель отынына қоспалар ретінде басқа эфирлерді (Хамидуллин және т.б., 2014) қолдану белсенді зерттелуде. Бірқатар гликольдік моноэфирлердің мысалында целлозольвалар мен карбитолдардың тікелей айдаудан алынған бензин фракциясына 1 % қоспа түріндегі детонацияға қарсы белсенділігі МТБЭ-ге қарағанда жоғары екендігі көрсетілген.

Сонымен қатар, үшіншілік ацетилен спирттерінің детонацияға қарсы қасиеттері тіпті дерлік зерттелмеген. Соңғы жылдары (Гилязов және т.б., 2022) «Сафи Өтебаев атындағы Атырау мұнай және газ университеті» КЕАҚ, «Мұнай химиясы» инженерлік бейіндегі зертханада ДМЭК үшіншілік алифатты ацетилен спирттерінің детонацияға қарсы қасиеттеріне зерттеу жүргізілуде. Бір қызығы, үшіншілік ацетилен спирті, олардың молекуласындағы барлық белгілі антидетонаторлар сияқты, детонация фронтын бұзуға қабілетті үшіншілік алкил радикалдары, гидроксил радикалдары және қанықпаған ацетиленді топтарға ие. Үшіншілік ацетилен спирттері негізінде құрамында оттегі бар жаңа бензин қоспаларын зерттеу және әзірлеу маңызды және өзекті міндет болып табылады.

МТБЭ және ДМЭК оксигенаттарының тікелей айдаудан алынған бензиннің октан санының артуына әсерін зерттеу нәтижесінде біз мынадай нәтижелер алдық:

- 2, 3-суреттерде және 1, 2-кестелерде көрініп тұрғандай ДМЭК қоспасы тікелей айдаудан алынған бензиннің октандық санын ЗӘ бойынша 18,6 пунктке және МӨ бойынша 12,5 пунктке дейін арттырады, ал МТБЭ қосқанда октандық санның артуы ЗӘ бойынша 14,9 пунктті, МӨ бойынша 8,6 пунктті құрайды. Демек, ДМЭК октанды күшейтетін қоспаның тиімділігі МТБЭ-ге қарағанда едәуір жоғары екенін байқауға болады.

- Әдеби ізденістен белгілі болғандай (Danilov et al., 2017; Nikulin et al., 2017) синергетикалық әсердің орын алуына байланысты оксигенаттардың қоспасымен оң нәтижеге қол жеткізген. Осыған байланысты зерттеудің екінші кезеңінде біз ДМЭК және МТБЭ-ден тұратын бинарлы қоспаларды қолданудың тиімділігін тексердік.

4, 5-суреттерде және 3-кестеде ЗӘ және МӨ барлық жағдайларда синергетикалық әсерді күшейту арқылы октан санының жоғарылауы байқалады. Бұл ретте, тікелей айдаудан алынған бензиннің октандық саны МТБЭ қосқанға қарағанда ДМЭК және бинарлы қоспаны қосқанда жоғары екенін байқауға болады.

Осылайша, осы зерттеудің нәтижелері жаңа ДМЭК оксигенаты МТБЭ-ге қарағанда тікелей айдаудан алынған бензиннің октан санын жоғарылататынын көрсетті.

Қорытынды

Бұл жұмыста бензиннің октан санын арттыратын қоспа ретінде жаңа оксигенат - ДМЭК қасиеттері зерттелді. Тікелей айдаудан алынған бензиннің октан санын арттыру үшін оксигенаттардың – МТБЭ және ДМЭК салыстырмалы тиімділігі көрсетілген.

МТБЭ және ДМЭК сияқты оксигенаттардың тікелей айдаудан алынған бензиннің октан санының жоғарылауына әсерін зерттеу ДМЭК және бинарлы қоспаны қосқанда бензиннің октан санының жоғарылауы МТБЭ қосқанға қарағанда жоғары екенін көрсетті. Зерттеу нәтижелері бойынша үшіншілік ацетилен спирті – ДМЭК-ті автомобиль бензиндеріне арналған оттегі қоспасы ретінде ұсынуға

болады. ДМЭК-ті қолдану жоғары октанды компоненттердің ресурстарын кеңейтуге, бензиндер мен пайдаланылған газдардың уыттылығын төмендетуге, автомобиль қозғалтқыштары үшін жоғары сапалы тауарлық бензин шығаруды ұлғайтуға мүмкіндік береді.

ӘДЕБИЕТТЕР

Academic dictionaries and encyclopedias. Ethinylmethylcarbinol. <https://de-academic.com/dic.nsf/dewiki/411193>. Жүгінген күні: 05.05.2024. (in Eng).

Badia J.H., Ramírez E., Bringué R., Cunill F. and Delgado J. (2021). New Octane Booster Molecules for Modern Gasoline Composition. *Energy Fuels*. — 35(14). — 10949–10997. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c00912> (in Eng).

Beig B., Riaz M., Raza Naqvi S., Hassan M., Zheng Z., Karimi K. et al. (2021). Current challenges and innovative developments in pretreatment of lignocellulosic residues for biofuel production: A review. *Fuel*. — 287. — 119670. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119670> (in Eng).

Cakmak A., Ozcan H. (2018). Oxygenated Fuel Additives to Gasoline. *Politeknik dergisi*. — 21, — 4. — 831–840. <https://doi.org/10.2339/politeknik.457956> (in Turk).

Chongming Wang, Yanfei Li, Cangsu Xu, Tawfik Badawy, Amrit Sahu, Changzhao Jiang (2019). Methanol as an octane booster for gasoline fuels. *Fuel*. — 248. — 76–84. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.02.128> (in Eng).

Danilov A.M. (2017). Research on Fuel Additives During 2011-2015. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. — 53. — 705–721. <https://doi.org/10.1007/s10553-017-0853-z> (in Eng).

Davis J.M., Farland W.H. (2001) The Paradoxes of MTBE. *Toxicological Sciences*. — 61. — 211–217. <https://doi.org/10.1093/toxsci/61.2.211> (in Eng).

Ershov M.A., Klimov N.A., Burov N.O., Abdellatif T.M.M., Kapustin V.M. (2021). Creation a novel promising technique for producing an unleaded aviation gasoline 100UL. *Fuel*. — 284. — 118928. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118928> (in Eng).

Hazim Sharudin, Nik Rosli Abdullah, G. Najafi, Rizalman Mamat, H.H. Masjuki (2017). Investigation of the effects of iso-butanol additives on spark ignition engine fuelled with methanol-gasoline blends. — *Applied thermal engineering*. — 114. — 593–600. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.12.017> (in Eng).

Lan T., Wang Y., Ali R., Liu H., Liu X., He M. (2022). Prediction and measurement of critical properties of gasoline surrogate fuels and biofuels. *Fuel Process Technol.* — 228. — 107156. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2021.107156> (in Eng).

Nikulin R.M., Kharlampidi Kh.E., Khamidullin R.F., Sitalo A.V. & Sharaf F.A. (2017). Synergistic Blend Based on Glycol Ethers as Antiknock Additives to Motor Fuels. — *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. — 52. — 762–772. <https://doi.org/10.1007/s10553-017-0771-0> (in Eng).

Sun X., Liu H., Duan X., Guo H., Li Y., Qiao J. et al. (2022). Effect of hydrogen enrichment on the flame propagation, emissions formation and energy balance of the natural gas sparkignition engine. *Fuel*. — 307. — 121843. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121843> (in Eng).

Гиладжов Е., Аронова А.А., Изгалиев С.А., Гиладжов Ф.Е., Сулейменов Е.Б., Ахметов С.М. (2006). Международная заявка №РСТ/КЗ2020/000027, С10L 10/10 (2006.1). Октаноповышающая добавка к бензину (ПК). Заявитель НАО «Атырауский университет нефти и газа им. С.Утебаева»; опубликовано 02.06.2022. WIPO / PCT № WO 2022/114942. — А1. — https://patentscope.wipo.int/search/ru/detail.jsf?docId=WO2022114942&_cid=P11-LWEXGU-78009-1 (in Rus).

Капустин В.М., Ершов М.А., Хакимов Р.В. (2021). Автомобильные бензины с высокооктановыми добавками. Учебное пособие. М. Российский государственный университет нефти и газа имени И.М. Губкина. — 160. https://fileskachat.com/view/110297_a16818243c514c4c4a022a20f843bb38.html (in Rus).

Максимов А.Л., Нехаев А.И., Рамазанов Д.Н. (2015). Простые эфиры и ацетали – перспективные продукты нефтехимии из возобновляемого сырья (Обзор). *Нефтехимия*. — 55. — 1. — 3-24. <https://doi.org/10.7868/S0028242115010104>, <http://csl.isc.irk.ru/BD/%D0%96%D1%83%D1%80%D0%B-D%D0%B0%D0%BB%D1%8B/%D0%9D%D0%B5%D1%84%D1%82%D0%B5%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F%202015%20%D0%A255%E2%84%96%201/3-24.pdf> (in Rus).

Опарина Л.А., Колыванов Н.А., Ганина А.А., Дьячкова С.Г. (2020). Арилбутилацетали –

октановывышающие оксигенатные добавки к моторным топливам. Нефтехимия. — 60. — 1. — 148–153. <https://doi.org/10.31857/S0028242120010104>, <https://sciencejournals.ru/cgi/getPDF.pl?jid=neftkhim&year=2020&vol=60&iss=1&file=NeftKhim2001010Oparina.pdf> (in Rus).

Опарина Л.А., Колыванов Н.А., Гусарова Н.К., Сапрыгина В.Н. (2018). Оксигенатные добавки к топливу на основе возобновляемого сырья. Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. — 8. — 1. — 19–34. <http://dx.doi.org/10.21285/2227-2925-2018-8-1-19-34> (in Rus).

Хамидуллин Р.Ф., Харлампида Х.Э., Пучкова Т.Л., Мельник А.Ю., Батрутдинова А.Р., Галиуллина М.М. (2014). Оксигенатные добавки к бензиновым фракциям, повышающие октановые числа моторных топлив. Вестник Казанского технологического университета. — 17. — 21. — 295–300. <https://cyberleninka.ru/article/n/oksigenatnye-dobavki-k-benzinovym-fraktsiyam-povyshayuschie-oktanovye-chisla-motornyh-topliv/viewer> (in Rus).

Щелкунов А.В., Васильева Р.Л., Кричевский Л.А. (1975). Синтез и взаимные превращения монозамещенных ацетиленов. — 44–45. — Алма-Ата: «Наука». <https://libcats.org/book/387683> (in Rus).

REFERENCES

Academic dictionaries and encyclopedias. Ethinylmethylcarbinol. <https://de-academic.com/dic.nsf/dewiki/411193>. Circulation date: 05.05.2024 (in Eng).

Badia J.H., Ramírez E., Bringué R., Cunill F. and Delgado J. (2021). New Octane Booster Molecules for Modern Gasoline Composition. *Energy Fuels*. — 35(14). — 10949–10997. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.1c00912> (in Eng).

Beig B., Riaz M., Raza Naqvi S., Hassan M., Zheng Z., Karimi K. et al. (2021). Current challenges and innovative developments in pretreatment of lignocellulosic residues for biofuel production: A review. *Fuel*. — 287. — 119670. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119670> (in Eng).

Cakmak A., Ozcan H. (2018). Oxygenated Fuel Additives to Gasoline. *Politeknik dergisi*. — 21, — 4. — 831–840. <https://doi.org/10.2339/politeknik.457956> (in Turk).

Chongming Wang, Yanfei Li, Cangsu Xu, Tawfik Badawy, Amrit Sahu, Changzhao Jiang (2019). Methanol as an octane booster for gasoline fuels. *Fuel*. — 248. — 76–84. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.02.128> (in Eng).

Danilov A.M. (2017). Research on Fuel Additives During 2011-2015. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. — 53. — 705-721. <https://doi.org/10.1007/s10553-017-0853-z> (in Eng).

Davis J.M., Farland W.H. (2001) The Paradoxes of MTBE. *Toxicological Sciences*. — 61. — 211–217. <https://doi.org/10.1093/toxsci/61.2.211> (in Eng).

Ershov M.A., Klimov N.A., Burov N.O., Abdellatif T.M.M., Kapustin V.M. (2021). Creation a novel promising technique for producing an unleaded aviation gasoline 100UL. *Fuel*. — 284. — 118928. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118928> (in Eng).

Gilazhov E., Aronova A.A., Izgaliev S.A., Gilazhov F.E., Suleimenov E.B., Akhmetov S.M. International application No. RST/KZ2020/000027. — C10L 10/10 (2006.1). Octane-increasing additive for gasoline (RK). Applicant NJC “Atyrau University of Oil and Gas named after S.Utebaev”; published on 02.06.2022. WIPO / RST No. WO 2022/114942. — A1 https://patentscope.wipo.int/search/ru/detail.jsf?docId=WO2022114942&_cid=P11-LWEXGU-78009-1 (in Rus).

Hamidullin R.F., Kharlampidi H.E., Puchkova T.L., Melnik A.Y., Batrutdinova A.R., Galiullina M.M. (2014). Oxygenate additives to gasoline fractions increasing octane numbers of motor fuels. *Bulletin of Kazan Technological University*. — 17. — 21. — 295–300. <https://cyberleninka.ru/article/n/oksigenatnye-dobavki-k-benzinovym-fraktsiyam-povyshayuschie-oktanovye-chisla-motornyh-topliv/viewer> (in Rus).

Hazim Sharudin, Nik Rosli Abdullah, G. Najafi, Rizalman Mamat, H.H. Masjuki (2017). Investigation of the effects of iso-butanol additives on spark ignition engine fuelled with methanol-gasoline blends. *Applied thermal engineering*. — 114. — 593–600. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.12.017> (in Eng).

Kapustin V.M., Ershov M.A., Khakimov R.V. (2021). Automobile gasolines with high-octane additives. *Textbook. M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas*. — 160. https://fileskachat.com/view/110297_a16818243c514c4c4a022a20f843bb38.html (in Rus).

Lan T., Wang Y., Ali R., Liu H., Liu X., He M. (2022). Prediction and measurement of critical properties of gasoline surrogate fuels and biofuels. — *Fuel Process Technol.* — 228. — 107156. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2021.107156> (in Eng).

Maximov A.L., Nekhaev A.I., Ramazanov D.N. (2015). Simple esters and acetals - promising petrochemical products from renewable raw materials (Review). *Petrochemistry*. — 55. — 1. — 3–24. <https://doi.org/10.7868/S0028242115010104>, <http://csl.isc.irk.ru/BD/%D0%96%D1%83%D1%80%D0%B>

D%D0%B0%D0%BB%D1%8B/%D0%9D%D0%B5%D1%84%D1%82%D0%B5%D1%85%D0%B8%D0%BC%D0%B8%D1%8F%202015%20%D0%A255/%E2%84%96%201/3-24.pdf (in Rus).

Nikulin R.M., Kharlampidi Kh.E., Khamidullin R.F., Sitalo A.V. & Sharaf F.A. (2017). Synergistic Blend Based on Glycol Ethers as Antiknock Additives to Motor Fuels. *Chemistry and Technology of Fuels and Oils*. — 52. — 762–772. <https://doi.org/10.1007/s10553-017-0771-0> (in Eng).

Oparina L.A., Kolyvanov N.A., Ganina A.A., Dyachkova S.G. (2020). Aryl butyl acetals - octane-enhancing oxygenate additives to motor fuels. *Petrochemistry*. — 60. — 1. — 148–153. <https://doi.org/10.31857/S0028242120010104>, <https://sciencejournals.ru/cgi/getPDF.pl?jid=neftkhim&year=2020&vol=60&iss=1&file=NeftKhim2001010Oparina.pdf> (in Rus).

Oparina L.A., Kolyvanov N.A., Gusarova N.K., Saprygina V.N., Trofimov B.A. (2018). Oxigenate fuel additives on the basis on renewable raw materials. *Proceedings of Universities. Applied Chemistry and Biotechnology*. — 87. — 1. — 19–34. <http://dx.doi.org/10.21285/2227-2925-2018-8-1-19-34> (in Rus).

Shchelkunov A.V., Vasilieva R.L., Krichevskii L.A. (1975) Synthesis and mutual transformations of monosubstituted acetylenes. — 44–45. — Alma-Ata: “Nauka”. <https://libcats.org/book/387683> (in Rus).

Sun X., Liu H., Duan X., Guo H., Li Y., Qiao J. et al. (2022). Effect of hydrogen enrichment on the flame propagation, emissions formation and energy balance of the natural gas sparkignition engine. *Fuel*. — 307. — 121843. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121843> (in Eng).

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

ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 140–151

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.285>

УДК 54.085.7

© **D.Zh. Kalimanova***, **A.K. Mendigalieva**, **A.B. Medetova**, **O.S. Sembay**, 2024
Atyrau University named after H. Dosmukhamedov, Republic of Kazakhstan, Atyrau.
E-mail: dana80_04@mail.ru

SUMMATIVE ASSESSMENT OF STUDENTS' RESULTS IN CHEMISTRY LESSONS USING ELECTRONIC EDUCATIONAL RESOURCES, GAME TECHNOLOGIES

Danagul Kalimanova — Atyrau University named after H. Dosmukhamedov, candidate of Biological Sciences, acting associate professor Atyrau, Kazakhstan

E-mail: dana80_04@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6904-3218>;

Ainur Mendigalieva — Master's student of Atyrau University named after H. Dosmukhamedov. Atyrau, Kazakhstan

E-mail: mendigaliyeva81@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Azhar Medetova — Master's student of Atyrau University named after H. Dosmukhamedov. Atyrau, Kazakhstan

E-mail: ajar_2001@mai.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0621-9650>;

Oralsyn Sembay — Master's student of Atyrau University named after H. Dosmukhamedov. Atyrau, Kazakhstan

E-mail: sembay2001@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-1793-931X>;

Abstract. This article delves into the topic of summative assessment of student knowledge results using electronic educational resources and game technologies in chemistry classes. With the increasing role of digital technologies and innovative methods in the education system, there's a growing potential to enhance student motivation and improve the quality of education. The study explores the integration of various electronic educational resources such as interactive presentations, video tutorials, online tests, alongside game technologies including educational games and simulators in chemistry lessons. The aim is to evaluate the impact of these resources and technologies on students' learning outcomes. Electronic resources like interactive whiteboards, virtual labs, online platforms, and multimedia content were employed, while gaming technologies encompassed educational games, quizzes, and simulation programs. Methodologies including observation, surveys, testing, and statistical analysis were utilized throughout the study. Findings revealed that the use of electronic educational resources and gaming technologies heightened student interest in chemistry, deepened theoretical understanding, and improved practical skills. Furthermore, there was a significant enhancement in cumulative assessment results, indicating increased student motivation and improved knowledge quality. The effective integration of these technologies in chemistry lessons fosters better student learning outcomes, making the educational process more engaging

and productive, while also nurturing students' creative and critical thinking abilities. The research findings were practically applied in chemistry education and validated through pedagogical experiments.

Keywords: chemistry, electronic resources, game technologies, summative assessment

© Д.Ж. Калиманова*, А.К. Мендигалиева, А.Б. Медетова, О.С. Сембай, 2024

Х. Досмұхамедов атындағы Атырау университеті Атырау, Қазақстан.

E-mail: dana80_04@mail.ru

ХИМИЯ САБАҚТАРЫНДА ЭЛЕКТРОНДЫҚ БІЛІМ РЕСУРСТАРЫН, ОЙЫН ТЕХНОЛОГИЯЛАРЫН ПАЙДАЛАНЫП ОҚУШЫЛАРДЫҢ НӘТИЖЕЛЕРІН ЖИЫНТЫҚ БАҒАЛАУ

Данагул Калиманова — биология ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор м.а., Х. Досмұхамедов атындағы Атырау университеті, Атырау, Қазақстан

E-mail: dana80_04@mail.ru , <https://orcid.org/0000-0001-6904-3218>;

Айнұр Мендигалиева — магистрант., Х. Досмұхамедов атындағы Атырау университеті, Атырау, Қазақстан

E-mail: mendigaliyeva81@mail.ru , <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Ажар Медетова — магистрант, Х. Досмұхамедов атындағы Атырау университеті, Атырау, Қазақстан

E-mail: ajar_2001@mail.ru , <https://orcid.org/0009-0000-0621-9650>;

Оралсын Сембай — магистрант, Х. Досмұхамедов атындағы Атырау университеті, Атырау, Қазақстан

E-mail: sembay2001@gmail.com , <https://orcid.org/0009-0008-1793-931X>.

Аннотация. Бұл мақалада химия сабақтарында электронды білім беру ресурстары мен ойын технологияларын қолдана отырып, оқушылардың білім нәтижелерін жиынтық бағалау тақырыбы қарастырылады. Білім беру жүйесіндегі цифрлық технологиялар мен инновациялық әдістердің рөлінің артуымен оқушылардың ынтасын арттыру және білім беру сапасын жақсарту әлеуеті артып келеді. Бұл зерттеу химия сабақтарында интерактивті презентациялар, бейне сабақтар, онлайн тесттер сияқты әртүрлі электрондық білім беру ресурстарын ойын технологияларымен, соның ішінде оқу ойындары мен біріктіруді қарастырады. Мақсат-осы ресурстар мен технологиялардың оқушылардың оқу нәтижелеріне әсерін бағалау. Интерактивті тақталар, виртуалды зертханалар, онлайн платформалар және мультимедиялық мазмұн сияқты электрондық ресурстар пайдаланылды, ал ойын технологиялары білім беру ойындарын, викториналар мен тренажерлерді қамтыды. Зерттеу барысында бақылау, сауалнама, тестілеу және статистикалық талдау сияқты әдістер қолданылды. Нәтижелер электронды білім беру ресурстары мен ойын технологияларын пайдалану оқушылардың химияға деген қызығушылығын арттырып, теориялық білімдерін тереңдетіп, практикалық дағдыларын жетілдіргенін көрсетті. Сонымен қатар, кумулятивті бағалау нәтижелері айтарлықтай жақсарды, бұл оқушылардың мотивациясының жоғарылауын және білім сапасының жақсарғанын көрсетеді. Химия сабақтарында

осы технологияларды тиімді интеграциялау оқытудың тиімділігін арттыруға ықпал етеді, білім беру процесін қызықты әрі нәтижелі етеді, сонымен қатар оқушылардың шығармашылық қабілеттері мен сыни ойлауын дамытуға ықпал етеді. Зерттеу нәтижелері химиялық білім беруде практикалық қолдануды тапты және педагогикалық эксперименттермен расталды.

Түйін сөздер: химия, электрондық ресурстар, ойын технологиялары, жиынтық бағалау

© Д.Ж. Калиманова*, А.К. Мендигалиева, А.Б. Медетова, О.С. Сембай, 2024

Атырауский университет им. Х. Досмухамедова, Қазақстан, Атырау.

E-mail: dana80_04@mail.ru

СУММАТИВНОЕ ОЦЕНИВАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ УЧАЩИХСЯ НА УРОКАХ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ, ИГРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Данагул Калиманова — кандидат биологических наук, и. о. ассоциированного профессора, Атырауский университет им. Х. Досмухамедова, Атырау, Казахстан

E-mail: dana80_04@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6904-3218>;

Айнур Мендигалиева — магистрант, Атырауский университет им. Х. Досмухамедова, Атырау, Казахстан

E-mail: mendigaliyeva81@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3121-3135>;

Ажар Медетова — магистрант, Атырауский университет им. Х. Досмухамедова, Атырау, Казахстан

E-mail: ajar_2001@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0621-9650>;

Оралсын Сембай — магистрант, Атырауский университет им. Х. Досмухамедова, Атырау, Казахстан

E-mail: sembay2001@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0008-1793-931X>.

Аннотация. В статье рассматривается тема суммарной оценки результатов знаний учащихся с использованием электронных образовательных ресурсов и игровых технологий на уроках химии. С увеличением роли цифровых технологий и инновационных методов в системе образования растет потенциал для повышения мотивации учащихся и улучшения качества образования. В данном исследовании рассматривается интеграция различных электронных образовательных ресурсов, таких как интерактивные презентации, видеоуроки, онлайн-тесты, с игровыми технологиями, включая обучающие игры и симуляторы, на уроках химии. Цель - оценить влияние этих ресурсов и технологий на результаты обучения учащихся. Использовались такие электронные ресурсы, как интерактивные доски, виртуальные лаборатории, онлайн-платформы и мультимедийный контент, а игровые технологии включали в себя образовательные игры, викторины и симуляторы. В ходе исследования использовались такие методики, как наблюдение, опросы, тестирование и статистический анализ. Результаты показали, что использование электронных образовательных ресурсов и игровых технологий повысило интерес учащихся к химии, углубило теоретические знания и улучшило практические навыки. Кроме того, значительно улучшились результаты кумулятивной оценки,

что свидетельствует о повышении мотивации учащихся и улучшении качества знаний. Эффективная интеграция этих технологий на уроках химии способствует повышению результативности обучения, делает образовательный процесс более увлекательным и продуктивным, а также способствует развитию творческих способностей и критического мышления учащихся. Результаты исследования нашли практическое применение в химическом образовании и подтверждены педагогическими экспериментами.

Ключевые слова: химия, электронные ресурсы, игровые технологии, суммативное оценивание

Introduction

Today, the rapid advancement of digital technologies in education is creating new opportunities to enhance the educational process, boost student motivation, and improve learning outcomes. Specifically, the integration of modern technologies in teaching Natural Sciences heightens student interest in the subject and helps develop their scientific worldview.

Chemistry is one of the most complex and interesting subjects. Traditional methods of teaching students to explain chemical processes and phenomena may be insufficient. In this regard, the use of electronic educational resources and game technologies at lessons helps to make the learning process more effective and interesting. There are numerous types of electronic educational resources utilized in chemistry lessons. The use of interactive whiteboards, virtual laboratories, online platforms and multimedia content as e-learning resources facilitates students' understanding of chemistry. Electronic platforms allow students to receive instant feedback on their results, which contributes to faster and more effective learning of the material. (Murciano-Calles, 2020)

Game technologies enable the adaptation of task difficulty to match each student's individual characteristics, enhancing cognitive activity by transforming the educational process into a game format, thereby making assessments fair and effective. The use of game technology aids students in grasping chemical topics and recognizing their achievements clearly. With the help of games, students can get additional information, review concepts through the game and deepen the topic among students which enhances the learning process. In this way, students making progress in their knowledge will be motivated to increase their motivation in chemistry lessons and actively participate in the topic. (Udeozor et al., 2024).

In modern education, summative assessment serves not only as a test of knowledge but also as a tool to gauge the depth of understanding of the material and to monitor student progress. Traditional assessment methods in chemistry are often limited to tests and written work, which may not reflect all aspects of students' knowledge. But with the advent of e-learning resources and gaming technologies, cumulative assessment becomes an interesting and effective process and makes it more efficient and up-to-date. It allows for a complete analysis of students' knowledge, taking into account their individual characteristics. (Zapata-Rivera et al., 2012)

The study aims to enhance the overall assessment of student learning outcomes by utilizing electronic educational resources and game technologies in chemistry lessons. This article explores both the theoretical and practical aspects of these methods and examines their impact on the quality of students' knowledge.

Research objectives:

Identification of the characteristics of using electronic educational resources and game technologies in chemistry.

Analysis of the effectiveness in enhancing students' motivation and interest in the subject.

Investigation into how these methods affect the overall assessment results of students.

This study aims to enhance the effectiveness of contemporary methods and technologies in education, with the expectation of promoting the adoption of innovative approaches in the learning process.

Materials and methods

The study is based on experiments conducted in 9 «a» and 9 «b» classes of secondary school named after Zhumabai Myrzagaliyev in the village of Tushchikuduk, Isatay district, Atyrau region in chemistry. In the II and III quarters at chemistry lessons in 9 «a» class were presented criterion-assessment tasks, in 9 «c» class-single-toned tasks. III quarter «Sulfuric acid and its salts», «elements of the 15th group. On the topics «Nitrogen», «Ammonia», «properties, production and application of ammonia», «nitric acid», formative tasks with intellectual games such as quest, quizzes, guess a couple were given, as well as assessment methods were changed. Electronic educational resources, i.e. interactive whiteboards, virtual laboratories, online platforms and multimedia content were used in each lesson. Educational games, quizzes and simulation programs were introduced as game technologies. Game tasks and quizzes contribute to increasing the activity of students, developing the ability to think logically and work in a team. Games provide students with a platform to apply their knowledge and skills, facilitating a more thorough understanding of the educational material. Throughout the study, diverse methodologies were employed, including observation, surveys, testing, and statistical analysis of outcomes. The findings indicated that integrating electronic educational resources and game technologies heightened students' enthusiasm for chemistry, enriched their theoretical understanding, and enhanced their practical proficiency. There has been a notable improvement in students' overall grades, suggesting a rise in their motivation to learn and the quality of their understanding. The successful integration of electronic educational resources and game technologies in Chemistry Lessons leads to enhanced student learning outcomes. These methods not only make learning engaging and fruitful but also foster the development of students' creative and critical thinking skills. The research work was applied in practice in Chemistry Lessons and tested through pedagogical experiments. A comparative conclusion was made on the results of training for these two quarters. Below is a short-term plan for the topic «(I)-group elements and their compounds», conducted in chemistry in Grades 9 «a» and 9 «b».


Table 1





Short-term plan for Grade 9 «a»

Unit	9.2C Elements of groups I, II, III and their compounds	
Teacher's name:	Mendigaliyeva Ainur	
Date:		
Class:9 «a»	number of participants	number of non-participants

Lesson topic:	(I)-group elements and their compounds Presentation №6 «Interaction of sodium with water»
Purpose of training according to the curriculum	9.2.1.1 - explanation of the general properties of alkali metals based on atomic structure 9.2.1.2- compilation of reaction equations characterizing the basic properties of oxides and hydroxides of alkali metals
Purpose of the lesson	Knows the general properties of alkali metals Characterizes the basic properties of alkali metal oxides and hydroxides. Determines the distribution in nature

The course of the lesson:


Period/time of the lesson	Teacher's actions	Student's actions	Evaluation	Resources
Beginning of the lesson Organization 3minutes	Greets the students. Illustrates the lesson's subject matter and the training objectives..	After mutual greetings, he begins his studies. https://wordwall.net/ru/resource/65100286 Find a pair	Oral feedback	Presentation
Introduction to a new lesson 5 minutes 	Collective discussion of reflection questions to connect the new lesson to the topic covered using the brainstorming method.	1. What metals are called alkali metals? 2. Features of the electronic structure of alkali metals? What is determined by the group number? https://wordwall.net/ru/resource/65133457 Answers the questions given	Descriptor: Total-3 points 1.Describes the properties of alkali metals. 2. Knows the features of the electronic structure of alkali metals 1 point for each correct answer, the student evaluates himself/ herself	Textbook, interactive whiteboard, students' cell phones, wordwall platform




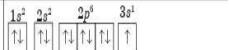

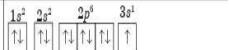

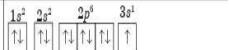

<p>The middle of the lesson Disclosure of meaning. 10 min.</p> 	<p>Assigns the task of reading the text from a new lesson in the textbook.</p> <p>Independent study</p>	<p>They will peruse the textbook and acquaint themselves with its content. They will identify key terms and jot them down in their notebooks. https://wordwall.net/ru/resource/65100286 Determination of alkali metal</p>	<p>Descriptor: Total-3 points 1. Describes the basic properties of oxides and hydroxides of alkali metals</p> <p>1 point for each correct answer</p>	<p>Viewing an online video related to the topic, interactive whiteboard, student mobile phones, wordwall platform</p>								
<p>15 min.</p> 	<p>Performs task 1 in the task header, monitors, shows an example.</p>	<p><i>1 Task</i></p> <table border="1" data-bbox="495 500 953 755"> <thead> <tr> <th>Химиялық табысы</th> <th>Электрондардың энергетикалық деңгейлерге орналасуы</th> <th>Электрондық формулалар және электрондардың орбитальдарға орналасуы</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Na</td> <td>$^{23}_{11}\text{Na} 2F 8F 1F$</td> <td>$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑</td> </tr> <tr> <td>K</td> <td>$^{39}_{19}\text{K} 2F 8F 1F$</td> <td>$3s^2 3p^6 3d^0 4s^1$ ↑↓ ↑↓ ↑↓ □ □ □ □ ↑</td> </tr> </tbody> </table> <p>Description of the atomic structure of sodium and potassium according to table 18</p> <p>Descriptor: Total-2 points 1. Draws and analyzes the table</p>	Химиялық табысы	Электрондардың энергетикалық деңгейлерге орналасуы	Электрондық формулалар және электрондардың орбитальдарға орналасуы	Na	$^{23}_{11}\text{Na} 2F 8F 1F$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑	K	$^{39}_{19}\text{K} 2F 8F 1F$	$3s^2 3p^6 3d^0 4s^1$ ↑↓ ↑↓ ↑↓ □ □ □ □ ↑	<p>The textbook, interactive whiteboard</p>
Химиялық табысы	Электрондардың энергетикалық деңгейлерге орналасуы	Электрондық формулалар және электрондардың орбитальдарға орналасуы										
Na	$^{23}_{11}\text{Na} 2F 8F 1F$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑										
K	$^{39}_{19}\text{K} 2F 8F 1F$	$3s^2 3p^6 3d^0 4s^1$ ↑↓ ↑↓ ↑↓ □ □ □ □ ↑										
	<p>Gives a task to apply knowledge. Pair work</p>	<p>https://wordwall.net/ru/resource/65100515 Answers the questions given by choosing a cell, evaluates themselves https://wordwall.net/ru/resource/65099859</p>	<p>Descriptor: Total-2 points 1. Gives characteristics to alkali metals 2. Distinguishes the characteristic features of alkali metals 1 point for each correct answer</p>	<p>The textbook, interactive whiteboard, student mobile phones, wordwall platform</p>								
<p>End of lesson Reflection. Reflection 2 min.</p> 	<p>The teacher listens to students' feedback and reflections on the lesson to conclude the session.</p>	<p>As students complete the tasks that will set the goal for today's lesson, they draw conclusions for the lesson by comparing themselves to the activity of alkali metals, talking about their understanding.</p>	<p>Self-evaluation</p>									


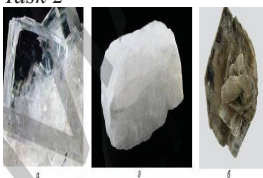


Short-term plan for Grade 9 «b»

Unit	9.2C Elements of groups I, II, III and their compounds
Teacher's name:	Mendigalieva Ainur
Date:	
Class:9 "b"	number of participants number of non-participants
Lesson topic:	(I)-group elements and their compounds Presentation №6 «Interaction of sodium with water»
Purpose of training according to the curriculum	9.2.1.1 - explanation of the general properties of alkali metals based on atomic structure 9.2.1.2- compilation of reaction equations characterizing the basic properties of oxides and hydroxides of alkali metals
Purpose of the lesson	Knows the general properties of alkali metals Characterizes the basic properties of alkali metal oxides and hydroxides. Determines the distribution in nature

The course of the lesson:

Period/time of the lesson	Teacher's actions	Student's actions	Evaluation	Resources
The beginning of the lesson Arousing interest 7 min.	I, Organizational stage: Welcomes students, checks their attendance Using the «spider web» method, students throw a string by saying good wishes to each other. a). Remembering the group rule. B). Group.	By systematically counting, starting from one to two, they organize themselves into two groups.	Students share their desires with each other, emphasizing the enhancement of listening skills and promoting active participation from all students during the lesson.	 Knitting thread

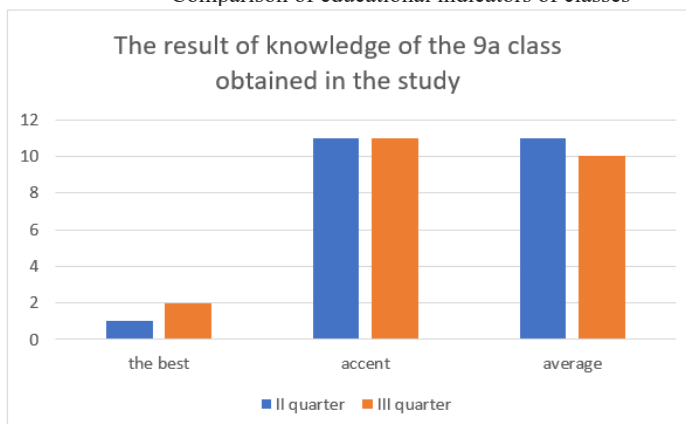
<p>Introduction to a new lesson</p> 	<p>Engaging in a group discussion of stimulating questions aimed at linking the new lesson with previously covered topics using the «brainstorming» technique. Students are provided with overarching questions and various exercises. Each student contributes their thoughts, supplementing and building upon the ideas of their peers.</p>	<p>1. What metals are called alkali metals? 2. features of electronic construction of alkali metals?</p>	<p>Goal: Foster rapid and practical development of critical thinking. Effectiveness: Enhances students' cognitive abilities while demonstrating the lesson's relevance to real-life scenarios and enabling them to identify the lesson's topic and objectives.</p>	<p>We commend the student who effectively conveyed their thoughts and actively engaged in the discussion by saying «Excellent job!»</p>								
<p>Middle of the lesson Revealing the meaning. 26 min.</p> 	<p>Assigns the task of reading the new lesson text in the textbook.</p>	<p>They will go through the textbook and become acquainted with its contents, focusing on key terms which they will record in their notebooks.</p>	<p>Descriptor: Total - 3 points 1. Describes basic properties of oxides and hydroxides of alkali metals.</p>	<p>Тақырып бойынша интернет желісін пайдаланып видеоролик көру.</p>								
 <p>Performs task 1 in the task header, monitors, shows an example.</p>		<p><i>1 Task</i></p> <table border="1" data-bbox="516 1051 950 1297"> <thead> <tr> <th>Химиялық таңбасы</th> <th>Электрондардың энергетикалық деңгейлерге орналасуы</th> <th>Электрондық формуласы және электрондардың орбитальдарға орналасуы</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Na</td> <td>$^{23}_{11}\text{Na} 2\bar{7} 8\bar{7} 1\bar{7}$</td> <td> $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$  </td> </tr> <tr> <td>K</td> <td>$^{39}_{19}\text{K} 2\bar{7} 8\bar{7} 8\bar{7} 1\bar{7}$</td> <td> $3s^2 3p^6 3d^0 4s^1$  </td> </tr> </tbody> </table> <p>Description of the atomic structure of sodium and potassium according to table 18</p> <p>Descriptor: Total-2 points 1. Draws and analyzes the table</p>	Химиялық таңбасы	Электрондардың энергетикалық деңгейлерге орналасуы	Электрондық формуласы және электрондардың орбитальдарға орналасуы	Na	$^{23}_{11}\text{Na} 2\bar{7} 8\bar{7} 1\bar{7}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ 	K	$^{39}_{19}\text{K} 2\bar{7} 8\bar{7} 8\bar{7} 1\bar{7}$	$3s^2 3p^6 3d^0 4s^1$ 	<p>PC screen 9th grade textbook. Workbooks.</p>
Химиялық таңбасы	Электрондардың энергетикалық деңгейлерге орналасуы	Электрондық формуласы және электрондардың орбитальдарға орналасуы										
Na	$^{23}_{11}\text{Na} 2\bar{7} 8\bar{7} 1\bar{7}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ 										
K	$^{39}_{19}\text{K} 2\bar{7} 8\bar{7} 8\bar{7} 1\bar{7}$	$3s^2 3p^6 3d^0 4s^1$ 										

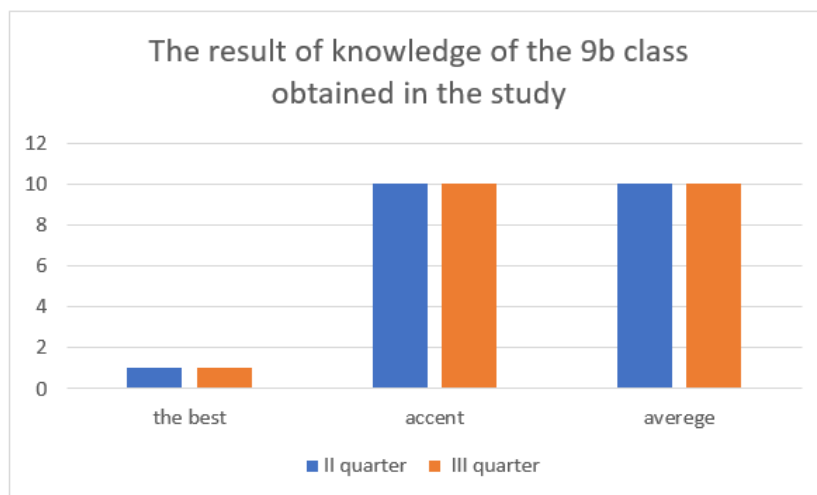
	<p>Carries out the task outlined in the textbook, overseeing it and providing an illustrative example.</p>	<p><i>Task 2</i></p>  <p>Tabulating the difference in sodium minerals</p>	<p>Descriptor: Total-3 points 1. Draws a table</p>	<p>PC screen 9th grade textbook. Workbooks.</p>
<p>End of lesson Reflection. Reflection 7 min.</p> 	<p>Using the «open microphone» method, the teacher listens to students' reflections on the lesson to summarize its key points.</p>	<p>Based on the tasks aimed at achieving today's lesson objectives, students draw conclusions by articulating their understanding, opinions, and thoughts.</p>	<p>The teacher employs the «Japanese assessment» technique to evaluate students.</p>	

Results and discussion

The study findings are illustrated through a comparative analysis as follows. Educational achievement monitoring was conducted for students in grades 9 «a» and 9 «b», revealing an improvement in the quality of education among grade 9 «a» students, who underwent training involving criterion-based assessment tasks transformation. Additionally, there was an increase in students' interest in the subject. The research work was obtained based on the results of the study of the evaluation indicators of the II and III quarters. In total, there are 23 students in grade 9 «a», where the best is 1, the accent is 11, and the average is 11. There were no observable changes noted in the 9th grade class «b». Following the study, by the end of the third quarter, there was an increase of one student in the top ranks in the 9th grade «a» class, as well as in the emphasized category. No changes were observed in the 9 «b» class. These results are shown in the diagram below.

Picture 1
Comparison of educational indicators of classes





Conclusion

As a result of the transformation of criterion assessment tasks in daily chemistry classes, not only the quality of students' knowledge increases, but also interest in the subject. It also contributes to their free, error-free choice of profession in the future. For each lesson, questions, interesting, informative tasks using various platforms were selected. The activity skills acquired in chemistry lessons significantly improve the quality and degree of student learning. Allows students to study in other subjects. The presented material can be used to work in the classroom and outside of school hours. Methodological development implemented as a result of scientific research can be included in the educational process of educational institutions.

REFERENCES

- Børte K., Lillejord S., Chan J., Wasson B. & Greiff S. (2023). Prerequisites for teachers' technology use in formative assessment practices: A systematic review. *Educational Research Review*. — 100568.
- Murciano-Calles J. (2020). Use of kahoot for assessment in chemistry education: a comparative study. *Journal of Chemical Education*. — 97(11). — 4209–4213.
- Wang S., Wu C. & Hou H.T. (2019). Integrating Board Game Elements, Collaborative Discussion, and Mobile Technology to a Gamification Instructional Activity-A Case of High School Chemical Course. *International Journal of Learning Technologies and Learning Environments*. — 2(2). — 11–20.
- Udeozor C., Abegão F.R. & Glassey J. (2024). Measuring learning in digital games: Applying a game-based assessment framework. *British Journal of Educational Technology*. — 55(3). — 957–991.
- Chans G.M. & Portuguese Castro M. (2021). Gamification as a strategy to increase motivation and engagement in higher education chemistry students. *Computers*. — 10(10). — 132.
- Zapata-Rivera D. & Bauer M. (2012). Exploring the role of games in educational assessment. *Technology-based assessments for twenty-first-century skills: theoretical and practical implications from modern research*. — Pp.147–169.
- Silverajah V.G. & Govindaraj A. (2018, October). The use of Edpuzzle to support low-achiever's development of self-regulated learning and their learning of chemistry. In *Proceedings of the 10th International Conference on Education Technology and Computers*. — Pp. 259–263.
- Chee Y.S. & Tan K.C.D. (2012). Becoming Chemists through Game-Based Inquiry Learning: The Case of "Legends of Alkhimia". *Electronic Journal of e-learning*. — 10(2). — 185–198.
- Basitere M., Rzyankina E. & Le Roux P. (2023). Reflection on experiences of first-year engineering students with blended flipped classroom online learning during the COVID-19 pandemic: A case study of the mathematics course in the extended curriculum program. *Sustainability*. — 15(6). — 5491.
- Ferro L.S., Sapio F., Terracina A., Temperini M. & Mecella M. (2021). *Gea2: A serious game for tech-*

nology-enhanced learning in STEM. *IEEE Transactions on Learning Technologies*. — 14(6). — 723–739.

Cooshna-Naik D. & Philippe G.D. (2014). LEARNING O'LEVEL CHEMISTRY THROUGH DIGITAL GAMES AND MULTIMEDIA-ITS IMPACT ON LEARNERS' ACADEMIC PERFORMANCE AND ENGAGEMENT. — In *EDULEARN14 Proceedings*. — Pp. 7253–7262. IATED.

Li X., Muñoz M., Chun K., Tai J., Guerra F. & York D.M. (2022). Inquiry-based activities and games that engage students in learning atomic orbitals. *Journal of chemical education*. — 99(5). — 2175–2181.

Fitriyana N., Wiyarsi A., Sugiyarto K.H. & Ikhsan J. (2021). The influences of hybrid learning with video conference and "chemondro-game" on students' self-efficacy, self-regulated learning, and achievement toward chemistry. *Journal of Turkish Science Education*. — 18(2). — 233–248.

Kalimukasheva A.D., Kalimanova D.Zh., Imankulova Z.A. (2022). Formative evaluation is an uninterrupted part of the training process on lessons of chemistry. *News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Chemistry and Technology Series*. — (5). — 139–145. <https://doi.org/10.32014/2018.2518-1491.18>. [in Eng.]

D.Zh. Kalimanova, A.A. Aleshova, Sh.T. Balabekova, A.K. Mendigalieva (2024). FORMATION OF THE BASICS OF ENVIRONMENTAL EDUCATION IN TEACHING CHEMISTRY. *Известия НАН РК. Серия химии и технологии*. — (1). — 40–53. <https://doi.org/10.32014/2024.2518-1491.206> [in Eng.]

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

ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 152–166

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.286>

SRSTA 31.01.11

© **L.M. Kalimoldina***, **G.S. Sultangazieva**, **S.O. Abilkasova**, 2024

Almaty Technological University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru

STUDY OF CHEMICAL POLLUTION LEVEL IN WATER RESOURCES OF ALMATY CITY

Kalimoldina Laila Mautenovna — senior lecturer of the Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Candidate of Technical Sciences, Almaty Technological University, 100 Tole bi str., Almaty, Kazakhstan

E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru. Orcid ID 0000-0003-4397-9629;

Sultangazieva Gulbaram Sapina — lecturer of the Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Master's degree, Almaty Technological University, 100 Tole bi str., Almaty, Kazakhstan

E-mail: gul-2012-61@mail.ru Orcid ID 0000-0001-7724-9558;

Abilkasova Sandugash Orynbaevna — senior lecturer of the Department of Chemistry, Chemical Technology and Ecology, Candidate of Technical Sciences, Almaty Technological University, 100 Tole bi str., Almaty, Kazakhstan

E-mail: sandy_ao@mail.ru. Orcid ID 0000-0001-8322-4592.

Abstract. Nowadays pollution of water bodies is an urgent problem. The natural regime of water is disturbed by dumping of wastes on Almaty water bodies. There is also a high share of river water pollution by pipe runoff, domestic wastes, industrial wastes. The purpose of this work is to determine the level of chemical pollution of Almaty rivers. Therefore, the study of water pollution of the main rivers that provide water supply to the city of Almaty is an urgent issue. The rivers Bolshaya Almatinka and Malaya Almatinka flow through the city, as well as their tributaries - Esentai (Vesnovka), Ak-Kayin, Remezovka, Zharbulak (Kazachka), Karasu, Kargaly (Kargalinka). The river Esentai flows into the Bolshaya Almatinka, then flows into Kaskelen, the river Malaya Almatinka flows into the Kapshagai reservoir. In accordance with the goal set, the objectives of the study were determined. The rivers Bolshaya Almatinka, Malaya Almatinka and Yesentai were the object of the study. The study revealed different levels of pollution by chemical substances. Monitoring on heavy metals of sources of household and drinking water supply of Almaty city was carried out. In the research laboratory on quality assessment and food safety of Almaty Technological University water samples were taken from the rivers Bolshaya Almatinka, Malaya Almatinka and Yesentai. Organoleptic properties of the composition of the selected samples were determined and heavy metals were detected. Heavy metals from river water samples were determined using spectrophotometer KFK 3.01. As a result of the

research, heavy metals in the rivers of Almaty city were identified and their dynamics and degree of accumulation in certain periods of time were studied. The rivers of Almaty while flowing through the territory of the city had significant chemical pollution exceeding MPC.

Keywords: water pollution index, heavy metals, MPC, average concentration, organoleptic properties

Funding: *This study did not receive external funding.*

Acknowledgements: *The authors would like to express their gratitude to the staff of the Laboratory of Quality Assessment and Food Safety of Almaty Technological University.*

Conflict of interest: *No conflict of interest*

© Л.М. Калимолдина*, Г.С. Султангазиева, С.О. Абилкасова, 2024

Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru

АЛМАТЫ ҚАЛАСЫНЫҢ СУ РЕСУРСТАРЫНЫҢ ХИМИЯЛЫҚ ЗАТТАРМЕН ЛАСТАНУ ДЕҢГЕЙІН ЗЕРТТЕУ

Калимолдина Лайла Маугеновна — т.ғ.к., «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының сениор-лекторы, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан
E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru. Orcid ID 0000-0003-4397-9629;

Султангазиева Гүлбарам Сапина — магистр, «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының лекторы, Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан
E-mail: gul-2012-61@mail.ru. Orcid ID 0000-0001-7724-9558;

Абилкасова Сандуғаш Орынбайқызы — т.ғ.к., «Химия, химиялық технология және экология» кафедрасының сениор-лекторы, т.ғ.к., Алматы технологиялық университеті, Алматы, Қазақстан
E-mail: sandy_ao@mail.ru. Orcid ID 0000-0001-8322-4592.

Аннотация. Қазіргі уақытта су объектілерінің ластануы өзекті мәселе болып табылады. Судың табиғи режимі қалдықтарды Алматы су объектілеріне төгу жолымен бұзылады. Өзен суларының құбырлар ағынымен, тұрмыстық қалдықтармен, өнеркәсіптік кәсіпорындардың қалдықтарымен ластану үлесі де жоғары. Бұл жұмыстың мақсаты Алматы өзендерінің химиялық заттармен ластану дәрежесін анықтау болып табылады. Сондықтан Алматы қаласын сумен қамтамасыз ететін негізгі өзендер суының ластануын зерттеу өзекті мәселе болып табылады. Қала арқылы Үлкен Алматы және Кіші Алматы өзендері, сондай - ақ олардың салалары-Есентай (Весновка), Ақ-қайын, Ремезовка, Жарбұлақ (Казачка), Қарасу, Қарғалы (Қарғалы) өзендері ағып өтеді. Есентай өзені Үлкен Алматыға, одан әрі Қаскелең өзеніне құяды, Кіші Алматы өзені Қапшағай су қоймасына құяды. Зерттеу нысаны ретінде Үлкен Алматы, Кіші Алматы және Есентай өзендері болды. Зерттеу химиялық заттардың ластануының әртүрлі деңгейлерін анықтады. Қойылған мақсатқа сәйкес зерттеу міндеттері анықталды. Алматы қаласын шаруашылық-ауыз сумен жабдықтау көздерінің ауыр металдары бойынша мониторинг жүргізілді.

Алматы технологиялық университетінің тамақ өнімдерінің сапасы мен қауіпсіздігін бағалау жөніндегі ғылыми-зерттеу зертханасында Үлкен Алматы, Кіші Алматы және Есентай өзендерінің суларының сынамалары алынды. Іріктелген сынамалар құрамының органолептикалық қасиеттері анықталып, ауыр металдар анықталды. Өзен суларының сынамаларынан ауыр металдар (Fe, Cu, Zn) КФК 3.01 спектрофотометр құралының көмегімен анықталды. Зерттеу нәтижесінде Алматы қаласының өзендерінде ауыр металдар анықталды, сондай-ақ олардың белгілі бір уақыт кезеңдеріндегі жинақталуы дәрежесі мен динамикасы зерттелді. Алматы өзендері қала аумағы арқылы ағып жатқан кезде ШПК-дан асатын айтарлықтай химиялық ластануға ие болды.

Түйін сөздер: судың ластану индексі, су сапасының көрсеткіші, ауыр металдар, ШМК, орташа концентрация, органолептикалық қасиеттер

Қаржыландыру: Бұл зерттеу сыртқы қаржыландыруды алған жоқ

Алғыс: Авторлар қажетті зерттеулер жүргізгені үшін Алматы технологиялық университетінің тамақ өнімдерінің сапасы мен қауіпсіздігін бағалау зертханасының қызметкерлеріне алғысын білдіреді.

Мүдделер қақтығысы: Мүдделер қақтығысы жоқ.

©Л.М. Калимолдина*, Г.С. Султангазиева, С.О. Абилкасова, 2024

Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан.

E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ УРОВНЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ХИМИЧЕСКИМИ ВЕЩЕСТВАМИ ВОДНЫХ РЕСУРСОВ ГОРОДА АЛМАТЫ

Калимолдина Лайла Маугеновна — к.т.н., сениор-лектор кафедры «Химия, химическая технология и экология», Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан
E-mail: kalimoldina.laila@mail.ru. Orcid ID 0000-0003-4397-9629;

Султангазиева Гульбарам Сапина — магистр, лектор кафедры «Химия, химическая технология и экология», Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан
E-mail: gul-2012-61@mail.ru. Orcid ID 0000-0001-7724-9558;

Абилкасова Сандугаш Орынбаевна — к.т.н., сениор-лектор кафедры «Химия, химическая технология и экология», к.т.н., Алматинский технологический университет, Алматы, Казахстан
E-mail: sandy_ao@mail.ru. Orcid ID 0000-0001-8322-4592.

Аннотация. В настоящее время загрязнение водных объектов является актуальной проблемой. Естественный режим воды нарушается путем сброса отходов на алматинские водные объекты. Высока также доля загрязнения речных вод стоком труб, бытовыми отходами, отходами промышленных предприятий. Целью данной работы является определение уровня загрязненности химическими веществами рек Алматы, так как изучение загрязнения воды основных рек, обеспечивающих водоснабжение города Алматы, является актуальным вопросом. Через город протекают реки Большая Алматинка и Малая Алматинка, а также их притоки – Есентай (Весновка), Ак-Кайин, Ремезовка, Жарбулак (Казачка), Карасу, Каргалы (Каргалинка). Река Есентай впадает в Большую Алматинку, далее впадает в Каскелен, река Малая Алматинка впадает в Капшагайское водохранилище. В соответствии с поставленной целью определены задачи исследования.

В качестве объекта исследования были реки Большая Алматинка, Малая Алматинка и Есентай. Исследование выявило различные уровни загрязнения химическими веществами. Проведен мониторинг по тяжелым металлам источников хозяйственно-питьевого водоснабжения города Алматы. В научно-исследовательской лаборатории по оценке качества и безопасности пищевых продуктов Алматинского технологического университета были отобраны пробы вод рек Большой Алматинки, Малой Алматинки и Есентай. Определены органолептические свойства состава отобранных проб и выявлены тяжелые металлы. Тяжелые металлы из проб речных вод определяли с помощью прибора спектрофотометра КФК 3.01. В результате исследований выявлены тяжелые металлы в реках г. Алматы, а также изучена их динамика и степень накопления в определенные периоды времени. Реки Алматы при протекании по территории города имели значительное химическое загрязнение, превышающее ПДК.

Ключевые слова: индекс загрязнения воды, тяжелые металлы, ПДК, средняя концентрация, органолептические свойства

Финансирование: данное исследование не получало внешнего финансирования.

Благодарность: авторы выражают свою благодарность сотрудникам лаборатории оценки качества и безопасности пищевых продуктов Алматинского технологического университета анализов.

Конфликт интересов: конфликта интересов нет.

Introduction

At the modern stage of urbanization, which is becoming global, water occupies a special place and importance in the normal functional activity of humans, living organisms and living things. Unfortunately, most of the particularly voluminous water reserves in the hydrosphere (the volume of the hydrosphere is 2.2 times larger than the lithosphere) are sources of water unsuitable for human consumption. This situation, which today poses the problem of fresh water to mankind as a global problem, it is predicted that in the coming decades most of the world's population may face the problem of fresh water. The qualitative changes in climate, water in rivers, lakes are now creating global scale problems. The southern capital with a population of more than 2 million people, an industrial center, is one of the most beautiful cities. These waters are used in industry and institutions, houses and apartments and contain various elements, chemicals, metals, petroleum products, detergents. Currently, the agglomeration of Almaty city is among the most ecologically disadvantaged areas of the Republic of Kazakhstan, where all natural

environments are highly polluted with toxic chemical substances of soil, water, vegetation, and atmosphere. In the restoration of the ecological state of the city, special attention is paid to small rivers of Almaty city, as they are a true natural filter, as well as used as the main source of water in water supply zones, hydro-power, recreation. Water from the rivers of Almaty city is characterized by high levels of pollution, especially heavy metals. There are 22 river and 4 artificial river reservoirs in Almaty city. There are 1252 objects located in the water protection zone of the rivers of Almaty. It was found that 1090 residential houses, 27 cafes, 20 stores, 5 wind farms, 45 garages, 26 enterprises and organizations are located in them. Air pollution negatively affects the health of citizens, soil crust, flora and fauna, surface and underground water. Therefore, the level of bacteriological pollution of Almaty's rivers has reached a high level (Zamora–Ledezma et al. 2021). The total length of river channels is 220.8 km, total area of water bodies —1116 hectares. The largest rivers of Almaty are: the Big Almaty River, the Small Almaty River, further the Yesentai River. The sources of water supply of the city are surface sources — Big and Malo-Almaty lakes, underground sources — Almaty, Talgar, Malo — Almaty fields. It is established that in the river Malaya Almatinka copper is 2.5 times higher, phenol is 2 times higher. The content of lead is about 1.1 MPC, and the content of other heavy metals is below MPC. In the Yesentai River, the maximum permissible concentration (MPC) of copper is 3 times higher. The Malaya Almatinka River runs along the northern side of the Zailiyskiy Alatau ridge, belongs to the basin of Lake Balkhash, the catchment area of which is 118 km² and reaches 710 km² at its confluence with the Kaskelen River (Bolisetty et al., 2019; Kumar et al., 2019; Review, 200; Enrique, 2007).

According to the latest data, the level of pollution of the water protection zone of Almaty rivers with heavy metals has reached a high level. For example, on the rivers Bolshaya Almatinka and Yesentai the permissible maximum high concentrations of copper have reached 3 times, on the river Malaya Almatinka — 2.5 times, phenol — 2 times. The dynamics of presence and level of accumulation of heavy metals (Cd, Pb, Cu, Zn) in the mentioned rivers in the period from 2021 to 2022 were studied and it was found that they are present in all three. For example: copper increased from 11 to 12 MPC in all years. Lead pollution was noted in the river Malaya Almatinka (1.1km), Bolshaya Almatinka (1.9km). The content of other heavy metals was below MPC (Alzhanova, 2003; Water resources of Kazakhstan in the new millennium, 2007; Sall, 2020; Kilaru, 2009; Kiran, 2022; Fu, 2020).

The ways of getting into the hydrosphere of heavy metals from the water environment polluted by man are different. Heavy metals include elements with metallic properties and relative atomic mass above 50. Another criterion is density equal to or greater than the specific gravity of iron (7.8 g/cm³). The most dangerous elements are: chromium (51.9); nickel (58.7); cobalt (58.9); copper (63.5); zinc

(65.4); arsenic (74.9); cadmium (112.4); mercury (200.6); lead (207.2). The chemical composition of water also affects the living organism. It is established that natural waters can contain various trace elements (iodine, bromine, fluorine, selenium, strontium, molybdenum, cobalt, etc.). Possessing high biological activity, they determine the normal course of many physiological and metabolic processes in the human body, participate in mineral metabolism and as catalysts of various biochemical reactions affect the overall metabolism. Micronutrients enter the human body from the external environment, their amount in the body directly depends on the presence in the soil, water, plants, etc. Deficiency or excess of certain trace elements in water and food products can lead to the violation of various functions and diseases. In addition to trace elements, the human body is affected by a large number of different salts in water. Thus, highly mineralized water contributes to the increase of hydrophilicity of body tissues, water retention in the body (Shakhawat et al. 2016). The taste of water compared to pure drinking water has 4 senses of taste (sweet, bitter, salty, sour). The other senses are related to taste. They are sweet, metallic, chlorine, ammonia and others. The evaluation of odor and taste is determined on a 5-point scale. Odors and unpleasant tastes are intensified at high temperature (Alimkulov et al., 2016; Water resources of Kazakhstan: assessment, forecast, management, 2012; Dostai, 2012; Dostai, et al., 2012; Qasem et al., 2021).

Water odor is one of the sensitive indicators of water quality, the change of which indicates pollution. In addition, a slight degree of water pollution can be determined by changes in odor, which exceeds the sensitivity of the developed chemical methods of investigation (Dostai et al., 2012). The odor of water is related to the presence of odorous substances in it through various currents. Almost all liquid organic substances give water a characteristic odor of dissolved gases, organic suspensions, and mineral salts. Odors can be natural (swamp, sulfur, rotten) and artificial (chlorine, phenol, oil, etc.) (Kenshimov et al., 2005; Posthuma et al., 2019).

To determine chromaticity, the water under test is compared with artificial standards prepared from a mixture of potassium chloroplatinate and cobalt chloride (platinum-cobalt scale) or potassium bichromate and cobalt sulfate (chromium-cobalt scale). The coloration of water corresponding to the coloration of a solution that contains 0.1 mg of platinum in 1 ml is called the degree of chromaticity.

Table 1. Color scale of drinking water

Name of color category	Water color, degrees
Very small	Up to 25
small	25–50
medium	50–80
high	80–120
very high	over 120

Materials and methods

To conduct the study, locations for collecting water samples with different assumed degree of pollution are selected. Water samples for heavy metal content in the Yesentai River were taken in 2 locations along the riverbed, at its intersection with Al-Farabi Avenue (No. 1) and Ryskulov Street (No. 2). On the Bolshaya Almatinka River were used data from 3 points: No. 1–9.1 km above the city, No. 2–0.5 km below the AHBK discharge, No. 3–0.5 km below the city. Water samples of the Malaya Almatinka River were analyzed for heavy metals content at 3 points: No. 1–0.5 km below the Mekhkombinat discharge, No. 2–2.0 km above the city, No. 3–4.0 km below Almaty city. In discussion and analysis of the database on heavy metal pollution of Almaty rivers.

Complex indicators of drinking water quality are characterized by certain attributes. Physical indicators of drinking water quality include temperature, taste, odor, turbidity and color. They determine the organoleptic quality of water. Chemical indicators are characterized by the chemical composition of water. The nature of odor was determined by the perceived odor (soil, chlorine, petroleum product, etc.) and the odor was evaluated according to the point system and intensity. The following indicators were found in the samples studied: in the samples of the large river Almaty odor intensity — no odor, the nature of odor manifestation — not observed, odor intensity score — 0-1 point. From the samples of the Esentai River odor intensity — weak, the nature of odor manifestation — weak grass-soil, odor intensity score — 2 points. In the samples of the Malaya Almatinka River odor intensity — weak, the nature of odor manifestation — weak grass-soil, odor intensity rating — 2 points. Water color was determined by photometric method by comparing the investigated water sample with distilled water. The color of the water sample of the Yesentai River is 18.88 degrees, which does not exceed the index according to SNiP 2.01.14–83 for drinking water. The color of the water sample from the Malaya Almatinka River is 19.60 degrees, which does not exceed the SNiP 2.01.14–83 for drinking water.

The Bolshaya Almatinka River (1.9 km) flows through mountainous, plain and transitional uplands. The watershed is considered to be a mountainous zone, which makes up 46 % of the river's territory. Water purity in this zone is at an average level.

Water transparency was determined by photometric method, comparing

the water sample with distilled water.

The color is determined by comparing the test sample with reference water. Table 1 presents a special color scale of drinking water. Turbidity of water determines the composition of fine suspension of insoluble particles, also — the presence of sediment, measured in microns and millimeters; determined after filtration of the sample by suspended, coarsely dispersed substances and dried residues — transparency is measured mainly visually by the level of turbidity of the water column. Turbidity is determined photometrically, depending on the quality of the light beam passing through it.

Water pollution index, as well as other indicators, are of great scientific, theoretical and purely practical importance. They are the main diagnostic method to identify the fact of pollution and its quantitative measure. Thanks to this, it is possible to understand whether the water can be used, for what specific purposes, and whether it is necessary to take measures for the ecological rehabilitation of the water body.

Samples were taken from different points of rivers, and a complex quality indicator — water pollution index (WPI) — was determined on the example of rivers (Bolshaya Almatinka, Malaya Almatinka and Yesentai) taken for studying surface water quality. WPI is one of the most important characteristics of water. It is the average ratio of the concentration of a particular pollutant to its MAC. WPI quantitatively shows how polluted the water in a river is.

“Very clean” waters are class I (WPI less than or equal to 0.3), “clean” waters are class II (WPI 0.3 to 1), “moderately polluted” waters are class III (WPI 1 to 2.5), “polluted” waters are class IV (WPI 2.5 to 4), “dirty” waters are class V (WPI 4 to 6), “very dirty” waters are class VI (WPI 6 to 10), and “extremely dirty” waters are class VII (WPI greater than 10).

For this purpose, samples were taken at certain intervals and measurements were carried out in accordance with the adopted methodology. As a result, a specific value is obtained, depending on which the degree of surface fresh water pollution is judged.

The assessment is carried out in accordance with the requirements of the guiding document RD 52.24.643–2002. This document specifies methodological principles and instructions for assessing the degree of pollution of surface waters of a particular water body (natural or artificial).

According to the methodology, sampling is carried out with subsequent analysis and identification of the fact of exceeding the MPC, for example, for iron content. The degree of exceedance is determined, e.g. 4.3 more than the established MPC norm. The number of cases per year or other period when these violations were detected is determined.

As a result, the water is assigned a certain class and discharge. The best grade is “conditionally clean”. Such a liquid does not contain substances with concentrations exceeding the MPC.

However, its purity cannot be 100 % guaranteed due to unforeseen factors (e.g. acid rain, sewage discharge).

The formula and methodology for calculating WPI depends on the water being studied, in this case for surface freshwater. In any case, the WPI is calculated taking into account data on a strictly limited number of pollutants. For example, determine the exceedance of MPC for 10 components and work only with these data, calculating their arithmetic mean.

In the case of surface water, the index is calculated according to the following formula:

$$WPI = \left(\sum_{i=1}^n \frac{C_i}{MPC_i} \right) / 6$$

As can be seen from the formula, the WPI measurement is carried out in several steps.

Determine the concentration of a specific pollutant C_i . Divide the obtained value by the MPC of this component (described in regulatory documents). Obtain the sum of such divisions for each pollutant from $i=1$ to n (the number of determined substances is always strictly limited, in this case is 6). Then divided by 6, i.e. the total number of pollutants ($n = 6$).

Heavy metals were determined in the Research Institute of Food Safety ATU, which has methods of analysis (electrochemical and spectrometric) and the necessary equipment for water quality control. Heavy metals from river water samples were determined using a spectrophotometer KFK 3.01.

Results and discussion

The level of pollution of the river Bolshaya Almatinka in 2021, as shown in Table 2, is 1.43 (3 class), ie has an average level of character. In 2022, this indicator is 1.57 (3 class), we can observe an increase in pollution level.

Table 2. Pollution level of the Bolshaya Almatinka River 2021-2022

Name of water object	Water Pollution Index (WPI) - water quality characteristic		The content of pollutants exceeding MAC for 2022		
	2021	2022	impurity	average concentration, mg/l	multiplicity of MAC increase
Bolshaya Almatinskaya River	1,43 (3 cl.) medium contaminated	1,57 (3 cl.) contaminated	Cu (II)	0,4	0,9
			Fe (III)	0,8	1,1
			Pb (IV)	0,9	1,0
			Cd (II)	0,10	0,4

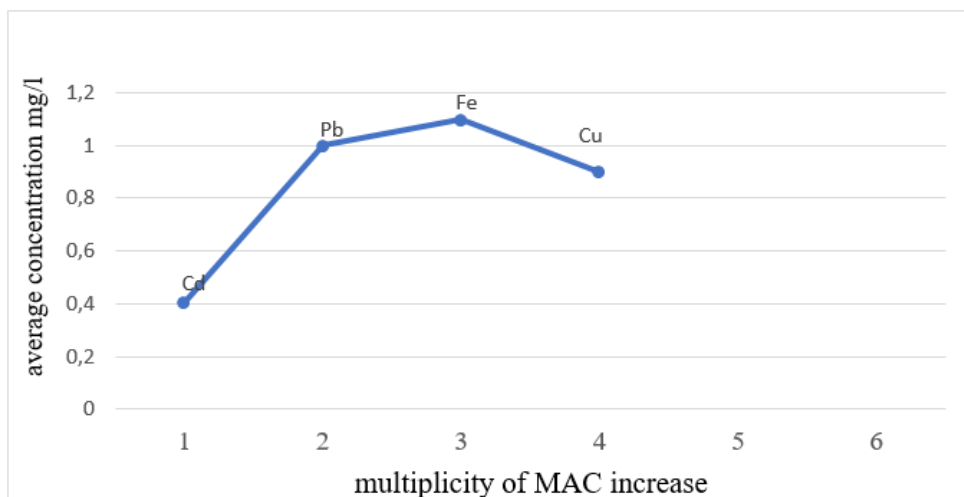


Figure 1 - Level of water pollution by impurities in the Bolshaya Almatinka River

As a result of the photometric study the following indicators were obtained: the transparency of water samples from the Bolshaya Almatinka River is 2.42 ml/dm³, which corresponds to SNiP 2.01.14–83 2.5 ml/dm³. Transparency of water samples from the Yesentai River is 2.45 ml/dm³, which corresponds to SNiP 2.01.14–83 2.5 ml/dm³. The transparency of water samples from the Malaya Almatinka River is 2.5 ml/dm³, which corresponds to SNiP 2.01.14-83 2.5 ml/dm³.

Heavy metals were detected in the composition of the studied surface water samples. The content of heavy metals in the samples taken from the research objects is presented in the table (Table 3). The danger of water pollution by these elements is associated with the fact that heavy metals in water are not detected organoleptically, i.e. are not noticeable by taste, smell and color.

Table 3. Average content of heavy metals in water of Almaty rivers

Name of water object	Quantity of pollutants compared to MAC, 2022	
	Heavy metals	Average MAC concentration, g/l
Average water index of Almaty rivers	Pb	0,001
	Cd	0,005
	As	0,001
	Al	0,004
	Cu	0,001
	Fe	0,001

The content of copper and iron from impurities in terms of pollutants raising MAC for 2022 is equal to 0.0049 and 0.0080 mg/l. The multiples of MAC elevation are equal to 4.9 and 1.1. Lead content is 0.00087 mg/l and cadmium content is 0.0010 mg/l, the MAC uplift multiples are 1.0 and 0.4. The content

of arsenic is 0.0012 mg/l. Only concentration of some chemical substances in waters of rivers Bolshaya Almatinka, Malaya Almatinka and Yesentai increases from MAC. The concentration of cadmium in the sample of the river Bolshaya Almatinka is 0.0061±0.003 mg/l and increased 6 times the MAC. On the concentration of copper in all samples under study exceeds the MAC level in the sample of the river Bolshaya Almatinka copper content is 0.0201±0.003 mg/l and exceeds the MAC by 20 times. Copper content in the sample of the Esentai River is 0.0191±0.003 mg/l and exceeds the MPC by 19 times. Copper content in the sample of the Malaya Almatinka River is 0.03±0.008 mg/l and exceeds the MPC 30 times. In samples in the control zone the level of MPC was not exceeded. According to literature sources, the cause is the ingress of copper in natural waters, as well as water from chemical plants, metallurgical industry, aldehyde reagents.

Table 4. Water pollution level in Malaya Almatinka 2021–2022

Name of water object	Water Pollution Index (WPI) - a characteristic of water quality		The content of pollutants that increase the content of MPC, for 2022		
	2021	2022	impurity	average concentration, mg/l	multiplicity of MAC increase
Malaya Almatinka River	1,68 (3 cl.) medium contaminated	1,47 (3 cl.) medium contaminated	CuF ₂ , Cu ₃ N ₂ , Cu(-NO ₃) ₂	0,0043 0,0092 0,0021	4,3 1,2 1,1

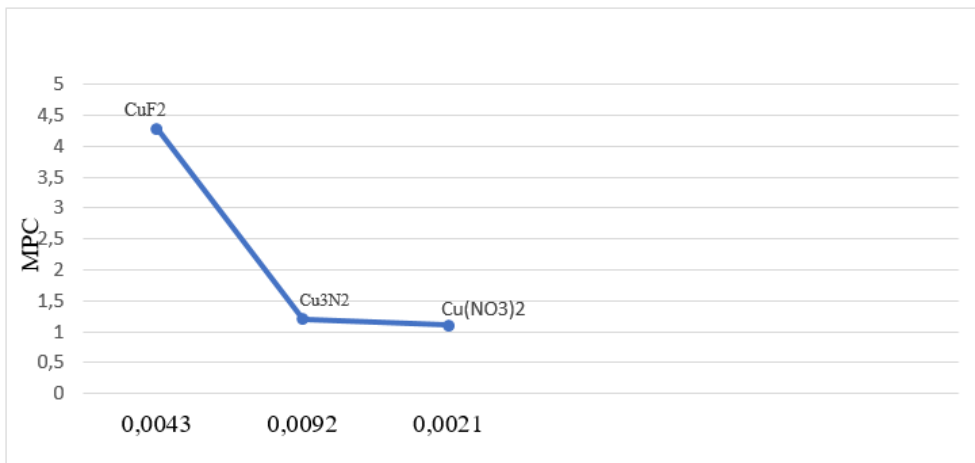


Figure 2 - Level of water pollution by impurities in the Malaya Almatinka River

As shown in Table 4, the water pollution index of the Malaya Almatinka River in 2021 is equal to - 1.68 (3kl), and in 2022 is equal to 1.47. This indicates a “moderately polluted” level for water quality characteristics. According to calculations for 2022, the water quality of the rivers Malaya Almatinka, Bolshaya Almatinka and Yesentai is considered “moderately polluted” (class 3, WPI — 1.52–2.60). In all rivers possible amounts of copper were traced, about 4.3 — 5.1 MAC. The content of fluoride and nitride nitrogen exceeding 1 MPC was monitored on the Small Almaty Lake, on the Big Almaty Lake — 1.1 MPC, iron content (pollution index on the Small Almaty Lake — 1.68, Yesentai - 1.58, Big Almaty Lake — 1.43).

The next object of study Esentai (Vesnovka) is a river in the Ili basin, left tributary of the Malaya Almatinka River. It originates from the northern slope of Zailiyskiy Alatau and flows through Almaty city. Its length is 43 km. The average annual water discharge is 0.06 m³/s. It has 8 tributaries with a total length of 19 km. Along the river 7 ponds were built [11].

Table 5. Water pollution level of the Yesentai River 2021–2022

Name of water object	Water Pollution Index (WPI) – a characteristic of water quality		The content of pollutants that increase the content of MPC, for 2022		
	2021	2022	impurity	average concentration, mg/l	multiplicity of MAC increase
Yesentai River	1,57 (3 кл.) medium contaminated	2,60 (4 кл.) contaminated	Cu	0,0051	5,1

According to calculations for 2021, the water quality of the rivers Malaya Almatinka, Bolshaya Almatinka and Yesentai is considered “moderately polluted” (class 3, WPI — 1.52–2.60). All rivers showed possible amounts of copper, about 4.3 — 5.1 MAC (Table 5).

The content of fluoride and nitride nitrogen exceeding 1 MPC was monitored on the Small Almaty Lake, on the Big Almaty Lake — 1.1 MPC, iron content (pollution index on the Small Almaty Lake — 1.68; Yesentai — 1.58; Big Almaty Lake — 1.43).

Table 6. Special characteristics of water with different types of iron according to SNiP 2.1.4.1074-01

Type of iron	Tap water	Water after infusion
divalent	pure	red-brown precipitate
trivalent	colored	red-brown precipitate

colloidal	yellow-brown	does not form a precipitate, cannot be filtered
dissolved organic	yellow-brown	does not form a precipitate, not filtered
dissolved inorganic	jelly-like formations opalescent film in the pipe system	

The odor of water is related to the presence of odorous substances in it through various currents. Almost all liquid organic substances give water the characteristic odor of dissolved gases, organic suspensions, and mineral salts. Odors can be natural (swamp, sulfur, rotten) and artificial (chlorine, phenol, oil, etc.).

Table 7. Determination of water odor according to SNiP 2.1.4.1074–01

Score	Terms	Characteristic definition
0	definite	Odorless
1	very weak	An odor that is not detected by the consumer but is detected by observation in a laboratory
2	faint	An odor that is detected by the consumer if they pay attention to it, but not realized if they do not pay attention to it themselves
3	perceptible	An odor that is easy to notice and that may cause negative feedback about it
4	definite	An odor that is unpleasant and which is not recommended for drinking
5	very high	An odor so strong that the water is unfit for drinking

Laboratory analysis of water taken in April 2021 revealed that many indicators are above the norm, especially in terms of metals and sulfates. Thus, the pH level was 9.33 with the norm of 6.0–8.5, magnesium — 51.0 mg/dm³ (norm — 40–50), copper — 0.01 mg/dm³ (norm — not more than 0.005), sodium — 290 mg/dm³ (norm — 120), sulfates — 182.3 mg/dm³ (norm — not more than 100). All this indicates that the river is not in the best condition, it is constantly exposed to pollution by solid waste, which led to imbalance in the ecosystem of the reservoir (Table 7).

Table 8. Institutions located in water protection zones of Almaty rivers

s/n	Water protection zones	quantity
1	residential buildings	1090
2	cafes	27
3	stores	20
4	Wind protection stations	5
5	garage	45
6	businesses and organizations	26

Conclusion

The water issue in Almaty has always taken a back seat to problems with air, soil and greenery. But improper development, human factor and production processes meanwhile pollute water and threaten the health of citizens. The problem of not only water quality but also water quantity is important. The main reserves of water resources of the republic are concentrated in surface and underground sources. Water reserves in the country and cities are not infinite. But this is not only our problem: already now about one billion people around the world do not have direct access to clean drinking water. The level of water supply averages 20 thousand cubic meters per 1 square kilometer of the country's territory.

The information base of the study was scientific and statistical documentation of surface water monitoring of rivers in Almaty. The presence of heavy metals (Cd, Pb, Cu, Fe) in the rivers of Almaty was shown, their dynamics and degree of accumulation were studied from 2020 to 2022. Copper pollution of Almaty rivers was significant: from 11 to 12 MPC in all 3 rivers and in all analyzed years. Pb pollution was observed in the Malaya Almatinka River (1.1 MPC) and in the Bolshaya Almatinka River (1.9 MPC). The content of other heavy metals was below MPC. Thus, chemical pollution of the Malaya Almatinka River can be attributed to the average, as there was an excess of MPC, the content of other metals did not exceed the MPC. Analysis of water samples of the Big Almatinka river for Cd content showed MPC 0.005 mg/ml, the obtained values of Cd pollution were significantly lower than MPC. Exceedance of Pb pollution (2nd class of hazard, MPC 0.005 mg/ml in the Yesentai River was not observed.

In the 1st half of 2022, the water quality of the rivers Bolshaya Almatinka, Malaya Almatinka and Yesentai decreased compared to the previous year. Along the rivers debris is piled up, some parts of the water, water quality decreases day by day, and most importantly, downstream water enters the groundwater of the city. Thus, pollution of rivers of Almaty city by heavy metals is considered significant (in all 3 rivers), other heavy metals were present, but their content was within MPC and did not pose a threat to aquatic inhabitants of rivers.

REFERENCES

- Alzhanova B.S., Sataev K.S., Aitzhanova Z. (2003). Water Resources of South Kazakhstan Province, Science and Education of South Kazakhstan. — 32:20–22.
- Alimkulov S.K., Tursunova A.A., Saparova A.A., Zagidullina A.R., Kulebaev K.M. (2016). Regularities of territorial distribution of river flow resources of the south and southeast of Kazakhstan in modern conditions of geographical environment development // *Issues of Geography and Geoecology*. — 1, — 23–30.
- Bolisetty S., Peydayesh M., Mezzenga R. (2019). Sustainable technologies for water purification from heavy metals: review and analysis, *Chemical Society Reviews*. — T. 48. — 2. — 463–487. <https://doi.org/10.1039/C8CS00493E>
- Dostai J.D. (2012). Natural waters of Kazakhstan: resources, regime, quality and forecast. Water resources of Kazakhstan: assessment, forecast, management (monograph). — 2, — 330 .
- Dostai J.D., Alimkulov S.K., Saparova A.A. (2012). Water resources of Kazakhstan: assessment, forecast, management. River flow resources. Renewable surface water resources of the south and south-east of Kazakhstan. T. VII, book – 2. – 360.
- Dostai J.D., Galperin R.I., Davletgaliev S.K., Alimkulov S.A. (2012). Natural waters of Kazakhstan: resources, regime, quality and forecast // *Voprosy geografii i geoekologii*. — 4, — 18–24.
- Enrique Sánchez, Manuel F. (2006). Colmenarejo, Juan Vicente, Angel Rubio, María G. García, Lissette Travieso, Rafael Borja, (2007) Use of the water quality index and dissolved oxygen deficit as simple indicators

of watersheds pollution, *Ecological Indicators*, — 7. — Issue – 2. — 315–328. — ISSN 1470–160X. <https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2006.02.005>

Environmental Sciences Europe. 1:1-7.<https://www.infoeco.ru/index.php?id=54#:~:text>

Fu Z., Xi S. (2020). The effects of heavy metals on human metabolism // *Toxicology mechanisms and methods*. — 3. — 167–176. <https://doi.org/10.1080/15376516.2019.1701594>

Kumar V. et al. (2019). Global evaluation of heavy metal content in surface water bodies: A meta-analysis using heavy metal pollution indices and multivariate statistical analyses, *Chemosphere*. — T. 236: 124364. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.124364>

Kilaru H.V., Ponnusamy S.K., Rames C.P. (2019). A review on heavy metal pollution, toxicity and remedial measures: Current trends and future perspectives. — *Journal of Molecular Liquids*. — 290. — 111197. — ISSN 0167–7322. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111197>

Kiran, Ruchi Bharti, Renu Sharma (2022). Effect of heavy metals: An overview, *Materials Today: Proceedings*, — 51. — Part 1. — 2022, — 880–885. — ISSN 2214–7853. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.06.278>

Kenshimov A.K., Ibatullin S.R., Zaurbek A.K. (2005). Problems of water resources utilization in the Republic of Kazakhstan. *Water economy of Kazakhstan*. — 4, — 229–233.

Posthuma L. et al. (2019). Chemical mixtures are important drivers of impacts on the ecological status of surface waters in Europe.

Review “Water Resources of Kazakhstan in the New Millennium”. UN Development Program. — 2000. www.undp.kz/library/publications/files.

Shakhawat Chowdhury, M.A. Jafar Mazumder, Omar Al-Attas, Tahir Husain (2016). Heavy metals in drinking water: Occurrences, implications, and future needs in developing countries, *Science of The Total Environment*. — 569–570. — 476–488. — ISSN 0048–9697. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.06.166>

Sall M.L., Diaw A.K.D., Gningue-Sall D. et al. (2020). Toxic heavy metals: impact on the environment and human health, and treatment with conducting organic polymers, a review. *Environ Sci Pollut Res* — 2. — 29927–29942. <https://doi.org/10.1007/s11356-020-09354-3>

Qasem N.A.A., Mohammed R.H. & Lawal D.U. (2021). Removal of heavy metal ions from wastewater: a comprehensive and critical review. *npj Clean Water*. — 4. — 36. <https://doi.org/10.1038/s41545-021-00127-0>

Water resources of Kazakhstan in the new millennium. Review. UNRWA Kazakhstan Series of Publications № UNDPKAZ 07. — Almaty. — 2004.

Water resources of Kazakhstan: assessment, forecast, management. — VOL. VII. River flow resources of Kazakhstan. — Book 1. Renewable resources of surface waters of Western, Northern, Central and Eastern Kazakhstan (monograph). Under the scientific editorship of R.I. Galperin. — Almaty. — 2012. — 684 p.

Zamora-Ledezma C. et al. (2021). Heavy metal water pollution: A fresh look about hazards, novel and conventional remediation methods, *Environmental Technology & Innovation*. — 22. — 101504. <https://doi.org/10.1016/j.eti.2021.101504>

© **B.K. Kenzhaliyev, A.K. Koizhanova*, M.B. Yerdenova, D.R. Magomedov,
K.M. Smailov, 2024**

Satbayev University, the JSC “Institute of Metallurgy and Ore Beneficiation”,
Almaty, Kazakhstan.

E-mail: a.koizhanova@satbayev.university

OPTIMIZATION OF COPPER EXTRACTION FROM WASTE ORES USING BIOCHEMICAL AND CHEMICAL OXIDATION METHODS

B.K. Kenzhaliyev — doctor of technical sciences, professor, General Director in the “Institute of Metallurgy and Ore Beneficiation”, Kazakhstan, Almaty, Shevchenko str., 29/133

E-mail: bagdaulet_k@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0003-1474-8354>;

A.K. Koizhanova — candidate of technical sciences, head of the laboratory of special methods of hydrometallurgy. Satbayev University, the JSC “Institute of Metallurgy and Ore Beneficiation”, Kazakhstan, Almaty, Shevchenko str., 29/133

E-mail: a.koizhanova@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-9358-3193>;

M.B. Yerdenova — researcher, master. Satbayev University, the JSC “Institute of Metallurgy and Ore Beneficiation”, Kazakhstan, Almaty, Shevchenko str., 29/133

E-mail: m.erdenova@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0002-7496-5097>;

D.R. Magomedov — researcher, master. Satbayev University, the JSC “Institute of Metallurgy and Ore Beneficiation”, Kazakhstan, Almaty, Shevchenko str., 29/133

E-mail: d.magomedov@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-7216-2349>;

K.M. Smailov — junior researcher, master. Satbayev University, the JSC “Institute of Metallurgy and Ore Beneficiation”, Kazakhstan, Almaty, Shevchenko str., 29/133

E-mail: k.smailov@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0002-9277-5254>.

Abstract. This article presents the results of research on the processing of waste ores from copper production at one of the deposits in Kazakhstan. The copper content in samples of various lithological types and taken from different sampling points varies from 0.2 % to 0.9 %. On average, the copper content was 0.3 % on the southern side of the dump and 0.28 % on the northern side. Phase analysis of the dump samples revealed that the primary rock-forming minerals are quartz, albite, muscovite, and clinocllore, with significant amounts of malachite and atacamite observed in certain areas. Detailed mineralogical analysis also identified the presence of sulfide minerals such as pyrite, chalcopyrite, and chalcocite. For this type of deposit, the most effective processing method is the use of biohydrometallurgical heap leaching technology. In the experiments on percolation leaching, the following options were considered: the use of trichloroisocyanuric acid (TCCA) as a chemical oxidizer and the adapted culture of *A. ferrooxidans* as a bio-oxidizer. Standard sulfuric acid leaching served as the control variant. The application of TCCA resulted in an increase in copper extraction into the solution only during the first 7 cycles, after which the effectiveness of chemical oxidation decreased. The highest efficiency was observed with preliminary bacterial oxidation: 76.08 % of copper was

extracted into the productive solution over 28 cycles of irrigation. The productive solutions obtained from all variants underwent the complete technological cycle of copper hydrometallurgical production. As a result of the extraction and re-extraction processes, electrolyte solutions were produced that fully met the quality parameters required for electrolysis. During the electrolysis stage, 30.8 g of copper was deposited on the cathode from these electrolyte solutions, corresponding to a current efficiency of 94.6 %.

Keywords: copper-containing raw materials, biochemical method, leaching, *Acidobacillus ferrooxidans*, trichloroisocyanuric acid, extraction

This study was conducted with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan within the framework of program-targeted financing (grant BR21882140).

© Б.К. Кенжалиев, А.К. Койжанова*, М.Б. Ерденова, Д.Р. Магомедов,
К.М. Смаилов, 2024

Satbayev University; «Металлургия және кен байыту институты» АҚ, Алматы,
Қазақстан.

E-mail: a.koizhanova@satbayev.university

ҮЙІНДІ КЕНДЕРДЕН МЫС АЛУДЫ БИОХИМИЯЛЫҚ ЖӘНЕ ХИМИЯЛЫҚ ТОТЫҚТЫРУ ӘДІСТЕРІМЕН ОҢТАЙЛАНДЫРУ

Кенжалиев Б.К. — техника ғылымдарының докторы, профессор. Бас директор «Металлургия және кен байыту институты» АҚ, Қазақстан, Алматы, Шевченко к-сі, 29/133

E-mail: bagdaulet_k@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0003-1474-8354>;

Койжанова А.К. — техника ғылымдарының кандидаты, гидрометаллургияның арнайы әдістері зертханасының меңгерушісі. Satbayev University, «Металлургия және кен байыту институты» АҚ., Қазақстан, Алматы қ., Шевченко к-сі, 29/133

E-mail: a.koizhanova@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-9358-3193>;

Ерденова М.Б. — кіші ғылыми қызметкер, магистр. Satbayev University, «Металлургия және кен байыту институты» АҚ., Қазақстан, Алматы қ., Шевченко к-сі, 29/133

E-mail: m.erdenova@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0002-7496-5097>;

Магомедов Д.Р. — ғылыми қызметкер, магистр. Satbayev University, «Металлургия және кен байыту институты» АҚ., Қазақстан, Алматы қ., Шевченко к-сі, 29/133

E-mail: d.magomedov@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-7216-2349>;

Смаилов К.М. — кіші ғылыми қызметкер, магистр. Satbayev University, «Металлургия және кен байыту институты» АҚ., Қазақстан, Алматы қ., Шевченко к-сі, 29/133

E-mail: k.smailov@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0002-9277-5254>.

Аннотация. Мақалада Қазақстанның кен орындарының бірінде мыс өндірісінің үйінді кендерін өңдеу бойынша зерттеулердің нәтижелері келтірілген. Әр түрлі жыныстардың үлгілеріндегі және әртүрлі іріктеу нүктелерінен алынған мыс мөлшері 0,2-ден 0,9 % - ға дейін өзгереді. Үйіндінің оңтүстік жағы бойынша орташа есеппен мыс мөлшері 0,3 %, солтүстік жағынан – 0,28 % құрады. Пышак сынамаларының фазалық талдауы тау жыныстарының негізгі бөлігі кварц, альбит, мусковит, клинохлор болып табылатындығын анықтады, мыс үйінділерінен бірқатар жерлерде малахит пен атакамиттің айтарлықтай мөлшері байқалды. Минералдардың тотыққан түрлерінен басқа, егжей-тегжейлі минералогиялық талдау пирит, халькопирит, халькозин және т.б. сияқты сульфидті минералды түзілімдердің фрагменттерін де тіркеді. кен орындарының бұл түрі үшін өңдеудің ең тиімді әдісі

үйінді шаймалаудың биогидрометаллургиялық технологиясын қолдану болады. Химиялық тотықтырғыш ретінде перколяциялық шаймалау бойынша трихлоризоцианур қышқылын (ТХЦҚ) қолдану нұсқасы қарастырылды, био тотықтырғыш ретінде бейімделген *A. Ferrooxidans* мәдениеті де қолданылды. Химиялық тотықтырғыш ретінде перколяциялық шаймалау бойынша трихлоризоцианур қышқылын (ТХЦҚ) қолдану нұсқасы қарастырылды, био тотықтырғыш ретінде бейімделген *A. Ferrooxidans* мәдениеті де қолданылды. Стандартты күкірт қышқылын шаймалау бақылау нұсқасы ретінде қызмет етті. ТХЦҚ көмегімен тотығудың химиялық әдісін қолдану нәтижесінде басқа нұсқалармен салыстырғанда ерітіндіге мыс алудың өсуі алғашқы 7 циклде ғана байқалды. Ең үлкен тиімділік бактериялардың алдын-ала тотығу нұсқасында байқалды, суарудың 28 циклі үшін 76,08 % мыс өнімді ерітіндіге алынды. Барлық нұсқалардың алынған өнімді ерітінділері мыс гидрометаллургиялық өндірісінің толық технологиялық цикліне ұшырады. Экстракция және қайта экстракция процестерінің нәтижесінде электролизді жүргізу үшін қажетті сапалық параметрлерге толық сәйкес келетін электролит ерітінділері жасалды. Электролиз сатысында жинақталған электролит ерітінділерінен 30,8 г мыс катодқа тұндырылды, бұл ток арқылы 94,6 % - ға тең экстракция береді.

Түйін сөздер: құрамында мыс бар шикізат, биохимиялық әдіс, сілтілеу, *Acidobacillus Ferrooxidans*, трихлоризоцианур қышқылы, экстракция

Бұл зерттеу бағдарламалық-нысаналы қаржыландыру (BR21882140 гранты) шеңберінде Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің қаржылық қолдауымен жүргізілді.

**©Б.К. Кенжалиев, А.К. Койжанова*, М.Б. Ерденова, Д.Р. Магомедов,
К.М. Смаилов, 2024**

АО «Институт металлургии и обогащения», Алматы, Казахстан.

E-mail: a.koizhanova@satbayev.university

ОПТИМИЗАЦИЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ МЕДИ ИЗ ОТВАЛЬНЫХ РУД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИОХИМИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ОКИСЛЕНИЯ

Кенжалиев Б.К. — доктор технических наук, профессор. Генеральный директор АО «Институт металлургии и обогащения», Казахстан, Алматы, ул. Шевченко, 29/133

E-mail: bagdaulet_k@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0003-1474-8354>;

Койжанова А.К. — кандидат технических наук, заведующая лабораторией специальных методов гидрометаллургии. Satbayev University, АО «Институт металлургии и обогащения», Казах-стан, Алматы, ул. Шевченко, 29/133

E-mail: a.koizhanova@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-9358-3193>;

Ерденова М.Б. — научный сотрудник, магистр. Satbayev University, АО «Институт металлургии и обогащения», Казахстан, Алматы, ул. Шевченко, 29/133

E-mail: m.erdanova@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0002-7496-5097>;

Магомедов Д.Р. — научный сотрудник, магистр. Satbayev University, АО «Институт металлургии и обогащения», Казахстан, Алматы, ул. Шевченко, 29/133

E-mail: d.magomedov@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0001-7216-2349>;

Смаилов К.М. — младший научный сотрудник, магистр. Satbayev University, АО «Институт металлургии и обогащения», Казахстан, Алматы, ул. Шевченко, 29/133

E-mail: k.smailov@satbayev.university, <https://orcid.org/0000-0002-9277-5254>.

Аннотация. В данной статье представлены результаты исследований по переработке отвальных руд медного производства одного из месторождений Казахстана. Содержание меди в пробах различных типов породообразования и взятых из разных точек отбора варьируется от 0,2 % до 0,9 %. В среднем, по южной стороне отвала содержание меди составило 0,3 %, а по северной — 0,28 %. Фазовый анализ проб отвала показал, что основная масса породы представлена кварцем, альбитом, мусковитом и клинохлором, а в некоторых участках были обнаружены значительные количества малахита и атакамита. Подробный минералогический анализ также выявил наличие сульфидных минералов, таких как пирит, халькопирит и халькозин. Для данного типа месторождений наиболее эффективным методом переработки является использование биогидрометаллургической технологии кучного выщелачивания. В рамках экспериментов по перколяционному выщелачиванию были рассмотрены следующие варианты: применение трихлоризоциануровой кислоты (ТХЦК) в качестве химического окислителя и адаптированной культуры *A. ferrooxidans* в качестве биоокислителя. Стандартное серноокислотное выщелачивание служило контрольным вариантом. Применение ТХЦК привело к увеличению извлечения меди в раствор только в течение первых 7 циклов, после чего эффективность химического окисления снизилась. Наибольшая результативность наблюдалась при предварительном бактериальном окислении: за 28 циклов орошения в продуктивный раствор было извлечено 76,08 % меди. Полученные продуктивные растворы всех вариантов подвергались полному технологическому циклу гидрометаллургического производства меди. В результате процессов экстракции и реэкстракции были получены растворы электролитов, полностью соответствующие качественным параметрам для проведения электролиза. На стадии электролиза из этих растворов было осаждено 30,8 г меди на катоде, что соответствует извлечению по току равному 94,6 %.

Ключевые слова: медьсодержащее сырье, биохимический метод, выщелачивание, *Acidobacillus Ferrooxidans*, трихлоризоциануровой кислоты, экстракция

Данное исследование было проведено при финансовой поддержке Министерства науки высшего образования Республики Казахстан в рамках программно-целевого финансирования (грант BR21882140).

Введение

Одной из ключевых особенностей большинства медных месторождений Казахстана является снижение запасов высококачественного сырья и накопление значительных объемов забалансовых отвалов с низким содержанием меди в пределах 0,1–0,5 %. Для переработки забалансового медного сырья, представленного преимущественно окисленной формой медьсодержащих минералов, применяется стандартная гидрометаллургическая технология, включающая серноокислотное выщелачивание, последующую жидкостную экстракцию и электролиз.

Однако, помимо забалансовых руд и отвалов с явно выраженной сульфидной или окисленной формой меди в минералах, существуют многочисленные месторождения со сложным минералогическим составом. В таких случаях, несмотря на преобладание окисленной формы меди, в составе месторождений также встречаются значительные примеси сульфидных и железосодержащих минералов, таких как пирит и арсенопирит. Хотя окисленные формы меди легко

растворяются при сернокислотном выщелачивании, присутствие сульфидов двухвалентного железа и других элементов значительно увеличивает расход серной кислоты в процессе гидрометаллургической переработки. Дополнительно, минералы с различными комбинациями железа, кальция, карбонатов и силикатов (например, тремолит, клинохлор, кальцит) также могут оказывать негативное влияние на процесс выщелачивания серной кислотой.

Современные технологии кучного выщелачивания и жидкостной экстракции меди детально исследованы как отечественными, так и зарубежными учеными (Koizhanova et al., 2023: 54; Nyamdelger et al., 2023: 26). Важным аспектом текущих исследований является применение бактерий для повышения эффективности извлечения меди из руд. Процесс, известный как «бактериальное выщелачивание», представляет собой усиленное выщелачивание металлов с помощью микробов.

Экономические преимущества бактериального выщелачивания подтверждены многочисленными исследованиями. Предварительная биообработка окисленных руд демонстрирует значительное увеличение процента извлечения меди. Исследования показали, что адаптация бактерий перед процессом биовыщелачивания существенно повышает его эффективность.

Особую роль в этих процессах играют бактерии *Thiobacillus ferrooxidans*, которые участвуют в выщелачивании сульфидных руд. В ходе биогидрометаллургического процесса эти бактерии превращают нерастворимые сульфиды металлов в растворимые сульфаты. *Thiobacillus ferrooxidans* окисляют все сульфиды металлов и получают углерод, необходимый для их роста, из углекислого газа. Эти бактерии развиваются в кислой среде с pH от 1,0 до 4,8 и температуре от 3 до 40 °C, при оптимальных условиях pH 2–3 и температуре 28 °C. Тионовые бактерии встречаются в водоемах, почве и месторождениях серных и сульфидных руд, проявляя свою активность в присутствии кислорода.

В процессе биогидрометаллургического выщелачивания металлов осуществляется орошение рудного материала или техногенных отходов, содержащих сульфиды металлов, растворами серной кислоты и солями железа, а также вводятся жизнеспособные тионовые бактерии. Для интенсификации бактериального выщелачивания используется кислород воздуха. В результате фильтрации раствора через материал, содержащий сульфиды металлов, происходит переход металлов в растворимое состояние. Таким образом, кучное выщелачивание представляет собой эффективный метод переработки окисдных медных забалансовых руд месторождений Республики Казахстан, параметры которого определяются экспериментально в зависимости от химического и фазового составов руд.

Отечественная и мировая практика демонстрируют успешное применение бактериальных культур в качестве окисляющего реагента (Wohlgemuth 2014: 7; Golian et al., 2023: 150). Основными преимуществами бактериального окисления являются высокая эффективность преобразования двухвалентного железа в трехвалентное и экономичность данной технологии.

При разработке технологии биовыщелачивания необходимо учитывать резко-континентальный климат месторождений Казахстана. Хотя данная технология широко используется в ЮАР, Австралии и странах Латинской Америки,

показательным является пример финской компании Talvivaara. В 2009–2010 годах, внедрив биохимическую технологию на месторождении Колмисоппи, компания добилась увеличения производства в 2,7 раза даже в условиях северных широт (Tezuyapar Kara et al., 2023: 3350; Cho et al., 2023: 5997; Akhmetov et al., 2022: 549; Li et al., 2021: 178; Seitkamal et al., 2020: 972; Foroutan et al., 2021: 8).

Материалы и методы

Объектом исследования является отвальная руда медного производства одного из месторождений Казахстана. Цель работы заключается в разработке уникальной технологии переработки отвалов, содержащих окисленные минералы меди, перекрытые значительными включениями сульфидных минералов и железо-кальциевых силикатов. Использование бактерий в качестве катализатора окислительных процессов позволит значительно повысить степень извлечения меди в продуктивный раствор.

Эксперименты по перколяционному выщелачиванию предполагают лабораторное моделирование процессов кучного выщелачивания. Были отобраны различные технологические пробы, представляющие различные составные фрагменты отвала: порода со значительными включениями малахита; проба, представленная в основном конгломератом; проба, представленная алевритом; и проба песчаника, сосредоточенная в основном у основания отвала.

Экспериментальная часть

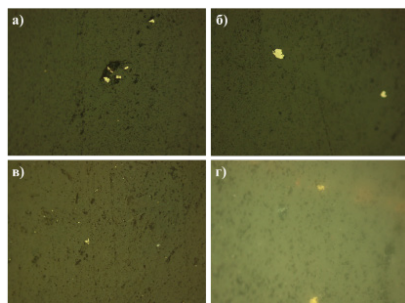
Перед началом перколяционного выщелачивания были определены базовые параметры процесса: концентрация серной кислоты в выщелачивающем растворе – 2,5 %, плотность орошения – 10 л/м² в час. Также перед основным орошением серной кислотой производилось влагонасыщение пробы и расчет влагоемкости. Площадь орошения вычисляется по формуле: $S = \pi R^2$. Зная площадь орошаемой поверхности и заданную плотность орошения в л/м² в час, рассчитывается необходимый объем раствора.

Загрузка проб рудного материала в перколяторы осуществлялась в следующих массовых соотношениях: малахит – 5 %, конгломерат – 30 %, алеврит – 40 %, песчаник – 25 %. Все породы, за исключением песчаника, предварительно перемешивались и усреднялись. 10 % песчаника загружалось на дно перколятора для имитации основания отвала, а оставшиеся 15 % равномерно перемешивались с остальной рудной массой. Пробы каждого образца породы и смешанная рудная масса для загрузки предварительно подвергались рентгенофлуоресцентному анализу. По результатам анализа, представленным в таблице 1, были определены составы каждого отдельного образца и смешанной усредненной пробы, а также проведены расчеты теоретического состава смешанной пробы в зависимости от массовых соотношений образцов.

Таблица 1 – Элементный состав образцов проб отвала и смешанной пробы образцов с заданными массовыми соотношениями, %

Элемент	Наименование компонентов, %				Показатели смешанных проб, %	
	Малахит	Конгломерат	Алевролит	Песчаник	Фактическое	Теоретическое
O	53,64	50,979	54,209	52,471	50,339	52,777
Na	1,119	1,318	1,802	1,079	1,567	1,4419
Mg	1,246	0,642	1,368	1,331	1,103	1,13485
Al	5,806	3,485	6,789	6,975	4,867	5,79515
Si	22,022	27,846	27,843	25,795	25,708	27,041
P	0,054	0,048	0,062	0,068	0,053	0,0589
S	0,269	0,031	0,116	0,026	0,479	0,07565
Cl	0,012	0,015	0,013	0,015	0,026	0,01405
K	1,147	0,579	1,199	1,662	0,834	1,126
Ca	5,953	5,162	0,855	2,12	3,044	2,718
Ti	0,435	0,239	0,476	0,522	0,312	0,414
V	0,006	0,006	0,007	0,01	0	0,0074
Mn	0,178	0,132	0,066	0,163	0,123	0,116
Fe	2,921	1,38	2,676	3,797	2,289	2,579
Cu	0,448	0,103	0,178	0,028	0,15	0,1315
Zn	0,014	0,007	0,013	0,015	0,024	0,0117
Rb	0,009	0,003	0,007	0,012	0,005	0,00715
Sr	0,011	0,007	0,007	0,014	0,01	0,00895
Zr	0,01	0,006	0,011	0,013	0,01	0,00995
Ba	0	0	0,1	0	0,416	0,04
Pb	0,006	0	0	0,016	0,01	0,0043

Образцы проб, взятые из различных точек отбора, были изучены методом минералогического анализа в отраженном свете с использованием микроскопа OLIMPUS-BX 51. Основную часть проб составляют нерудные минералы, среди которых отчетливо видны очень мелкие зерна пирита размером от 0,01 до 0,05 мм. Зерна пирита встречаются как в свободной форме, так и в сростках с нерудной массой, причем мелкий сульфидный материал сохраняет свои характерные обломочные и неправильные формы. Единичные зерна халькопирита, размером до 0,02 мм, также были обнаружены. Изображения сульфидных фрагментов пробы представлены на рисунке 1.



а) - пирит в сростке нерудной массы; б) - свободные зерна пирита; в) - очень мелкие зерна пирита;
г) - зерна халькопирита

Рисунок 1 – Фотографии минералогического анализа пробы при увеличении в 400 раз

После определения элементного состава проб медного отвала, основные фазовые компоненты были выявлены с помощью рентгенофазового анализа, проведенного на дифрактометре D8 Advance (BRUKER) с использованием излучения $\text{Cu} - \text{K}\alpha$. Результаты этого анализа представлены в таблицах 2 и 3. Согласно полученным данным, основная масса породообразующего материала в пробах как из северной, так и из южной части отвала, состоит из кварца. В значительных количествах также присутствуют альбит, кальцит, клинохлор и мусковит.

Таблица 2 – Результаты фазового состава северной стороны отвала

Название компонента	Формула	Содержание в образцах, %		
		Точка 1	Точка 2	Точка 3
Кварц	SiO_2	61,5	42,6	63,1
Альбит	$\text{Na}(\text{AlSi}_3\text{O}_8)$	18,1	32,5	24,7
Кальцит/карбонат кальция	CaCO_3	12,2	-	4,4
Мусковит	$\text{H}_2\text{KAl}_3\text{Si}_3\text{O}_{12}$	4,9	5,2	3,7
Клинохлор	$(\text{Mg,Fe})_6(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	3,3	-	4,1
Атакамит	$\text{Cu}_2\text{Cl}(\text{OH})_3$	-	10,1	-
Гидросульфат калия	$\text{K}_3\text{H}(\text{SO}_4)_2$	-	5,5	-
Гидрат сульфита серы калия	$\text{K}_2(\text{S}_3(\text{SO}_3)_2)(\text{H}_2\text{O})_{1,5}$	-	4,2	-
Гематит	Fe_2O_3			
Тенардит	Na_2SO_4	-	-	-

Таблица 3 – Результаты фазового состава южной стороны отвала

Название компонента	Формула	Содержание в образцах, %		
		Точка 1	Точка 2	Точка 3
Кварц	SiO_2	73,9	74,3	64,7
Альбит	$\text{NaAl}_{0,91}\text{Si}_3\text{O}_8$	10,2	11,7	14,8
Малахит	$\text{Cu}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$	9,1	-	-
Клинохлор	$(\text{Mg,Fe})_6(\text{Si,Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	4,0	6,7	6,1
Мусковит	$\text{H}_4\text{K}_2(\text{Al,Fe})_6\text{Si}_6\text{O}_{24}$	2,7	3,4	5,5
Кальцит/карбонат кальция	CaCO_3		3,8	8,8

Обсуждение результатов

В итоге смешанная руда медного отвала была загружена в три перколятора для проведения трех вариантов перколяционного выщелачивания (рисунок 2): 1) стандартное сернокислотное выщелачивание без дополнительного окисления; 2) выщелачивание с предварительным бактериальным окислением; 3) выщелачивание с предварительным химическим окислением. Окисление минерального сырья проводилось на стадии влагонасыщения. Для перколятора с бактериальным окислением был использован раствор с культурой *A. ferrooxidans* в питательной среде, адаптированной к соединениям меди. В перколяторе с химическим окислением применялся 0,5 % раствор трихлоризоциануровой кислоты (ТХЦК). В перколяторе без предварительного окисления для влагонасыщения использовался слабый 0,5 % раствор серной кислоты.

Влагонасыщение во всех трех вариантах составило 10 %. После влагонасыщения и окислительной обработки был запущен процесс выщелачивания. Подача раствора серной кислоты с концентрацией 25 г/л осуществлялась перистальтическими насосами, в соответствии с заданной базовой плотностью орошения – 10 л/м² в час. Объемы оборотных растворов составляли 2 литра. После прохождения раствора через рудный материал в перколяторе измерялся объем получаемых продуктивных растворов, анализировались остаточное содержание серной кислоты и концентрация ионов меди. Продуктивные растворы доукреплялись до концентрации серной кислоты 25 г/л и доводились до объема 2 литра, после чего использовались в новом оборотном цикле выщелачивания.



Рисунок 2 – Загруженные перколяторы для трех вариантов выщелачивания

Первое экстракционное извлечение меди из продуктивных растворов было произведено после 17 циклов выщелачивания. К тому моменту в растворах накопились достаточно высокие концентрации меди (> 3 г/л). После экстракции процесс выщелачивания продолжался с использованием рафината, полученного в результате извлечения меди органическим растворителем из продуктивного раствора. Последующая экстракция была проведена на завершающем этапе перколяционного выщелачивания после 28 циклов растворов. Результаты перколяционного выщелачивания и динамика извлечения меди в продуктивный раствор, как стандартными, так и окислительными методами выщелачивания, представлены в таблице 4 и на рисунке 3.

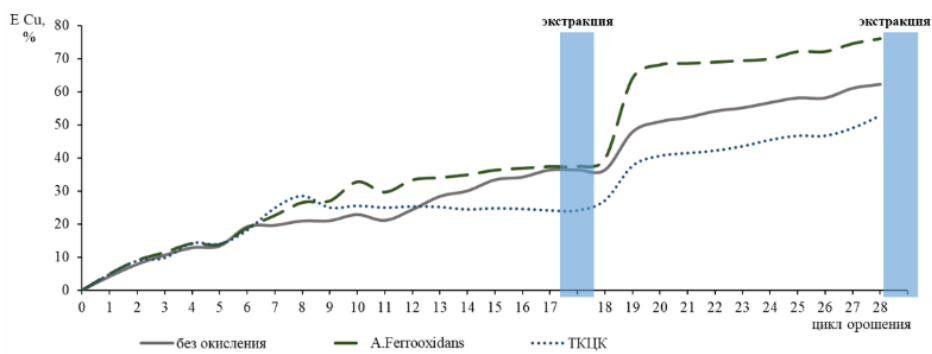
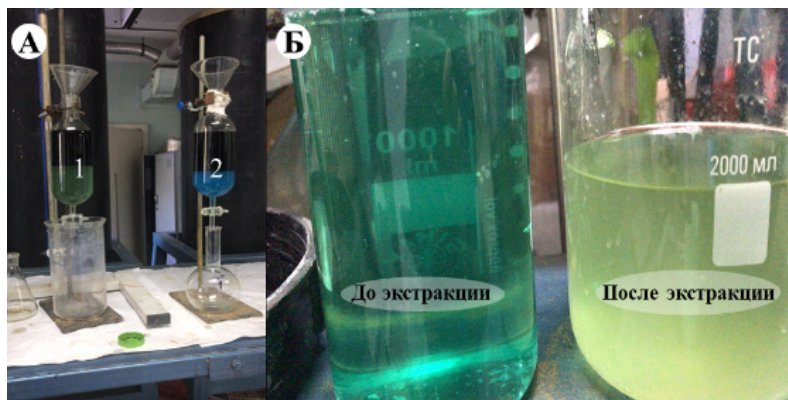


Рисунок 3- Динамика извлечения в продуктивный раствор

Из данных таблицы и графика видно, что на начальном этапе выщелачивания, в первые 7 циклов орошения, извлечение меди было примерно на одном уровне для всех вариантов. Затем в перколяторе с химическим окислением наблюдалось увеличение извлекаемой меди в раствор, которое продолжалось несколько дней. Однако, эффект химического окисления постепенно снижался, тогда как в варианте с бактериальным окислением фиксировался устойчивый рост извлечения меди в раствор. При достижении концентраций меди в растворах в диапазоне 3–4 г/л интенсивность извлечения в оборотные продуктивные растворы временно снизилась.

Для восстановления динамики извлечения меди была проведена серия экспериментов по экстракции и ре-экстракции, что позволило переместить часть растворенной меди из продуктивных растворов в электролиты с помощью органической фазы. Экстракция производилась с использованием селективного к меди экстрагента Lix 984, растворенного в концентрации 10 % в органическом растворителе Escaid. Соотношение водной и органической фаз на стадии экстракции составляло В:О = 1:1, а на стадии ре-экстракции – В:О = 3:5. Разделение и отстаивание фаз осуществлялось в делительных воронках (рисунок 4).



- а) разделение водной и органической фаз в делительных воронках: 1 – экстракция, 2 – ре-экстракция;
б) изменение цвета продуктивного раствора.

Рисунок 4 – Процессы экстракции и ре-экстракции, отстаивание и разделение в воронках

На первом этапе экстракции в электролит было переведено 57,45 % меди из раствора стандартного серноокислотного выщелачивания, 66,79 % из раствора с бактериальным окислением и 69,02 % из раствора с использованием окислителя ТХЦК. Помимо того, что часть меди остается в оборотном рафинате, некоторое количество также остается в органической фазе, так как использование свежеприготовленных растворов органической фазы предполагает однократные потери меди. Эти потери обусловлены тем, что органическая фаза фиксирует некоторое количество меди, которое не удаляется даже в процессе промывки. Однако дальнейшего накопления меди в органической фазе не происходит – ее количество после полной ре-экстракции обычно остается на уровне 0,2-0,5 г/л.

На второй стадии экстракции в электролит было переведено 84,04 % меди при стандартном серноокислотном варианте, 84,4 % при бактериальном окислении и 78,06 % при химическом окислении ТХЦК. Расчет экстракционных показателей для каждого варианта получения продуктивного раствора приведен в таблице 5. Концентрация меди в полученных электролитах соответствовала требуемым параметрам (не менее 30 г/л и не более 60 г/л). Все полученные электролиты использовались на следующей технологической стадии – электроосаждении меди в электролизной ванне. Сила тока составляла 2,5 А.

Таблица 4 – Результаты перколяционного выщелачивания медьсодержащей пробы

Параметры продуктивных растворов																				
Cu, г/л	H ₂ SO ₄ , г/л	Fe ²⁺ , г/л	Fe ³⁺ , г/л	V, л	H ₂ SO ₄ , мл	E Cu, %	Cu, г/л	H ₂ SO ₄ , г/л	Fe ²⁺ , г/л	Fe ³⁺ , г/л	V, л	H ₂ SO ₄ , мл	E Cu, %	Cu, г/л	H ₂ SO ₄ , г/л	Fe ²⁺ , г/л	Fe ³⁺ , г/л	V, л	H ₂ SO ₄ , мл	E Cu, %
Без окисления, только H ₂ SO ₄ 25 г/л																				
0,5	5,1	1,1	0,2	2,0	22,1	4,17	0,63	3,70	2,3	0,1	2,0	23,67	4,94	0,66	0,00	1,40	0,10	2,0	27,8	4,89
0,94	5,4	1,2	0,2	2,0	21,8	7,83	1,15	5,88	2,5	0,15	2,0	21,24	9,02	1,20	1,08	1,50	0,10	2,0	26,6	8,89
1,41	11,3	1,8	0,2	1,8	16,5	10,58	1,62	11,3	2,7	0,15	1,8	16,48	11,44	1,65	6,80	1,50	0,10	1,6	21,7	9,78
1,54	9,8	2,2	0,2	2,0	16,9	12,83	1,80	10,8	3,3	0,15	2,0	15,78	14,12	1,92	7,35	1,70	0,10	2,0	19,6	14,22
1,78	10,3	2,5	0,3	1,8	17,5	13,35	1,96	12,25	3,3	0,2	1,8	15,53	13,84	2,10	10,10	2,10	0,10	1,8	17,7	14,00
2,3	12,0	2,5	0,3	2,0	14,4	19,17	2,4	16,0	3,3	0,2	2,0	10,00	18,82	2,45	10,80	2,40	0,10	2,0	15,8	18,15
2,35	12,7	2,7	0,3	2,0	13,7	19,58	2,88	14,7	3,5	0,2	2,0	11,44	22,59	3,36	11,20	2,40	0,15	2,0	15,3	24,89
2,51	11,76	3,2	0,3	2,0	14,7	20,92	3,38	13,72	3,5	0,2	2,0	12,53	26,51	3,85	8,82	2,40	0,15	2,0	18,0	28,52
2,65	11,5	3,4	0,3	1,3	19,5	14,35	4,12	16,4	3,6	0,2	1,6	13,20	25,85	3,41	9,80	2,50	0,15	0,8	23,4	10,10
2,74	5,0	3,4	0,3	2,0	22,2	22,83	4,18	12,3	3,6	0,2	2,0	14,11	32,78	3,45	5,00	2,50	0,15	2,0	22,2	25,56
2,81	12,3	3,4	0,3	1,8	15,5	21,08	4,20	13,5	3,6	0,2	1,8	14,28	29,65	3,30	9,00	2,80	0,20	1,3	21,3	16,85
2,92	15,92	3,6	0,3	2,0	10,1	24,33	4,25	17,4	3,8	0,2	2,0	8,44	33,33	3,42	17,60	2,80	0,20	2,0	8,2	25,33
3,4	20,09	3,8	0,3	2,0	5,5	28,33	4,34	19,6	4,3	0,2	2,0	6,00	34,04	3,40	10,29	3,00	0,20	2,0	16,3	25,19
3,6	15,4	4,0	0,3	2,0	10,7	30,0	4,45	16,9	4,3	0,2	2,0	9,00	34,90	3,30	18,40	3,00	0,20	2,0	7,3	24,44
4,0	16,4	4,0	0,3	2,0	9,6	33,33	4,63	15,7	4,5	0,23	2,0	10,33	36,31	3,35	17,40	3,20	0,25	2,0	8,4	24,81
4,1	14,1	4,2	0,3	2,0	12,1	34,17	4,70	16,0	4,5	0,23	2,0	10,00	36,86	3,32	14,50	3,20	0,25	2,0	11,7	24,59
4,36	13,47	4,2	0,33	2,0	12,8	36,33	4,77	16,66	4,5	0,23	2,0	9,27	37,41	3,26	13,72	3,20	0,28	2,0	12,5	24,15
Экстракция: 10 % Liq984 / 90 % Escacid										Экстракция: 10 % Liq984 / 90 % Escacid										
1,35	25,0	4,5	0,4	2,0	0,0	36,33	1,09	25,0	4,8	0,25	2,0	0,0	39,75	0,52	25,0	3,5	0,3	2,0	0,0	27,17
3,03	12,74	4,5	0,4	1,8	15,0	47,81	4,46	15,2	4,8	0,25	1,8	12,58	64,12	2,03	11,5	3,5	0,3	1,75	16,6	37,64
3,1	19,1	4,5	0,4	2,0	6,6	50,92	4,5	17,64	4,9	0,25	2,0	8,18	68,17	2,14	15,4	3,5	0,32	2,0	10,67	40,67

Продолжение таблицы 4

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
3.25	19.6	4.7	0.5	2.0	0.0	52.17	4.55	26.95	4.9	0.25	2.0	0.0	68.58	2.24	26.0	3.5	0.3	2.0	0.0	41.5
3.48	10.3	4.7	0.5	2.0	16.3	54.08	4.6	17.15	5.0	0.25	2.0	8.72	69.0	2.33	12.25	3.5	0.3	2.0	14.17	42.25
3.79	14.2	4.75	0.5	2.0	12.0	56.67	4.72	18.4	5.1	0.25	2.0	7.33	70.0	2.72	14.7	3.7	0.35	2.0	11.44	45.5
3.6	14.7	4.7	0.5	2.0	11.4	55.08	4.65	17.15	5.0	0.25	2.0	8.72	69.42	2.49	15.2	3.55	0.3	2.0	10.89	43.58
3.96	17.2	4.9	0.5	2.0	0.0	58.08	4.98	17.2	5.1	0.25	2.0	0.0	72.17	2.87	17.2	3.7	0.35	2.0	0.0	46.75
4.2	18.86	4.9	0.55	1.8	8.9	56.58	5.11	20.3	5.2	0.28	1.8	7.48	68.99	3.02	18.4	3.7	0.35	1.8	9.38	45.48
4.31	15.93	4.95	0.55	2.0	0.0	61.0	5.27	18.13	5.2	0.28	2.0	0.0	74.58	3.15	14.7	3.9	0.35	2.0	0.0	49.08
4.45	10.29	5.09	0.6	2.0	16.3	62.17	5.45	17.15	5.2	0.28	2.0	8.72	76.08	3.6	10.29	3.9	0.38	2.0	16.34	52.83

Таблица 5 – Баланс меди в процессе экстракции и ре-экстракции

Наименование продуктов	Параметры растворов								
	Без окисления, H ₂ SO ₄ 25 г/л			A.Ferrooxidans + H ₂ SO ₄ 25 г/л			ТХЦК + H ₂ SO ₄ 25 г/л		
	Cu, г/л	V, л	%	Cu, г/л	V, л	%	Cu, г/л	V, л	%
Экстракция 1									
PLS	4,36	2,0	100,00	4,77	2,0	100,00	3,26	2,0	100,00
Raf	1,35	2,0	31,0	1,09	2,0	22,9	0,52	2,0	16,0
Органика	2,02	0,5	11,6	1,976	0,5	10,4	1,96	0,5	15,0
Электролит	16,7	0,3	57,45	21,24	0,3	66,79	15,0	0,3	69,02
Cu из оборота, г	6,02			7,36			5,48		
Экстракция 2									
PLS	4,45	2,0	100,00	5,45	2,0	100,00	3,6	2,0	100,00
Raf	0,6	2,0	13,5	0,8	2,0	14,7	0,7	2,0	19,4
Органика	0,44	0,5	2,5	0,2	0,5	0,9	0,36	0,5	2,5
Электролит	45,0	0,3	84,04	55,2	0,3	84,40	37,0	0,3	78,06
Cu из оборота, г	13,72			16,66			11,28		

Для осаждения использовался медный катод с изначальной массой 94,2 г, а в качестве анодов служили нерастворимые свинцовые пластинки. Электрохимический эквивалент меди составляет $A=0,329$ мг/А·сек. Процесс электролиза длился 11 часов. Теоретический выход металла при электролизе вычисляется по формуле:

$$G = A \cdot I \cdot t, \quad (1)$$

где G – количество выделенного вещества; I – сила электрического тока; A , t – время, сек.

Подставив значения:

$$G = 0,329 \text{ мг/А} \cdot \text{сек} \cdot 2,5 \text{ А} \cdot 11 \cdot 60 \cdot 60 = 32\,571 \text{ мг} = 32,571 \text{ г}. \quad (2)$$

По завершению процесса электролиза масса катода составила 125 г (рисунок 15). Таким образом, на катоде было осаждено 30,8 г меди. Извлечение меди составляет:

$$E_{\text{Cu}} = G_{\text{практ.}} / G_{\text{теор.}} \cdot 100 \% = 30,8 / 32,571 \cdot 100 \% = 94,6 \%$$

Заключение

Таким образом, был изучен вещественный состав медного минерального сырья и произведен отбор проб отвала. Основная масса рудной породы отвала представлена конгломератами, алевритом и песчаником. Среди медных минералов наблюдаются залежи малахита, халькопирита и атакамита. Содержание меди в пробах различного породообразования, взятых из разных точек отвала, варьируется от 0,2 до 0,9 %. В среднем, по южной стороне отвала содержание меди составило 0,3 %, по северной – 0,28 %. Фазовый анализ проб отвала показал, что основная масса породы представлена кварцем, альбитом, мусковитом и клинохлором, а также значительными количествами малахита и атакамита в ряде участков. Подробный минералогический анализ выявил, что помимо окисленных форм минералов, присутствуют также фрагменты сульфидных минеральных образований, таких как пирит, халькопирит и халькозин.

Исследования химического, фазового и минералогического составов медьсодержащего сырья отвала показали неоднородность и многообразие форм залегания меди и других примесных элементов. В рамках перколяционного выщелачивания были рассмотрены три варианта: применение трихлоризоциануровой кислоты (ТХЦК) в качестве химического окислителя, адаптированной культуры *A. ferrooxidans* в качестве биоокислителя, и стандартное сернокислотное выщелачивание в качестве контрольного варианта. Применение ТХЦК показало увеличение извлечения меди в раствор только в течение первых 7 циклов, после чего эффективность химического окисления снизилась, и за 28 циклов выщелачивания показатель извлечения составил 52,83 %. Стандартное сернокислотное выщелачивание за тот же период привело к извлечению 62,17 % меди. Наибольшая эффективность наблюдалась при предварительном бактериальном окислении, где за 28 циклов было извлечено 76,08 % меди в продуктивный раствор.

Все продуктивные растворы подвергались полному технологическому циклу гидрометаллургического производства меди. В результате процессов экстракции и ре-экстракции были получены растворы электролитов, соответствующие качественным параметрам для проведения электролиза. На стадии электролиза из этих растворов было осаждено 30,8 г меди на катоде, что дало извлечение по току, равное 94,6 %.

В ходе экспериментов были установлены оптимальные условия для наращивания бактериальной культуры *A. ferrooxidans*, адаптированной к химическому составу медьсодержащего минерального сырья. Было определено, что для более эффективного бактериального окисления минерального сырья целесообразно проводить предварительную обработку бактериальным раствором при pH не менее 1,5. При снижении pH менее 1,2 наблюдается отрицательное влияние на выживаемость бактериальных клеток. Оптимальный температурный режим для роста и развития культуры *A. ferrooxidans* находится в диапазоне 20-30 °C. Применение наиболее благоприятных условий для роста бактериальных клеток (pH = 2,3 и t = 20-30 °C) позволяет увеличить их концентрацию с $0,1 \times 10^6$ кл/см³ до $2,8 \times 10^6$ кл/см³.

Были определены основные механизмы каталитического воздействия микроорганизмов на окислительные процессы, происходящие при окислении сульфидных минералов медьсодержащего сырья. Показано, что наличие бактериальной культуры существенно ускоряет разложение сульфидных

минералов, включая халькопирит и халькозин. Лучшие результаты селективности были получены при использовании экстрагента серии LIX984, который обеспечивал максимальное извлечение меди из раствора — 94,0 %, при минимальном извлечении железа — 0,83 %.

При оценке емкости органической фазы по меди было установлено, что оптимальным соотношением потоков продуктивного раствора и органической фазы является $O:B = 1:2$. Превышение этого соотношения $O:B > 1:5$, приводит к повышению вязкости органической фазы из-за избыточного насыщения, что может привести к образованию сгустков.

REFERENCES

- Akhmetov L.I. Puntus I.F. Narmanova R.A. Appazov N.O. Funtikova T.V. Regepova A.A. Filonov A.E. (2022). Recent Advances in Creating Biopreparations to Fight Oil Spills in Soil Ecosystems in Sharply Continental Climate of Republic of Kazakhstan. *Processes* 2022. — 10. — 549. DOI: 10.3390/PR10030549
- Cho K.H. Kim H.S. Lee C.G. Park S.J. Choi N.C. (1997). A Comparative Study on Bioleaching Properties of Various Sulfide Minerals Using *Acidiphilium cryptum*. *Appl. Sci.* 2023. — 13. — 5997. DOI: 10.3390/APP13105997
- Foroutan A., Bazpors Ghaziani S., Abbas Zadeh Haji Abadi M. et al. (2021). Intensification of Zinc Bioleaching from a Zinc–Iron Bearing Ore by Condition Optimization and Adding Catalysts. *Trans Indian Inst.* — Met 74. — 1–8. (2021). DOI: 10.1007/S12666-020-02117-1
- Golian S. El-Idrissy H. Stambuk D. (2023). Using CMIP6 Models to Assess Future Climate Change Effects on Mine Sites in Kazakhstan. *Hydrology* 2023. — 10. — 150. <https://doi.org/10.3390/hydrology10070150>
- Koizhanova A., Kenzhaliyev B., Magomedov D., Kamalov E., Yerdenova M., Bakrayeva A., Abdylidayev N. (2023). Study of Factors Affecting the Copper Ore Leaching Process. *ChemEngineering*. — 7 — 54 — DOI: 10.3390/chemengineering7030054
- Li M., Wen J. (2021). Recent progress in the application of omics technologies in the study of bio-mining microorganisms from extreme environments. *Microb Cell Fact.* 2021. — Sep 8. — 20(1):178. DOI: 10.1186/S12934-021-01671-7
- Nyamdelger Shirchinnamjil, Narangarav Tumen-Ulzii, Nemekhbayar Davaadorj, Enkhtuul, Surenjav (2023). Treatment of Copper-Containing Leaching Residue by Sulfation Roasting Followed by Acid/Water Leaching. *Mongolian Journal of Chemistry*. — 18–26 — DOI: 10.5564/MJC.V24I50.1310
- Tezyapar Kara I., Kremser K., Wagland S.T. et al. (2023). Bioleaching Metal-Bearing Wastes and By-Products for Resource Recovery: A Review. *Environmental Chemistry Letters*. — 21. — 3329–3350. (2023). DOI: 10.1007/S10311-023-01611-4
- Seitkamal K.N. Zhappar N.K. Shaikhutdinov V.M. Shibayeva A.K., Ilyas S. Korolkov I.V., Kim H. (2020). Bioleaching for the Removal of Arsenic from Mine Tailings by Psychrotolerant and Mesophilic Microbes at Markedly Continental Climate Temperatures. *Minerals*. 2020. — 10. — 972. DOI: 10.3390/MIN10110972
- Wohlgemuth R. (2014). 7.04 Oxidation by Microbial Methods. DOI: 10.1016/B978-0-08-097742-3.00705-9

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

ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 183–197

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.288>

MPHTI 34.15.19

© **G.M. Madybekova^{1*}, T.T. Turebayeva², B.Zh. Mutaliev², D.M. Lesbekova²,
A.B. Issayeva³, 2024**

¹South Kazakhstan Pedagogical University named after O. Zhanibekov, Kazakhstan,
Shymkent;

²South Kazakhstan University named after M. Auezov, Kazakhstan, Shymkent;

³Kazakh-British Technical University, Kazakhstan, Almaty.

E-mail: Galiya56@list.ru

ADVANTAGES AND POTENTIAL OF USING MICROCAPSULATION ME- THODS FOR DELIVERY OF ACTIVE AGENTS: A REVIEW

Madybekova Galiya Mutalievna — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, South Kazakhstan Pedagogical University named after O. Zhanibekov. 160012 Shymkent, Kazakhstan

E-mail: galiya56@list.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1970-8143>;

Mutaliev Botagoz Zhaksylykovna — Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, South Kazakhstan University named after M. Auezov. 160012, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: mbota@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5295-4410>;

Turebayeva Tamila Timurkyzy — PhD student, South Kazakhstan University named after M. Auezov. 160012, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: tamilaturebayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1047-1108>;

Lesbekova Dana Maratkyzy — master's student, South Kazakhstan University named after M. Auezov. 160012, Shymkent, Kazakhstan

E-mail: lesbekova101@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0004-5997-9441>;

Issayeva Assem Bakhytzhanovna — PhD, Scientific researcher, Kazakh-British Technical University. 050000 Almaty, Kazakhstan

E-mail: isa-aseem@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6727-0257>.

Abstract. This article presents an overview of microencapsulation methods, focusing on the emulsification method and spray drying. The use of microcapsules in various fields, including medicine, food and cosmetic industries, is considered. An important aspect is to ensure the uniformity and stability of microcapsules, as this is critical for efficient delivery of active substances. Particular attention is paid to the membrane emulsification method, which makes it possible to create microcapsules with high monodispersity. The advantages of this method are highlighted in a study involving phage encapsulation using microspheres. This method is scalable and provides a tool for precise delivery of active substances. Limitations of spray drying such as loss of volatile compounds and change in particle size are also considered. In the context of this problem, Fernandez, Borges and Botrel propose the use of gum arabic to improve the quality of microcapsules and protect core materials from oxidation. The final analysis of various microencapsulation methods and proposed solutions allows a better understanding of the advantages and limitations of this technology, as well as its potential for innovation in modern industry and scientific research.

Keywords: Microencapsulation, essential oils, enzymes, probiotics, controlled release, protection, encapsulation methods

Financing. *The research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (grant no. AP19679879).*

Conflict of interest: *The authors declare that there is no conflict of interest*

© Г.М. Мадыебекова^{1*}, Т.Т. Туребаева², Б.Ж. Муталиева², Д.М. Лесбекова²,
А.Б. Исаева³, 2024

¹Ө. Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті,
Шымкент, Қазақстан;

²М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан;

³ Қазақстан-Британ техникалық университеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: Galiya56@list.ru

БЕЛСЕНДІ АГЕНТТЕРДІ ЖЕТКІЗУ ҮШІН МИКРОКАПСУЛЯЦИЯЛЫҚ ӘДІСТЕРДІ ҚОЛДАНУДЫҢ АРТЫҚШЫЛЫҚТАРЫ МЕН ПОЦЕНЦИАЛЫ: ШОЛУ

Мадыебекова Ғалия Мүтәліқызы — химия ғылымдарының кандидаты, доцент, Ө. Жәнібеков атындағы Оңтүстік Қазақстан педагогикалық университеті, Шымкент, Қазақстан

E-mail: galiya56@list.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1970-8143>;

Муталиева Ботагөз Жақсылыққызы — химия ғылымдарының кандидаты, доцент, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан

E-mail: mbota@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5295-4410>;

Туребаева Тамила Тимурқызы — PhD докторанты, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан

E-mail: tamilaturebayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1047-1108>;

Лесбекова Дана Маратқызы — магистрант, М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан

E-mail: lesbekova101@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0004-5997-9441>;

Исаева Асем Бахытжанқызы — PhD, Қазақстан-Британ техникалық университетінің ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан

E-mail: isa-aseм@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6727-0257>.

Аннотация. Бұл мақалада эмульгациялау және шашыратқыш кептіру әдістеріне назар аударатын отырып, микрокапсуляция әдістеріне шолу берілген. Микрокапсулаларды әртүрлі салаларда, соның ішінде медицинада, тамақ өнеркәсібінде және косметикада қолдану қарастырылған. Маңызды аспект микрокапсулалардың біркелкілігі мен тұрақтылығын қамтамасыз ету болып табылады, өйткені бұл белсенді заттардың тиімді жеткізілуі үшін өте маңызды. Мембраналық эмульсия әдісіне ерекше назар аударылады, бұл монодисперстілігі жоғары микрокапсулаларды жасауға мүмкіндік береді. Бұл әдістің артықшылықтары микросфералардың көмегімен фагтарды инкапсуляциялауды қамтитын зерттеуде көрсетілген. Бұл әдіс ауқымды және белсенді заттарды дәл жеткізу құралын қамтамасыз етеді. Ұшқыш қосылыстардың жоғалуы және бөлшектердің өлшемдерінің өзгеруі сияқты бүркумен кептірудің шектеулері де қарастырылады. Осы мәселенің контекстінде Фернадес, Борхес және Ботрель микрокапсулалардың сапасын жақсарту және негізгі материалдарды тотығудан

қорғау үшін араб сағызын пайдалануды ұсынады. Өртүрлі микрокапсуляция әдістерін және ұсынылған шешімдерді қорытынды талдау осы технологияның артықшылықтары мен шектеулерін, сондай-ақ оның заманауи өнеркәсіп пен ғылыми зерттеулердегі инновациялар үшін әлеуетін жақсырақ түсінуге мүмкіндік береді.

Түйін сөздер: микрокапсуляция, эфир майлары, ферменттер, пробиотиктер, бақыланатын босату, қорғау, инкапсуляция әдістері

Қаржыландыру. *Зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті (грант № AP19679879) қаржыландырады.*

Мүдделер қақтығысы: *Авторлар осы мақалада мүдделер қақтығысы жоқ деп мәлімдейді.*

© Г.М. Мадыбекова^{1*}, Т.Т. Туребаева², Б.Ж. Муталиева², Д.М. Лесбекова²,
А.Б. Исаева³, 2024

¹Южно-Казахстанский педагогический университет имени О.Жанибекова, Шымкент, Казахстан;

²Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

³Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Казахстан.

E-mail: Galiya56@list.ru

ПРЕИМУЩЕСТВА И ПОТЕНЦИАЛ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДОВ МИКРОКАПСУЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ДОСТАВКИ АКТИВНЫХ АГЕНТОВ: ОБЗОР

Мадыбекова Галия Муталиевна — кандидат химических наук, доцент, Южно-Казахстанский педагогический университет имени О. Жанибекова, Шымкент, Казахстан
E-mail: galiya56@list.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1970-8143>;

Муталиева Ботагоз Жаксылыковна — кандидат химических наук, доцент, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан
E-mail: mbota@list.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5295-4410>;

Туребаева Тамила Тимурқызы — PhD студент, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

E-mail: tamilaturebayeva@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1047-1108>;

Лесбекова Дана Маратқызы — магистрант, Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан

E-mail: lesbekova101@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0004-5997-9441>;

Исаева Асем Бахытжановна — PhD, научный сотрудник, Казахстанско-Британский Технический Университет. 050000 Алматы, Казахстан

E-mail: isa-aseм@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6727-0257>.

Аннотация. Данная статья представляет обзор методов микрокапсулирования, фокусируясь на методе эмульгирования, ионотропного гелеобразования и распылительной сушке. Рассматривается применение микрокапсул в различных областях, включая медицину, пищевую и косметическую промышленности. Важным аспектом является обеспечение равномерности и стабильности микрокапсул, так как это критически важно для эффективной доставки активных веществ. Особое внимание уделено методу мембранного эмульгирования, который позволяет создавать микрокапсулы с высокой моносферностью. Пре-

имущества этого метода подчеркиваются на примере исследования, включающего инкапсуляцию фагов с использованием микросфер. Этот метод обладает масштабируемостью и предоставляет инструмент для точной доставки активных веществ. Также рассматриваются ограничения распылительной сушки, такие как потеря летучих соединений и изменение размера частиц. В контексте этой проблемы авторы Фернандес, Боргес и Ботрель предлагают использование гуммиарабика для улучшения качества микрокапсул и защиты материалов сердцевинки от окисления. Итоговый анализ различных методов микрокапсулирования и предложенных решений позволяет лучше понять преимущества и ограничения данной технологии, а также её потенциал для инноваций в современной промышленности и научных исследованиях.

Ключевые слова: микрокапсулирование, эфирные масла, ферменты, пробиотики, контролируемое высвобождение, защита, методы инкапсуляции

Финансирование. Исследование финансируется Комитетом по науке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19679879).

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Введение

Микроинкапсуляция, универсальная технология, включающая включение активных агентов в защитные матрицы, привлекла значительное внимание в различных отраслях промышленности благодаря своей способности решать проблемы, связанные с контролируемым высвобождением, стабильностью и адресной доставкой различных агентов. В данной статье углубимся в мир микроинкапсуляции и изучим ее потенциальное применение для инкапсулирования различных агентов.

Современные технологии микрокапсулирования предоставляют уникальные решения для различных областей применения, от медицины до пищевой и косметической промышленности. Микрокапсулы, микроскопические оболочки, содержащие активные вещества, обеспечивают контролируемое высвобождение и защиту от воздействия внешних факторов. Это позволяет значительно расширить возможности применения активных компонентов и улучшить свойства продуктов (Doering и др., 2022).

Однако, несмотря на многообещающие перспективы микрокапсулирования, существуют определенные вызовы и ограничения, которые требуют дальнейших исследований и разработок. Один из таких вызовов – это обеспечение устойчивости и равномерности микрокапсул, что имеет критическое значение для успешной реализации многих приложений. Особенно это актуально при использовании метода эмульсий, который, хотя и является популярным, имеет потенциальные проблемы с неоднородностью размеров капсул.

В данной статье мы рассмотрим метод мембранного эмульгирования, который представляет собой надежный подход к созданию микрокапсул с улучшенной равномерностью и размерами, подходящими для специфических потребностей. Преимущества этого метода, такие как высокая монодисперсность и управляемые параметры процесса, делают его привлекательным инструментом для создания стабильных микрокапсул (Nauman и др., 2019).

Однако стоит также обратить внимание на ограничения и проблемы, связанные с другим распространенным методом – распылительной сушкой. Несмотря на ее преимущества, такие как долгий срок хранения и простота обращения, у неё есть свои ограничения, такие как потеря летучих соединений и изменение размера частиц.

Эта статья анализирует различные методы микрокапсулирования, показывает их преимущества и ограничения, а также представляет возможное решение для улучшения стабильности и равномерности микрокапсул. В результате этого анализа можно будет лучше понять потенциал микрокапсулирования и его роль в современной науке и промышленности.

Методы микрокапсулирования

Метод эмульгирования включает образование эмульсий, в которых активные агенты диспергированы в непрерывной фазе с использованием эмульгатора. Эмульсия впоследствии затвердевает посредством охлаждения или химического сшивания, что приводит к образованию микрокапсул. Этот метод широко используется для инкапсулирования эфирных масел, обеспечения защиты от окисления и испарения и обеспечения контролируемого высвобождения в различных областях применения (Sugeng и др., 2020).

Процесс микрокапсулирования начинается с создания эмульсии — смешивания двух несмешивающихся жидкостей, обычно воды и масла, с помощью эмульгатора, который обеспечивает стабильность этой смеси. Далее, к этой эмульсии добавляют материал для образования оболочки капсулы. В случае метода эмульсий для микрокапсулирования чаще всего используют полимеры, такие как альгинаты, гелевая оболочка из которых образуется в процессе дальнейшего обработки.

Важной частью процесса является процедура, называемая «закаливание» (или «перекрещивание»), которая способствует образованию стойкой оболочки вокруг микрокапсулы. Это может происходить, например, за счет введения кросс-связывающих агентов, которые образуют структуру внутри материала оболочки, делая ее более прочной и стабильной (Guo и др., 2020).

После завершения процесса микрокапсулирования получают микроскопические капсулы, внутри которых заключены активные вещества, такие как лекарственные препараты, ароматизаторы, красители или другие биологически активные компоненты. Эти микрокапсулы могут контролируемо высвободить активные вещества по мере изменения условий окружающей среды, что делает их ценными в индустрии искусственной доставки и улучшения свойств различных продуктов.

Согласно авторам Алессандра Имброньо, Эмма Пьячентини, Энрико Дриоли, Лидиетта Джорно, мембранное эмульгирование считается лучшим методом эмульгирования благодаря его преимуществам, таким как простота, потенциально более низкие энергозатраты и возможность контролировать размер капель, в первую очередь за счет выбора мембраны. Он предлагает большой потенциал в производстве эмульсий «на заказ» и других твердых частиц. Мембранные системы особенно подходят для крупномасштабного производства, поскольку их можно легко масштабировать за счет увеличения количества небольших технологических установок (рисунки 1).



Рисунок 1 – Принципиальная схема получения микрокапсул по методу А. Имброньо, Э. Пьячентини, Э. Дриоли, Л. Джорно

1 – Этап создания эмульсии с использованием гомогенизатора; 2 – Этап добавления кросс связывающих полимеров; 3 – Этап получения микрокапсул

Этот метод был успешно применен для получения микросфер и микрокапсул с использованием различных полимеров, в том числе сложных полиэфиров, таких как поликапролактон (Imbrogno и др., 2015).

Вещества, которые можно микрокапсулировать эмульсионным методом:

Фармацевтические соединения: Эмульсионный метод можно использовать для микрокапсулирования фармацевтических соединений, таких как вакцины, белки, антибиотики и другие гидрофильные препараты.

Полимерные материалы: Эмульсионные методы использовались для микроинкапсуляции сложных полиэфиров, полученных из молочной и гликолевой кислот, таких как поликапролактон (PCL). Микрочастицы PCL были успешно получены с использованием метода диффузии эмульсии/растворителя.

Органические растворители: Эмульсионный метод позволяет микроинкапсулировать вещества, растворенные в органических растворителях, частично растворимых в воде. Растворитель эмульгируется в водной фазе, а последующая диффузия растворителя во внешнюю фазу приводит к затвердеванию полимера внутри капель.

Пептиды и белки. Было обнаружено, что поликапролактон обладает хорошей проницаемостью для белков, что делает его подходящим носителем для доставки вакцин. Эмульсионный метод можно использовать для микроинкапсуляции пептидов и белков, обеспечивая их стабильность и контролируемое высвобождение.

Соединения, чувствительные к температуре: Хотя метод распылительной сушки не подходит для инкапсулирования чувствительных к температуре соединений, метод эмульсии представляет собой жизнеспособную альтернативу. Это позволяет контролировать инкапсуляцию таких соединений, не подвергая их воздействию высоких температур.

Эмульгирование является эффективным методом получения мелких капель с относительно узким распределением по размерам. Это позволяет производить монодисперсные микрокапсулы, которые могут более легко имитировать кинетику высвобождения лекарственного средства (Piacentini и др., 2017).

Однако традиционный метод эмульсии, используемый для эмульгирования, может привести к трудностям в приготовлении микрокапсул небольшого размера и узкого распределения. Контроль многих параметров, участвующих в этом методе, может быть сложной задачей, что приводит к колебаниям качества микрокапсул.

Одним из главных недостатков метода эмульсий для микрокапсулирования является потенциальная неоднородность размеров капсул. В ходе процесса формирования микрокапсул разного размера может привести к проблемам при конкретных применениях, требующих высокой равномерности размеров (Wilson и др., 2021).

Другой важной проблемой может быть нестабильность эмульсий. Внутренние фазы, такие как масло и вода, могут разделяться со временем, что может вызвать несоответствие размеров и свойств капсул. Это может быть особенно критично, если требуется долговременная стабильность капсул.

Также следует учитывать, что выбор правильных эмульгаторов – важный аспект. Ошибочный выбор эмульгаторов может влиять на стабильность капсул и даже на вкус, запах или другие характеристики конечного продукта.

Микрокапсуляция также может привести к потере активных веществ, особенно если они нестабильны или чувствительны к высоким температурам или механическому воздействию в процессе. Метод эмульсий микрокапсулирования требует специализированного оборудования и экспертизы для его эффективного использования, что также может быть дополнительным ограничением в практической реализации.

Несмотря на эти недостатки, метод эмульсий для микрокапсулирования остается важным инструментом для контролируемой доставки активных веществ в различных областях и может быть успешно применен с учетом и минимизацией ограничений, а также с установленным контролем качества (Jamekhorshid и др., 2014).

Мембранное эмульгирование предлагает несколько преимуществ по сравнению с обычными методами эмульгирования, такими как перемешивание или обработка ультразвуком. Это позволяет производить небольшие и относительно более монодисперсные микрокапсулы. Этот метод особенно полезен для получения небольших и однородных по размеру микрокапсул, что важно для систем доставки лекарств.

В исследовании Г.К. Виннера, К. Ричардс, М. Леппанен, А.П. Сагона и Д.Дж. Малик (Vinner и др., 2019) использовалось мембранное эмульгирование для приготовления микросфер с инкапсулированными фагами в эмульсии вода-в-масле с контролируемым размером капель (рисунок 2).

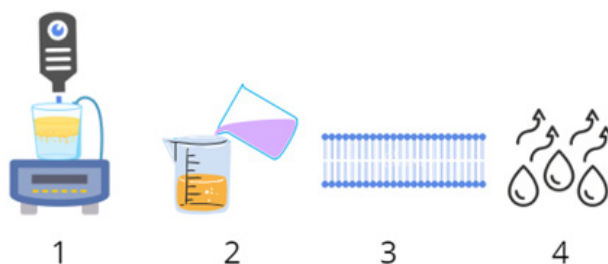


Рисунок 2 – Принципиальная схема получения микрокапсул по методу Г. К. Виннера, К. Ричардс, М. Леппанен, А. П. Сагона и Д. Дж. Малик

1 – Этап создания эмульсии с использованием гомогенизатора; 2 – Введение в эмульсию материала для образования оболочки капсулы, такого как полимеры (например, альгинаты); 3 – Процесс мембранного эмульгирования; 4 – Получение микрокапсул методом распылительной сушки

Размер капель варьировался приблизительно от 100 до 300 мкм. Процесс был масштабируемым, что позволяло производить большие промышленные количества однородных маленьких микрокапсул, подходящих для перорального введения мелким животным, таким как мыши и крысы. Этот метод инкапсуляции направлен на защиту фагов от кислотности желудка и обеспечение доставки высоких доз фагов в определенные отделы кишечника, нацеленные на очаг инфекции в нижних отделах желудочно-кишечного тракта.

Эффективность инкапсуляции фагов с использованием процесса мембранного эмульгирования составила почти 100 %. Полученные микрочастицы гидрогеля со средним размером чуть более 100 мкм реагировали на pH, высвобождая инкапсулированные фаги при воздействии pH 7, что делало их подходящими для применения в желудочно-кишечном тракте.

Исследование выявило потенциальные преимущества динамики контролируемого высвобождения, достигаемой за счет микроинкапсуляции, что позволяет точно доставлять высокие концентрации микроорганизмов для эффективного уничтожения бактерий. Фаги, высвобожденные из микрочастиц, продемонстрировали эффективность, сравнимую со свободными фагами при тех же уровнях доз при воздействии на бактериальные культуры (Colom и др., 2017).

Исследование показало важность размера частиц, состава и pH-чувствительных характеристик для защиты микроорганизмов и обеспечения контролируемого высвобождения в сложной кислой среде желудка. Подход к инкапсуляции с использованием мембранного эмульгирования показал себя многообещающим в преодолении этих препятствий и потенциальном повышении терапевтической эффективности лечения бактериальных инфекций на основе фагов, а также в обеспечении масштабируемого производственного процесса.

Данное исследование дает возможность утверждать, что метод микрокапсуляции мембранного эмульгирования живых микроорганизмов является оптимальным по многим критериям. Двойная оболочка микрокапсулы (наночастицы) помогает защитить ядро с микроорганизмами от воздействия таких факторов как кислая среда желудочно-кишечного тракта (Colom и др., 2017).

Метод ионотропного гелеобразования — это один из способов микрокапсулирования, использующий особенности взаимодействия полимерных материалов с ионами в растворе для образования гелевой оболочки вокруг активных веществ. Этот метод находит применение в различных областях, таких как фармацевтика, косметика, пищевая промышленность и многие другие (Mouga и др., 2018).

Процесс микрокапсулирования методом ионотропного гелеобразования начинается с приготовления эмульсии, в которой активное вещество или материал, который нужно заключить, распределен в диспергированной фазе (обычно масле или воде), а оболочка капсулы формируется вокруг этой диспергированной фазы с использованием ионов, которые образуют гель из полимерного материала в

растворе.

Процесс образования гелевой оболочки может происходить в условиях комнатной температуры, что делает его относительно мягким и подходящим для включения биологически активных веществ, которые могут быть чувствительны к высоким температурам (Hosseini и др., 2013).

Преимущества метода ионотропного гелеобразования включают возможность контролировать толщину оболочки, варьируя концентрацию ионов и характеристики полимеров, а также обеспечивать устойчивость капсул к внешним воздействиям. Этот метод также позволяет достичь высокой эффективности микрокапсулирования, что особенно важно для сохранения активных веществ внутри капсулы.

Однако важно учитывать, что выбор полимеров и ионов, а также оптимизация условий процесса, могут быть критическими для успешной микрокапсуляции. Неконтролируемое освобождение активных веществ из капсул или низкая стабильность капсул могут быть вызваны неправильным подбором компонентов или условий образования оболочки (Otalora и др., 2016).

В исследовании Phui Yee Tan, a Tai Boon Tan, b Hon Weng Chang использовали эмульсию Пикеринга в качестве прекурсора для образования микрокапсул (Tan и др., 2021). Тщательно манипулируя ключевыми параметрами, такими как pH, время гелеобразования и концентрация альгината, а также увеличивая сшивание с использованием более высокого содержания хитозана (0,5%), они успешно производили однородные и сферические микрокапсулы, которые сохраняли свою структурную жесткость даже после процесса сушки (рисунок 3).

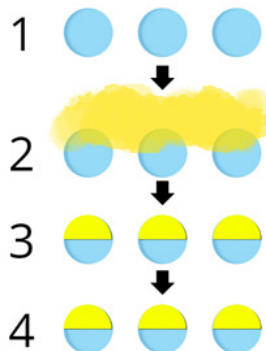


Рисунок 3 – Принципиальная схема получения микрокапсул методом Эмульсии Пикеринга

Полученные микрокапсулы показали улучшенную эффективность инкапсуляции масла (EE) и более высокую эффективность загрузки масла (LE). Комбинация эмульгирования Пикеринга и ионотропного гелеобразования позволила эффективно улавливать пальмовые токотриенолы в биосовместимом продукте. Примечательно, что использование карбоната кальция (CaCO_3), который чувствителен к pH, предполагает потенциальное применение для доставки токотриенолов в различные пищевые продукты, особенно те, которые требуют контролируемого высвобождения при определенных условиях pH.

Метод ионотропного гелеобразования представляет собой эффективный подход для микрокапсулирования различных веществ, особенно тех, которые могут взаимодействовать с ионами для образования гелевых оболочек. Этот метод

находит широкое применение в разных областях, таких как фармацевтика, пищевая промышленность, косметика и биомедицина.

Кроме того, метод ионотропного гелеобразования позволяет микрокапсулировать витамины, нутрацевтики и натуральные экстракты, что обеспечивает контролируемое высвобождение в пищевых продуктах, диетических добавках и косметических средствах (Liu и др., 2013).

Важно отметить, что этот метод также подходит для микрокапсулирования микроорганизмов, включая пробиотики, для доставки в функциональных продуктах питания или в медицинских приложениях.

Вещества, наиболее подходящие для микрокапсулирования методом ионотропного гелеобразования, включают биологически активные соединения, такие как протеины, пептиды, ферменты и факторы роста, а также фармацевтические препараты с заряженными группами. Нуклеиновые кислоты, включая ДНК и РНК, также могут быть успешно капсулированы для применений в генной терапии.

Важно отметить, что этот метод также подходит для микрокапсулирования микроорганизмов, включая пробиотики, для доставки в функциональных продуктах питания или в медицинских приложениях (Gu и др., 2019).

Несмотря на множество преимуществ, такие как контролируемое высвобождение, биосовместимость и разнообразие применений, метод ионотропного гелеобразования может потребовать оптимизации параметров процесса для достижения наилучших результатов. Тем не менее, его потенциал для микрокапсулирования биоактивных веществ делает его важным инструментом в разработке продуктов с улучшенной контролируемой доставкой активных компонентов в различных областях.

Метод ионотропного гелеобразования остается интересной и перспективной техникой в области микрокапсулирования и может быть использован для разработки инновационных продуктов с контролируемой доставкой активных веществ. Метод ионотропного гелеобразования: Преимущества: Методы ионотропного гелеобразования, такие как формирование микрокапсул альгината кальция, предлагают мягкий и не содержащий растворителей подход к микрокапсулированию. Эти методы включают сочетание полиэлектролита с многовалентным ионом противоположного заряда. Они подходят для получения микрокапсул в мягких условиях (Jagtap и др., 2016).

Несмотря на множество преимуществ, такие как контролируемое высвобождение, биосовместимость и разнообразие применений, метод ионотропного гелеобразования может потребовать оптимизации параметров процесса для достижения наилучших результатов. Тем не менее, его потенциал для микрокапсулирования биоактивных веществ делает его важным инструментом в разработке продуктов с улучшенной контролируемой доставкой активных компонентов в различных областях. Метод ионотропного гелеобразования может не обеспечивать такого контроля желаемых свойств микрокапсул по сравнению с другими методами. Оптимизация мембраны по всем желаемым свойствам с использованием простого процесса может оказаться сложной задачей.

Распылительная сушка включает преобразование жидкой суспензии активных агентов и материала покрытия в высушенные частицы путем распыления их в потоке горячего воздуха. Этот метод широко используется для инкапсуляции

эфирных масел, ферментов и пробиотиков, предлагая высокую эффективность инкапсуляции и превосходный контроль над размером частиц и характеристиками высвобождения. Распылительная сушка – это метод микрокапсулирования, который включает приготовление эмульсии с последующим удалением растворителя путем выпаривания в процессе сушки. Это одностадийный процесс, при котором эмульсия высушивается распылением, в результате чего образуются твердые микрокапсулы. Этот метод предлагает несколько преимуществ, включая простоту, хороший контроль параметров процесса и масштабируемость. Микросферы, полученные распылительной сушкой, могут демонстрировать устойчивое или более медленное высвобождение лекарственного средства по сравнению с обычными методами распылительной сушки. Однако важно отметить, что микросферы, полученные с использованием этого метода, могут подвергаться механическому напряжению сдвига и термическому напряжению в процессе сушки.

Распылительная сушка представляет собой широко используемый промышленный процесс преобразования жидких веществ, обычно растворов, суспензий или эмульсий, в сухие порошки или твердые частицы. Этот метод используется в различных отраслях промышленности, включая пищевую, фармацевтическую, химическую и сырьевую, благодаря его способности преобразовывать термочувствительные, термолабильные или чувствительные соединения в стабильные, легко транспортируемые и стабильные формы (Al-Khattawi и др., 2018).

Процесс распылительной сушки включает в себя несколько основных этапов:

Распыление: жидкий корм распыляется на мельчайшие капли с помощью сопла или распылителя. Это создает большую площадь поверхности для быстрого высыхания.

Сушильная камера: Распыленные капли вводятся в сушильную камеру, где они вступают в контакт с потоком горячего воздуха или газа. Высокое отношение поверхности к объему капель способствует быстрому испарению растворителя или жидкости-носителя.

Сушка и образование частиц: когда капли проходят через сушильную камеру, тепло заставляет растворитель испаряться, оставляя после себя твердые частицы или порошок. Затвердевшие частицы собираются на дне сушильной камеры, а испарившийся растворитель обычно удаляют с помощью газового потока.

Сбор частиц: высушенные частицы собираются с использованием различных методов, таких как циклонные сепараторы, рукавные фильтры или электростатические осадители, в зависимости от размера и свойств частиц (Sosnik и др., 2015).

Распылительная сушка имеет ряд преимуществ:

Сохранение свойств: процесс быстрой сушки сводит к минимуму воздействие высоких температур, что делает его пригодным для термочувствительных веществ, таких как ферменты, пробиотики и витамины, сохраняя их биологическую активность.

Улучшенная растворимость: полученные порошки часто имеют повышенную растворимость благодаря мелкому размеру частиц, что может быть

полезным в фармацевтических составах и продуктах быстрого приготовления.

Долгий срок хранения доступная транспортировка: высушенные распылением продукты обычно имеют более длительный срок хранения по сравнению с жидкими формами, что снижает потребность в охлаждении и снижает транспортные расходы.

Несмотря на свои преимущества, сушка распылением имеет некоторые ограничения:

Потеря летучих соединений: хрупкие соединения с высокой летучестью могут теряться в процессе.

Изменение размера частиц: Достижение узкого распределения размера частиц может быть сложной задачей, особенно при работе с липкими веществами или продуктами, склонными к агломерации.

Стоимость оборудования: оборудование для распылительной сушки может быть дорогим в приобретении и эксплуатации, что может быть проблемой для мелкосерийного производства.

Для преодоления проблемы потери некоторых соединений в процессе распылительной сушки исследователем Р.В. де Б. Фернандес было предложено использование гуммиарабик, используемый в производстве ароматизаторов, играет важную роль в защите материалов сердцевинки от окисления и улетучивания (Fernandes и др., 2013). Он обладает высокой растворимостью и низкой вязкостью в водных растворах, что делает его предпочтительным для процесса распылительной сушки. Цель этого исследования состояла в том, чтобы оценить, как рабочие условия во время распылительной сушки влияют на свойства микрокапсулированного эфирного масла розмарина.

В целом, распылительная сушка представляет собой универсальный метод с широким промышленным применением, особенно при производстве порошкообразных пищевых продуктов, фармацевтических препаратов и химических веществ, где преобразование жидкостей в стабильные сухие порошки имеет важное значение для стабильности, удобства и эффективности продукта.

Результаты и обсуждения

Исследование методов микрокапсулирования, описанных в данной статье, позволяет понять их преимущества, ограничения и потенциал для различных применений. Метод эмульгирования, как показано, широко используется для инкапсулирования эфирных масел и защиты активных веществ от окисления и испарения. Однако, как отмечено, его главным недостатком является неоднородность размеров капскул, что может ограничивать определенные применения.

Интересным аспектом является метод мембранного эмульгирования, который считается лучшим в силу своей простоты, потенциально более низких энергозатрат и возможности контролировать размер капель. Это особенно важно в медицинских применениях, где точная доставка активных веществ играет критическую роль. Масштабируемость этого метода делает его перспективным для промышленного производства.

Исследование, в котором использовалось мембранное эмульгирование для инкапсуляции фагов в контролируемой эмульсии вода-в-масло, показывает его успешное применение. Микрокапсулы с инкапсулированными фагами могут быть использованы для доставки высоких доз фагов в определенные отделы кишечника,

что обладает большим потенциалом в борьбе с бактериальными инфекциями. Размер частиц и характеристики оболочки оказываются важными факторами для успешной доставки в сложной кислой среде желудка.

Метод ионотропного гелеобразования также представляет интересную альтернативу, особенно для чувствительных к температуре и гидрофильных соединений. Его способность создавать мягкие и не содержащие растворителей микрокапсулы делает его ценным инструментом для разработки инновационных продуктов с контролируемой доставкой активных веществ.

Распылительная сушка остается важным методом для преобразования термочувствительных соединений в стабильные формы. Использование гуммиарабика для защиты материалов сердцевин микрокапсул в процессе распылительной сушки представляет интересное решение, способное повысить эффективность этого метода.

В целом, разнообразие методов микрокапсулирования предоставляет индустрии широкий набор инструментов для улучшения свойств продуктов и обеспечения контролируемой доставки активных компонентов. Однако важно учитывать ограничения каждого метода и находить оптимальное применение в зависимости от конкретных требований и характеристик инкапсулируемых веществ. Дальнейшие исследования в области улучшения точности и равномерности размеров микрокапсул, а также разработки новых оболочек, могут привести к еще более эффективным и инновационным решениям в сфере микрокапсулирования.

Выводы

Исследования методов микрокапсулирования, включая метод эмульгирования и распылительную сушку, подтверждают их важное значение в различных отраслях промышленности и медицине. Метод эмульгирования обеспечивает устойчивость активных агентов и контролируемое высвобождение, особенно с использованием полимерных оболочек, таких как альгинаты.

Мембранное эмульгирование, как указывают авторы Алессандра Имброньо и другие, обладает значительными преимуществами, такими как простота и потенциально более низкие энергозатраты. Этот метод также позволяет контролировать размер капель, что важно для точной инкапсуляции активных веществ.

Метод ионотропного гелеобразования предоставляет мягкий и эффективный способ микрокапсулирования, особенно для чувствительных к температуре и гидрофильных соединений. Этот метод подходит для разработки инновационных продуктов с контролируемой доставкой активных веществ.

Распылительная сушка, несмотря на свои ограничения, остается важным инструментом в промышленности, особенно для преобразования термочувствительных соединений в стабильные формы. Использование гуммиарабика, как предложено исследователями Фернадесом, Боргесом и Ботрелем, улучшает эффективность этого метода, обеспечивая защиту от окисления и сохранность активных веществ.

В целом, методы микрокапсулирования предоставляют широкий спектр возможностей для улучшения свойств различных продуктов и обеспечения контролируемой доставки активных компонентов, что делает их важным инструментом для индустрии искусственной доставки и многих других областей.

REFERENCES

- Al-Khattawi A., Bayly A., Phillips A. & Wilson D. (2018). The design and scale-up of spray dried particle delivery systems. *Expert Opinion on Drug Delivery*. — 15. — 47–63. <https://doi.org/10.1080/17425247.2017.1321634> (in Eng.).
- Colom J., Cano-Sarabia M., Otero J.L., Arriñez-Soriano J., Cortés P., MasPOCH D. & Llagostera M. (2017). Microencapsulation with alginate/CaCO₃: A strategy for improved phage therapy. *Scientific Reports*, — 7. <https://doi.org/10.1038/srep41441> (in Eng.).
- Doering U., Grigoriev D., Tapio K., Bald I. & Böker A. (2022). Synthesis of nanostructured protein-mineral-microcapsules by sonication. *Soft matter*. <https://doi.org/10.1039/d1sm01638e> (in Eng.).
- Gu M., Zhang Z., Pan C., Goulette T., Zhang R., Hendricks G., McClements D. & Xiao H. (2019). Encapsulation of *Bifidobacterium pseudocatenulatum* G7 in gastroprotective microgels: Improvement of the bacterial viability under simulated gastrointestinal conditions. — *Food Hydrocolloids*. <https://doi.org/10.1016/J.FOODHYD.2019.01.040> (in Eng.).
- Guo J., Hou L., Hou J., Yu J. & Hu Q. (2020). Generation of ultra-thin-shell microcapsules using osmolarity-controlled swelling method. *Micromachines*, — 11. <https://doi.org/10.3390/mi11040444> (in Eng.).
- Hosseini S.M., Hosseini H., Mohammadifar M.A., Mortazavian A.M., Mohammadi A., Khosravi-Darani K., Shojae-Aliabadi S., Dehghan S. & Khaksar R. (2013). Incorporation of essential oil in alginate micro-particles by multiple emulsion/ionic gelation process. *International journal of biological macromolecules*. — 62. — 582–588. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2013.09.054> (in Eng.).
- Imbrogno A., Dragosavac M.M., Piacentini E., Vladislavljević G.T., Holdich R.G. & Giorno L. (2015). Polycaprolactone multicore-matrix particle for the simultaneous encapsulation of hydrophilic and hydrophobic compounds produced by membrane emulsification and solvent diffusion processes. *Colloids and surfaces. B, Biointerfaces*. — 135. — 116–125. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2015.06.071> (in Eng.).
- Fernandes Regiane & Borges Soraia & Botrel Diego (2013). Influence of spray drying operating conditions on microencapsulated rosemary essential oil properties. *Food Science and Technology (Campinas)*. — 33. — 171–178. <https://doi.org/10.1590/S0101-20612013000500025> (in Eng.).
- Jagtap S., Mohan M. & Shukla P. (2016). Improved performance of microcapsules with polymer nanocomposite wall: Preparation and characterization. *Polymer*. — 83. — 27–33. <https://doi.org/10.1016/J.POLYMER.2015.12.011> (in Eng.).
- Jamekhorshid A., Sadrameli S.M. & Farid M.M. (2014). A review of microencapsulation methods of phase change materials (PCMs) as a thermal energy storage (TES) medium. *Renewable & Sustainable Energy Reviews*. — 31. — 531–542. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2013.12.033> (in Eng.).
- Liu L., Wu F., Ju X.J., Xie R., Wang W., Niu C.H. & Chu L.Y. (2013). Preparation of monodisperse calcium alginate microcapsules via internal gelation in microfluidic-generated double emulsions. *Journal of colloid and interface science*. — 404. — 85–90. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2013.04.044> (in Eng.).
- Moura S., Berling C., Germer S., Alvim I. & Hubinger M. (2018). Encapsulating anthocyanins from *Hibiscus sabdariffa* L. calyces by ionic gelation: Pigment stability during storage of microparticles. *Food chemistry*. — 241. — 317–327. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.08.095>.
- Nauman N., Zaquen N., Junkers T., Boyer C. & Zetterlund P. (2019). Particle Size Control in Miniemulsion Polymerization via Membrane Emulsification. *Macromolecules*. <https://doi.org/10.1021/ACS.MACROMOL.9B00447> (in Eng.).
- Otálora M.C., Carriazo J.G., Iturriaga L., Osorio C. & Nazareno M.A. (2016). Encapsulating betalains from *Opuntia ficus-indica* fruits by ionic gelation: Pigment chemical stability during storage of beads. *Food chemistry*. — 202. — 373–382. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.01.115> (in Eng.).
- Piacentini E., Dragosavac M.M. & Giorno L. (2017). Pharmaceutical particles design by membrane emulsification: preparation methods and applications in drug delivery. *current pharmaceutical design*, — 23. — 2, — 302–318. <https://doi.org/10.2174/1381612823666161117160940> (in Eng.).
- Sosnik A. & Seremeta K.P. (2015). Advantages and challenges of the spray-drying technology for the production of pure drug particles and drug-loaded polymeric carriers. *Advances in colloid and interface science*. — 223. — 40–54. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2015.05.003> (in Eng.).
- Sugeng D., Ithnin A., Yahya W. & Kadir H. (2020). Emulsifier-Free Water-in-Biodiesel Emulsion Fuel via Steam Emulsification: Its Physical Properties, Combustion Performance, and Exhaust Emission. *Energies*. <https://doi.org/10.3390/en13205406> (in Eng.).
- Tan P., Tan T., Chang H., Mwangi W., Tey B., Chan E., Lai O., Liu Y., Wang Y. & Tan C. (2021). Pickering emulsion-templated ionotropic gelation of tocotrienol microcapsules: Effects of alginate and chitosan

concentrations and gelation process parameters. — *Journal of the science of food and agriculture*. <https://doi.org/10.1002/jsfa.11249>. (in Eng.).

Vinner G.K., Richards K., Leppanen M., Sagona A.P. & Malik D.J. (2019). Microencapsulation of enteric bacteriophages in a ph-responsive solid oral dosage formulation using a scalable membrane emulsification process. *Pharmaceutics*. — 11. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics11090475> (in Eng.).

Wilson A., Ekanem E.E., Mattia D., Edler K.J. & Scott J.L. (2021). Keratin–chitosan microcapsules via membrane emulsification and interfacial complexation. *acs sustainable chemistry & engineering*, —9. — 16617–16626. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c05304> (in Eng.).

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

ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 198–208

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.289>

УДК 546.431:54

МРПТИ 31.15.28

© **B.K. Massalimova¹, B. Janekova², S.M. Naurzkulova^{2*}**, 2024

¹M. Kozybayev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan;

²Taraz Regional University named after M.Kh. Dulaty, Taraz, Kazakhstan.

E-mail: Simbat_3@mail.ru

QUANTITATIVE CHEMICAL ANALYSIS OF THE COMPOSITION OF COMPOSITES BASED ON NI-RU-CONTAINING COMPLEX OXIDES BY ENERGY-DISPERSED SPECTROSCOPY

Massalimova B. K. — candidate of chemical sciences, professor of the Department of Chemistry and Chemical Technology of the M. Kozybayev North Kazakhstan University, Petropavlovsk, Kazakhstan

E-mail: massalimova15@mail.ru, bkmasalimova@ku.edu.kz. <https://orcid.org/0000-0003-0135-9712>;

Janekova B. — master's student of the Department of Chemistry and Chemical Technology of the Taraz Regional University named after M.Kh. Dulaty. Taraz, Kazakhstan

E-mail: janekowabossanjemal@gmail.com. <https://orcid.org/0009000773231095>;

Naurzkulova S.M. — Senior Lecturer of the Department of Chemistry and Chemical Technology of the Taraz Regional University named after M.Kh. Dulaty, Taraz, Kazakhstan

E-mail: simbat_3@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2144-233X>.

Abstract. In this article, the oxide precursors of catalysts for the production of hydrogen from ethanol by the steam conversion process have been studied by energy dispersion spectroscopy. Oxide materials with the structure of fluorite $\text{Pr}_{0.15}\text{Sm}_{0.15}\text{Ce}_{0.35}\text{Zr}_{0.35}\text{O}_2$ and perovskite $\text{LaMn}_{0.45}\text{Ni}_{0.45}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3$ were synthesized by the method Pechini. Based on complex oxides, nanocomposites $[\text{Pr}_{0.15}\text{Sm}_{0.15}\text{Ce}_{0.35}\text{Zr}_{0.35}\text{O}_2 + \text{LaMn}_{0.45}\text{Ni}_{0.45}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3]$ (1:1 by mass) were synthesized using the “Polymer”, “Ultrasonic dispersion”, “One pot” methods and the phase structure was studied using the methods X-ray phase analysis (XRD) and transmission electron microscopy (TEM). The XRD and TEM data of the synthesized samples showed that the «Polymer» and «Ultrasonic dispersion» methods ensure the formation of fluorite-perovskite nanocomposites. The sample obtained by the method «One-pot» is a mixture of individual and complex oxides of cations. In order to confirm the exact elemental and stoichiometric composition of the samples formed by the perovskite-fluorite composite phase, analysis was carried out using energy-dispersive spectroscopy. In the quantitative and qualitative analysis of solid catalysts, the energy dispersive spectroscopy method is often used in practice due to its advantages, such as fast and highly accurate results, as well as ease of sample preparation for research. So, from the EDS spectra of nanocomposites in two samples, all the peaks of such elements as Pr, Sm, Ce, Zr, La, Mn, Ni, Ru, O were determined, and the stoichiometric composition

of the elements was calculated by atomic fractions in the phases. The calculation results showed that there is only a small deviation ($\sim 0.0002-0.0003$) between the theoretical stoichiometric values and the experimental values of the elements in the nanocomposites. It has been established that Pekini methods are effective in the synthesis of multicomponent complex oxides, and the “Polymer” and “Ultrasonic dispersion” methods are effective in obtaining nanocomposites based on phases with two different properties.

Keywords: perovskite, fluorite, nanocomposite, energy dispersive spectroscopy

© Б.К. Масалимова¹, Б. Джанекова², С.М. Наурзулова^{2*}, 2024

¹М. Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университеті, Петропавл, Қазақстан;

²М.Х. Дулати атындағы Тараз өңірлік университеті, Тараз, Қазақстан.

E-mail: Simbat_3@mail.ru

NI-RU ҚҰРАМДЫ КҮРДЕЛІ ОКСИДТЕРГЕ НЕГІЗДЕЛГЕН КОМПОЗИТТЕР ҚҰРАМЫН ЭНЕРГОДИСПЕРСТІ СПЕКТРОСКОПИЯ ӘДІСІМЕН САНДЫҚ ХИМИЯЛЫҚ ТАЛДАУ

Масалимова Б.К. – химия ғылымдарының кандидаты, М.Қозыбаев атындағы Солтүстік Қазақстан университетінің «Химия және химиялық технология» кафедрасының профессоры, Петропавл, Қазақстан

E-mail: massalimova15@mail.ru, bkmasalimova@ku.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0135-9712>;

Джанекова Б. – М.Х.Дулати атындағы Тараз өңірлік университетінің “Химия және химиялық технология” кафедрасының магистранты, Тараз, Қазақстан

E-mail: janekowabossanjemal@gmail.com. <https://orcid.org/0009000773231095>;

Наурзулова С.М. – М.Х.Дулати атындағы Тараз өңірлік университетінің «Химия және химиялық технология» кафедрасының аға оқытушысы, Тараз, Қазақстан

E-mail: simbat_3@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2144-233X>.

Аннотация. Берілген мақалада этанолдан сутегін булы конверсиялау процесімен алу катализаторларының күрделі оксидті прекурсорлары энергодисперсті спектроскопия (ЭДС) әдісімен зерттелді. Флюорит $\text{Pr}_{0.15}\text{Sm}_{0.15}\text{Ce}_{0.35}\text{Zr}_{0.35}\text{O}_2$ және перовскит $\text{LaMn}_{0.45}\text{Ni}_{0.45}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3$ құрылымды катализатор прекурсорлары Пекини әдісімен синтезделді. «Полимер», $[\text{Pr}_{0.15}\text{Sm}_{0.15}\text{Ce}_{0.35}\text{Zr}_{0.35}\text{O}_2 + \text{LaMn}_{0.45}\text{Ni}_{0.45}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3]$ (1:1 масса бойынша) нанокөмізгіттері синтезделіп, фазалық құрамы және құрылымы рентгенфазалық талдау (РФТ) және трансмиссиялық электронды микроскопия (ТЭМ) әдістерімен зерттелді. Синтезделген үлгілердің РФТ және ТЭМ мәліметтері «Полимер», «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістері флюорит-перовскитті нанокөмізгіттердің түзілуін қамтамасыз ететін көрсетті. Ал «One pot» әдісімен дайындалаған үлгі құрамына кіретін катиондардың жеке және күрделі оксидтерінің қоспасынан тұратыны анықталды. «Перовскит-флюорит» көмізгіттік фазасы түзілген үлгілердің нақты элементтік және стехиометриялық құрамын растау ЭДС әдісімен талдау жасалды. Қатты катализаторларды сандық және сапалық талдауда, энергодисперсті спектроскопия әдісі нәтижелерді жылдам және жоғары дәлдікпен алу, үлгілерді зерттеуге дайындаудың қарапайымдылығы сияқты артықшылықтары себебінен тәжірибеде жиі қолданылады. Сонымен, нанокөмізгіттердің ЭДС спектрлерінен екі үлгіде Pr Sm Ce Zr La, Mn Ni Ru O сияқты элементтердің барлық

шындары анықталып, элементтердің фазалардағы атомдық үлестері бойынша стехиометриялық құрамы есептелді. Есептеу нәтижелері нанокөпозиттер құрамындағы элементтердің теориялық стехиометриялық мандері мен тәжірибелік мандері арасында аз ғана ауытқу (~ 0,0002–0,0003) болатынын көрсетті. Көп компонентті күрделі оксидтерді синтездеуде Пекини, екі түрлі қасиеттері бар нанокөпозиттерді синтездеуде «Полимер» және «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістері тиімді екені анықталды.

Түйін сөздер: перовскит, флюорит, нанокөпозит, энергодисперсті спектроскопия

© Б.К. Масалимова¹, Б. Джанекова², С.М. Наурзкулова^{2*}, 2024

¹Северо-Казахстанский университет имени М.Козыбаева, Казахстан;

²Таразский региональный университет им. М.Х.Дулата, Казахстан.

E-mail: Simbat_3@mail.ru

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СОСТАВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ NI-RU – СОДЕРЖАЩИХ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ МЕТОДОМ ЭНЕРГОДИСПЕРСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Масалимова Б.К. — кандидат химических наук, профессор кафедры «Химия и химическая технология», Северо-Казахстанский университет имени М.Козыбаева, Петропавловск, Казахстан
E-mail: massalimova15@mail.ru, bkmasalimova@ku.edu.kz, <https://orcid.org/0000-0003-0135-9712>;

Джанекова Б. — магистрант кафедры химии и химической технологии Таразского регионального университета имени М.Х. Дулата, Тараз, Казахстан

E-mail: janekowabossanjemal@gmail.com. <https://orcid.org/0009000773231095>;

Наурзкулова С.М. — старший преподаватель кафедры химии и химической технологии Таразского регионального университета имени М.Х. Дулата, Тараз, Казахстан
E-mail: simbat_3@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2144-233X>.

Аннотация. В данной статье методом энергодисперсионной спектроскопии исследованы оксидные предшественники катализаторов получения водорода из этанола процессом паровой конверсии. Оксидные материалы со структурой флюорита $\text{Pr}_{0,15}\text{Sm}_{0,15}\text{Ce}_{0,35}\text{Zr}_{0,35}\text{O}_2$ и перовскита $\text{LaMn}_{0,45}\text{Ni}_{0,45}\text{Ru}_{0,1}\text{O}_3$ синтезированы методом Пекини. На основе сложных оксидов методами «Полимер», «Ультразвуковое диспергирование», «One pot» синтезированы нанокөпозиты $[\text{Pr}_{0,15}\text{Sm}_{0,15}\text{Ce}_{0,35}\text{Zr}_{0,35}\text{O}_2 + \text{LaMn}_{0,45}\text{Ni}_{0,45}\text{Ru}_{0,1}\text{O}_3]$ (по массе 1:1), а фазовая структура исследовалась методами рентгенофазного анализа (РФА) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Данные РФА и ПЭМ синтезированных образцов показали, что методы «Полимер», «Ультразвуковое диспергирование» обеспечивают образование флюорит-перовскитных нанокөпозитов. Образец, полученный методом «One-pot», представляет собой смесь индивидуальных и сложных оксидов, входящих в состав катионов. С целью подтверждения точного элементного и стехиометрического состава образцов, образованных композитной фазой «перовскит-флюорит», был проведен анализ методом энергодисперсионной

спектроскопии (ЭДС). При количественном и качественном анализе твердых катализаторов на практике часто применяется метод энергодисперсионной спектроскопии, благодаря быстрому и высокоточному получению результатов и простоте подготовки проб к исследованию. Из спектров ЭДС нанокompозитов в двух образцах были определены все пики таких элементов, как Pr, Sm, Ce, Zr, La, Mn, Ni, Ru, O и рассчитан стехиометрический состав элементов по атомным долям в фазах. Результаты расчетов показали, что между теоретическими стехиометрическими и экспериментальными значениями элементов в нанокompозитах существует лишь небольшое отклонение ($\sim 0,0002-0,0003$). Установлено, что метод Пекини эффективен при синтезе многокомпонентных сложных оксидов, а методы «Полимер» и «Ультразвуковое диспергирование» эффективны при получении нанокompозитов на основе фаз с двумя различными свойствами.

Ключевые слова: перовскит; флюорит; нанокompозит; энергодисперсионная спектроскопия

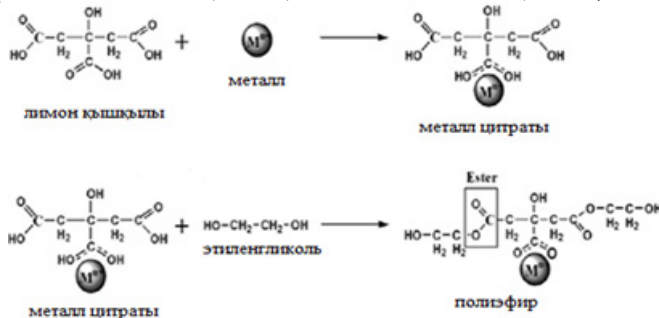
Кіріспе

Катализаторлар құрамына кіретін көптеген ауыспалы металдар (Fe, Co, Ni, Cu) бейорганикалық және органикалық реагенттермен кешенді қосылыстар түзуге қабілетті, ал спектрофотометрия олардың құрамын талдаудың қарапайым және арзан әдісі болып табылады. Алайда, іс жүзінде катализаторларды талдауда бұл әдіс қолданыстағы реагенттердің аз талғамдылығына және компоненттерді сіңіру спектрлерінің қабаттасуына байланысты сирек қолданылады (Huang және т.б., 2005; Swetha және т.б., 2013; Tarpani және т.б., 2016; Cerda және т.б., 2017). Қазіргі уақытта, құрамында екі немесе одан да көп белсенді компоненттері күрделі катализаторларды сапалық және сандық талдауда индуктивті-байланысқан плазмамен атомдық-эмиссиялық спектрометрия (АЭС – ИСП), жалынмен немесе электротермиялық атомизациямен атомдық абсорбциялық спектрометрия, рентген-флуоресцентті талдау, сондай-ақ нейтронды активациялық талдау, энергодисперсті спектрометрия (ЭДС) әдістері қолданылады. Бұл әдістер жоғары метрологиялық сипаттамаларға ие және бір уақытта бірнеше элементтерді анықтауға мүмкіндік береді (Eskina және т.б., 2020; Маншилин және т.б., 2009; Yao және т.б., 2016; Бесталь және т.б., 2012; Sam және т.б., 1991). Аталған әдістердің ішінде энергодисперсті спектрометрия әдісі аналитикалық мүмкіндіктері және үлгілерді зерттеуге дайындаудың салыстырмалы түрде қарапайымдылығы себебінен қатты катализаторлардың сапалық сипаттамаларын анықтауда жиі қолданылады (Newbury және т.б., 2015; Ritchie және т.б., 2012; Reddy және т.б., 2000; Zhang және т.б., 2013). Бұл әдістің принципі келесідей: зерттелетін үлгілердің атомдары электрондар шоғы (сканерлеуші электронды микроскоппен немесе трансмиссиялық электронды микроскоп) немесе рентген сәулелері (*рентген-флуоресцент* анализаторларында) көмегімен қоздырылады және әрбір химиялық элемент өзіне тән рентген сәулелерін шығарады. Мұндай сәулеленудің энергетикалық спектрлерін зерттей отырып, үлгінің сапалық және сандық құрамы анықталады (Lalitha және т.б., 2010; Zhu және т.б., 2001). Бұл жұмыста биоотындарды булы конверсиялау катализаторларының прекурсорлары — флюорит $\text{Pr}_{0,15}\text{Sm}_{0,15}\text{Ce}_{0,35}\text{Zr}_{0,35}\text{O}_2$ және перовскит $\text{LaMn}_{0,45}\text{Ni}_{0,45}\text{Ru}_{0,1}\text{O}_3$ құрылымды полиоксидтер негізінде «Полимер», «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістерімен синтезделген нанокompозиттердің $[\text{Pr}_{0,15}\text{Sm}_{0,15}\text{Ce}_{0,35}\text{Zr}_{0,35}\text{O}_2 + \text{LaMn}_{0,45}\text{Ni}_{0,45}\text{Ru}_{0,1}\text{O}_3]$ (1:1 масса бойынша) ЭДС талдау

мәліметтерімен химиялық құрамы анықталып, элементтердің атомдық үлестері (%) бойынша сандық талдау жүргізілді.

Тәжірибелік бөлім. Композит құраушылары флюорит $\text{Pr}_{0.15}\text{Sm}_{0.15}\text{Ce}_{0.35}\text{Zr}_{0.35}\text{O}_2$ және перовскит $\text{LaMn}_{0.45}\text{Ni}_{0.45}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3$ құрылымды күрделі оксидтер (Fernandes және т.б., 2002; Хи және т.б., 2017; Reis және т.б., 2018) әдебиеттерде толық сипаттамасы берілген Пекини әдісімен синтезделді.

Пекини әдісінде лимон қышқылы әртүрлі катиондары бар катализатор құраушыларымен кешенді қосылыс түзу үшін қолданылады. Бұл кешенді қосылыстар көп атомды спирт –этиленгликольмен әрекеттесіп полиэфир түзеді. Нәтижесінде біртекті ерітінді пайда болып, металл иондары бүкіл органикалық матрицаға біркелкі бөлінеді. Бұл әдіс - күрделі оксидтерде катиондардың біркелкі таралуын, жоғары дисперстілігін және стехиометриялық құрамын бақылауға мүмкіндік береді (Martins және т.б., 2014; Hosseini және т.б., 2016).



Сурет 1. Күрделі оксидтерді Пекини әдісімен синтездеудің сызбасы

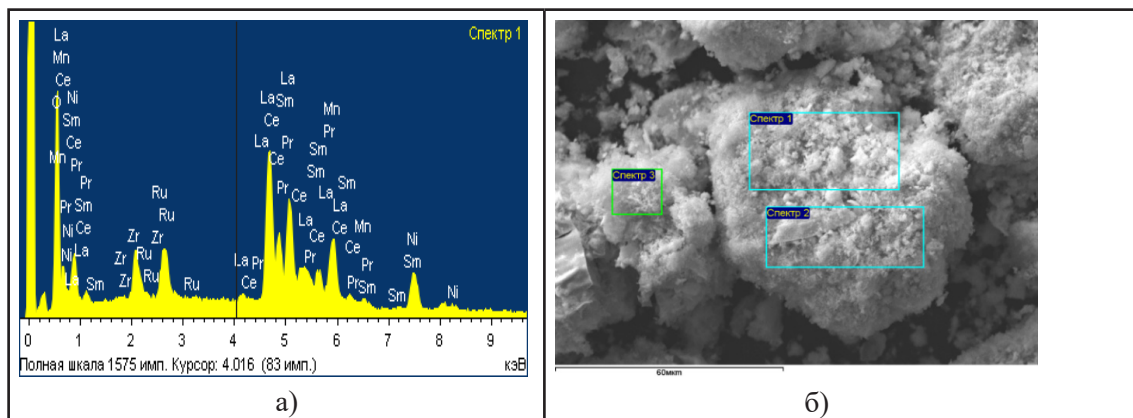
Синтезделген күрделі оксидтер негізінде жалпы формуласы $[\text{Pr}_{0.15}\text{Sm}_{0.15}\text{Ce}_{0.35}\text{Zr}_{0.35}\text{O}_2 + \text{LaMn}_{0.45}\text{Ni}_{0.45}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3]$ (1:1 масса бойынша) болатын композиттер синтездеудің үш әдісімен жүргізілді: 1) «Полимер» әдісі - алдын ала синтезделген флюорит құрылымды күрделі оксид қатысында полимер матрицасынан $\text{LaMn}_{0.45}\text{Ni}_{0.45}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3$, $\text{LaMn}_{0.9}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3$ перовскиттердің түзілуі, 2) «Ультрадыбыстық диспергирлеу» - бастапқы күрделі оксидтерді $\text{Pr}_{0.15}\text{Sm}_{0.15}\text{Ce}_{0.35}\text{Zr}_{0.35}\text{O}_2$ және $\text{LaMn}_{0.45}\text{Ni}_{0.45}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3$, $\text{LaMn}_{0.9}\text{Ru}_{0.1}\text{O}_3$ изопропанолда беттік белсенді затты қосу арқылы ультрадыбыстық диспергирлеу және 3) барлық катиондары бар полимердің «One-pot» синтезі. Барлық үлгілер 700 °C температурада 4 сағат бойы күйдірілді. Дайындау әдістері біздің алдыңғы жұмысымызда толық сипатталған (Naurzkulova және т.б., 2021).

Синтезделген үлгілердің фазалық құрамы, құрылымы CuKα сәулелену көзі бар Bruker Advance D8 дифрактометрі және JEM-2200FS трансмиссиялық электронды микроскоптың көмегімен зерттелді. Композиттердің құрамын сапалық және сандық талдау энергетикалық дисперсиялық спектроскопия (ЭДС) әдісі қолданылды. Талдау JSM 6460 – LV сканерлеуші электрондық микроскопында жасалып, алынған мәліметтер Oxford INCA бағдарламасымен өңделді.

Нәтиже және талқылау

Перовскит-флюорит күрделі оксидтер негізінде $[\text{Pr}_{0.15}\text{Sm}_{0.15}\text{Ce}_{0.35}\text{Zr}_{0.35}\text{O}_2 + \text{L}$

aMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O₃] (1:1 масса бойынша) композиттер «Полимер», «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістерін қолданғанда түзілетіні рентгенфазалық талдау және трансмиссиялық электронды микроскопия әдістерінің зерттеу мәліметтерімен анықталды және біздің (Naurzkulova және т.б., 2021) жұмысымызда нәтижелері жарияланды. Алынған композиттердің нақты химиялық және стехиометриялық құрамын растау үшін энергодисперсті спектроскопия әдісімен талдау жасалды. 2 және 3 суреттерде «Полимер» және «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістерімен синтезделген [Pr_{0,15}Sm_{0,15}Ce_{0,35}Zr_{0,35}O₂+LaMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O₃] құрамды композиттердің СЭМ кескіндері мен энергетикалық дисперсиялық спектрлері, 1 және 3 кестелерде спектрлерден тікелей алынған тәжірибелік атомдық үлестерінің сандық мәндері берілген.



Сурет 2. «Полимер» әдісімен синтезделген [Pr_{0,15}Sm_{0,15}Ce_{0,35}Zr_{0,35}O₂+LaMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O₃] композитінің ЭДС (а) және СЭМ (б) кескіні

Композиттердің ЭДС спектрлерінен Pr Sm Ce Zr La, Mn Ni Ru O сияқты элементтердің барлық шыңдары анықталып, атомдық үлестері (%) негізінде (Кесте 1 және 3) жеке флюорит және перовскит фазаларындағы химиялық элементтердің стехиометриялық құрамын нақтылауға мүмкіндік берді (Кесте 2 және 4).

Кесте 1. Полимер әдісімен синтезделген [Pr_{0,15}Sm_{0,15}Ce_{0,35}Zr_{0,35}O₂+LaMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O₃] композитінің ЭДС талдауынан алынған элементтік құрамы және атомдық үлесі (%)

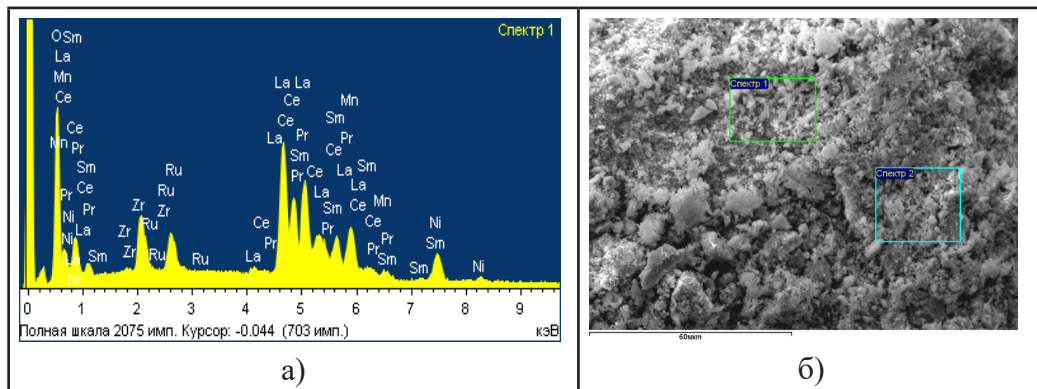
№	Химиялық элемент	Спектр			Атомдық үлесінің орташа мәні, (%)
		1 нүкте	2 нүкте	3 нүкте	
1	Pr	2,24	2,16	2,05	2,15
2	Sm	2,10	2,14	2,12	2,12
3	Ce	5,54	5,83	5,00	5,45
4	Zr	4,38	4,82	3,92	4,37
5	La	13,46	12,73	12,94	13,04

6	Mn	7,64	6,94	7,23	7,27
7	Ni	6,67	6,17	7,12	6,65
8	Ru	1,15	0,87	1,14	1,05
9	O	56,82	58,34	58,48	57,88
	Барлығы	100 %			100 %

Кесте 2. ЭДС талдауы негізінде полимер әдісімен синтезделген $[Pr_{0,15}Sm_{0,15}Ce_{0,35}Zr_{0,35}O_2+LaMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O_3]$ композиттің стехиометриялық құрамы

Элементтер	Атомдық үлесінің орташа мәні, %	Стехиометриялық құрамы, %	
		Эксперименттік	Теориялық
Pr	2,15	0,1525	0,15
Sm	2,12	0,1504	0,15
Ce	5,45	0,3867	0,35
Zr	4,37	0,3101	0,35
Барлығы	14,09	0,9997	1
La	13,04	0,9509	1
Mn	7,27	0,5094	0,45
Ni	6,65	0,4660	0,45
Ru	1,05	0,0735	0,1
Барлығы	27,96	1,9998	2

«Полимер» және «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістерімен синтезделген $[Pr_{0,15}Sm_{0,15}Ce_{0,35}Zr_{0,35}O_2+LaMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O_3]$ құрамды композиттердегі элементтердің атомдық үлестерінің орташа мәні негізінде есептелген эксперименттік стехиометриялық құрамының мәндері, теориялық есептеу мәндеріне жақын екенін көруге болады (Кесте 2 және 4). Наноккомпозиттер құрамына кіретін химиялық элементтердің теориялық және эксперименттік сандық мәндерінің аз ғана айырмашылығы ($\sim 0,0002-0,0003$) стехиометриялық құрамы нақты күрделі оксидтерді синтездеуде Пекини әдісі, ал наноккомпозиттерді синтездеуде «Полимер», «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістерінің тиімді екенін дәлелдейді.



Сурет 3. «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдісімен синтезделген $[Pr_{0,15}Sm_{0,15}Ce_{0,35}Zr_{0,35}O_2+LaMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O_3]$ композитінің ЭДС (а) және СЭМ (б) кескіні

Кесте 3. «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдісімен синтезделген $[Pr_{0,15}Sm_{0,15}Ce_{0,35}Zr_{0,35}O_2+LaMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O_3]$ композитінің ЭДС талдауынан алынған элементтік құрамы және атомдық үлесі (%)

№	Элемент	Спектр		Атомдық үлесінің орташа мәні, (%)
		1 нүкте	2 нүкте	
1	Pr	2,37	2,63	2,50
2	Sm	2,58	2,83	2,70
3	Ce	6,31	6,80	6,56
4	Zr	4,74	5,52	5,13
5	La	12,29	12,60	12,45
6	Mn	6,17	6,48	6,32
7	Ni	5,54	6,15	5,85
8	Ru	1,02	0,87	0,95
9	O	57,97	55,11	56,54
	Барлығы	100 %	100 %	100 %

Кесте 4. ЭДС талдауы негізінде «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдісімен синтезделген $[Pr_{0,15}Sm_{0,15}Ce_{0,35}Zr_{0,35}O_2+LaMn_{0,45}Ni_{0,45}Ru_{0,1}O_3]$ композиттің стехиометриялық құрамы

Элементтер	Атомдық үлесінің орташа мәні, %	Стехиометриялық құрамы, %	
		Эксперименттік	Теориялық
Pr	2,50	0,1480	0,15
Sm	2,70	0,1598	0,15
Ce	6,56	0,3883	0,35
Zr	5,13	0,3037	0,35
Барлығы	16,89	0,9998	1
La	12,45	0,9737	1
Mn	6,32	0,4943	0,45
Ni	5,85	0,4575	0,45

Ru	0,95	0,0743	0,1
Барлығы	25,57	1,9998	2

Қорытынды

Бұл зерттеуде этанолдың булы конверсия процесі үшін «Полимер», «Ультрадыбыстық диспергирлеу» және «One pot» әдістерімен флюорит $\text{Pr}_{0,15}\text{Sm}_{0,15}\text{Ce}_{0,35}\text{Zr}_{0,35}\text{O}_2$ және перовскит $\text{LaMn}_{0,45}\text{Ni}_{0,45}\text{Ru}_{0,1}\text{O}_3$ күрделі оксидтер негізінде массивті $[\text{Pr}_{0,15}\text{Sm}_{0,15}\text{Ce}_{0,35}\text{Zr}_{0,35}\text{O}_2 + \text{LaMn}_{0,45}\text{Ni}_{0,45}\text{Ru}_{0,1}\text{O}_3]$ (1:1 масса бойынша) нанокөмізгіштерін синтезделіп, фазалық құрамы және құрылымы рентгенфазалық талдау және трансмиссиялық электронды микроскопия әдістерімен зерттелді. Синтезделген үлгілердің РФТ және ТЭМ мәліметтері «Полимер», «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістері жеке флюорит және перовскит жеке фазалары бар нанокөмізгіштердің түзілуін қамтамасыз ететін көрсетті. Ал «One pot» әдісімен дайындалаған үлгі құрамына кіретін катиондардың жеке және күрделі оксидтерінің қоспасынан тұратыны анықталды. «Перовскит-флюорит» көмізгіштік фазасы түзілген үлгілердің нақты элементтік және стехиометриялық құрамын растау үшін энергодисперсті спектроскопия әдісімен талдау жасалды. Энергодисперсті спектроскопия әдісі - құрамында екі немесе одан да көп белсенді металдары бар қатты катализаторларды элементтік талдауда нәтижелерді жылдам және жоғары дәлдікпен анықтау, сондай-ақ үлгілерді зерттеуге дайындаудың салыстырмалы түрде қарапайымдылығы себебінен тәжірибеде жиі қолданылады. Сонымен нанокөмізгіштердің ЭДС спектрлерінен екі үлгіде Pr Sm Ce Zr La, Mn Ni Ru O сияқты элементтердің барлық шыңдары анықталып, элементтердің фазалардағы атомдық үлестері бойынша стехиометриялық құрамы есептелді. Есептеу нәтижелері нанокөмізгіштер құрамындағы элементтердің теориялық стехиометриялық мәндері мен тәжірибелік мәндері арасында аз ғана ауытқу (~ 0,0002–0,0003) болатынын көрсетті. Яғни, көп компонентті күрделі оксидтерді синтездеуде Пекини, екі түрлі қасиеттері бар нанокөмізгіштерді синтездеуде «Полимер» және «Ультрадыбыстық диспергирлеу» әдістері тиімді екені анықталды.

REFERENCES

- Bestal S.G. (2012). Determination of platinum metals in spent automobile catalysts: methods of sample preparation. *Methods and objects of chemical analysis*. — 2008. — 4:160–163. (in Rus.).
- Cerdà V., González A., Danchana K. (2017). From thermometric to spectrophotometric kinetic-catalytic methods of analysis. A review. *J.Talanta*. — 2017. — 167:733–746. DOI:<https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.02.004> (in Eng.)
- Esquina V. V., Baranovskaya, V. B., Filatova, D. G., Osipova, A. A., & Karpov, Y. A. (2020). Analysis of Nanomaterials Based on Indium and Zinc Oxides by High Resolution Atomic Absorption Spectrometry with the Use of Continuous Spectral Source and Electrothermal Atomization. *Inorganic Materials*. — 2020. — 56:1391–1397. DOI:<https://doi.org/10.18596/jotcsa.1020357> (in Eng.)
- Hosseini S.A., Alvarez-Galvan M.C. (2016). Study of physical-chemical properties and catalytic activities of ZnCr_2O_4 spinel nano oxides obtained from different methods – Modeling the synthesis process by response surface methodology and optimization by genetic algorithm. *J.Taiwan. Inst. Chem. Eng.* — 2016. — 61:261–269. DOI:<https://doi.org/10.1016/j.jtice.2015.12.024> (in Eng.)
- Huang Z. (2005). Spectrophotometric determination of palladium by the colouration with 2-(2-quinolylazo)-5-diethylaminobenzoic acid. *Bulletin of the Korean Chemical Society*. — 2005. — 10:1623–1626. DOI:<https://doi.org/10.1155/2020/8141853> (in Eng.)

Lalitha K., Sadanandam G., Kumari V.D., Subrahmanyam M., Sreedhar B., Hebalkar N.Y. (2010). Highly stabilized and finely dispersed Cu₂O/TiO₂: a promising visible sensitive photocatalyst for continuous production of hydrogen from glycerol: water mixtures. *The Journal of Physical Chemistry*. 2010. 114:22181-22189. DOI:<https://doi.org/10.1021/jp107405u> (in Eng.)

Manshilin V.I., Vinokurova E.K., Kapelyushny S.A. (2009). Determination of the mass fraction of Pt, Pd, Re in samples of spent catalyst by atomic emission spectrophotometry with inductively coupled plasma. *Methods and objects of chemical analysis*. — 2009. — 1:97–100. (in Rus.)

Martins M.L., Florentino A.O., Cavalheiro, A.A., Silva, R.I.V., Santos, D.I.D., Saeki, M.J. (2014). Mechanisms of phase formation along the synthesis of Mn-Zn ferrites by the polymeric precursor method. *Ceram. Int.* — 2014. — 40:16023–1603. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.07.137> (in Eng.)

Naurzkulova S.M., Arapova M.V., Ishchenko A.V., Krieger T.A., Saraev A.A., Kaichev V.V., Rogov V.A., Krasnov A.V., Massalimova B.K., Sadykov V.A. (2021). Ni-Ru-containing mixed oxide-based composites as precursors for ethanol steam reforming catalysts: Effect of the synthesis methods on the structural and catalytic properties. *Open Chemistry*. — 2021. — 1:696–708. — DOI: <https://doi.org/10.1515/chem-2021-0062> (in Eng.)

Newbury D.E., Ritchie N.W.M. (2015). Performing elemental microanalysis with high accuracy and high precision by scanning electron microscopy/silicon drift detector energy-dispersive X-ray spectrometry (SEM/SDD-EDS). *Journal of materials science*. — 2015. — 50:493–518. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-014-8685-2>. (in Eng.)

Reis J.V., Pereira T.C., Teles T.H., França A.B., Bellido J.D.A., Naves F.L., Baston E.P. (2018). Synthesis of CeNb₃O₉ perovskite by Pechini method. *Materials Letters*. — 2018. — 227:261–263. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2018.05.093> (in Eng.)

Reddy E.P., Rojas T.C., Fernandez A., Chowdhury B., Reddy B.M. 2000. - *Reddy E.P., Rojas T.C., Fernandez A., Chowdhury B., Reddy B.M.* Transmission Electron Microscopy and Energy-Dispersive X-ray Spectroscopy Study of V₂O₅/TiO₂-ZrO₂ Catalyst. *Langmuir*. — 2000. — 16(9):4217–4221. DOI: <https://doi.org/10.1021/la9912545> (in Eng.)

Ritchie N.W.M., Newbury D.E. (2012). Uncertainty estimates for electron probe X-ray microanalysis measurements. *Analytical chemistry*. — 2012. — 84:9956–9962. DOI: <https://doi.org/10.1021/ac301843h> (in Eng.)

Swetha M., Raveendra Reddy P., Krishna Reddy V. (2013). Direct, derivative spectrophotometric determination of micro amounts of Palladium (II) by 5-bromo salicylaldehyde isonocotinoyl hydrazone (5-BrSAINH). *Adv. Appl. Sci. Res.* — 2013. — 2:298–304. DOI: <https://doi.org/10.18596/jotcsa.1020357> (in Eng.)

Sam D.S.H., Soenen V., Volta J.C. (1990). Oxidative dehydrogenation of propane over VMgO catalysts // *Journal of catalysis*. — 1990. — 123(2):417–435. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9517\(90\)90139-B](https://doi.org/10.1016/0021-9517(90)90139-B)(in Eng.)

Tarpani L., Mencarelli E., Nocchetti M., Fano L., Taglieri L., Latterini L. (2016). Spectrophotometric analysis of nickel colloid performances as catalysts for hydrogenation of nitro-phenol: influence of the stabilizing agents. *Catalysis Communications*. 2016. — 74:2–32. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2017.02.004> (in Eng.).

Xu L., Xie H., Yin Pu., Yanlin Huang, Lin Qin, Hyo Jin Seo (2017). Perovskite semiconductor La(Ni_{0.75}W_{0.25})O₃ nanoparticles for visible-light-absorbing photocatalytic material. — *Journal of Nanoparticle Research*. 2017. — 19(2):1–11. DOI: 10.1007/s11051-016-3519-6. (in Eng.)

Yao D., Hu Q., Wang D., Yang H., Wu C., Wang X., Chen H. (2016). Hydrogen production from biomass gasification using biochar as a catalyst/support. *Bioresource technology*. — 2016. — 216:159–164. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.05.011> (in Eng.)

Zhang B., Zhang W., Shao L., Su D.S. (2013). Optimum Energy-Dispersive X-Ray Spectroscopy Elemental Mapping for Advanced Catalytic Materials. — *ChemCatChem*. 2013. — 5:2586–2590. DOI: 10.1002/cctc.201200654. (in Eng.)

Zhu T., Flytzani-Stephanopoulos M. (2001). Catalytic partial oxidation of methane to synthesis gas over Ni-CeO₂. *Applied catalysis — A: General.* — 2001. — 208:403–417. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(00\)00728-6](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(00)00728-6) (in Eng.)

© S. Turganbay*, A.I. Ilin, D. Askarova, A.B. Jumagazyeva, Z. Ashimkhanova,
2024

JSC “Scientific Center for anti-infectious drugs”, Almaty, Kazakhstan.

E-mail: turganbay.s@gmail.com

STUDY OF PHYSICOCHEMICAL EQUILIBRIA IN API SOLUTIONS AT DIFFERENT DILUTIONS

Turganbay Seitzhan — PhD, Head of Laboratory of New Substances and Materials, JSC «Scientific Center for Anti-infectious Drugs», Almaty, Kazakhstan

E-mail: turganbay.s@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9621-3534>;

A. I. Ilin — Doctor of Chemical Sciences, Director of JSC «Scientific Center for Anti-infectious Drugs», Almaty, Kazakhstan

E-mail: scaid@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9528-9721>;

Dana Askarova — Master’s student, junior researcher, laboratory of New Substances and Materials, JSC «Scientific Center for Anti-infectious Drugs», Almaty, Kazakhstan

E-mail: askarova.dana00@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0006-0214-4296>;

Jumagazyeva Ardak — PhD, Head of microbiology laboratory JSC «Scientific Center for Anti-infectious Drugs», Almaty, Almaty, Kazakhstan

E-mail: r_dawa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8610-7321>;

Ashimkhanova Zauresh — Master, senior researcher, control-analytical laboratory of JSC «Scientific Center for Anti-infectious Drugs», Almaty, Almaty, Kazakhstan

E-mail: a_zauresh.72@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6690-393X>.

Abstract. The formulation of new drugs that exert a wide spectrum of activity is a relevant issue. Knowledge of the physicochemical characteristics and structure of the drug is necessary in order to correctly interpret the mechanism of its action and distribution after administration to the body. Finally, the structure and properties of the drug determine both the medicinal form and the method of dosage. In this regard, our work was aimed to study the structure and properties of active pharmaceutical ingredient (API) using a complex of physicochemical methods. According to the results of viscometric studies, the solutions of API were found to be non-Newtonian liquids and the dependence tendency between the temperature increase and solution viscosity decrease was found out, what indicates the occurrence of the decomposition processes, or the existing structures, or associations disaggregation. The data on viscometric studies correlate with the data obtained from calculations of the activation energies of the viscous flow (E_a). Also, the electrical conductivity of API solutions at the temperature of 20–25 °C was studied using the conductometric method. Measurements of the electrical conductivity of API solutions showed that with an increase in the drug content, the values of the specific conductance (χ , mS/cm) rise. This is due to an increase in the quantity of electrically conductive particles in the system, which occurs both due to the concentration of solutions and disaggregation of the micelles.

Keywords: Association, Dynamic viscosity, Specific conductance, potentiometry, redox potential, microscopy

Financing: “Improvement of biosafety measures in Kazakhstan: countering dangerous and especially dangerous infections” scientific technical program, (IRN BR218004/0223).

Conflict of interest: The authors declare that there is no conflict of interest.

© С. Тұрғанбай*, А.И. Ильин, Д.А. Аскарова, А.Б. Джумагазиева,
З.С. Ашимханова, 2024

“Инфекцияға қарсы препараттар ғылыми орталығы” АҚ, Алматы, Қазақстан.

E-mail: turghanbay.s@gmail.com

ӘРТҮРЛІ СҰЙЫЛТУЛАРДАҒЫ АФС ЕРІТІНДІЛЕРІНДЕГІ ФИЗИКА-ХИМИЯЛЫҚ ТЕПЕ-ТЕҢДІКТІ ЗЕРТТЕУ

Тұрғанбай Сейтжан — PhD, «Инфекцияға қарсы препараттар ғылыми орталығы» АҚ, Жаңа заттар және материалдар зертханасының меңгерушісі, Алматы, Қазақстан

E-mail: turghanbay.s@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9621-3534>;

Ильин Александр Иванович — химия ғылымының докторы, «Инфекцияға қарсы препараттар ғылыми орталығы» АҚ директоры, Алматы, Қазақстан

E-mail: scaid@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9528-9721>;

Аскарова Дана — магистр-студент, «Инфекцияға қарсы препараттар ғылыми орталығы» АҚ, Жаңа заттар және материалдар зертханасының кіші ғылыми қызметкері; Алматы, Қазақстан

E-mail: askarova.dana00@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0006-0214-4296>;

Джумагазиева Ардак Бейсенбаевна — PhD, «Инфекцияға қарсы препараттар ғылыми орталығы» АҚ, Микробиология зертханасының меңгерушісі, Алматы, Қазақстан

E-mail: r_dawa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8610-7321>;

Ашимханова Зауреш Сайдахметовна — «Инфекцияға қарсы препараттар ғылыми орталығы» АҚ, Бақылау-аналитикалық зертханасының аға ғылыми қызметкері; Алматы, Қазақстан

E-mail: a_zuresh.72@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6690-393X>.

Аннотация. Эсер ету спектрі кең жаңа препараттарды жасау өзекті мәселе болып табылады. Денеге енгізгеннен кейін эсер ету механизмін және оның әрекетін дұрыс түсіндіру үшін препараттың физика-химиялық сипаттамалары мен құрылымын білу қажет. Препараттың құрылымы мен қасиеттері, соңында дәрілік форманы да, енгізу әдісін де анықтайды. Осыған байланысты біздің зерттеу жұмысымыздың мақсаты физика-химиялық әдістер кешенін қолдана отырып, активті фармацевтикалық субстанциялардың (АФС) құрылымы мен қасиеттерін зерттеу болды. Вискозиметриялық зерттеулердің нәтижелері бойынша АФС ерітінділерінің ньютондық емес сұйықтар екендігі және температураның жоғарылауымен ерітінділердің тұтқырлығы төмендейтіні анықталды, бұл - құрылымдардың немесе ассоциаттардың ыдырау немесе бөлшектену процестеріне ұшырауын көрсетеді. Вискозиметриялық зерттеулердің деректері мен тұтқыр ағыстың активтену энергиясының (Еа) есептеулерінен алынған мәліметтер сәйкес келеді. Сондай-ақ кондуктометриялық әдіспен 20–25 °С температурада АФС ерітінділерінің электрөткізгіштігі зерттелді. АФС ерітінділерінің электрөткізгіштігін өлшеу, дәрілік заттардың мөлшері артқан сайын меншікті электрөткізгіштік мәндері (χ , mS/cm) жоғарылайтынын көрсетеді. Бұл ерітінділердің концентрациясы есебінен де, мицеллалардың ыдырауынан да пайда болатын жүйедегі электрөткізгіш бөлшектер санының артуына байланысты.

Түйін сөздер: ассоциация, динамикалық тұтқырлық, электр өткізгіштік,

потенциометрия, тотығу-тотықсыздану потенциалы, микроскопия

Қаржыландыру: «Қазақстанда биологиялық қауіпсіздікті қамтамасыз ету шараларын жетілдіру: қауіпті және аса қауіпті инфекцияларға қарсы іс-қимыл» ғылыми-техникалық бағдарламасы (ЖРН BR218004/0223).

Мүдделер қақтығысы: авторлар осы мақалада мүдделер қақтығысы жоқ деп мәлімдемейді.

© С. Тұрғанбай*, А.И. Ильин, Д.А. Аскарова, А.Б. Джумагазиева,
З.С. Ашимханова, 2024

АО «Научный центр противоиnфекционных препаратов», Алматы, Казахстан.
E-mail: turghanbay.s@gmail.com

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ В РАСТВОРАХ АФС ПРИ РАЗЛИЧНЫХ РАЗВЕДЕНИЯХ

Тұрғанбай Сейтжан — PhD, заведующий лабораторией новых веществ и материалов АО «Научный центр противоиnфекционных препаратов», Алматы, Казахстан
E-mail: turghanbay.s@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-9621-3534>;

Ильин Александр Иванович — доктор химических наук, директор АО «Научный центр противоиnфекционных препаратов», Алматы, Казахстан
E-mail: scaid@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9528-9721>;

Аскарова Дана Алмазқызы — магистрант, младший научный сотрудник лабораторий новых веществ и материалов АО «Научный центр противоиnфекционных препаратов», Алматы, Казахстан
E-mail: askarova.dana00@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0006-0214-4296>;

Джумагазиева Ардак Бисенбаевна — PhD, заведующий лабораторией микробиологии, АО «Научный центр противоиnфекционных препаратов», Алматы, Казахстан
E-mail: r_dawa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8610-7321>;

Ашимханова Зауреш Сайдахметовна — магистрант, старший научный сотрудник контрольно-аналитической лаборатории, АО «Научный центр противоиnфекционных препаратов», Алматы, Казахстан
E-mail: a_zauresh.72@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-6690-393X>.

Аннотация. Создание новых лекарственных препаратов, которые обладают широким спектром действия является актуальной проблемой. Знание физико-химических характеристик и строения препарата является необходимым для того, чтобы правильно трактовать механизм действия и его поведение после введения в организм. Строение и свойства препарата, в конечном итоге, определяют и лекарственную форму, и способ применения. В связи с этим целью наших исследований явилось изучение при помощи комплекса физико-химических методов строения и свойств активные фармацевтические субстанции (АФС). По результатам вискозиметрических исследований установлено, что растворы АФС являются неньютоновыми жидкостями и было установлено, что с повышением температуры вязкость растворов уменьшается, что свидетельствует о протекании процессов распада или дезагрегации имеющихся структур или ассоциаций. Данные вискозиметрических исследований коррелируют с данными полученных при расчетах энергий активации вязкого течения (E_a). Также кондуктометрическим методом была изучена электропроводность растворов АФС при температуре 20–25 °С. Измерения электропроводности растворов АФС показывают, что с повышением содержания лекарственного препарата значения удельной электропроводности

(χ , mS/cm) растут. Это обусловлено увеличением количества электропроводящих частиц в системе, происходящее как за счет концентрирования растворов, так и за счет дезагрегации мицелл.

Ключевые слова: ассоциация, динамическая вязкость, удельная электропроводность, потенциометрия, окислительно-восстановительный потенциал, микроскопия

Финансирование: научно-техническая программа «Совершенствование мер обеспечения биологической безопасности в Казахстане: противодействие опасным и особо опасным инфекциям» (ИРН BR218004/0223).

Конфликт интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Introduction

Iodine has been used as an antiseptic to prevent and treat a wide range of infections for the long time ago. However, its use has been limited by a number of undesirable factors, such as irritation, sensitization, staining of biological and artificial surfaces, low solubility in water and high vapor pressure. In the early 1950s, the “conquest” of iodine began with the study of its complex formation with certain polymers to form a new class of compounds known as iodophors (Garg et al., 2007). Iodophors are chemical complexes containing a mixture of molecular iodine, iodide ions and a solubilizing agent (Klimaviciute et al., 2012). Natural and synthetic water-soluble polymers and nonionic surfactants are widely used as solubilizing agents. Complexation with polymer carriers increases the solubility of molecular iodine, promotes its prolonged release (Boddie et al., 1997) and reduces the steady-state concentration of free iodine (Kaiho et al., 2014).

Iodine has antimicrobial and antiseptic properties. While antibiotics are localized in a specific location, iodine simultaneously affects all structures of the microbial cell. Iodine binds to proteins, causing their denaturation through several mechanisms, for example, by oxidizing SH groups on cysteine and methionine residues and preventing the formation of hydrogen bonds between the amino groups of arginine and histidine and the phenolic groups of tyrosine. Changes affect the structure and function of microbial cells. In addition, iodine is able to bind to fatty acids via C–C bonds and some nucleotides (adenine, cytosine and guanine), thereby changing the structure of nucleic acids and the entire bacterial cell membrane. Thus, membranes and cytoplasm are rapidly destroyed in cells exposed to iodine (Garg et al., 2007). For example, the effects of the iodophore polyvinylpyrrolidone (PVP)-iodine have been studied in bacterial cells using electron microscopy and biochemical methods and found to involve rapid cytoplasmic partitioning, nucleotide coagulation, and loss of enzymatic activity. The cells did not completely decompose, but pores appeared in the cell wall, causing leakage of cellular components (Schreier et al., 1997). The wide range of uses of iodophor makes it possible to create various iodine-polymer compositions: solutions, ointments, foaming creams, films, mucoadhesive tablets, etc. Iodophors are stable during long-term storage, and their side effects are extremely rare (Cooper et al., 2007).

Iodine-polymer complexes are widely used in pharmacy, veterinary medicine, medicine, production of disinfectants, and environmental protection. As mentioned above, iodine is a universal antiseptic, but when it comes into contact with the skin, an irritating effect occurs, limiting its use. Iodine-containing polymers are devoid of this disadvantage and are used as disinfectants, antimicrobial and antibacterial agents.

Antibacterial activity of PVP-Iodine observed in the pH range of 2.5-7.0. *In vivo* studies have shown that PVP iodine kills 96.7 % of bacteria within 60 seconds of contact with the mucous membrane of the eye (Ferguson et al., 2003). PVP iodine has many of the properties required for wound treatment and has a wide spectrum of antimicrobial activity (Shiraishi et al., 1997), affecting viruses (Kawana et al. 1997), fungi (König et al., 1997) and parasites. PVP iodine does not cause resistance, is more effective against biofilms, is well tolerated, acts on inflamed areas of the skin and has excellent ability to form films (Kumar et al., 2009). Thus, iodophor is an ideal antiseptic for the treatment of skin and mucous membranes during preparation for surgery.

Severe acute respiratory syndrome caused by coronavirus (SARS-CoV) was first detected in November 2002 in Guangdong Province, China. The virus caused 774 human deaths between November 2002 and July 2003 (Kariwa et al., 2006). Antiviral activity against coronavirus was studied for povidone-iodine. Treatment of SARS-CoV with povidone-iodine preparations for 2 minutes reduced the infectious titer from 1.17×10^6 TCID₅₀/mL (50 % infectious dose in tissue culture) to a level below the detectable limit. The efficacy of povidone-iodine was equivalent to that of 70% ethanol. As a preventive measure, the use of sprays and rinses with povidone-iodine is important. The new coronavirus SARS-CoV-2 appeared in the Chinese province of Wuhan in the last decade of 2019. On March 11, 2020, the World Health Organization declared SARS-CoV-2 a pandemic. Patients and healthcare professionals are encouraged to use sprays containing 0.5 % povidone-iodide, 0.28–0.30 ml in each nostril (Khutoryanskiy et al., 2010). The total dose of iodine in this case is approximately 0.33 mg and does not cause any side effects. Mouthwash with 9 ml of 0.5 % povidone-iodine solution for 30 s was suggested in (Poutanen et al., 2005). The total dose of iodine in this case is approximately 0.05 mg. It has been shown that a single injection of povidone-iodine leads to a decrease in the microflora of the oral cavity within 3 hours.

There are more than 400 brands of pharmaceuticals (generics) based on iodine-polymer complexes in the world (www.drugbank.ca/drugs/DB06812). The most common active ingredients are iodine complexes with PVP and PVA.

The non-adhesive INADINE dressing consists of a low-adhesion fabric impregnated with PEG and containing 10 % povidone iodine and 1 % free iodine. INADINE has been shown to be effective as a non-adherent antiseptic dressing for the primary treatment of wounded skin areas (Vermeulen et al., 2010). It has been established that iodine-containing dressings are superior to dressings with sulfadiazine and inferior to dressings with rifamycin. In addition, 5 % iodine-PVP ointment has been found to be superior to silver sulfadiazine in wound healing. The drug has been shown to be effective and well tolerated by pediatric patients (Lafferty et al., 2011).

Microbial infection of the burn wound can have a significant effect, as microorganisms can contribute to the progression of partial-thickness burns to full-thickness burns with severe consequences. PVP-iodine ointments have been used to treat patients with burns of various sizes in combination with antibiotics and systemic administration of vitamins E and C to alleviate oxidative stress in burn wounds (Al-Kaisy et al., 2005). Ointments containing PVP-iodine have shown an efficacy of 15.3 % and a wound healing time of 4 days. which made it possible to reduce the cost of staying in the hospital. Moreover, no side effects were observed. Of particular importance in patients with concomitant skin injuries (e.g., open bleeding) are the effects of PVP

iodine on neutrophils and oxygen radicals (Landsman et al., 2016) have developed polymeric hemostatic materials with shape memory based on the hydrogel PEG-acrylate-PVP-iodine to stop wound bleeding. Hydrogels increased fluid absorption by 19 times compared to hydrogels without povidone-iodine and showed high antibacterial activity. Hemostatic macroporous polymer foams were synthesized by tempering the highly dispersed (inner) phase of an emulsion based on PEG and sodium acrylate (Lundin et al., 2019). Polymer foams were impregnated with an iodine solution to impart antimicrobial activity. Prolonged iodine release over 48 h was achieved at higher iodine concentrations in solutions, whereas rapid release was observed at lower concentrations. The complexes showed activity against the bacteria *Escherichia coli*, *Klebsiella pneumoniae*, *Pseudomonas aeruginosa*, and *Staphylococcus aureus*.

A complex of iodine with sodium acrylate and N-vinylpyrrolidone copolymers in combination with carboxymethylchitosan has been used to prevent postoperative infection after treatment of vaginal diseases (Chen et al., 2018). The results of clinical studies have shown that the composition under consideration is more effective than the standard treatment method.

Another promising area is the creation of new drugs for targeted delivery of iodine to hard-to-reach areas of the body and increasing the period of iodine action. For example, povidone-iodine has been found to be suitable for the treatment of conjunctival infections (Koerner et al., 2018). Another study demonstrated the efficacy of povidone-iodine against pathogenic vaginal bacteria (Moghadam et al., 2018).

Thus, it can be said that polymer-iodine complexes are widely used as effective antiseptics and antimicrobial agents in medicine and pharmacy. Structural modeling of the polymer carrier opens up new opportunities for the use of iodophores as antiseptic and antimicrobial agents in the treatment of various infectious diseases

The creation of new active pharmaceutical ingredients that have a wide range of action is an urgent problem. Knowledge of the physicochemical characteristics and structure of the drug is necessary in order to correctly interpret the mechanism of action and its behavior after administration into the body. The structure and properties of the drug, in the end, determine both the dosage form and the method of administration. In this regard, the purpose of our research was to study the structure and properties of APIs using a set of physicochemical methods.

Materials and basic methods

The object of the study is active pharmaceutical substances (hereinafter referred to as API) provided by the Scientific Center for Anti-Infective Drugs. The drug is a complex compound by its chemism, which is molecular and ionic complexes of iodine with associates of synthetic water-soluble polymers, as well as natural mono-, oligo- and polysaccharides and natural proteins. The total molecular weight of the drug is 55–60 kDa. 1000, 1:100 and 1:10. For potentiometric studies, solutions of potassium iodide salts 12.0 g/l, lithium chloride 4.0 g/l, calcium chloride 2.0 g/l, magnesium chloride 4.0 g/l were taken. Sigma Aldrich, Germany, 99.8 %).

Determination of the viscosity of API solutions

Viscometric studies of API solutions were carried out using a glass capillary temperature-controlled viscometer. The viscosity measurement temperature of solutions of various concentrations was 20, 25, 30, 35 and 40 °C. The dynamic viscosity of the solutions was calculated according to the following formula:

$$\eta = K \times \tau \quad (1)$$

where η - dynamic viscosity of solutions, CPZ;
 K - viscometer constant, determined by the flow of distilled water;
 τ - time for liquids to flow out of the capillary, in min

Determination of Electrical Conductivity

A Multi 340i conductivity meter was used to measure the electrical conductivity of API solutions. Previously, the readings of the device were checked on a standard solution of 0.01n KCl at appropriate temperatures. The drug dilutions of 1:2000-1:10 were used.

Potentiometric Titration of API Solutions

In order to determine the potential of API solutions when diluted with water, saline and electrolytes, a device was assembled, which consisted of a pH meter (universal ionomer EV-74) connected to an analog-to-digital converter (ADC) ADAM-4018M connected to a PC. The readings of the device were recorded in the computer using the ADC. A working electrode (platinum) and an auxiliary electrode (silver chloride) were lowered into the vessel with the liquid under study. The liquid used for titration of API solutions was also supplied here at a constant rate. Potential measurements were taken every 30 seconds. Further, the data were processed using the "Origin" program according to the formula for determining the dependence of the equilibrium concentration of the API solution on the time of measurement:

$$C = \frac{C_0}{1 + \frac{v_k}{V_0} \cdot \tau} \quad (3)$$

where C_0 – initial concentration of the API solution, equal 1:10, v_k – titration fluid delivery rate, л/c, V_0 – initial volume of API solution, equal 0,03 L.

Results and discussion

Viscometric studies of the medical drug API

Physicochemical studies of the drug, previously conducted studies have shown that API solutions are suspensions that have thixotropic properties. This property is characteristic of structured liquids, which is due to the presence of particles in the liquid medium. To study the features of the flow of such systems, as well as unstructured suspensions and sols, the method of capillary viscometry, which is common for liquids, is used, based on the measurement of the volumetric velocity of flow through the capillary.

The dynamic viscosity (η , CPZ) of the API solutions was measured with a temperature-controlled viscometer at dilutions with saline of 1:1000, 1:100 and 1:10. All solutions were pre-filtered. For comparison, the viscosity of the saline solution was also determined. Measurements were carried out at temperatures of 20, 25, 30, 35 and 40 °C. Figure 1 shows the viscosity relationship graph for water, saline and API at three dilutions. As measurements have shown, the viscosity of API solutions increases with an increase in concentration compared to saline, in general: the maximum values of η have an API solution with a dilution of 1:10.

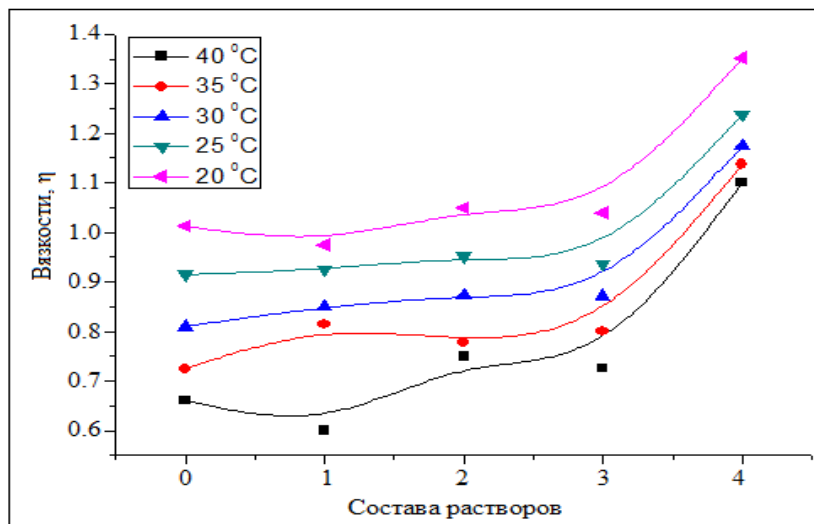


Fig. 1. Temperature dependence of viscosity on the composition of solutions: 1-H₂O, 2-NaCl, 3-API 1:1000, 4-API 1:100, 5-API 1:10

The Einstein's law is usually used to describe the viscosity behavior of η dispersed system (sol, suspension):

$$\left(\frac{\eta}{\eta_0} - 1 \right) / \varphi = k \quad (4)$$

where η and η_0 – the viscosity of the colloidal solution and the pure dispersion medium; $\varphi = V_d/V$ – volume fraction of dispersed phase (V_d) in the total volume of the system (V); k - constant defined by the shape of the particles.

According to this law, the viscosity of such a system increases with the increase in the content of the dispersed phase. The physical meaning of this law is that the relative increment of viscosity is directly proportional to the relative content of the dispersed phase. The larger the φ value, the more vigorous is the inhibitory effect of particles (which do not have internal fluidity) on the flow. With linear dependence η from φ liquids are referred to as ordinary, or Newtonian liquids. Structured colloidal systems are distinguished by the fact that they do not obey the laws of Newton and Einstein. For them, the viscosity value usually increases with an increase in the content of the dispersed phase much more. They are also called non-Newtonian fluids [2].

Figure 1 shows the regularity characteristic of structured liquids quite well: with an increase in the content of the drug, the viscosity of solutions increases sharply. Moreover, with an increase in temperature, this effect is even more pronounced, which is probably due to an increase in the number of particles in the volume of the API solution compared to lower temperatures. Below are graphs of the dependence of the viscosity of solutions on temperature (Fig. 2 and 2-A).

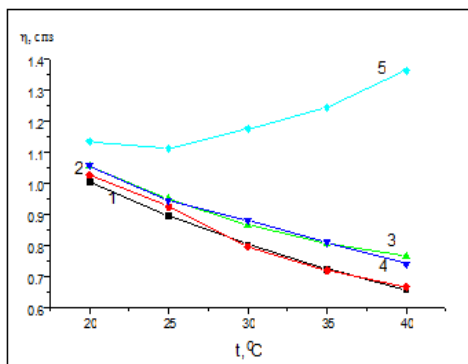


Fig. 2. Dependence of the viscosity of solutions: API on dilution without washing the capillary. 1- H_2O , 2- NaCl, 3-API 1:1000, 4-API:100, 5-API 1:10

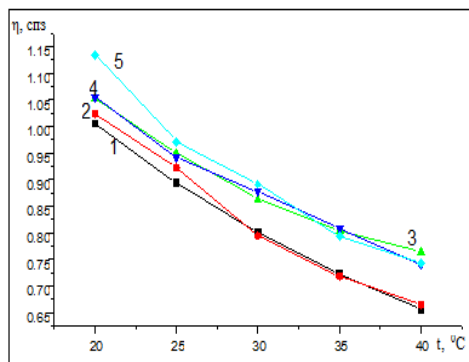
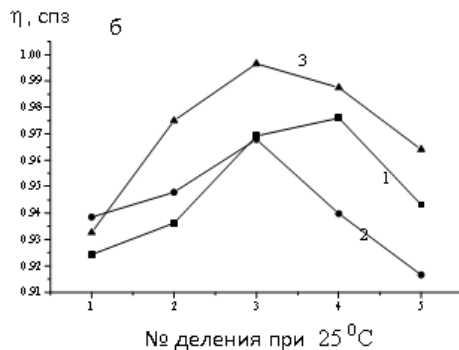
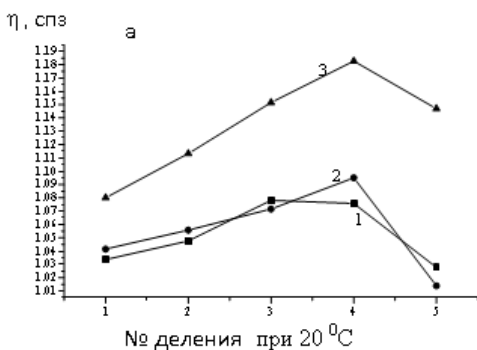


Fig. 2A. Dependence of the viscosity of API solutions on dilution: 1- H_2O , 2- NaCl, 3-API 1:1000, 4-API 1:100, 5-API 1:10

With an increase in temperature, the viscosity of all solutions decreases, and at temperatures from 20 to 250 °C, sharper decreases in values are observed in comparison with their change in the range of 25–400 °C. It should be noted here that this viscosity behavior is more clearly manifested for the concentrated API solution itself. With a decrease in the content of the drug, this phenomenon is leveled out.

During the measurement, an interesting feature of the viscosity change for the concentrated solution itself was noted: if the viscometer capillary was not washed before each measurement, then the effect of increasing viscosity in subsequent measurements was manifested. This phenomenon was not observed with constant flushing of the capillary: viscosity naturally decreased with an increase in temperature. Most likely, at a given concentration of API, the thixotropic properties of the solution are manifested, i.e. the structuring ability for it remains high even after filtration. The time of discharge was measured sequentially one after another without flushing the capillary in order to verify the possibility of structuring during viscous outflow through the capillary. The results are presented in Fig. 3.



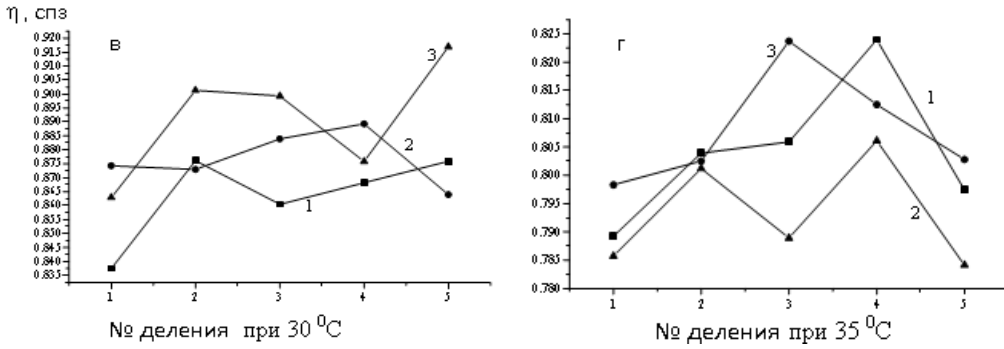


Fig. 3. Curves of changes in the viscosity of API solutions depending on the number of consecutive measurements: 1-API 1:1000, 2-API 1:100, 3-API 1:10

Thus, the temperature dependence of viscosity can be conditionally divided into two rectilinear sections that have different angles of inclination. In general, this curve indicates that the system is undergoing a process of disaggregation. It is likely that the large micelles present in the solution (especially in the 10-fold diluted API) break down into smaller particles throughout the measurement process, with disaggregation being most intense at temperature range of 20–25 °C.

As can be seen from the above data, in general, there is a noticeable trend towards an increase in the elapse time from the number of the sequential measurement. This behavior may be due to the fact that the structuring of the gel in solution occurs from the walls where the adsorption of particles begins, which leads to the effect of reducing the diameter of the capillary.

We tried to calculate the activation energy of a viscous flow (E_A), for what a dependency graph was built $\lg\eta$ from reverse temperature (Fig. 4), and then, using the tangent of the angles of inclination of the lines drawn over the two sections, their values for all solutions of API are determined (Table 1).

Table 1. Calculation of viscous flow activation energy

Composition of solutions	E_a , kJ/mol (Range of temperature 20–25 °C)	E_a , kJ/mol (Range of temperature 25–40 °C)
Water	6,88	
Saline solution	7,20	
API in 1000 s	4,75	6,31
API in 100 s	5,30	6,98
API in 10 s	6,02	9,57

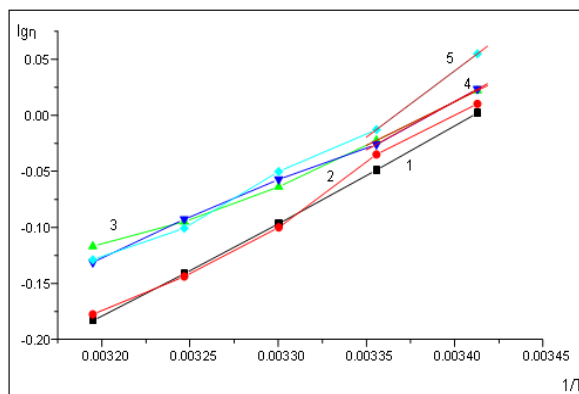


Fig. 4. Dependence of viscosity logarithm from its temperature: 1- H₂O, 2- NaCl, 3-API 1:1000, 4-API 1:100, 5-API 1:10

However, the activation energy calculated from the initial ranges of the (temperature 20–25 °C) for solutions the API was less than for pure saline. If for saline $E_A = 7,20$ kJ/mol, then for an API solution diluted 100 times, it has a value of about 5 kJ/mol. Such a decrease E_A is probably due to the fact that during the breakdown of micelles into smaller, part of the molecules NaCl is spent on the formation of new solvate layers. This leads to a decrease in the number of free molecules in the system NaCl, as a result of which E_A API solution drops. Further, with an increase in the concentration of APC, the activation energy increases slightly, reaching the value of 6,02 kJ/mol. The increase in the values of the activation energy is due to an increase in the number of particles in the volume of the liquid.

Thus, the data of viscometric studies prove unequivocally that API solutions are structured liquids. This property of solutions is due to the presence of particles in the liquid volume, the size of which can be different. Presumably, the particles are rather large micelles (the shape of which can also be very diverse), capable of decaying into smaller particles under the influence of both mechanical action and temperature.

Measurement of electrical conductivity of API solutions

We measured electrical conductivity on API solutions at three dilutions: 1:1000, 1:100 and 1:10 at the same temperatures as in viscometric studies at the beginning. At the same time, the measurement technique was worked out, since the conductivity meter is designed to measure electrical conductivity at temperatures 20–25 °C.

Fig. 5 shows the data on the dependence of specific electrical conductivity (χ) from temperature. The graph shows reference data on the solution for comparison KCl. As can be seen, the electrical conductivity of saline and API with dilution 1:1000 match, but for API (1:100) values χ are lower. This change is most likely due to micelle formation, which leads to a decrease in the number of conductive particles due to their aggregation. The next API solution (1:10) has relatively high conductivity values. This indicates an increase in the number of electrically conductive particles with an increase in the concentration of the drug.

The general pattern for all solutions is that with an increase in temperature, electrical conductivity also increases. Such a change in the electrical conductivity of solutions is quite natural, because with an increase in temperature, the viscosity decreases

and the freedom of movement of electrically conductive particles increases. Similar to viscometric studies, the activation energies of electrical conductivity were also determined here (Fig.6, Table 2).

As can be seen from the table, there is a slight decrease in the values of the activation energy of API solutions compared to saline, which is natural, since with an increase in the concentration, the number of particles capable of conductivity increases.

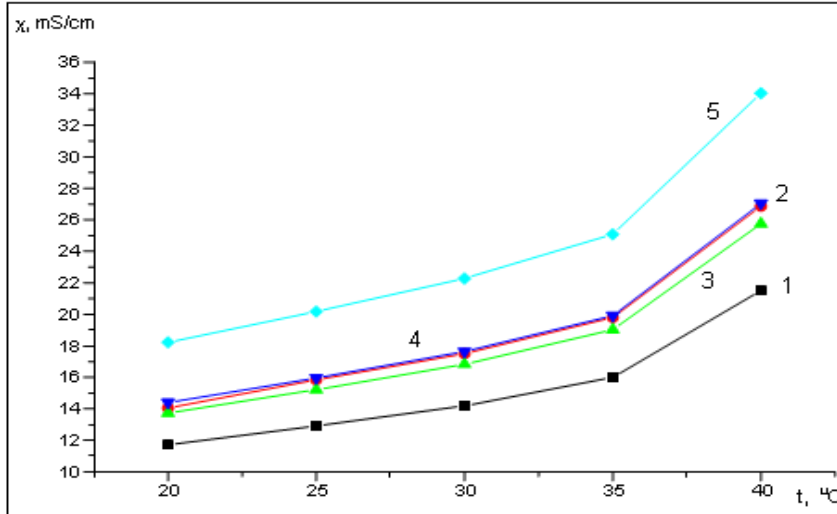


Fig. 5. Change in the electrical conductivity of solutions with temperature: 1. KCl, C=0,1 n.; 2. Saline; 3. API in 1000 s.; 4. API in 100 s.; 5. API in 10 s.

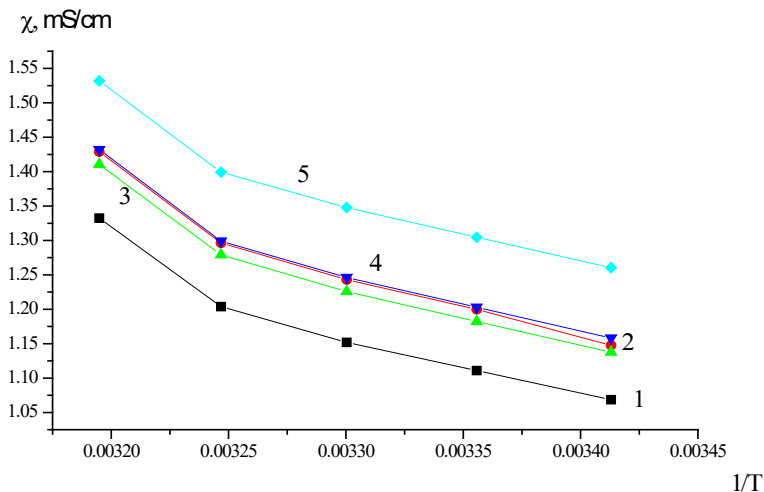


Fig. 6. Dependence of the logarithm of electrical conductivity on the inverse temperature. 1. KCl C=0,1 n., 2. Saline, 3. API in 1000 s., 4. API in 100 s., 5. API in 10 s.

Table 2. Calculation of activation energy of electrical conductivity

Composition of solutions	Ea, kJ/mol (Range of temperature 20–35 °C)
KCl 0,1 n.	6,53
Saline	7,15
API in 1000 s	6,84
API in 100 s	6,81
API in 10 s	6,71

Taking into account the available data, we calculated the value of electrical conductivity corrected for viscosity. The results are shown in Figure 7. Since the corrected electrical conductivity is a characteristic of the number of conductive particles and taking into account the fact that the total concentration of the electrolyte component at 10-fold dilution does not provide a significant addition of conductive particles, it is necessary to conclude that the increase in the mobility of new ions makes a significant contribution to the resulting effect. As can be seen from the figure with an increase in temperature, the electrical conductivity corrected for viscosity increases. With an increase in the concentration of the drug, its values also increase. It should be noted here that on the graph, the curves pass through small lows, which appear brighter with an increase in the concentration of API. The increase in corrected electrical conductivity with temperature clearly indicates the disaggregation of particles.

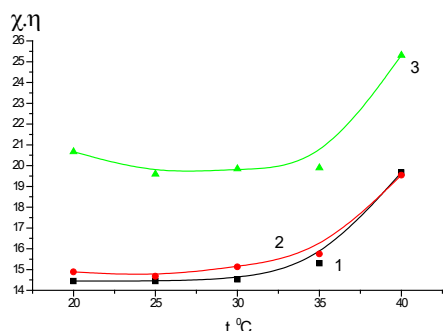


Fig. 7. Dependence of corrected electrical conductivity on temperature. 1-API in 1000 s, 2-API in 100 s, 3-API in 10 s (dilution with saline).

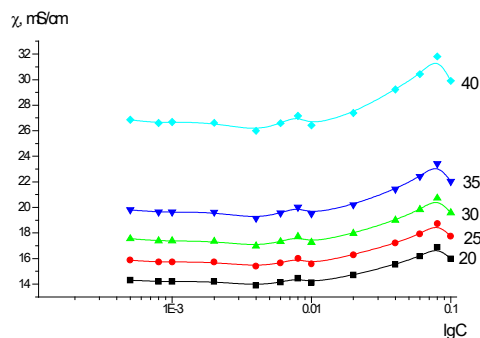


Fig. 8. Specific electrical conductivity of API solutions with different dilutions

Further, the electrical conductivity was measured at the same temperatures when diluted with a saline solution of API from 1:2500 to 1:10 (Fig. 8). The curves of changes in electrical conductivity with an increase in the content of the drug tend to increase. This indicates an increase in the number of electrically conductive particles with a concentration. As we expected, there are several minima at APC concentrations on the conductivity curves 8×10^{-3} , 4×10^{-2} , 1×10^{-2} and 0,1. The appearance of these minima is associated with the processes of micelle formation, which leads to a decrease in the number of electrically conductive particles.

Potentiometric study of the stability of solutions of the preparation API

The meaning of the method is that with the help of a redox indicator electrode,

the role of which is played by platinum, the redox potential of the system formed by solutions of the drug in salts of various concentrations is measured.

To find out the change in redox properties, titration was carried out with solutions of salts included in the preparation in order to identify the individual effect of each of them. Salt solutions were used: NaCl, LiCl, MgCl₂, CaCl₂ и KI. In addition, titration with ordinary distilled water was carried out for comparison.

Figures 9–15 show the curves of the dependence of the redox potential of the system on the concentration of the drug in conventional units, which practically denote the value inverse to the dilution of the original preparation API. In semilogarithmic coordinates, the main part of the curve is a straight-linear section with an angle of inclination close to the angle of inclination for an electrochemical reaction with a single-electron transition. Moreover, the angle of inclination is also close to the value for a single-electron junction. This behavior can be explained by the fact that the reaction by which this process can be described involves a certain equilibrium associated with the molecular and ionic forms of iodine, depending in this case on dilutions or concentration ratios.

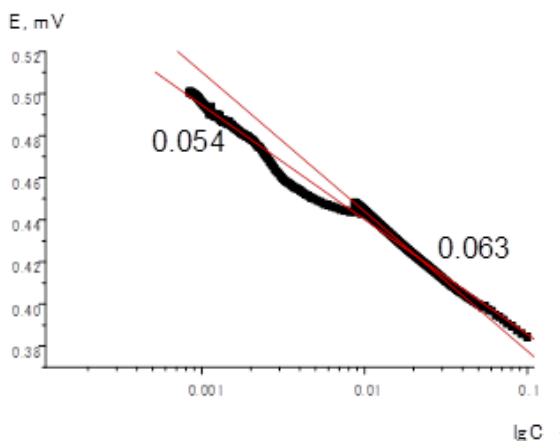


Figure 9. Potentiometric titration of API solutions with water

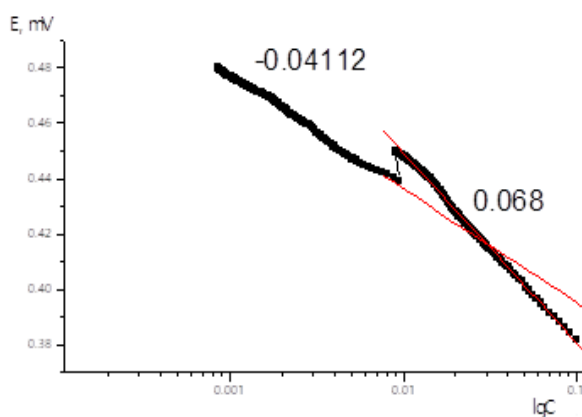


Figure 10. Potentiometric titration of solutions of the drug product API with NaCl solution

Similar curves that were obtained during titration of NaCl (Fig. 10) and LiCl (Fig. 11) have some differences, perhaps not so significant, which consist in a decrease in the angle of inclination of the curve during dilution.

An even more pronounced difference is the titration curves of API solutions with divalent metal solutions, i.e. $MgCl_2$ (Fig.12) and $CaCl_2$ (Fig.13). At the same time, there is a clear curve break, at approximately the same concentration for both solutions, at dilutions of about 1/200, which coincides with the presence of cash registers in that area, and at the same time there is a change in the angle of inclination, which for $MgCl_2$, can be represented as a transition from one-electron equilibrium to two-electron equilibrium, and for $CaCl_2$ from single-electron, to an even greater value.

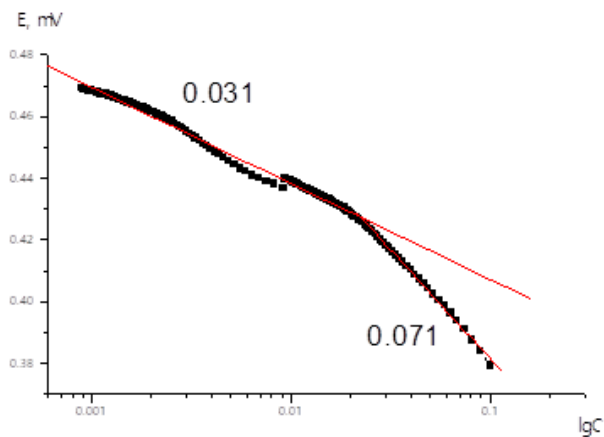


Figure 11. Potentiometric Titration of API solutions with LiCl solution

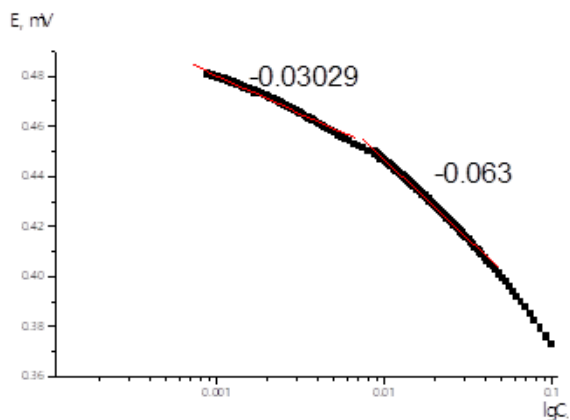


Figure 12. Potentiometric titration of solutions of the drug product API with $MgCl_2$ solution

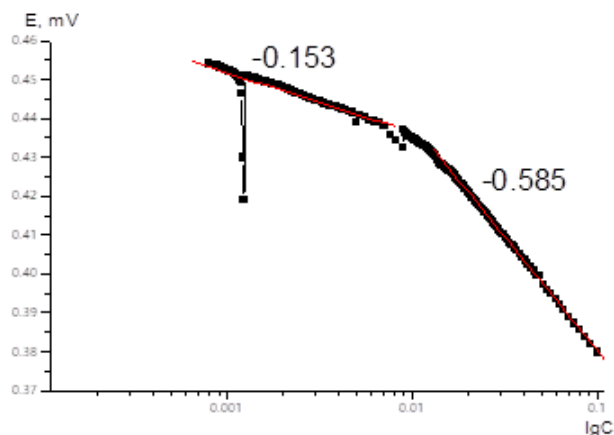


Figure 13. Potentiometric titration of solutions of the drug product API with CaCl_2 solution

If we analyze the type of dependence from the point of view of equilibrium on the electrode, then it can be described on the basis of the assumption of the constant activity of the oxidized form of iodine, i.e. molecular iodine, and the activity of the reduced form, i.e. I^- , which changes during dilution during titration and as it should be in this case, the slope of the curve should be according to the Nernst equation -0.59 mV by an order of magnitude, and the angle of inclination should be negative, which we see in this case. For example, for the cations Li^+ , Mg^{2+} and especially Ca^{2+} , the inclination angle begins to drop sharply with increasing dilution. This behavior may indicate that with large ratios of the concentration of I^- to the concentration of ions of the titratable solution, i.e. Ca^{2+} , Mg^{2+} and Li^+ ions, a significant part of I^- can fall into the sphere of complexation of these very titrative agents and there is an effective decrease in concentration.

Another explanation for the change in the angle of inclination of the dependence may be that in the area of about 200 dilutions, where this transition is most often observed, we just observe the rearrangement of micelles. On the curves of the dependence of surface tension on composition, we have fracture points associated with their realignment. In addition, if we consider in more detail the course of the curves during titration with water, NaCl , LiCl , we can see that kinks also exist at dilutions of the order of 700, 800, which also corresponds to the critical concentration of micelation found in other experiments. The same can be seen in the titration curves with CaCl_2 solution. A similar kink in the dependence is present on the titration curve MgCl_2 . Changes in the angle of inclination with a change in the concentration corresponding to the rearrangement of micelles may well be due to the fact that a change in the structure of the aggregate cause's different types of equilibrium of this aggregate with the solution, in any case, differences in these equilibriums, which is reflected in the angles of inclination. Judging by the fact that this is characteristic for divalent cations and partly for Li^+ , it can be assumed that particles with more pronounced acidic properties largely determine the very process of micelle formation.

In general, a change in the angle of inclination on potentiometric curves indicates that the process passes from the region of constant activity I_2 in the solid phase to the region where a change in the concentration of some component of the solution (in particular, Mg^{2+} and Li^+) leads to a change in the activity of molecular iodine to the solid

phase, i.e. micelle. The question of the equilibrium of the system should be touched upon separately, since the available data on dilution with water and physiological, as well as the initial sites for dilution with solutions of other salts, indicate that the system must be equilibrium. Therefore, with a high degree of probability, it can be assumed that the changes that occur with the micelle during titration with salts containing rather acidic cations are due to the fact that these cations are additionally incorporated into the composition of the micelles and lead to a decrease in the activity of molecular iodine in it, which is manifested in a change in the angle of inclination.

The most unexpected dependence was obtained during titration with KJ solution (Fig. 14–15). The course of the relationship corresponds to a formal increase in the activity of the oxidant in the solution, which can be easily explained by the fact that an increase in the concentration of KJ (compared to other components) leads to a shift in equilibrium towards the extraction of molecular iodine from micelles in the form of tri-iodide. If we recalculate the titration curve for the dilution of the iodide ion in the solution of the preparation, we get a curve with a slope very close to the theoretical slope for J⁻ (Fig. 15). Later, at high concentrations, the dependence breaks down, and the main factor in this balance begins to be the complexation of iodine from the micellar state.

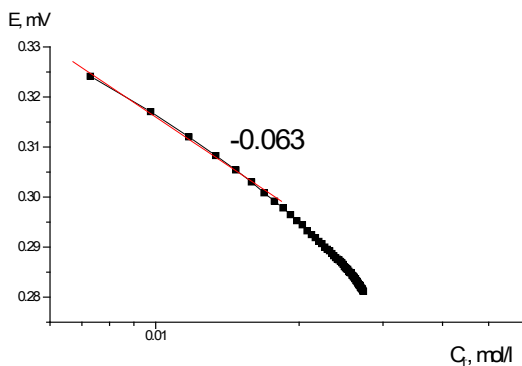
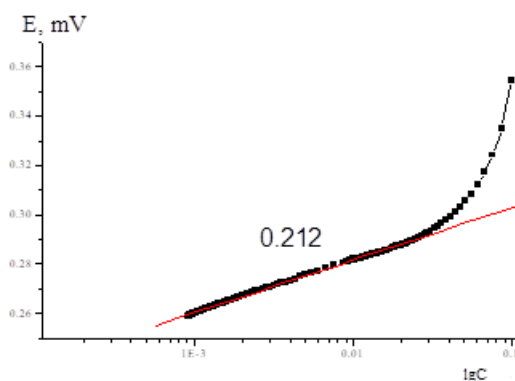


Figure 14. Potentiometric Titration of API-1 Solutions with KJ Solution

Figure 15. Potentiometric titration of solutions of the drug product API with KJ solution, recalculated for dilution of the iodide ion

Summarizing all of the above, it can be concluded that potentiometric measurements allow us to assume that iodine in oxidized form is in the form of particles with its constant activity in phase, i.e. micelle. This is possible if this iodine is packed inside the micelle and at the same time is in connection with J⁻, which are located in the outer shell of the micelle, giving it a negative charge, which entails the disintegration of the micelles as such and its rearrangement into different forms. In order for this aggregative state to be stable, it is probably not enough to have only an organic component or only molecular iodine in the nucleus. Most likely, it is some kind of combination consisting of organic molecules, in which a complex of tri-iodide ion with a metal cation is enclosed, for example Mg²⁺, Ca²⁺, Li⁺.

Conclusion

1. As a result of viscometric studies, it was established that API solutions are non-Newtonian liquids characterized by the presence of structures. With an increase in temperature, the viscosity of solutions decreases. On these curves, there is a slight break, which indicates the course of the processes of disintegration or disaggregation of existing structures or associations. This effect is also confirmed by the data of calculations of the activation energies of the viscous flow (E_a).

2. Measurements of the electrical conductivity of API solutions show that with increasing drug content, the χ value increases. This is due to an increase in the number of electrically conductive particles in the system, which occurs both due to the concentration of solutions and due to the disaggregation of micelles. On the curves of the dependence of electrical conductivity, four minima were found at dilutions of 1:1200, 1:250, 1:100 and 1:10. The appearance of minima is associated with the processes of micelle formation, which lead to a decrease in the number of electrically conductive particles.

3. Potentiometric studies of the stability of API solutions suggest that iodine in an oxidized form with constant activity is located inside the micelles. At the same time, it is in a certain ratio with iodine anions located in the outer membrane of the micelle, thereby giving it a negative charge, which entails the disintegration of the micelles as such and its rearrangement into different forms. The stability of these aggregates is probably ensured by a combination of organic molecules in which a complex of tri-iodide ion and metal cations is enclosed.

REFERENCES

Al-Kaisy A.A., Salih Sahib A. (2005). Role of the antioxidant effect of vitamin e with vitamin C and topical povidone-iodine ointment in the treatment of burns. *Ann Burns Fire Disasters*. — 18(1):19–30. — PMID: 21990974; — PMID: PMC3187962 (in Eng.).

Boddie R.L., and S.C. Nickerson (1997). Evaluation of two iodophor teat germicides: Activity against *Staphylococcus aureus* and *Streptococcus agalactiae*. — *J. Dairy Sci.* —80:1846–1850 (in Eng.).

Cooper R.A. (2007). Iodine revisited, *Int Wound J.* —4(2):124–37. DOI: 10.1111/j.1742-481X.2007.00314.x. — PMID: 17651228; — PMID: PMC7951686 (in Eng.).

Chen Y., Qiu H., Dong M., Cheng B., Jin Y., Tong Z., Li P., Li S., Yang Z. (2019). Preparation of hydroxylated lecithin complexed iodine/carboxymethyl chitosan/sodium alginate composite membrane by microwave drying and its applications in infected burn wound treatment. *Carbohydr Polym.* — 206:435–445. DOI: 10.1016/j.carbpol.2018.10.068. — PMID: 30553343 (in Eng.).

Ferguson A.W., Scott J.A., McGavigan J., Elton R.A., McLean J., Schmidt U., Kelkar R., Dhillon B. (2003). Comparison of 5 % povidone-iodine solution against 1% povidone-iodine solution in preoperative cataract surgery antisepsis: a prospective randomised double blind study, *Br J Ophthalmol.* — 87(2):163–7. DOI: 10.1136/bjo.87.2.163. — PMID: 12543744. — PMID: PMC1771501 (in Eng.).

- Garg S., Jambu L., Vermani K. (2007). Development of novel sustained release bioadhesive vaginal tablets of povidone iodine, *Drug Dev Ind Pharm.* — 33(12):1340–9. DOI: 10.1080/03639040701385782. — PMID: 18097808 (in Eng.).
- Klimaviciute R., Bendoraitiene J., Rutkaite R., Siugzdaite J., Zemaitaitis A. (2012). Preparation, stability and antimicrobial activity of cationic cross-linked starch-iodine complexes, *Int J Biol Macromol.* 51(5):800–7. DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2012.07.025. PMID: 22885019 (in Eng.).
- Kaiho T. (2014). Iodine chemistry and applications, John Wiley & Sons. — ISBN: 1118466292. — 9781118466292 (in Eng.).
- B. König, K. Reimer, W. Fleischer, W. König (1997). Effects of Betaisodona® on Parameters of Host Defense, *Dermatology.* — 195 (Suppl. 2). — 42–48. DOI:10.1159/000246029 (in Eng.).
- Kumar K.J., Reddy C.H.K., Gunashakaran V., Ramesh Y., Babu P.K., Narasimha N.P., Reddy P.L. (2009). Application of broad spectrum antiseptic povidone iodine as powerful action: a review, *Journal of Pharmaceutical Science and Technology.* — 1(2). — 48–58. (in Eng.).
- Kariwa H., Fujii N., Takashima I. (2006). Inactivation of SARS coronavirus by means of povidone-iodine, physical conditions and chemical reagents, *Dermatology.* — 212 Suppl 1(Suppl 1):119–23. — DOI: 10.1159/000089211. — PMID: 16490989; PMCID: PMC7179540 (in Eng.).
- Khutoryanskiy V.V. (2011). Advances in mucoadhesion and mucoadhesive polymers, *Macromol Biosci.* — 14. — 11(6):748–64. DOI: 10.1002/mabi.201000388. — PMID: 21188688 (in Eng.).
- R. Kawana, T. Kitamura, O. Nakagomi, I. Matsumoto, M. Arita, N. Yoshihara, K. Yanagi, A. Yamada, O. Morita, Y. Yoshida, Y. Furuya, S. Chiba (1997). Inactivation of Human Viruses by Povidone-Iodine in Comparison with Other Antiseptics, *Dermatology.* — 195 (Suppl. 2): 29–35. DOI:10.1159/000246027 (in Eng.).
- Koerner J.C., George M.J., Meyer D.R., Rosco M.G., Habib M.M. (2018). Povidone-iodine concentration and dosing in cataract surgery, *Surv Ophthalmol.* — 63(6):862–868. DOI: 10.1016/j.survophthal.2018.05.002. PMID: 29778494 (in Eng.).
- Lafferty Bronwen, Lisa Wood and Paul Davis (2011). Improved care and reduced costs with advanced wound dressings. — *Wounds UK* 7.1: 14–23 (in Eng.).
- Landsman T.L., Touchet T., Hasan S.M., Smith C., Russell B., Rivera J., Maitland D.J., Cosgriff-Hernandez E. (2017). A shape memory foam composite with enhanced fluid uptake and bactericidal properties as a hemostatic agent, *Acta Biomater.* — 47:91–99. DOI: 10.1016/j.actbio.2016.10.008. — PMID: 27721009; — PMCID: PMC5508985 (in Eng.).
- Lundin, Jeffrey G., et al. (2019). Iodine binding and release from antimicrobial hemostatic polymer foams, *Reactive and Functional Polymers.* — 135: 44–51 (in Eng.).
- Moghadam A., Ijaz M., Asim M.H., Mahmood A., Jelkmann M., Matuszczak B. & Bernkop-Schnürch A. (2018). Non-ionic thiolated cyclodextrins—the next generation, *International Journal of Nanomedicine.* — 4003–4013 (in Eng.).
- Poutanen S.M., Low D.E., Henry B., Finkelstein S., Rose D., Green K., Tellier R., Draker R., Adachi D., Ayers M., Chan A.K., Skowronski D.M., Salit I., Simor A.E., Slutsky A.S., Doyle P.W., Kraiden M., Petric M., Brunham R.C., McGeer A.J. (2003). National Microbiology Laboratory, Canada; Canadian Severe Acute Respiratory Syndrome Study Team. Identification of severe acute respiratory syndrome in Canada, *N Engl J Med.* — 348(20):1995–2005. DOI: 10.1056/NEJMoa030634. — PMID: 12671061 (in Eng.).
- Povidone-iodine. [Электронный ресурс] — URL: www.drugbank.ca/drugs/DB06812.
- Vermeulen H., Westerbos S.J., Ubbink D.T. (2010). Benefit and harm of iodine in wound care: a systematic review, *J Hosp Infect.* — 76(3):191–9. DOI: 10.1016/j.jhin.2010.04.026. — PMID: 20619933.
- Schreier H., Erdos G., Reimer K., König B., König W., Fleischer W. (1997). Molecular effects of povidone-iodine on relevant microorganisms: an electron-microscopic and biochemical study, *Dermatology.* — 195. — Suppl 2:111–6. DOI: 10.1159/000246043. — PMID: 9403268 (in Eng.).
- T. Shiraishi, R. Oka, Y. Nakagawa (1997). Pharmaceutical and Bacteriological Study on Povidone-Iodine Sugar Ointment, *Dermatology* 195 (Suppl. 2): — 100–103. DOI: 10.1159/000246040 (in Eng.).

REPORTS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC
OF KAZAKHSTAN
ISSN 2224-5227

Volume 2. Number 350 (2024), 228–240

<https://doi.org/10.32014/2024.2518-1483.291>

FTAXP 31.01.45

© A.M. Userbayeva*, R.G. Ryskaliyeva, 2024

Al-Farabi Kazakh National University, Faculty of chemistry and Chemical Technology,
Almaty, Kazakhstan.

E-mail: alina.139@mail.ru

SCIENTIFIC AND PEDAGOGICAL FOUNDATIONS OF THE PREPARATION OF AN EDUCATIONAL AND METHODOLOGICAL COMPLEX IN CHEMIS- TRY

Userbayeva Alina Maratovna — 2nd year master's degree student of the faculty of chemistry and chemical technology, Kazakh National University named after al-Farabi, Almaty, Kazakhstan

E-mail: alina.139@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-3389-1993>;

Ryskaliyeva Roza Gabdrahimovna — associate Professor, department of chemistry and chemical technology, Candidate of Chemical Sciences Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

E-mail: roza12_11_64@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-3389-1993>.

Abstract. The article considers the features of compiling an educational and methodological complex in the process of teaching the discipline “Chemistry” in the specialty biotechnology in higher educational institutions. A syllabus corresponding to the needs of students of this specialty has been compiled and a comparative description of the structure of the syllabuses already used has been given. It is noted that the volume and content of the educational and methodological complex should correspond to the curriculum of the discipline and fully contain its materials. When developing an educational and methodological complex for any discipline, it is necessary to take into account the integration of natural sciences and knowledge, the comprehensive presentation of information and its practical application. The importance of focusing on experience in the educational process is emphasized. This means that the educational material should be designed in such a way that students can apply their knowledge in practice, solving specific tasks and problems that they face in their professional activities. The importance of using interactive teaching methods that promote the active participation of students in the educational process is emphasized. Reflects not only the importance of curriculum content to ensure effective student learning and preparation for future professional activities in the field of biotechnology, but also the ways in which they are transmitted.

Keywords: educational and methodological complex, curriculum, scientific and technical innovation, interdisciplinary continuity, integration, business skills, research activities

© А.М. Усербаева*, Р.Г. Рыскалиева, 2024

эл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, химия және химиялық технология факультеті, Алматы, Қазақстан.

E-mail: alina.139@mail.ru

ХИМИЯ ПӘНІНЕН ОҚУ-ӘДІСТЕМЕЛІК КЕШЕН ҚҰРАСТЫРУДЫҢ ҒЫЛЫМИ ПЕДАГОГИКАЛЫҚ НЕГІЗДЕРІ

Усербаева Алина Маратқызы — эл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің химия және химиялық технология факультетінің 2 курс магистранты, Алматы, Қазақстан

E-mail: alina.139@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-3389-1993>;

Рыскалиева Роза Габдрахимовна — эл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің химия және химиялық технология факультетінің доценті, химия ғылымдарының кандидаты, Алматы, Қазақстан

E-mail: roza12_11_64@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-3389-1993>.

Аннотация. Мақалада жоғары оқу орындарында “Биотехнология” мамандығына “Химия” пәнін оқыту үдерісінде оқу-әдістемелік кешен құрастыру ерекшеліктері қарастырылған. Осы мамандықтағы студенттердің қажеттіліктеріне сәйкес келетін силлабус құрастырылып, бұрыннан қолданылған силлабустардың құрылымына салыстырмалы сипатта берілген. Оқу-әдістемелік кешеннің көлемі мен мазмұны пән бойынша оқу бағдарламасына сәйкес келуі және оның материалдарын толық қамтуы тиіс екендігі атап көрсетілген. Кез-келген пән үшін оқу-әдістемелік кешенді әзірлеу кезінде жаратылыстану ғылымдары мен білімнің интеграциясын, ақпараттың кешенді ұсынылуын және оның практикалық қолданылуын ескеру қажет. Білім беру процесінде тәжірибеге назар аударудың маңыздылығы атап өтіледі. Бұл дегеніміз, оқу материалы студенттер өздерінің кәсіби қызметінде кездесетін нақты міндеттер мен мәселелерді шеше отырып, өз білімдерін іс жүзінде қолдана алатындай етіп жасалуы керек. Студенттердің оқу процесіне белсенді қатысуына ықпал ететін интерактивті оқыту әдістерін қолданудың маңыздылығы атап өтіледі. Студенттерді тиімді оқытуды және олардың биотехнология саласындағы болашақ кәсіби қызметіне дайындықты қамтамасыз ету үшін оқу бағдарламалары мазмұнының маңыздылығын ғана емес, оларды беру әдістерін де көрсетеді.

Түйін сөздер: оқу-әдістемелік кешен, силлабус, ғылыми-техникалық жаңару, пәнаралық сабақтастық, кіріктіру, іскерлік дағды, ізденушілік әрекеттер

© А.М. Усербаева*, Р.Г. Рыскалиева, 2024

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, факультет химии и химической технологии Алматы, Казахстан.

E-mail: alina.139@mail.ru

НАУЧНО – ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОСТАВЛЕНИЯ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ПО ХИМИИ

Усербаева Алина Маратовна — магистрант 2 курса факультета химии и химической технологии Казахского национального университета имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

E-mail: alina.139@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-3389-1993>;

Рыскалиева Роза Габдрахимовна — доцент кафедры общей и неорганической химии факультета химии и химической технологии, Казахского национального университета имени аль-Фараби, кандидат химических наук, Алматы, Казахстан

E-mail: roza12_11_64@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0008-3389-1993>.

Аннотация. В статье рассмотрены особенности составления учебно-методического комплекса в процессе преподавания дисциплины “Химия” по специальности “Биотехнология” в высших учебных заведениях. Силлабус, соответствующий потребностям студентов данной специальности, составлен и дана сравнительная характеристика структуры уже использованных силлабусов. Отмечается, что объем и содержание учебно-методического комплекса должны соответствовать учебной программе по дисциплине и полностью содержать ее материалы. При разработке учебно-методического комплекса для любой дисциплины необходимо учитывать интеграцию естественных наук и знаний, комплексное представление информации и ее практическое применение. Подчеркивается важность сосредоточения внимания на опыте в образовательном процессе. Это означает, что учебный материал должен быть разработан таким образом, чтобы учащиеся могли применить свои знания на практике, решая конкретные задачи и проблемы, с которыми они сталкиваются в своей профессиональной деятельности. Подчеркивается важность использования интерактивных методов обучения, способствующих активному участию студентов в учебном процессе. Для обеспечения эффективного обучения студентов и для подготовки к будущей профессиональной деятельности в области биотехнологии важно не только содержание учебных программ, но и методы их преподавания.

Ключевые слова: учебно-методический комплекс, учебная программа, научно-техническая инновация, междисциплинарная преемственность, интеграция, деловые навыки, исследовательская деятельность

Кіріспе

Қазіргі уақытта жоғары білім беру жүйесінде студенттерді білікті де, білімді, құзіреттілігі жоғары маман ретінде даярлау үшін оқу бағдарламаларының мазмұнына көп көңіл бөлу керек. Кез-келген мамандық бойынша жоғары оқу орнының түлегі өзінің алдағы еңбек қызметінде белгілі бір ғылымның маңыздылығы туралы нақты түсінікке ие болуы және әртүрлі білім салаларының жетістіктерін өз кәсібіне біріктіріп, қолдана білуі қажет. Педагогикалық жоғары оқу орындарының химиялық емес мамандықтарының студенттері үшін жаратылыстану және гуманитарлық пәндердің байланысын, ғылымның тұтастығын және оның

негізділігін көрсететін, жекелеген фактілерді есте сақтауға емес, қоршаған әлемде болып жатқан процестерді түсінуге бағытталған химия курсына оқуға көзқарасты өзгерту бүгінгі таңда өзекті бола түсуде.

Дәстүрлі білім беру жүйесінде білікті мамандар даярлаушы кәсіби білім беретін оқу орындарының басты мақсаты, студенттерге сапалы, кәсіби, жалпы кәсіби білім алуға мүмкіндік беру, оларды жұмысқа орналастыруға және өзін-өзі жетілдіруге көмектесу үшін қажетті жүйелерді жасауға арналған. Бұл орындардың басты мақсаты, жаңа жұмыс пен әрекеттерді дайындауға, жұмыс орындарымен жұмыс істеу біліктерін дамытуға көмектесу. Сондықтан, оқу орындары білім алушылардың кездесетін жұмыс орындарымен жұмыс істеу, тәжірибе жинау және мамандандыру үшін қажетті орталықтарды қамтамасыз ету мақсатын ұстанады.

Жұмысқа алушылар жаңадан келген маманның біліктілігімен қатар, маманның өзін-өзі өзгерте алу қабілеттілігін, сол салада жинақтаған тәжірибесін ұтымды пайдалана білгеніне назар аударса, әлбетте мамандарды дайындаудағы күзінеттілік тәсілінің рөлі артар еді. Мысалы, осы орындарда көп тәжірибе жинақтауға болады. Бұл тәжірибе бірнеше жағдайда жүргізіледі:

1. Оқу орындарында жұмыс жасау: Студенттер теориялық бөлімінде теориялық білім алып, сонымен қатар, оқу орындарында мамандыққа қатысты жұмыс істеу мүмкіндігі беріледі. Осы практикалық жұмыс олардың мамандығымен, мекеме немесе компаниямен танысуын және олардың сапалы жұмыс істеу жүйесін түзетуіне мүмкіндік беретін жағдайларды жасауға себебін тигізеді.

2. Өз оқу жоспарын жасау: Білім алушыларға өз оқу жоспарларын жасауға мүмкіндік беріледі. Олардың мамандығына сәйкес тақырыптарды ұсыну, әртүрлі курстар мен жаңа білім алу мүмкіндіктерін таңдау, студенттердің жаңа тақырыптарды таңдауына еркіндік беруге болады.

3. Мекемеде практикалық жұмыс: Оқу орындарында студенттерге өндіріс орындарына барып мамандықтары бойынша практикадан өтуге мүмкіндік беріледі. Бұл практикалық жұмыс студенттерге мамандықтарымен байланысты практикалық тәжірибе жинап, олардың әрекетін бақылау, сапалы жұмыс істеу біліктерін дамыту, жаңа білім алу және іс-шараларды жолға қою үшін тәжірибелі құрылғаларды қолдануға мүмкіндік береді.

Бұлардың көмегімен, студенттер даярланушы кәсіптік білім алу орталығында жаңа білімдер және әрекеттер алуда әрекет етуге, практикалық жұмыс жасауға және әртүрлі жаңа мамандандыру жолдарын ашуға тырысады.

Қазіргі заманғы еңбек нарығында бәсекелестік пен экономикалық сұраныстың салдарынан жұмысшыларға жаңа талаптар қойылып, қатаң іріктеу жүргізілуде (Керімбаева, 2016: 145).

Өзгерістің кез келген заманында, ХХІ ғасырдағы технологиялардың жүйелері мен өнімдерін кеңейтуде, білім мен ақпараттық технологиялардың рөлі де артуда. Жаңа технологиялар, интернет арқылы білімнің жалпы қолданылуын қалыптастыру, онлайн платформалардың, курстардың, вебинарлардың кеңейтілуі, жаңа оқу модульдерін жасау, оқу орталықтарының жетістігі мен мәдени іс-шаралардың көбеюі білімге ұмтылуға жан-жақты жағдай жасайды. Сондықтан, жан-жақты білімді, білікті, әрқашанда ізденісте жүретін және өзін-өзі дамытуға ұмтылатын тұлғаны дайындауға міндетті етіп отыр. Қазіргі кездері барлық пәннің мақсаты мен мазмұнына қарай біршама жұмыстар жүргізілуде, өзіндік жұмыстар

жүйесі ұсынылуда. Химия пәнінің мазмұны биология, физика және география ғылымдарымен тығыз байланысты. Бұл ғылымдардың қатарында химияның рөлі артуда, себебі химия биологиялық процестерді, физикалық өнімдерді және географиялық құрылыстарды қолдануға және түсіндіруге көмектеседі. Бұл жағдайда, химия пәні арқылы осы ғылымдардың ғылыми ұғымы тереңдетіледі.

Білім беру бағдарламасының негізгі мақсаты - білім мазмұнының жаңаруымен қатар, критериалды бағалау жүйесін енгізу және оқытудың әдіс-тәсілдері мен әр құралдарын қолданудың тиімділігін арттыруды талап етеді (Sugralina, 2019: 111).

Қазіргі қоғамға әлеуметтік жағынан бейімделу үшін, білім алушыларға теорияны толық меңгеруіне жағдай жасау және қоршаған өмірде өздерінің ізденуі арқылы шындыққа көз жеткізуіне химия пәнін оқытуды жаңаша құрып, жаңа технологияларды кеңінен қолданумен тығыз байланысты ұйымдастыруы қажет (Балғышева, 2022: 147). Алдымен, студенттерге химия пәнінде теорияны меңгеруге арналған ақпаратты толық беру үшін интерактивті әдістемелік курстарды қолдану, видео лекциялар, виртуалды эксперименттер, веб-сайттар мен өзге онлайн ресурстарды пайдалану тиімді. Онлайн платформалардың көмегімен алғашқы деңгейден бастап химия пәнінің теориясын толық түсінуге болады. Курстарда интерактивті ақпараттар, тесттер, сауалнамалар мен өздік оқу материалдары қамтылған. Онлайн платформаларда немесе университеттердің веб-сайттарында орналасқан видео лекциялар арқылы студенттер теорияны толықтай түсіне алады. Олар кіші кескіндер, тақырыптық видео материалдар мен түсіндірмелерден құрылады. Химиялық реакциялар мен өнімдердің виртуалды эксперименттері арқылы студенттер теорияны қолданып, оны кеңейтілген түрде түсінуі мүмкін. Осы ресурстарды пайдалану арқылы олар теориялық білімдерді өздерінің тәжірибесімен байланыстыра отырып, білімдерін арттыра алады. Осылардың барлығын қолдану арқылы студенттер химия пәнінің теориясын толық түсінулеріне мүмкіндік туындайды. Сонымен қатар, химия ғылымының жетістіктерін білім жүйесіне енгізе отырып, студенттерге практикалық тәжірибелер жасау мүмкіндігін беру үшін бірнеше әдістемелік құралдарды пайдалану керек. Мысалы, университеттерде, колледждерде немесе басқа оқу орталықтарында жасалған химиялық лабораториялар арқылы студенттер практикалық тәжірибелер жасауға болады. Осы лабораторияларда студенттер жаңа реакцияларды, эксперименттерді, өнімдерді тексеріп, талдау жасауға мүмкіндік алады. Химиялық реакцияларды, эксперименттерді, химиялық тәжірибелерді виртуалды әдістемелік курстар арқылы жүзеге асыруға болады.

Онлайн платформаларды пайдалану арқылы студенттер қолдаушы материалдар, химиялық тәжірибелер, сынақтар және өтілген материалдарды пайдаланады. Химия пәнінің жетістіктерін жетілдіру үшін жаңа технологияларды пайдалану керек. Мысалы, виртуалды эксперименттер, компьютерлік модельдеудің пайдалануы, химиялық теорияның компьютерлік модельдеудің пайдалануы және басқалар. Бұл олардың теориялық білімін меңгеруі мен нақты деректерді пайдалануы үшін көмектеседі.

Жаңартылған білім бағдарламасы – өзгерістің алғашқы қадамы. Республикамызда орта білім берудің жаңа жүйесі жасалып, Қазақстандық білім беру жүйесі әлемдік білім беру кеңістігіне енуге бағыт алуда (Балтабаева, 2016:

38). Білім беру курстарының жалпы мақсаты - адамдардың жетістікке жетуіне қолдау көрсету, жаңа білім, дағдылық және құндылықтарды арттыру. Олар жаңа мәдениеттер мен технологияларды таныту, жаңа кезеңдерді түсіндіру және көрсету, жеке белестерге жету, кез-келген салада көрсетілетін білім мен мәдени түрлерді жетістіктер арқылы ұйымдастыру. Мұғалімдер қауымының білімі мен тәжірибесін кеңейту, олардың біліктілігі мен жетістіктерін жаңарту күрделі мақсат болып табылады. Қазақстанның ұлттық білім беру жүйесіне арналған жоғары оқу орындарындағы білім мазмұнын жаңарту бағдарламасымен және критериалдық бағалау жүйесімен таныстыру мақсатында білім беру процесінің тиімділігін және оқытушылардың әрекеттілігін дамытуға арналған жаңа бағдарлама және әдістемелерді қарастыру жүйесін жүзеге асыруды қадағалайды. Бұл бағдарлама арқылы студенттердің оқу жолындағы толықтырулары мен жетістіктері туралы белгілі мәліметтер алып, олардың білім деңгейін бағалау жүйесі арқылы анықтау мүмкін болады.

Материалдар мен әдістер

Белгілі бір пән бойынша білім беру мазмұнын анықтау кезінде студенттің жеке басының дамуына байланысты аспектілерді ескеру қажет. Бұл пән үшін ғылыми база құруды, студенттің белсенділігін ұйымдастыруды және оның жан-жақты дамуын қамтамасыз етуді ескереді. Қазіргі қоғамда білім беру процесінде тұлғаның өзін-өзі анықтауы, еңбек және экономикалық мәдениеттің дамуы, сондай-ақ зияткерлік, моральдық, экологиялық және отбасылық аспектілер сияқты көптеген факторлар ескеріледі. Сонымен қатар, жаратылыстану ғылымдарының пәнаралық байланысы мен интеграциясына ерекше назар аударылады. Сол арқылы ғана білім алушылардың, іскерлік дағдыларын қалыптастыру, оларды жаңа біліммен қаруландыру, өздігінен жұмыс атқару дағдыларын меңгерту мақсаттары жүзеге асады (Ильясова, 2018: 18).

Химияны оқыту барысында оқу және тәрбие жұмыстарының материалдары беріліп қана қоймай, студенттердің психофизикалық, интеллектуалдық және рухани аспектілері де белсенді дамып келеді. Химияны оқыту процесі студенттерде шығармашылық пен сыни ойлауды дамытуға ықпал ететінін атап өткен жөн. Химиялық процестер мен заңдылықтарды зерттеу аналитикалық тәсілді қажет етеді және ақпаратты талдау, қорытынды жасау және негізделген шешімдер қабылдау қабілетін дамытуға ықпал етеді. Химиялық білім беру процесінде ұжымдық жұмыс, коммуникация және ынтымақтастық дағдылары қалыптасады, бұл қазіргі қоғамда және кәсіби қызметте сәтті бейімделудің маңызды аспектісі болып табылады. Осылайша, химиялық білім тек оқу саласында ғана емес, сонымен қатар олардың күнделікті өмірі мен болашақ мансабында студенттердің жеке басының кешенді дамуында шешуші рөл атқарады. Осы қабілеттердің дамуын ынталандыру үшін студенттерді үнемі өзгеріп отыратын әр түрлі іс-шараларға тарту маңызды. Теориялық және практикалық жұмыстардың үйлесімі студенттердің материалды жақсы игеруіне ықпал етеді. Теориялық дайындық негізгі ұғымдар мен принциптерді ұсынады, ал практикалық сабақтар алған білімдерін іс жүзінде қолдануға мүмкіндік береді, бұл оларды игеру мен түсінуді нығайтады. Практикалық тапсырмалар студенттерге өз бетінше жұмыс істеу, сыни тұрғыдан ойлау және болашақта табысты кәсіби қызмет үшін қажет мәселелерді шешу дағдыларын дамытуға көмектеседі. Осылайша, білім берудегі теория мен

практиканың оңтайлы үйлесімі студенттердің жан-жақты дамуын қамтамасыз етеді және оларды тандалған саладағы табысты мансапқа дайындайды.

Оқу-әдістемелік кешенді пайдалану белгілі бір пән бойынша оқу процесін құрылымдауға және жүйелеуге көмектесетін тиімді оқыту әдісі болып табылады. Ол әдетте оқу материалдарын, әдістемелік ұсыныстарды, практикалық тапсырмаларды, бақылау сұрақтарын және белгілі бір курс үшін арнайы әзірленген басқа білім беру ресурстарын қамтиды.

Оқу-әдістемелік кешенді пайдаланудың артықшылықтары:

1. Кешен оқу материалын логикалық дәйектілікпен қамтамасыз етеді, бұл студенттердің оны игеруін жеңілдетеді.
2. Кешенге тек оқулықтар ғана емес, сонымен қатар қосымша материалдар, интерактивті оқу құралдары, бейне дәрістер және т.б. кіруі мүмкін, бұл оқу процесін байыта түседі.
3. Оқу-әдістемелік кешен студенттердің әртүрлі қажеттіліктері мен дайындық деңгейлеріне бейімделуі мүмкін.
4. Кешенде білімді бақылау әдістері мен кері байланыс мүмкіндіктері қарастырылуы мүмкін, бұл студенттерге олардың үлгерімін бақылауға және дағдыларын жақсартуға көмектеседі.

Оқу-әдістемелік материалдардың құрылымдық жүйелі кешені студенттердің пән мазмұнын сапалы игеруін қамтамасыз етеді және кәсіби маңызды құзыреттерді тиімді қалыптастыруға мүмкіндік береді. Оқу үрдісінде оқу-әдістемелік кешенді тиімді пайдалану білім сапасынның жоғары деңгейге көтерілуіне жол ашады (Көлібайқызы, 2022: 219).

Оқу - әдістемелік кешендерде берілетін тапсырмаларды ұйымдастыру мәселесі білім беру үдерісінде көптеген зерттеулердің негізі болып келеді. Оқу – әдістемелік кешенің көлемі мен құрылымы пән бойынша типтік оқу бағдарламасына сәйкес болуы қажет және онда көрсетілген білім мазмұны толықтай қамтылуы тиіс (Білім беру ұйымдарында оқу-әдістемелік және ғылыми-әдістемелік жұмысты ұйымдастыру және жүзеге асыру қағидаларын бекіту туралы Қазақстан Республикасы Білім және ғылым министрінің 2007 жылғы 29 қарашадағы № 583 бұйрығы).

Оқу - әдістемелік кешенді ұйымдастыруда жүйелі-әрекеттік ұстанымды қолдану тиімді болып табылады. Жүйелік-белсенділік позициясы-бұл студенттердің белсенді қызметі төңірегінде білім беру процесін ұйымдастыруға және оның әртүрлі компоненттері арасындағы жүйелік қатынастарды есепке алуға бағытталған білім беру тәсілі. Оқу үрдісіне жүйелі-белсенді тәсілді енгізу, білім алушылардың бойынан келесі құзыреттіліктерді қалыптастырады:

- мәселелерді шешуге;
- технологияларды меңгеруге;
- өзін-өзі тәрбиелеуге;
- ақпараттық ресурстарды пайдалануға;
- әлеуметтік қарым қатынасқа түсуге;
- коммуникативтілік ізденіске баулиды (Аксенова, 2012: 40).

Кез-келген пәнге, соның ішінде химияға арналған оқу-әдістемелік кешенді әзірлеу кезінде білімнің берілуін ғана емес, сонымен бірге жаратылыстану мен білімнің интеграциясын да ескеру қажет. Бұл дегеніміз, материал жан-жақты болуы,

ақпарат тұтас ұсынылуы және практикалық қолданылуы керек. Оқу процесінің тәжірибеге бағдарлануын ескеру де маңызды, бұл оқытудың интерактивті әдістерін қолдануды және оқу материалының нақты өмірлік жағдайлармен байланысын білдіреді. Химияға арналған кешенді әзірлеу кезінде оқытудың нақты мақсаттарын анықтау, тақырыптар бойынша мазмұнды жоспарлау және оны құрылымдау бірінші кезектегі міндет болып табылады. Химиялық материалдың басқа жаратылыстану пәндерімен байланысын, сондай-ақ оның қазіргі ғылыми жетістіктермен және қоршаған ортамен байланысын қарастыру қажет. Осы жағдайларды көрсете отырып, кешен құрастырудың дидактикалық негіздері дегеніміз — білім беру мазмұны құрамының негізгі элементтерінің өзара үйлесім табуы деп анықтайды (Ильясова, 2018: 24).

Әртүрлі мамандықтағы студенттер «Химия» пәнін оқып жатқандығын ескере отырып, оқу-әдістемелік кешен олардың әрқайсысының қажеттіліктеріне бейімделуі керек. Мұндай кешендерге қойылатын талаптар күрделене түсуде және қазір әр пәннің мазмұнының құндылық бағытына ерекше назар аударылуда. Студенттерге ұсынылатын материалдар осы мақсатқа сәйкес келуі, олардың назарын аударуы және кешенде ұсынылған міндеттер бойынша өз бетінше жұмыс істеуге ынталандыруы керек. Студенттердің оқу процесіне деген қызығушылығы мен оң көзқарасын ояту арқылы ғылыми-зерттеу жұмыстарына ынталандыру маңызды. Мұндай тәсіл сыни және шығармашылық ойлауды дамытуға ықпал етеді, бұл зерттелетін материалды сәтті игеру үшін маңызды.

Белгілі психолог М.М. Мұқанов «Оқыту — бұл білім беру және білімді тиісті жерінде қолдануға үйрету» деп бекер айтпаған (Мұқанов, 1973: 127). Оқу-әдістемелік кешендегі тақырыптардың теориялық және практикалық маңыздылығын арттыру үшін олармен жұмыс істеудің әдістемелік және дидактикалық тәсілдерін дұрыс ұйымдастыру қажет. Сұрақтар мен міндеттерді студенттердің шығармашылық қабілеттерін дамытуға ықпал ететін және жаңа шешімдер мен білімдерді өз бетінше іздеуге көмектесетіндей етіп беруге ерекше назар аудару қажет. Бұл дегеніміз, оқу процесінде студенттерді жаңа мәселелерді іздеуге, зерттеуге және талдауға, сондай-ақ алған білімдерін практикалық жағдайларда қолдануға ынталандыратын жағдайлар жасау қажет. Білім берудің дидактикалық мақсаты студенттердің шығармашылық әлеуетін ашуға және әртүрлі салаларда білімді сәтті қолдану үшін қажетті дағдылар мен біліктілікті жетілдіруге көмектесуге бағытталуы тиіс. Бұл тәсіл әртүрлі ғылымдарды біріктіру және оларды жалпы білім жүйесіне байланыстыру арқылы ғылыми тұжырымдамаларға қол жеткізуге мүмкіндік береді.

Себебі, қандай ғылыми ұғымды қалыптастыру мақсатын алға қойсақ та, оларды бір-бірімен ұқсас ғылымдар жүйесімен байланыстыра отырып, оқыту арқылы қол жеткізуге болады (Ильясова, 2018: 50).

Нәтижелер және талқылау

Тәжірибелік экспериментке әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің биология және биотехнология факультетінің 6B05103-Биотехнология мамандығының 1 курс студенттері алынды. Эксперименттік топта 13 студент, бақылау тобында 13 студент болды. Олар химия пәнін 7 апта көлемінде оқиды, әрі қарай математика пәні оқытылады. Зерттеу барысында біз дайындаған силлабус бойынша эксперименттік топта химия пәні оқытылды, ал бақылау

тобында басқа факультеттерде оқытылатын оқу бағдарламасы қолданылды. Зерттеу жұмыстарын жүргізу үшін егжей-тегжейлі әдістемелік материалдар, оның ішінде әдістемелік нұсқаулар, ақпарат жинауға арналған сауалнамалар, студенттердің өзіндік жұмысына арналған тапсырмалар және білімді бағалауға арналған тест тапсырмалары жасалды. Сонымен қатар, эксперименттің анықтаушы кезеңінен алынған деректерді жалпылау және талдау процесін сипаттайтын нұсқаулық жасалды.

Эксперименттік жұмыстың бірінші бөлімі студенттердің химияны оқудағы өзіндік жұмысының деңгейін, сондай-ақ олардың сабақтағы өзін-өзі еркін ұстауы мен коммуникативті дағдыларының деңгейін анықтауға арналды. Анықтау эксперименті аясында екі топқа да сұхбат, сауалнама, пікір алмасу және зерттеуге қатысушылармен қарым-қатынас орнату сияқты деректерді жинау әдістері ұсынылды.

Бақылау тобының студенттеріне басқа мамандықтарға арналған «Химия» пәнінің силлабусын пайдаланып сабақ жүргізілді. Оларда негізінен мынадай тақырыптар қамтылған болатын:

1. Химияның негізгі стехиометриялық заңдары. Заттар массасының сақталу заңы. Құрам тұрақтылық заңы. Көлемдік қатынастар және Авогадро заңы.

2. Атом құрылысы. Квант химиялық теорияның, негізгі идеялары. Квант сандары. Паули ұстанымы, Хунд ережесі. Клечковский ережелері.

3. Химиялық байланыс және молекулалардың құрылымы. Химиялық байланыс және молекулалардың құрылысы мен құрылымы. Химиялық байланыстың алғашқы теориялары. Коваленттік байланыстың сипаттамалары мен қасиеттері. Толық гибридтену тұжырымы бойынша молекулалардың кеңістіктегі пішіні. Атомдық орбитальдардың гибридтенуі туралы түсінік.

4. Химиялық кинетика. Химиялық реакциялардың жылдамдығы және оған әсер ететін факторлар. Әрекеттесуші массалар заңы. Химиялық реакциялардың жылдамдығына температураның әсері. Вант-Гофф ережесі.

5. Электролит ерітінділеріндегі алмасу реакциялары. Тұздар гидролизі.

6. Тотығу-тотықсыздану процестері теориясының негізгі ұғымдары. Тотығу-тотықсыздану реакцияларының негізгі типтері.

7. Координациялық-комплекті қосылыстар. Координациялық теория. Оның ең маңызды тұжырымдары. Координациялық қосылыстардың негізгі типтері мен атаулар жүйесі. Координациялық қосылыстардың кеңістіктегі құрылысы (Пірәлиев, 2003: 10).

Біздің мақсатымыз «Биотехнология» мамандығы бойынша оқитын студенттерге өткізілетін химия сабағы болғандықтан силлабусты олардың мамандықтарына сай тақырыптарын қосып, осы екі силлабус тақырыптарымен сабақ жүргізу болатын. Алдымен студенттердің «Химия» пәнінен қандай тақырыптарды терең зерттегісі келеді, нені оқып үйренгісі келеді деген сұрақтар қойылып, сауалнама алынды. Олардың сұранысы, ұсынысы ескеріліп жаңадан силлабус құрастырылды. Жаңадан ұсынылған силлабус құрылымы төменде көрсетілген.

Кесте 1 - Оқу курсының мазмұнын жүзеге асыру күнтізбесі

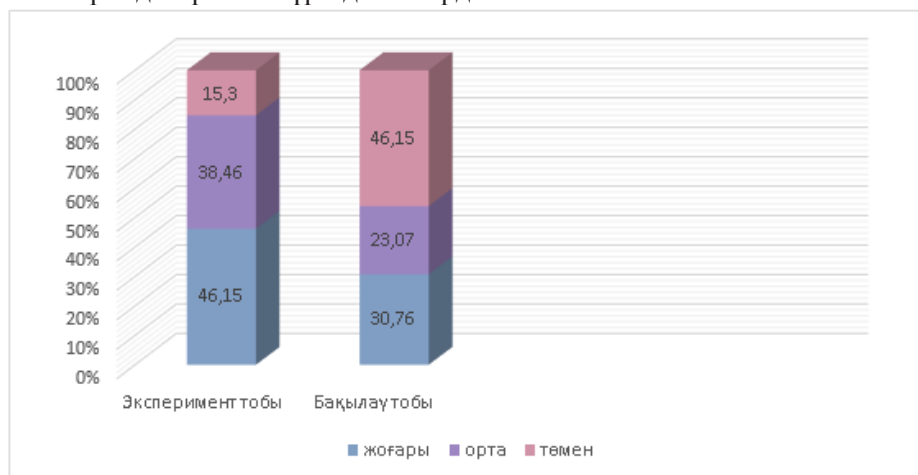
Апта	Тақырып атауы	Сағат саны	Макс. балл***
1	Д 1. Химия пәнінің биология және математикамен пәнаралық байланысы. Бейорганикалық қосылыстардың негізгі кластары.	1	
	ЗС 1. Зертханамен танысу. Қауіпсіздік техникасы. Химиялық ыдыстар. Жалпылама құрал-жабдықтар. Химиялық реактивтер. Химиялық лабораторияда жұмыс жасау ережелері. Алғашқы дәрігерлік көмек көрсету ережелері. Бейорганикалық қосылыстардың қасиеттерін зерттеу.	2	10
2	Д 2. Эквивалент. Эквиваленттер заңы.	1	
	ЗС 2. Жай және күрделі заттардың эквивалентін анықтау	2	10
	СӨЖ 1. Микро- және макро- элементтердің биологиялық рөлі		10
3	Д 3. Ерітінділер концентрациясын өрнектеу тәсілдері.	1	
	ЗС 2. Концентрациясы әртүрлі ерітінділер алу.	2	10
4	Д 4. Тотығу-тотықсыздану реакциялары.	1	
	ЗС 4. Тотығу-тотықсыздану реакцияларына зертханалық жұмыстар.	2	10
	СӨЖ 2. Дәрумендердің өмір тіршілігіндегі маңызы және оларды қабылдау шарттары		10
5	Д 5. Судың иондық көрсеткіші. Органың сутектік көрсеткіші.	1	
	ЗС 4. Өртүрлі ортадағы индикаторлар түстерінің өзгеруі. Ерітіндінің рН-ын анықтау.	2	10
6	Д 6. Ерігіштік көбейтіндісі. Тұнба түзілу шарттары.	1	
	ЗС 6. Химиялық әрекеттесу нәтижесінде тұнбаларды еріту жағдайлары.	2	10
	СӨЖ 3. Оттектің өмір тіршілігінде алатын орны. Оттектің биологиялық процестерге қолданылуы.		10
7	Д 7. Судың кермектігі	1	
	ЗС 7. Судың кермектігін анықтау тәсілдері	2	10
АБ 1			100

Осы силлабус бойынша сабақ барысында біз студенттердің химияға деген қызығушылығының артқанын, сондай-ақ олардың тапсырмаларды тез және мұқият орындағанын байқадық. Студенттер берген жауаптар мен жұмыстарды зерттей отырып, олардың білімін, дайындық деңгейін және өз бетінше жұмыс істеуге дайындығын бағалау әдістерін анықтай алдық. Бұл әдістерге бақылау жұмыстарын жүргізу, тест тапсырмаларын беру, өзіндік жұмысты ұйымдастыру және ауызша сауалнамалар жүргізу кірді.

Кесте 2 - Анықтау эксперименті кезіндегі студенттердің білім деңгейінің көрсеткіші

р/с	Деңгейлер	Эксперимент тобы	Бақылау тобы
1.	Жоғары	46,15	30,76
2.	Орта	38,46	23,07
3.	Төмен	15,3	46,15
4.	Оқушы саны	13	13

Сонымен қатар 2 топтың білім деңгейін салыстыра отырып, жаңартылған силлабуспен, бұрын құрастырылған силлабусты қолданып сабақ жүргізудегі көрсеткіштерін диаграмма түрінде келтірдік.



Сурет 1 - Эксперимент қорытындысы

Қорытынды

Бүгінгі таңда химияны оқытудың маңызды аспектісі - бұл ғылымның негізгі ұғымдарын «Химия» пәнін 7 апта мерзімінде оқитын биология факультеттерінің студенттеріне қысқа мерзімде беру ғана емес, сонымен қатар оларды өз мамандықтарына қолданылатын ғылыми тәсілге үйрету. Химияны оқытудың ғылыми-әдістемелік аспектілері білім берудің негізгі көзі болып табылады, өйткені білім беру технологияларын дұрыс пайдалану студенттердің танымдық қызығушылығын арттыруға және олардың танымдық белсенділігін дамытуға ықпал етеді.

Мамандандыру үшін қажетті химия негіздерін игеру арқылы студенттер өз бетінше жұмыс істеуді, қызметті жоспарлау мен ұйымдастыруды, сондай-ақ олардың жетістіктерін бақылауды үйренеді. Бұл сондай-ақ білім беру құрылымындағы біркелкілікті сақтауға және олардың болашақ кәсіби қызметіне сәйкес құзыреттерді қалыптастыруға ықпал етеді.

Дайын ақпаратты жаттауға негізделген оқытудың дәстүрлі тәсілі көбінесе студенттерге алған білімдерін басқа салалармен тиімді байланыстыруға мүмкіндік бермейді және механикалық есте сақтауға әкеледі. Сондықтан білім беру мазмұны студенттердің мемлекеттік стандарттары мен қажеттіліктерін ескере отырып, заманауи талаптарға сай болуы, сондай-ақ табысты кәсіби қызмет үшін қажетті негізгі құзыреттердің дамуына ықпал етуі маңызды.

Бұдан басқа, оқыту тек нақты ақпаратты жеткізуге ғана емес, сонымен қатар сыни ойлауды, аналитикалық дағдыларды және негізделген шешім қабылдау қабілетін дамытуға бағытталуы керек екенін ескеру маңызды. Химияны оқыту студенттердің білімін ғана емес, оларды іс жүзінде қолдана білу қабілетін қалыптастыруға, олардың кәсіби қызметінде кездесетін әртүрлі міндеттер мен мәселелерді шешуге ықпал етуі керек. Интерактивті оқыту әдістерін, заманауи білім беру технологияларын пайдалануды және студенттердің оқытушылармен

және басқа студенттермен белсенді өзара әрекеттесуін қамтитын ынталандырушы оқу ортасын құру маңызды. Бұл материалды тиімдірек игеруге және студенттердің шығармашылық әлеуетін дамытуға ықпал етеді.

Сонымен, оқыту әдістерін үнемі дамыту және жетілдіру, оқу процесін қазіргі әлемнің өзгеріп отыратын талаптары мен жағдайларына бейімдеу қажеттілігін есте ұстаған жөн. Бұл білім берудің жоғары сапасын қамтамасыз етуге және студенттерді болашақта табысты және нәтижелі кәсіби қызметке дайындауға көмектеседі.

ӘДЕБИЕТТЕР

Аксенова Н.И. (2012). Системно-деятельностный подход как основа формирования метапредметных результатов Междунар. науч. конф. — Санкт-Петербург 2012. — 40 б.

Балғышева Б.Д., Файзулла С.Е. (2022). Жаңа стандартқа сәйкес химия пәнінен практикалық жұмыстардың бағдарламасын сандық технология негізінде жетілдіру // «Химия ғылымы мен химиялық білім берудің өзекті мәселелері» атты Х-45 Республикалық ғылыми конференция материалдары. — Нұр-Сұлтан: Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, 2022. — 147 б.

Балтабаева Д.А. (2016). Пилоттық мектепте жанартылған білім беру мазмұнын апробациялауда «Жаратылыстану» пәнінің маңыздылығы // Белгілі ұстаз, ғалым, ЖОО-нда білім беруді ұйымдастырудың шебері Қуандық Досмағанбетұлы Жоламановтың 85-жылдығына арналған «Жоғары педагогикалық білім: дәстүр мен жаңашылдық» атты конференция материалдары. — Көкшетау, 2016 — 38 б.

Білім беру ұйымдарында оқу-әдістемелік және ғылыми-әдістемелік жұмысты ұйымдастыру және жүзеге асыру қағидаларын бекіту туралы Қазақстан Республикасы Білім және ғылым министрінің 2007 жылғы 29 қарашадағы № 583 бұйрығы [Электрондық ресурсы]: <https://adilet.zan.kz/kaz/docs/V070005036>

Ильясова Г.У. (2018). Химиядан оқулықтар мен оқу құралдарын құрастырудың дидактикалық негіздері [Электрондық ресурсы] — 2018. ЭОЖ 373.091.64:54: <https://kaznpu.kz/docs/doctoranti/ilyassova/Disser.pdf>

Керимбаева Б.Т., Исакова П.К. (2016). Бүгінгі педагогтың білім берудегі инновациялары мен дәстүрлері / П.К. Исакова, Б.Т. Керимбаева // Абай атындағы ҚазҰПУ-нің Хабаршысы, «Педагогика ғылымдары» сериясы. — 2016. — № 1 (49). — 145 б.

Көлібайқызы А., Талқанбаева Г.Е. (2022). ЖОО-дағы онлайн оқу форматында химия пәнін оқытуда оқуәдістемелік кешеннің рөлі // «Химия ғылымы мен химиялық білім берудің өзекті мәселелері» атты Х-45 Республикалық ғылыми конференция материалдары. — Нұр-Сұлтан: Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, 2022. — 219 б.

Мұқанов М.М. (1973). Бағдарламалық оқытудың негізгі идеялары мен ұғымдары. — Алматы, 1973. — 58 б.

Пірәлиев С.Ж. (2003). Жалпы химия [Мәтін] / С.Ж. Пірәлиев, Б.М. Бутин, Г.М. Байназарова, С.Ж. Жайлау. — Алматы: Дәуір, 2003. — 180 б.

L.M. Sugralina, Ye.V. Minayeva, S.G. Karstina, L.K. Salkeeva (2019). Engineering Educators Training in Kazakhstan: Situation and Prospects // Вестник Карагандинского университета: сб.статей. — Караганда, 2019. — DOI 10.31489/2019Ch4/110-115.

REFERENCES

Aksenova N.I. (2012). Sistemno-deyatelnostnyy podhod kak osnova formirovaniya metapredmetnyh rezul'tatov [The system-activity approach as the basis for the formation of meta-objective results] // Mezhdunar. науч. конф. — Sankt-Peterburg 2012. — 40 p.

Balgysheva B.D., Fajzulla S.E. (2022). Zhana standartka saikes himiya paninen praktikalyk zhyymystardyn bagdarlamасыn sandyk tekhnologiya negizinde zhetildiru [Improving the program of practical work in Chemistry based on digital technology in accordance with the new standard] // «Himiya gylыmy men himiyalyk bilim berudin ozekti maseleleri» aty H-45 Respublikalyk gylыmy konferenciya materialdary. — Nyr-Syltan: L.N. Gumilev atyndagy EYU, 2022. — 147 p.

Baltabaeva D.A. (2016). Pilottyk mektepte zhanartylgan bilim beru mazmynyn aprobaciyalalada

«ZHaratylystanu» paninin manyzdylygy [The importance of the subject “Natural Science” in approving the updated content of education in the pilot school] // Belgili ystaz, galym, ZHOO-nda bilim berudi yiymdastyrudyn sheberi Kuandyk Dosmaranbetyly ZHolamanovtyn 85-zhyldygyna arnalgan «ZHogary pedagogikalyk bilim: dastyr men zhanashyldyk» atty konferenciya materialdary. — Kokshetau, 2016 — 38 p.

Bilim beru yiymdarynda oku-adistemelik zhane gylymi-adistemelik zhymysty yiymdastyru zhane zhyzge asyru kagidalaryn bekitu turaly Kazakstan Respublikasy Bilim zhane gylym ministrinin 2007 zhylygy 29 karashadagy № 583 byirygy [Elektronnyk resursy]: https://adilet.zan.kz/kaz/docs/V070005036_

Il'yasova G.U. (2018). Himiyadan okulyktar men oku kyraldaryn kyrastyrudyn didaktikalyk negizderi [Elektronnyk resursy] — 2018. ЭОZH 373.091.64:54: <https://kaznpu.kz/docs/doctoranti/ilyassova/Disser.pdf>

Kerimbaeva B.T., Iskakova P.K. (2016). Bygingi pedagogtyn bilim berudegi innovatsiyalary men dastyrleri [Innovations and traditions of today's teacher in education] / P.K. Iskakova, B.T. Kerimbaeva // Abai atyndagy KazYPU-nin Habarshysy, «Pedagogika gylymdary» seriyasy. — 2016. — № 1 (49). — 145 p.

Kolibajkyzy A., Talkanbaeva G.E. (2022). ZHOO-dagy onlain oku formatynda himiya panin okytuda okuadistemelik keshennin roli [The role of the educational and methodical complex in teaching chemistry in the online format of study at the University] // «Himiya gylymy men himiyalyk bilim berudin ozekti maseleleri» atty H-45 Respublikalyk gylymi konferenciya materialdary. — Nyr-Sylytan: L.N. Gumilev atyndagy EYU, 2022. — 219 p.

Mykanov M.M. (1973). Bagdarlamalyk okytudyn negizgi ideyalary men ygymdary. Almaty, 1973. — 58 b.

Piraliev S.ZH. (2003). ZHalpy himiya [General chemistry] / S.ZH. Piraliev, B.M. Butin, G.M. Bainazarova, S.ZH. ZHailau. — Almaty: Dauir, 2003. — 180 p.

Sugralina L.M., Minayeva Ye.V., Karstina S.G., Salkeeva L.K. (2019). Engineering Educators Training in Kazakhstan: Situation and Prospects // Вестник Карагандинского университета: сб.статей. — Караганда, 2019. — DOI 10.31489/2019Ch4/110-115 .

© S.D. Fazylov^{1*}, O.A. Nurkenov¹, Zh.S. Nurmaganbetov¹, R.E. Bakirova²,
M.J. Jurinov³, 2024

¹Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan,
Karaganda, Kazakhstan;

²Medical University of Karaganda. Karaganda, Kazakhstan;

³D.V. Sokolskiy Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan
Казахстан.

E-mail: iosu8990@mail.ru

CYCLODEXTRINS AS SUPRAMOLECULAR CONTAINERS OF CHEMICAL COMPOUNDS

Fazylov S.D. — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan. Karaganda, Kazakhstan, 100008

E-mail: iosu8990@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4240-6450>;

Nurkenov O.A. — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan. Karaganda, Kazakhstan, 100008

E-mail: nurkenov_oral@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2771-0411>;

Nurmaganbetov Zh.S. — Candidate of Chemical Sciences, Institute of Organic Synthesis and Coal Chemistry of the Republic of Kazakhstan. Karaganda, Kazakhstan, 100008

E-mail: nzhangel'dy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0978-5663>;

Bakirova R.E. — Doctor of Medical Sciences, Professor, Medical University of Karaganda. Karaganda, Kazakhstan, 100012

E-mail: bakir15@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1592-8579>;

Zhurinov M.Zh. — Doctor of Chemical Sciences, Professor, Academician of NAS RK, JSC «Institute of fuel, catalysis and electrochemistry named after D.V. Sokolsky». Almaty, Kazakhstan, 050010

E-mail: nanrk.mzh@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5314-1219>.

Abstract. The article presents a brief analytical review of the properties, structure and main directions of practical use of cyclodextrins (CD) - macrocyclic receptors of natural origin. They are formed during the enzymatic cleavage of starch and consist of D-glucopyranose residues connected to each other by a head-to-tail $\alpha(1\rightarrow4)$ -glycoside bond. The unique structural features of cyclodextrins, namely the presence of separated hydrophilic and hydrophobic groups, determine the unusual physical and chemical properties of these macromolecules. The most important property of natural or chemically modified cyclodextrins is the ability to reversibly and selectively bind organic, inorganic and biological molecules, forming “guest-host” inclusion complexes or nanostructured supramolecular ensembles. The most interesting examples of the use of cyclodextrin clathrate complexes in the pharmaceutical, food and chemical industries, spectrometric analysis, separation technologies, the use of cyclodextrins as models for molecular rec-

ognition in biology, as well as the use of their cyclic component in the construction of supramolecular architectures (rotaxanes, pseudorotaxanes, etc.) are given. Various types of receptors capable of binding cations, anions, and neutral molecules due to non-valent interactions are considered. The fields of application of container chemistry, artificial systems simulating biological processes, principles of formation of supramolecular self-assembly, molecular devices and molecular machines are described. The mechanism and methods of formation of clathrate complexes, their properties and methods of analysis are described. The application of cyclodextrins in the production of nanoscale materials in the production of metallic and semiconductor nanoparticles coated with organic monolayers is considered.

Keywords: macrocyclic receptors, cyclodextrins, supramolecular ensembles, nanoscale materials, clathrates

© С.Д. Фазылов^{1*}, О.А. Нүркенов¹, Ж.С. Нұрмағанбетов¹, Р.Е. Бәкірова²,
М.Ж. Жұрынов³, 2024

¹ Органикалық синтез және көмірхимиясы институты ҚР, Қарағанды, Қазақстан;

²Қарағанды медицина университеті, Қарағанды, Қазақстан;

³АҚ «Д.В. Сокольский атындағы отын, катализ және электрохимия институты»,
Алматы, Қазақстан.

E-mail: iosu8990@mail.ru

ЦИКЛОДЕКСТРИНДЕР ХИМИЯЛЫҚ ҚОСЫЛЫСТАРДЫҢ СУПРАМОЛЕКУЛАЛЫҚ КОНТЕЙНЕРЛЕРІ РЕТІНДЕ

Фазылов С.Д. — химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академиясының академигі, Қазақстан Республикасының Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан

E-mail: iosu8990@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4240-6450>;

Нүркенов О.А. — химия ғылымдарының докторы, профессор, Қазақстан Республикасының Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан

E-mail: nurkenov_oral@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2771-0411>;

Нұрмағанбетов Ж.С. — химия ғылымдарының кандидаты, Қазақстан Республикасының Органикалық синтез және көмір химиясы институты, Қарағанды, Қазақстан

E-mail: nzhangeldy@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0978-5663>;

Бәкірова Р.Е. — медицина ғылымдарының докторы, профессор, Қарағанды медицина институты, Қарағанды, Қазақстан

E-mail: bakir15@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1592-8579>;

Жұрынов М.Ж. — химия ғылымдарының докторы, профессор, ҚР ҰҒА академиясының академигі, АҚ «Д.В. Сокольский атындағы отын, катализ және электрохимия институты», Алматы, Қазақстан

E-mail: nanrk.mzh@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5314-1219>.

Аннотация. Мақалада табиғи макроциклді рецепторларға жататын тұйықдекстриндердің қасиеттері, құрылымы және тәжірибелерде қолданылуының негізгі бағыттары бойынша қысқаша аналитикалық шолу берілген. Олар крахмалдың ферментативті ыдырауы арқылы түзіледі және $\alpha(1 \rightarrow 4)$ -гликозидтік байланыс арқылы бір-бірімен «бас-күйрық» принципі бойынша байланысқан D-глюкопиранозаның қалдықтарынан тұрады. Тұйықдекстриндердің ерекше құрылымдық ерекшеліктері, атап айтқанда, оларда гидрофильді және гидрофобты болып бөлінген топтардың болуы, осы макромолекулалардың ерекше физикалық

және химиялық қасиеттерін көрсетеді. Табиғи немесе химиялық түрлендірілген Тұйықдекстриндердің ең маңызды қасиеті — органикалық, бейорганикалық және биологиялық молекулаларды қайтымды түрде және арнайы байланыстыру арқылы «қонақ-қожайын» бопқосылу кешендерін немесе наноқұрылымды супрамолекулалық ансамбльдерді құру мүмкіндігі. Химия өндірісінде, фармацевтика және тамақ өнеркәсібінде тұйықдекстриндердің клатратты кешендерін қолданудың, спектрометриялық талдаудың, бөлу технологияларының, оларды биологияда молекулалық анықтап білу үшін тәсіл ретінде қолданудың, сондай-ақ олардың тұйықтық компонентін супрамолекулалық архитектураларды (ротаксандар, псевдоротаксандар және т.б.) құруда қолданудың қызығушылық тудыратын мысалдары келтірілген. Катиондарды, аниондарды, бейтарап молекулаларды валенттік емес өзара әрекеттесулер арқылы байланыстыруға қабілетті рецепторлардың әртүрлі түрлері қарастырылады. Контейнерлік химияны қолдану салалары, биологиялық процестерді ұқсастыра көрсететін жасанды жүйелер, супрамолекулалық өзін-өзі құрастыру принциптері, молекулалық құрылғылар және молекулалық құрылымдар сипатталған. Клатрат кешендерін қалыптастыру механизмі мен әдістертемелері, олардың қасиеттері мен әртүрлі талдау жолдары сипатталған. Органикалық моноқабаттармен қапталған металл және жартылай өткізгіш нанобөлшектер өндірісінде наноөлшемді материалдар алуға тұйықдекстриндердің туындыларын қолдану мысалдары қарастырылды.

Түйін сөздер: макроциклді рецепторлар, тұйықдекстриндер, супрамолекулалық ансамбльдер, наноразмерлі заттар, клатраттар

© С.Д. Фазылов^{1*}, О.А. Нуркенов¹, Ж.С. Нурмаганбетов¹, Р.Е. Бакирова²,
М.Ж. Журинов³, 2024

¹Институт органического синтеза и углекислотной химии РК, Караганда, Казахстан;

²Медицинский университет Караганды, Караганда Казахстан;

³АО «Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д.В. Сокольского»,
Алматы, Казахстан.

E-mail: iosu8990@mail.ru

ЦИКЛОДЕКСТРИНЫ КАК СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОНТЕЙНЕРЫ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Аннотация. В статье представлен краткий аналитический обзор по свойствам, строению и основным направлениям практического использования циклодекстринов (ЦД) – макроциклических рецепторов природного происхождения. Они образуются при ферментативном расщеплении крахмала и состоят из остатков D-глюкопиранозы, связанных друг с другом по принципу «голова к хвосту» $\alpha(1 \rightarrow 4)$ -гликозидной связью. Уникальные структурные особенности циклодекстринов, а именно наличие разделенных гидрофильных и гидрофобных групп, обуславливают необычные физические и химические свойства этих макромолекул. Наиболее важным свойством природных или химически модифицированных циклодекстринов является способность обратимо и избирательно связывать органические, неорганические и биологические молекулы, образуя комплексы включения типа “гость-хозяин” или наноструктурированные

супрамолекулярные ансамбли. Приведены наиболее интересные примеры применения клатратных комплексов циклодекстринов в фармацевтической, пищевой и химической промышленности, спектрометрическом анализе, технологиях разделения, использования циклодекстринов в качестве моделей для молекулярного распознавания в биологии, а также использования их циклического компонента при построении супрамолекулярных архитектур (ротаксанов, псевдоротаксанов и др.). Рассматриваются различные типы рецепторов, способных за счет невалентных взаимодействий связывать катионы, анионы, нейтральные молекулы. Описаны различные области применения контейнерной химии, искусственных систем, имитирующих биологические процессы, принципы формирования супрамолекулярной самосборки, молекулярных устройств и молекулярные машины. Описаны механизм и методы формирования клатратных комплексов, их свойства и методы анализа. Рассмотрено применение циклодекстриновых производных в получении наноразмерных материалов в производстве металлических и полупроводниковых наночастиц, покрытых органическими монослоями.

Ключевые слова: макроциклические рецепторы, циклодекстрины, супрамолекулярные ансамбли, наноразмерные материалы, клатраты

Финансирование: *Научно-исследовательская работа осуществлена в рамках ГФ AP14869941 Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан.*

Введение

В настоящее время одним из удобных инструментов получения химических молекулярных конструкций становится так называемая супрамолекулярная химия, обладающая перспективами самого широкого применения не только в медицине, но и в других областях. Термин «супрамолекулярная химия» был введен Ж.М. Леном и определен им как «...химия за пределами молекулы, описывающая сложные образования, которые являются результатом ассоциации двух (или более) химических частиц, связанных вместе межмолекулярными силами» (Szejtli, 2004; Crini, 2014; Пожарский, 1997). Толчком к дальнейшему развитию идеи макроциклического комплексообразования послужило открытие краун-эфиров, криптанов, циклофанов, каликсаренов и использование их в качестве молекулярных “хозяев” в распознавании различных соединений (рис.1) (Loftsson, 2012; Zhou et al., 2020; Skurederina et al., 2020; Dodziuk, 2006; Jeon, 2002). Однако “гости”, распознанные этими молекулами-хозяевами, были ограничены небольшими молекулами или простыми ионами (Li, Na, K, CCl_4 , C_6H_6).

Для распознавания крупных молекул-“гостей” или более сложных соединений (полимеров, биологических объектов) необходимо было использовать большие макромолекулы. Следует отметить, что подходящего способа распознавания макромолекул в искусственных системах “гость-хозяин” не существовало примерно до начала 1980-х годов, когда для этих целей стали использовать олигомеров крахмала – циклодекстриновых молекул (Loftsson, 2012; Zhou et al., 2020; Skurederina et al., 2020) (рис.1). Циклодекстрины (ЦД) – молекулы природного происхождения, были открыты в 1891 г. A.Villiers при исследовании продуктов метаболизма *Bacillus amylobacter*, и получили первое название «целлюлозины» (Dass et al., 2013; Szejtli, 1988). В 1903г. F. Schardinger (1853-1920гг.) доложил о получении двух различных кристаллических продуктов,

похожих на целлюлозин, которые он назвал α - и β -декстрины (Sabadini et al., 2006). В конце 70-х годов XX века стал возможен ферментативный синтез высокоочищенных α -, β - и γ -ЦД и их производных, которые стимулировали рост их использования в различных областях химии, косметологии, фармакологии и др. (Nikitin, 2015).

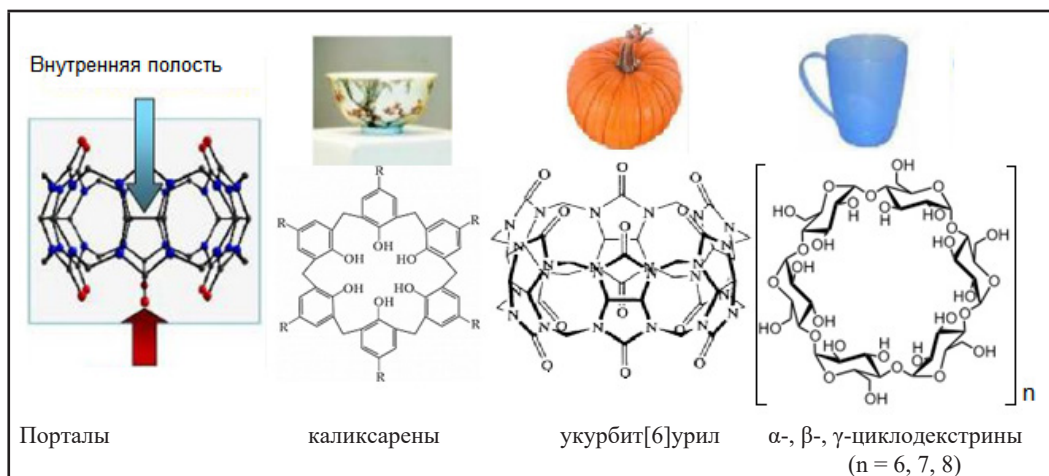


Рис. 1. Супрамолекулярные комплексобразующие соединения

Таким образом, в конце прошлого века на стыке органической, физической, координационной химии, биологии, материаловедения и микроэлектроники родилась наука под названием «супрамолекулярная химия» (Szejtli, 1988; Nikitin, 2015). В настоящее время насчитывается несколько классов супрамолекулярных соединений, среди которых основными являются кавитанды, криптанды, каликсарены, ротаксаны, катенаны и циклодекстриновые клатраты (комплексы «гость-хозяин»). Форма таких молекул напоминает корону, что и определило их название (англ. crown – корона) (рис. 2).



Рис. 2. Супрамолекулярная молекула в форме кавитанта (короны)

В настоящее время циклодекстрины находят наибольшее применение в химических технологиях получения различных биологически активных соединений в виде комплексов включений. Циклодекстрины представляют собой соединения с уникальной структурой и свойствами: являясь “корзинкой” с гидрофобной внутренней полостью и гидрофильной внешней поверхностью, обладают удивительной способностью образовывать нековалентные микросхемы типа “хозяин-гость” с различными органическими, неорганическими и биологическими

субстратами (Loftsson, 2012; Nikitin, 2015). Молекулярное распознавание с использованием циклодекстринов в качестве молекул-«хозяев» является одним из наиболее распространенных и развивающихся методов, используемых в химии, физике, материаловедении, молекулярной инженерии и молекулярной биологии для достижения лучшего понимания механизма формирования систем «гость-хозяин». Комплексообразующая (клатратообразующая) способность и, соответственно, практическое применение α -, β - и γ - ЦД определяется строением их молекул и размером внутримолекулярной полости (рис.3).

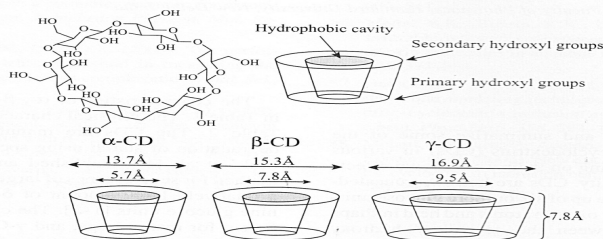


Рис. 3. Внешние и внутренние размеры циклодекстринов

Внутренняя полость циклодекстринов гидрофобна, а внешняя поверхность – гидрофильна. Геометрически молекулы циклодекстринов имеют форму усеченного конуса (тора), полого внутри, в котором по окружности нижнего основания расположены 6-8 первичных ОН-групп, а по окружности верхнего основания — 12–16 вторичных гидроксильных групп (Loftsson, 2012; Nikitin, 2015). Благодаря такой амфифильности строения своей молекулы они образуют в смесях с водой довольно сложные структуры: мицеллы, везикулы, слои и более сложные формы.

Образование всех этих сложных форм управляется *гидрофобным эффектом*. Эти «молекулярные контейнеры», способны удерживать во внутренней полости неполярные, неионизированные молекулы вещества «гостя». Это приводит к образованию комплексов включения, что придает гидрофобным молекулам вещества «гостя» уникальное свойство растворяться в водной фазе за счет гидрофильной наружной поверхности молекулярного контейнера (Пожарский, 1997; Sabadini et al., 2006). Этим свойствам циклодекстрины обязаны благодаря *амфифильности* своей молекулы, содержащей как полярную, так и неполярную части.

Таким образом, самым главным достоинством ЦД является возможность включать в свою полость другие органические молекулы или их фрагменты. Это, в свою очередь, приводит к изменению физико-химических свойств молекулы-«гостя», таких как стабильность, растворимость, биодоступность и др. Однако эти параметры зависят от водорастворимости ЦД, которая ограничена в сравнении с линейными олигосахаридами. Это явилось основной причиной синтеза новых модифицированных производных ЦД, обладающих высокой водорастворимостью (Loftsson, 2012; Nikitin, 2015).

Поскольку низкая водорастворимость ЦД обусловлена формированием

водородной связи между гидроксильными группами, любая их замена (даже гидрофобными фрагментами) приводит к значительному повышению растворимости в воде (Loftsson, 2012). Различные производные ЦД имеют возможность включения внутрь своей полости молекулы с аффинностью, превосходящей таковую у первичной молекулы. Среди водорастворимых производных ЦД наиболее часто используются метилированные, гидроксипропилированные и гидроксипропилированные (табл.1 и 2) (Nikitin, 2015). Включение в полость ЦД гостевой молекулы способствует приобретению ею новых физико-химических свойств, среди которых наиболее очевидным становится повышение водо-растворимости.

Таблица 1. Физико-химические параметры основных циклодекстринов (Nikitin, 2015)

Тип циклодекстрина	Число глюкопиранозных ед.	Молекулярный вес, г/моль	Диаметр полости, Å	Растворимость в воде, 100 г/мл
α	6	972	4,7...5,3	14,5
β	7	1135	6,0...6,5	1.85
γ	8	1297	7,5...8,3	23.2
δ	9	1459	10,3...11,2	8.19

Таблица 2. Физико-химические параметры модифицированных β-циклодекстринов (Nikitin, 2015)

Тип циклодекстрина	Общая молекулярная формула	Молекулярный вес, г/моль	Растворимость в воде, 100 г/мл
2,6-диметил-β-ЦД	$C_{14}H_{56}O_{35} \cdot (CH_3)_{14}$	1331,4	>50
2,3,6-триметил-β-ЦД	$C_{42}H_{49}O_{35} \cdot (CH_3)_{21}$	1429,6	>30
RAMED*	$C_{42}H_{70-n}O_{35} \cdot (CH_3)_n$	1135+ n14	>50
2-гидроксипропил-β-ЦД	$C_{42}H_{70-n}O_{35} \cdot (C_2H_5O)_n$	1135+ n44	>55
2-гидроксипропил-β-ЦД	$C_{42}H_{70-n}O_{35} \cdot (C_3H_7O)_n$	1135+ n58	>60
*- randomly methylated β-cyclodextrin (англ.), произвольно метилированный β-циклодекстрин.			

В настоящее время ЦД широко используются в косметической, пищевой, фармацевтической промышленности, в аналитической химии, в охране окружающей среды от экотоксикантов и др. (2007; Dodziuk, 2006; Szejtli, 1988; Saenger, 1980). В таких странах как Япония, Южная Корея, США, Китай и др. супрамолекулярные структуры являются основой многих современных технологий, таких как получение наночастиц драгоценных металлов (Shikhar et al., 2012), экстракция биологически активных веществ (Lin et al., 2003), создание фото- и хемосенсоров, разработка нанокатализаторов, моделирование сложных биологических процессов (Singh et al.2002; Gusev et. al., 2004) и др. А что касается фармакологических аспектов, то здесь новейшие технологии, за счет взаимодействия «гость-хозяин», позволяют помещать в полости молекулярных контейнеров

различные биоактивные вещества (пептиды, олигонуклеотиды, аминокислоты, антигены, антибиотики, цитостатики и др.) и избирательно доставлять их в клетки, ткани и органы человека. Такой подход не только повышает терапевтический эффект, но и уменьшает выраженность побочных эффектов доставляемых лекарств (Das et al., 2013; Dodziuk, 2006).

Методы получения супрамолекулярных комплексов включения циклодекстринов.

Существуют различные способы синтеза соединений включений циклодекстринов. От выбора того или иного метода будут зависеть свойства полученного продукта, такие как растворимость, вязкость, а также стабильность комплекса: метод должен отвечать масштабам синтеза (в лаборатории или промышленности), а также требуемым параметрам (Loftsson, 2012; Das et al., 2013; Sabadini et al., 2006). Все способы синтеза похожи друг друга, единственное отличие – последовательное уменьшение используемого количества воды. Вода играет особую роль при образовании комплексов, поскольку, являясь движущей силой для включения гидрофобного гостя в гидрофобную полость циклодекстринов, она представляет собой среду для растворения как циклодекстрина, так и «гостя» (Loftsson, 2012; Zhou et al., 2020).

К основным методам получения комплексов включения циклодекстринов относятся следующие методы: соосаждения, сухого помола, герметичного нагревания (без растворителей), суспензионный, нейтрализации, распылительной сушки, сублимации, соиспарения, экструзионный, а также методы сверхвысокочастотного облучения и сверхкритического углекислого газа (Van Hess et al., 1999; Toropainen et al., 2006). Наноструктуры комплексов включения могут образовываться при смешивании веществ либо в сухом кристаллическом состоянии, либо в суспензиях или растворах. Базовое молярное соотношение «гость-хозяин» в реакционной смеси используемое для получения комплексов включения составляет 1:1. Данное молярное соотношение может изменяться в зависимости от размера молекулы «гостя», а также от типа используемого циклодекстрина (Zhou et al., 2020). В случае, если «гость» нерастворим в воде, его растворяют в органическом растворителе.

Методы изучения наноструктур ЦД комплексов включения.

При изучении результатов синтеза супрамолекулярных комплексов включений (КВ) применяются комплекс различных физических методов исследования. При изучении механизмов образования клатратных КВ используются также теоретические расчетные методы молекулярного докинга и моделирования (Muldakhmetov et al., 2022).

а) Ультрафиолетовая (УФ) спектроскопия. Способ измерения основан на зависимости поглощения излучения от длины волны излучения (Пентин др., 2003). Метод широко используется для изучения КВ ввиду его просто-

ты. Он основан на том, что ЦД не проявляют значимого УФ-поглощения. В то же время в растворе «гость-хозяин» отмечается повышение абсорбции вследствие отклонения электронов хромофора гостевой молекулы при ее включении в ЦД.

б) Инфракрасная (ИК) спектроскопия. Метод ИК спектроскопии позволяет достоверно подтвердить факт образования КВ при условии заполнения полости тора более 25 % молекул ЦД от общего числа макроциклов в образце. В противном случае характеристические изменения в ИК-спектрах вещества комплексанта не проявляются на фоне полос поглощения ЦД, поскольку ИК-спектр ЦД не претерпевает значительных изменений в результате образования КВ. Наиболее выраженные изменения в ИК спектрах наблюдаются при участии ОН групп в образовании водородных связей при формировании КВ. При образовании кавитатов, межмолекулярные водородные связи, формировавшиеся с участием молекул «гостя», разрываются, и полосы поглощения образца смещаются в высокочастотную область (Badr-Eldin et al., 2008).

в) Дифференциальная сканирующая калориметрия (ДСК). Метод ДСК проводится для подтверждения результатов синтеза КВ на первичных и конечных продуктах реакций для подтверждения результатов образования комплекса включения. В случае формирования клатратного комплекса точки плавления, кипения и сублимации ЦД обычно сдвигаются к другой температуре (Wen et al., 2004).

г) Рентгеновская дифрактометрия (РД). Метод РД основан на способности рентгеновских лучей отражаться от плоских сетов, образованных атомами в кристаллической решетке материала. При этом полученные дифракционные пики указывают на кристалличность продукта, тогда как пустые участки – на его аморфность (Figueiras et al., 2007).

д) Метод сканирующей (растровой) электронной микроскопии. Данный метод применяется для анализа изменения кристаллической структуры исходных соединений и наноструктур комплексов включения. Фактически, с использованием метода сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) нельзя подтвердить факт образования кавитатов, но возможно подтвердить присутствие в полученном препарате компонентов смеси. Метод СЭМ позволяет провести морфологическую характеристику кристаллов вещества: размер, форма и пр. (Ribeiro et al., 2009).

е) Ядерная магнитная резонансная (ЯМР) спектроскопия. Наиболее информативным методом подтверждения формирования КВ является метод ^1H -ЯМР-спектроскопии (Schneider et al., 1998). Этот метод анализа позволяет зафиксировать выраженный химический сдвиг в колебательных спектрах Н-3 и Н-5 протонов, ориентированных внутрь полости тора, что обусловлено размещением молекулы вещества «гостя» в гидрофобной полости ЦД. При этом в колебательных спектрах Н-1, Н-2 и Н-4 атомов, локализованных на

внешней поверхности молекулы, наблюдаются незначительные химические сдвиги. Метод ^{13}C -ЯМР-спектроскопии позволяет зафиксировать химические сдвиги в электронном окружении атомов углерода полости молекулы ЦД, образующиеся в результате ван-дер-ваальсового и электростатического взаимодействия молекул вещества «гостя» с молекулами «хозяина».

ж) Методы молекулярного докинга и моделирования. В настоящее время современные методы молекулярного докинга и моделирования также широко используются при изучении супрамолекулярных клатратных комплексов (Iskineyeva et al., 2022). Эти методы позволяют обоснованно прогнозировать предпочтительную ориентацию одной молекулы по отношению к другой при образовании устойчивого комплекса. В качестве количественной оценки используется энергия связывания между молекулой рецептора и лигандом.

и) Другие методы. Для характеристики свойств кавитатов циклодекстринов, находящихся в растворенном состоянии можно применять методы электрохимии, а также хроматографические и др. методы анализа (Loftsson, 2012; Nikitin, 2015).

Применение ЦД в фармацевтической промышленности.

Наиболее распространенным фармацевтическим применением ЦД-нов является повышение растворимости лекарственных средств в водных растворах. В настоящее время около 40 % производимых в мире лекарственных веществ классифицируются Европейской Фармакопеей как нерастворимые в воде, в то время как в большинстве случаев наиболее эффективным способом введения является парентеральный способ. Таким образом, актуальность исследований по увеличению растворимости лекарственных веществ и жирорастворимых витаминов (Loftsson et al., 2002) становится очевидной. Первый рыночный фармацевтический продукт на основе комплекса β -ЦД-Prostamon ETM (в виде сублингвальных таблеток) был произведен в Японии в 1976г. корпорацией Ono Pharmaceutical Co. Ltd (Loftsson et al., 2002; Кедик и др., 2016).

Согласно данным статьи (Hirayama et al., 2007; Федорова и др., 2011; Tiwari, 2010) инкапсулирование лекарственных препаратов циклодекстринами может привести к увеличению растворимости десятки раз по отношению к их растворимости в чистой воде. С этим же периодом совпало возникновение новой медицинской концепции, основанной на контролируемой доставке лекарств с использованием специальных носителей природного и синтетического происхождения, из которых фармакологически активное вещество высвобождается в заданном режиме и необходимых количествах. С тех пор ЦД и их производные, как биосовместимые эксципиенты заняли прочные позиции в создании платформенных технологий доставки лекарств (Davis et al., 2004; Hirayama et al., 2007). Некоторые примеры лекарственных препаратов в ЦД комплексе, используемых в фармакологической практике

приведены в таблице 3.

Дальнейшие перспективы использования ЦД в фармацевтике связывают с разработкой так называемых таргетных (англ. *target* – мишень) препаратов для противоопухолевой и генной терапии (Hirayama et al, 2007). Эффективность систем доставки препаратов через клеточные мембраны напрямую связана с размером «загруженных» лекарством частиц. В связи с этим в последнее время ЦД и их производные в качестве наночастиц стали активно использоваться для конструирования систем доставки лекарств непосредственно в опухолевые ткани.

Таблица 3. Примеры лекарственных препаратов в циклодекстриновых клатратах (Davis et al., 2004).

Drug	Administration route	Trade name	Market
альфа-Cyclodextrin			
Alprostadil (PGE ₁)	IV solution	Prostavastin	Europe, Japan, USA
Cefotiam hexetil HCl	Oral tablet	Pansporin	Takeda, Japan
бета-Cyclodextrin			
Benexate HCl	Oral capsule	Ulgut, Lonmiel	Teikoku, Japan
Dexamethasone	Dermal ointment	Glymesason	Fujinage, Japan
Iodine	Topical	Mena-Gargle	Kyushin, Japan
Nicotine	Sublingual tablet	Nicorette	Pfizer, Europe
Nimesulide	Oral tablet	Nimedex, Mesulid	Novartis, Europe
Nitroglycerin	Sublingual tablet	Nitropen	Nihon Japan
Omeprazol	Oral tablet	Omebeta	Europe
PGE ₂	Sublingual	Prostarmon E	Japan
Piroxicam	Oral tablet	Brexin	Chiesi, Europe
Tiaprofenic acid	Oral tablet	Surgamyl	Europe
2-Hydroxypropyl-бета-cyclodextrin			
Cisapride	Rectal	Propulsid	Europe
Hydrocortisone	Buccal	Dexocort	Europe
Indomethacin	Eye drops	Indocid	Europe
Itraconazole	Oral, IV	Sporanox	Europe, USA
Mitomycin	IV	Mitozytrex	USA
Randomly methylated бета-cyclodextrin			
17-бета-Estradiol	Nasal spray	Aerodiol	Europe
Chloramphenicol	Eye drops	Clorocil	Europe
Sulfobutylether бета-cyclodextrin			
Voriconazole	IV	Vfend	Europe, USA
Ziprasidone maleate	IM	Geodon, Zeldox	Europe, USA

2-Hydroxypropyl-γ-cyclodextrin			
Diclofenac sodium	Eye drops	Voltaren	Europe
Tc-99 Teboroxime			

В основе разрабатываемых для этой цели препаратов лежит так называемая *antisense technology*, иными словами, точная адресация в клетку мишень сравнительно коротких синтетических олигонуклеотидов, комплементарных определенным смысловым участкам нуклеиновых кислот. С помощью данного подхода можно подавлять экспрессию онкогенов и блокировать синтез различных сигнальных и регуляторных белков, передающих импульс от рецепторов факторов роста к ядру клетки, что используются в противоопухолевой *antisense* терапии, эффективность которой сейчас уточняется во многих исследованиях (Федорова и др., 2011; Singh Nalwa Hari et al., 2007; Loftson et al., 2010). Для целевой доставки терапевтических *antisense* олигонуклеотидов наиболее предпочтительными являются ЦД, в молекулярной полости которых они надежно защищены от разрушения клеточными эндонуклеазами.

Высокая селективность онколитического действия и низкая токсичность химиопрепаратов, конъюгированных с ЦД-полимерами, продемонстрированы в экспериментальных условиях при лечении рака кожи, молочной железы, яичников и легких (Федорова и др., 2011). Известная компания Calando Pharmaceuticals, Inc (США) в своих презентациях последних лет в качестве ключевых наноразработок позиционирует платформенные технологии доставки противоопухолевых препаратов с использованием линейных ЦД-содержащих полимеров в качестве нанотранспортных систем, запатентованных под названиями Cyclosert™, si RNA, RONDEL™, которые успешно прошли доклинические испытания (www.calandopharma.com).

Приведенные выше материалы дают основание заключить, что фармацевтический потенциал ЦД и их производных далеко еще не исчерпан. Открытые более века назад эти уникальные природные биосовместимые, нетоксичные и неиммуногенные комплексообразователи открывают все новые и впечатляющие возможности их использования для управления свойствами веществ, в том числе лекарственных, на атомно-молекулярном уровне. И можно с уверенностью предсказать появление в будущем новых, основанных на знаниях («knowledge-based») контролируемых систем доставки лекарственных препаратов в организме, обладающих высокой специфичностью и создающих предпосылки для персонализированной медицины (Федорова и др., 2011; Astray, 2009; Varan et al., 2017; Navalch et al., 2021).

Перспективы использования циклодекстринов в пищевой промышленности.

ЦД являются продуктами ферментативной модификации крахмала. Это открывает широкие возможности их применения в пищевой промышленности, в первую очередь для улучшения потребительских качеств продуктов: повышения питательной ценности, вкусовых качеств, реологических свойств, увеличения срока сохранности. Циклодекстрины можно использовать в пищевом производстве для сохранения или модификации цвета и органолептических свойств продуктов питания. Эти макроциклические соединения способны образовывать комплексы включения с молекулами жирных кислот, пряноароматических соединений, пищевых красителей, витаминов и пр. (Федорова и др., 2011; Loftson et al., 2010).

Во многих странах, в том числе Японии, Франции, Венгрии, Нидерландах, Бельгии разрешено использование ЦД в пищевой промышленности в качестве пищевых добавок (E-459) (Davis et al., 2004; Astray, 2009). При добавлении в состав продуктов питания, циклодекстрины маскируют горький привкус, неприятный запах, и сохраняют аромат изделий, предназначенных для длительного хранения (Szejtli, 1988; Martin Del Valle, 2004; Navalch et al., 2021).

Отметим, основные функции ЦД, как многофункциональных пищевых ингибриентов (Shim et al., 2003; Shaw et al., 1983; Wagner et al., 1988):

а) Циклодекстрины в качестве носителей вкусов. ЦДинкапсуляции тормозит или исключает молекулярные взаимодействия между различными компонентами природных или синтетических композиционных систем, таких как ароматические концентраты, эфирные масла, живицы и т. д.

б) Циклодекстрины как протекторы пищевых ингредиентов. Супрамолекулярная инкапсуляция чувствительных к окислению пищевых ингредиентов (ароматизаторов, ненасыщенных кислот, красителей и др.) приводит к улучшению их химической стабильности.

в) Циклодекстрины для защиты от индуцированного светового разложения. Эксперименты с инкапсулированным цитралем (ароматизатор, цитрусовый запах) показали полную защищенность от ультрафиолетового облучения. При аналогичных экспериментах суспензий его клатрата в водных растворах только 15–25 % ароматизатора подверглись разрушению, что объясняется частичным высвобождением при контакте с водой (частичная диссоциация комплекса).

г). Применение «пустых» циклодекстринов для изменения физических свойств пищевых продуктов. С функциональной точки зрения ЦД-ы можно рассматривать как «пустые капсулы» молекулярного размера. Характерный запах баранины или рыбы, неприятные запахи костного порошка (используемого в качестве Са-добавки в кормах для животных), раствора казеината натрия и т.д. могут быть устранены добавлением ЦД. Соевые продукты, свободные от травянистого запаха и строгого вкуса, получают путем смешивания их с ЦД. Соевый лецитин, смешанный с β -ЦД, образует порошок без запаха, который может быть использован в питании (Shim et al., 2003; Wagner et al., 1988).

д) Циклодекстрины для маскировки или уменьшения нежелательного вкуса. Горький вкус грейпфрутовых или мандариновых соков существенно уменьшался, когда перед термической обработкой консервированных соков добавляли 0,3 % β -ЦД.

е) Селективное комплексообразование выбранных компонентов «пустыми» циклодекстринами. Описано, что получение мгновенно растворимого кофейного порошка путем распылительной или сублимационной сушки водного кофейного экстракта, содержащего β -ЦД, приводит к более эффективному сохранению летучих компонентов и обеспечивает лучший аромат продукта.

Применение циклодекстринов в сельском хозяйстве. Перспективы использования ЦД в сельском хозяйстве связаны, прежде всего, с возможностью повышения стабильности, растворимости, эффективности действия пестицидов (инсектицидов, гербицидов, фунгицидов и др.) и снижения их вредного влияния на окружающую среду. Комплексы пестицидов с ЦД значительно менее летучи, и это позволяет уменьшить их расход и концентрацию. Так, дихлофос, который

испаряется за несколько часов, в комплексе с (3-ЦД за то же время теряет только 0,003 % веса. Плёнки, пропитанные комплексом дихлофос-[3-ЦД-ном, в 8 раз эффективнее, чем пропитанные чистым препаратом (Szente et al., 1996). При использовании комплексов ЦД-на с фунгицидами наблюдается замедленное их разложение, т.е. эффект контролируемого освобождения и увеличение срока их действия. Средства для дезинфекции почвы обычно применяются, когда почва сухая, и могут обрабатываться машинами. Комплекс, нанесенный на сухую почву, будет устойчивым, и не будет выделяться до тех пор, пока не пойдет дождь. Таким образом, комплексообразование синтетических и природных пиретроидов (вид инсектицидов) с ЦД повышает их устойчивость к солнечному свету и увеличивает их инсектицидное действие.

Применение циклодекстринов в получении наночастиц металлов.

Одной из новых многообещающих областей применения ЦД является производство наноразмерных материалов (Chernykh et al., 2010). Простой способ получения водорастворимых частиц CdSe/ZnS под действием ультразвука с использованием β -ЦД в качестве поверхностно-стабилизирующего агента представлен в работе (Han et al., 2008). Авторы работы (Bocanegradiaz et al., 2003) впервые сообщили о получении наночастиц для феррожидкости из магнетита в присутствии β -ЦД с образованием комплексов включений (КВ) между оксидом металла и ЦД-ном. В данном случае β -ЦД использовался одновременно в качестве стабилизатора и формовщика наночастиц, “отбирая” частицы размером менее 2 нм. О синтезе наночастиц магнетита, покрытых оболочкой из молекул β CD для использования в медицинской диагностике и терапии, сообщалось в работе (Racsiu et al., 2007). Суспензий наночастиц получают в нейтральной по pH среде химическим осаждением солей железа (II) и (III) в присутствии β -ЦД.

Как известно, распространенным методом получения наночастиц оксидов металлов является термическое разложение солей металлов. Относительно простой метод получения наночастиц ZnO, при котором наночастицы получают термоллизом КВ ацетата цинка в присутствии β -ЦД, был предложен в работе (Chen et al., 2006). Размер наночастиц ZnO можно регулировать изменением соотношения β -ЦД/ $Zn(CH_3COO)_2$. Наночастицы, полученные этим методом, имеют размеры 20–30 нм. Применение КВ ацетата цинка с β -ЦД, по сравнению с одним только ацетатом цинка, оказывает более сильное влияние на морфологию частиц. β -Циклодекстрин, присутствующий в растворе, предотвращает агрегацию наночастиц и обеспечивает ограниченное пространство для образования зародышей за счет их включения в его полость. В этом случае форма и распределение наночастиц по размерам намного лучше, чем без использования ЦД. Этот метод также может быть применен к другим оксидам металлов: например, наночастицы NiO были получены таким способом из $Ni(CH_3COO)_2$ (Chen et al., 2006).

Химическое восстановление золотохлороводородной кислоты часто используется для получения наночастиц золота. В зависимости от используемого восстановителя размер полученных наночастиц может варьироваться в пределах 1-100 нм. В работах также (Wang et al., 2008; Liu et. al., 2011) описан синтез наночастиц золота восстановлением тригидрата хлороводородной кислоты цитратом натрия ($Na_3C_6H_5O_7$) или борогидридом натрия ($NaBH_4$) и др. Реагентами в присутствии α -, β - и γ -ЦД. Время, предшествующее зарождению, и время, в те-

чение которого происходит восстановление, уменьшились в присутствии ЦД до 10 и 45 сек по сравнению с 40 и 90 сек для образцов без ЦД, соответственно. Размер наночастиц зависел от типа и концентрации ЦД. Увеличение концентрации ЦД изменяет размер наночастиц с диапазона 12–15 нм до 4–6 нм в случае использования цитрата натрия и с 6–8 нм до 2–4 нм в случае восстановителя борогидрида натрия при том же распределении частиц по размерам. Этот результат подтверждается сдвигом максимума спектра поглощения частиц в сторону более коротких длин волн. В присутствии молекул ЦД постоянный рост наночастиц был ограничен за счет взаимодействия нанокластеров и окружающих их свободных атомов золота. Атомно-силовая микроскопия показала, что размер полученных наночастиц золота при хранении в течение 3 месяцев остается практически неизменным, что свидетельствует об их хорошей стабильности в присутствии ЦД (Wang et al., 2008; Liu et al., 2011).

Наночастицы золота, модифицированные α -, β - и γ -ЦД были получены в (Wang et al., 2008). Молекулярное узнавание между такими частицами и подходящими субстратами в растворе дает новые интересные возможности для самоорганизации наночастиц в два и три объемные конструкции. Такие системы находят применение в синтезе новых материалов и коммутационных устройствах, а также разработке новых датчиков и катализаторов. Для получения ЦД-модифицированных наночастиц золота в качестве прекурсора использовали AuCl_4^- , а в качестве восстановителя использовали раствор NaBH_4 в ДМСО также содержащий ЦД. В этом методе соотношение ЦД/Au определяет средний размер наночастиц (2×7 нм). Наночастицы Pt и Pd могут быть получены таким же образом (Wang et al., 2008; Liu et al., 2011).

В работах (Liu et al., 2001; Koichiro et al.; 2021) сообщались о взаимодействии покрытых тиолированными α - и β -ЦД наночастиц золота среднего размера 3 нм с некоторыми катионными производными ферроцена ($(\text{C}_5\text{H}_5)_2\text{Fe}$), что может быть использовано для перевода гидрофильных наночастиц в среду с низкой полярностью, такую как хлороформ. В этом случае наночастицы Au, покрытые ЦД, ведут себя как промежуточные звенья для образования необычных структур в хлороформе, где каждая частица золота окружена ферроцен-амфифилами, благодаря добавлению к частице связанных с ЦД ферроцен-радикалов. Авторы (Liu et al., 2001) полагают, что такие структуры, содержащие наночастицы золота в центре, концептуально очень похожи по структуре на структуру обратных мицелл, заполненных наночастицами золота (рис. 5).

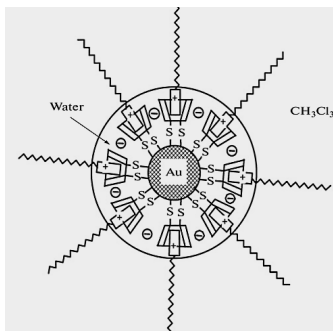
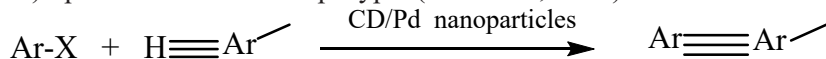


Рис. 5. Модель структуры комплекса включения Au, образованная переносом покрытых тиолированными наночастицами α - и β -ЦД в хлороформе

Авторы работы (Barrientos et al., 2007) показали преимущества сборки наночастиц через посредников – гостевые молекулы в супрамолекулярной структуре. Они изучали упорядоченную самоорганизацию наночастиц золота, полученных методом магнетронного распыления на поверхности микрокристаллов, состоящих из комплексов включения композиции 2α -ЦД–додекантиола. Преимущественное осаждение частиц на плоскостях кристалла (001) произошло из-за того, что -SH-группы молекул-“гостей” внутри полости ЦД выступают из плоскости. Эти группы -SH образуют двумерную гексагональную решетку, которая взаимодействует с наночастицами с образованием связей Au-S, стабилизируя и располагая их в определенном порядке. Таким образом, кристаллы обеспечивают удобный способ сохранения наночастиц в твердом состоянии без агрегации.

В (Alvarez et al., 2000) Pt- и Pd-наночастицы были модифицированы добавлением β -ЦД, что привело к образованию водорастворимых субстратов, перспективных в качестве гомогенных катализаторов для гидрирования аллиламина в водном растворе. Использование ЦД обеспечило получение монодисперсных коллоидных наночастиц размером $14,1 \pm 2,2$ нм для Pt и $15,6 \pm 1,3$ нм для Pd. Эти новые материалы используются в “зеленой химии”, поскольку они проявляют избирательную каталитическую активность, регулируемую присущими закрепленным на поверхности ЦД “хозяевам” свойствами молекулярного распознавания.

Покрытые наночастицами металла β -ЦД успешно используются в качестве нанокатализаторов для каталитических органических реакций в водных растворах. Например, реакция Соногаширы в присутствии наночастиц Pd, покрытых β -ЦД протекает с высокими выходами продуктов (алкиларил- и диарилзамещенные ацетилены) при комнатной температуре (Xue et al., 2007).



где X = I или Br.

Средний размер этих наночастиц составляет $3,2 \pm 0,8$ нм. Их высокая растворимость в воде обусловлена наличием множества гидроксильных групп на поверхности, покрытой ЦД. По сравнению с другими органическими защитными средствами объемные молекулы ЦД на поверхности наночастиц не только предотвращают агломерацию, но и сохраняют некоторую часть поверхности наночастиц неpassивированной, что дает возможность принимать участие в каталитических реакциях (рис. 6). Гидрофобные субстраты, входящие в полости β -ЦД на поверхности наночастиц Pd_n, оказываются в соседних реакционных центрах, что улучшает общий каталитический процесс (Alvarez et al., 2000; Xue et al., 2007).

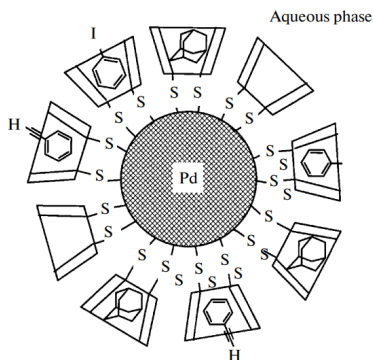


Рис. 6. Включение гидрофобных субстратов β -ЦД молекул на поверхности наночастиц Pd в водном растворе.

Заклучение.

В настоящее время одним из удобных инструментов получения уникальных химических молекулярных конструкций становится супрамолекулярная химия, обладающая перспективами самого широкого применения не только в медицине, но и в других областях науки. Открытые в 1891 году A.Villiers, циклодекстрины представляют собой соединения с уникальной структурой и свойствами: наличие гидрофобной внутренней полости и гидрофильной внешней поверхности обеспечивают им удивительную способность образовывать клатратные комплексы включений типа “хозяин-гость” с различными органическими, неорганическими и биологическими субстратами. В настоящее время циклодекстрины выступают в качестве уникальных природных объектов в области супрамолекулярной химии, предметом изучения которой являются молекулярные ансамбли, образованные в результате нековалентных слабых межмолекулярных взаимодействий. Одной из перспективных областей применения циклодекстринов заключается в производстве металлических и полупроводниковых наночастиц, покрытых органическими монослоями. Использование циклодекстринов открывает широкие возможности для модификации поверхности наночастиц, в частности, для фазового перехода между водной и органической средами.

REFERENCES

- Alvarez J., Liu J., Roman E., and Kaifer A.E. (2000). Water-soluble platinum and palladium nanoparticles modified with thiolated β -cyclodextrin Electronic supplementary information (ESI) available // Chem. Commun. — 2000. — 1151. <https://doi.org/10.1039/b002423f>
- Barrientos L., Yutronic N., Del Monte F., Gutier rez M.C., and Jara P. (2007). Ordered arrangement of gold nanoparticles on an α -cyclodextrin–dodecanethiol inclusion compound produced by magnetron sputtering //— New J. Chem. — 2007. — 31. — 1400. <https://doi.org/10.1039/B706346F>
- Badr-Eldin S.M., Elkheshen S.A., Ghorab M.M. (2008). Inclusion complexes of tadalafil with natural and chemically modified β -cyclodextrins. I: Preparation and in-vitro evaluation // European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics. — 2008. — 70(3). — 819–827.
- Bocanegradiaz A., Mohallem N.D.S., Sinis Terra R.D. (2003). Preparation of a Ferrofluid Using Cyclodextrin and Magnetite. // J. Braz. Chem. Soc. — 2003. — 14(6). — 89. <https://doi.org/10.1590/S0103-50532003000600011>
- Chen H.L., Zhao B., and Wang Z. (2006). Cyclodextrin in Artificial Enzyme Model, Rotaxane, and Nano-material Fabrication //— Journal of inclusion phenomena and macrocyclic chemistry. — 56. —17. DOI 10.1007/s10847-006-9054-9
- Chernykh E.V., Brichkin S.B. (2010). Supramolecular complexes based on cyclodextrins // High Energy Chemistry. — 2010. — 44(2). — 83–100. <https://doi.org/10.1134/s0018143910020013>.
- Davis M.E., Brewster M.E. (2004). Cyclodextrin-based pharmaceuticals: past, present and future // Nature reviews drug discovery. — 2004. — 3(12). — 1023–1035.
- Das S.K., Rajabalaya R., David Sh., Gani N., Khanam J., Nanda A. (2013). Cyclodextrins-The Molecular Container. // — Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences. — 2013. — 4(2). — 1694–1720.
- Dodziuk H. (2006). Cyclodextrins and Their Complexes. Chemistry, Analytical Methods, Applications. — Warsaw: Willey-VCH, Weinheim, — 504 p.
- Figueiras A., Carvalho R.A., Ribeiro L., Torres-Labandeira J.J., Veiga F.J.B. (2007). Solid-state characterization and dissolution profiles of the inclusion complexes of omeprazole with native and chemically modified β -cyclodextrin // European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics. — 67(2). — 531–539. <https://doi.org/10.1016/j.ejpb.2007.03.005>
- Hirayama F., Uekama K. (2007). Cyclodextrin-based controlled drug release system // Adv. Drug. Rev. 2007. — 36(1). — 125–141.
- Havalch T.M., Dudchik N.V., Tarun E.I. et al. (2021). Biologically active properties of hydrolysed and fermented milk proteins // Biointerface Research in Applied Chemistry. — 2021 —11. — 8626–8638.
- Han C.P. and Li H.B. (2008). Novel β -cyclodextrin modified quantum dots as fluorescent probes for polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) // — Chinese Chemical Letters. — 2008. — 19(2). — 215. <https://doi.org/10.1016/j.ccl.2007.11.008>
- Jeon W.S., Kim H.J., Lee C. (2002). Control of the stoichiometry in host-guest complexation by redox chemistry of guests: inclusion of methylviologen in cucurbit[8]uril // Chem. Commun. — 2002. — No17. — Pp.1828–1829.
- Koichiro S., Keegan M., Yasuo N. (2021). Saize-controlled synthesis of cyclodextrine-capped gold nanoparticles for molecular recognition using surface-enhanced Raman scattering // Nanoscale Advances. — 2021. — 1–7. <https://doi.org/10.1039/D1NA00125f>.
- Kedik S.A., Panov A.V., Tyukova V.S., Zolotareva M.S. (2016). Cyclodextrins and their application in pharmaceutical industry (review) // Drug development & registration. — 2016. — 3. — 68–75.
- Liu J., Alvarez J., Ong W., Roman E., and Kaifer A.E. (2001). Phase Transfer of Hydrophilic, Cyclodextrin-Modified Gold Nanoparticles to Chloroform Solutions // American Chemical Society. — 2001. — 123. — 11148. <https://doi.org/10.1021/ja003957a>
- Loftsson T. (2012). Cyclodextrins in topical drug formulations: theory and practice // — Journal of Pharmaceutical Sciences. — 2012. — 101(9).
- Loftsson T., Duchêne D. Cyclodextrins and their pharmaceutical applications: historical perspectives // International Journal of Pharmaceutics. — 2007. — 329. — 1–11.
- Liu Y., Male K.B., Bouvrette P., Luong J.H.T. (2003). Control of the Size and Distribution of Gold Nanoparticles by Unmodified Cyclodextrins // Chemistry Materials. — 2003. — 15. — 4172. <https://doi.org/10.1021/cm0342041>
- Loftson T., Brewster M.E. (2010). Pharmaceutical applications of cyclodextrins: basic science and prod-

- uct development. – Journal of pharmacy and pharmacology. — 62. — 1607–1621. <https://doi.org/10.1111/j.2042-7158.2010.01030.x>
- Loftsson T., K. Másson, Sigurdsson H.H. (2002). Cyclodextrins and drug permeability through semi-permeable cellophane membranes //— International Journal of Pharmaceutics. — 2002. — 232(1–2), — 101–107. [https://doi.org/10.1016/S0378-5173\(01\)00895-X](https://doi.org/10.1016/S0378-5173(01)00895-X)
- Liu D., Wang Z., Jiang X. (2011). Gold nanoparticle for the calorimetric and fluoresen detection of ions and small organic molecules // Nanoscale. — 2011. — 41. — 1421–1433.
- Muldakhmetov Z., Fazylov S., Nurkenov O., Gazaliev A., Sarsenbekova A., Pustolaikina I., Nurmaganbetov Z. et al. (2022) // — Journal of PLANTS. — 2022. — 11. — 2283. <https://doi.org/10.3390/plants11172283>
- Martin Del Valle E.M. (2004). Cyclodextrins and their uses: a review // Processes Biochemistry. — 2004. — 39(9). — 1033–1046.
- Nikitin N. (2015). Циклодекстрины и их комплексы // Вопросы биологической, медицинской и фармацевтической химии. — 2015. — 6. — 2–10.
- Skurederina A.A., Tychinina A.S., Le-Deygen I.M., Belogurova N.G. (2020). Regulation of Properties of Lipid Membranes by Interaction with 2-Hydroxypropyl β -Cyclodextrin: Molecular Details. C., Jira T. // Russian J. of Bioorganic Chemistry. — 2020. — Vol.46. — Pp.692–701.
- Szejtli J. (1988). Cyclodextrin Technology // Dordrecht, Netherlands: Kluwer Academic Publishers. — 1988. — 441.
- Sabadini E., Cosgrove T., Egidio F.D.C. (2006). Solubility of cyclomaltooligosaccharides (cyclodextrins) in H₂O and D₂O: a comparative study // Carbohydrate Research. — 2006. — 341(2). — 270 — 274.
- Saenger W. (1980). Cyclodextrin inclusion compounds in research and industry // Angew. Chem. Int. Ed. Engl. — 1980. — 19(5). — 344–362.
- Shikhar G. (2012). Solubility studies of the beta-cyclodextrins inclusion complexes: a review // International Research Journal of Pharmacy. — 2012. — 3(10). — 178–181.
- Singh M., Sharma R., Banerjee U.C. (2002). Biotechnological applications of cyclodextrins // Biotechnological Advances. — 2002. — 20. — 341–359.
- Schneider H.J., Hacket F., Rüdiger V., Ikeda H. (1998). NMR Studies of Cyclodextrins and Cyclodextrin Complexes // Chemical reviews. — 1998. — 98(5). — 1755–1786. <https://doi.org/10.1021/cr970019t>
- Szejtli J. Cyclodextrin Technology (1988). Dordrecht, — Netherlands: Kluwer Academic Publishers. — 1988. — 441.
- Shim S.Y., Ahn J., Kwak H.S. (2003). Functional properties of cholesterol-removed whipping cream treated by beta-cyclodextrin // Journal of Dairy Science. — 2003. — Vol.86. — Pp. 2767–2772. [https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302\(03\)73873-9](https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302(03)73873-9)
- Shaw P.E., Wilson C.W. (1983). Debittering Citrus Juices with β -Cyclodextrin Polymer // — Journal of Food Science. — 1983. — Vol. 48. — Pp. 646–650. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.1983.tb10811.x>
- Szente L., Szejtli J. (1996). Cyclodextrins in pesticides // Compr. Supramol. Chem. — 1996. — 3. — 503–514.
- Gusev A.I., Rempel A.A. (2004). Nanocrystalline Materials. Cambridge: Cambridge International Science Publishing. — 2004. — 351.
- Van Hees T., Piel G., Evrard B., Otte X., Thunus L., Delattre L. (1999). Application of Supercritical Carbon Dioxide for the Preparation of a Piroxicam- β -Cyclodextrin Inclusion Compound // *Pharmaceutical Research*. — 1999. — 16(12). — 1864–1870. <https://doi.org/10.1023/A:1018955410414>
- Toropainen T., Velaga S., Heikkilä T. et al. (2006). Preparation of budesonide/ γ -cyclodextrin complexes in supercritical fluids with a novel SEDS method // — *Journal of Pharmaceutical Sciences*. — 2006. — 95(10). — 2235–2245. <https://doi.org/10.1002/jps.20702>
- Ribeiro A., Figueiras A., Santos D., Veiga F. (2009). Preparation and Solid-State Characterization of Inclusion Complexes Formed Between Miconazole and Methyl- β -Cyclodextrin // *AAPS Pharm. Sci. Tech.* — 2009. — 9(4). — 1102–1109.
- Racuciu M., Creanga D.E., Badescu V., and Airinei A. (2007). Synthesis and properties of magnetic nanoparticles coated with biocompatible compounds // *J. Optoelectron. Adv. Mater.* — 2007. — 9(5). — 1530.

Iskineyeva A., Fazylov S., Bakirova R., Sarsenbekova A., Pustolaikina I., Seilkhanov Olzhas, Alsouk A.A., Elkaced E.B., Eissa I.H., Metwaly A.M. (2022). Combined In Silico and Experimental Investigations of Resveratrol Encapsulation by Beta-Cyclodextrin // *Journal of Plants*. — 11. — 1678. <https://doi.org/10.3390/plants11131678>

Tiwari G. (2010). Cyclodextrins in delivery systems: Applications / Tiwari Gaurav, Tiwari Ruchi, Rai Awani K // *J. Pharm. Bio Sci.* — 2010. — 2(2). — 72–79.

Федорова П.Ю., Андресон Р.К., Алехин Е.К., Усанов Н.Г. (2011). Природные циклические олигосахариды циклодекстрины, в системах доставки веществ//—*Медицинский Вестник Башкортостана*. — 2011. — Т.6. — №4. — С.125–131. [https://doi.org/10.1016/s0169-409x\(98\)00058-1](https://doi.org/10.1016/s0169-409x(98)00058-1)

Varan G., Varana C., Erdo N. et al. (2017). Amphiphilic cyclodextrin nanoparticles // *International Journal of Pharmaceutics*. — 2017. — No.16733. — Pp.1–13.

Xue C., Palaniappan K., Arumugam G., Hackney S.A., Liu J. and Liu H. (2007). Sonogashira reactions catalyzed by water-soluble, β -cyclodextrin-capped palladium nanoparticles // *J. Catal. Lett.* — 2007. — 116(3–4). — 94. <https://doi.org/10.1007/s10562-007-9108-7>

Wen X., Tan F., Jing Z., Lui Z. (2004). Preparation and study the 1:2 inclusion complex of carvedilol with β -cyclodextrin //— *Pharmaceutical and biomedical analysis*. — 2004. — 34. — 517–523. [https://doi.org/10.1016/S0731-7085\(03\)00576-4](https://doi.org/10.1016/S0731-7085(03)00576-4)

Wagner C.W., Wilson C.W., Shaw P.E. (1988). – Reduction of Grapefruit Bitter Components in a Fluidized β -Cyclodextrin Polymer Bed. — *Journal of Food Science*. — 1998. — 53. — 516. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.1988.tb07745.x>

Wang L.H., Zhang J., Wang X., Huang Q., Pan D. (2008). Gold nanoparticle optical probes for target-responsive DNA structures // *Gold. Bull.* — 2008. — 41. — 37–41.

Zhou D., Hao H., Ma Y., Zhong H., Dai Y., Cai K., Mukherjee S., Liu J., Bian H. (2020). Specific Host–Guest Interactions in the Crown Ether Complexes with K^+ and NH_4^+ Revealed from the Vibrational Relaxation Dynamics of the Counteranion // *Journal of Physical chemistry*. — 2020. — 124 (41). — 9154–9162. — <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c07032>

REFERENCES

Loftsson T. (2012). Cyclodextrins in topical drug formulations: theory and practice // *Journal of Pharmaceutical Sciences*. — 2012. — 101(9).

Zhou D., Hao H., Ma Y., Zhong H., Dai Y., Cai K., Mukherjee S., Liu J., Bian H. (2020). Specific Host–Guest Interactions in the Crown Ether Complexes with K^+ and NH_4^+ Revealed from the Vibrational Relaxation Dynamics of the Counteranion // *Journal of Physical chemistry*. — 2020. — 124 (41). — 9154–9162. — <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c07032>

Skurederina A.A., Tychinina A.S., Le-Deygen I.M., Belogurova N.G. (2020). Regulation of Properties of Lipid Membranes by Interaction with 2-Hydroxypropyl β -Cyclodextrin: Molecular Details. C., Jira T. // *Russian J. of Bioorganic Chemistry*. — 2020. — Vol.46. — P.692–701.

Jeon W.S., Kim H.J., Lee C. (2002). Control of the stoichiometry in host-guest complexation by redox chemistry of guests: inclusion of methylviologen in cucurbit[8]uril // *Chem. Commun.* — 2002. — No17. — P.1828–1829.

Das S.K., Rajabalaya R., David Sh., Gani N., Khanam J., Nanda A. (2013). Cyclodextrins-The Molecular Container. // *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences*. — 2013. — 4(2). — 1694–1720.

Szejtli J. (1988). *Cyclodextrin Technology* // Dordrecht, Netherlands: Kluwer Academic Publishers. — 1988. — 441.

Sabadini E., Cosgrove T., Egidio F.D.C. (2006). Solubility of cyclomaltooligosaccharides (cyclodextrins) in H₂O and D₂O: a comparative study // *Carbohydrate Research*. — 2006. — 341(2). — 270 – 274.

Nikitin N. (2015). Cyclodextrins and their complexes // *Questions of biological, medical and pharmaceutical chemistry*. — 2015. — 6. — 2–10.

Dodziuk H. (2006). — *Cyclodextrins and Their Complexes. Chemistry, Analytical Methods, Applications*. — Warsaw: Willey-VCH, Weinheim, — 504 p.

Loftsson T., Duchêne D. Cyclodextrins and their pharmaceutical applications: historical perspectives // *International Journal of Pharmaceutics*. — 2007. — 329. — 1–11.

Saenger W. (1980). Cyclodextrin inclusion compounds in research and industry // *Angew. Chem. Int. Ed.*

Engl. – 1980. -19(5). - 344-362.

Shikhar G. (2012). Solubility studies of the beta-cyclodextrins inclusion complexes: a review // *International Research Journal of Pharmacy*. – 2012. –3(10). –178–181.

Liu Y., Male K.B., Bouvrette P., Luong J.H.T. (2003). Control of the Size and Distribution of Gold Nanoparticles by Unmodified Cyclodextrins // *Chemistry Materials*. – 2003. –15. – 4172. <https://doi.org/10.1021/cm0342041>

Singh M., Sharma R., Banerjee U.C. (2002). Biotechnological applications of cyclodextrins // *Biotechnological Advances*. - 2002. –20. –341-359.

Gusev A.I., Rempel A.A. (2004). *Nanocrystalline Materials*. Cambridge: Cambridge International Science Publishing. – 2004. -351.

Van Hees T., Piel G., Evrard B., Otte X., Thunus L., Delattre L. (1999). Application of Supercritical Carbon Dioxide for the Preparation of a Piroxicam- β -Cyclodextrin Inclusion Compound // *Pharmaceutical Research*. –1999. –16(12). – 1864-1870. <https://doi.org/10.1023/A:1018955410414>

Toropainen T., Velaga S., Heikkilä T. et al. (2006). Preparation of budesonide/ γ -cyclodextrin complexes in supercritical fluids with a novel SEDS method // *Journal of Pharmaceutical Sciences*. –2006. - 95(10). – 2235-2245. <https://doi.org/10.1002/jps.20702>

Muldakhmetov Z., Fazylov S., Nurkenov O., Gazaliev A., Sarsenbekova A., Pustolaikina I., Nurmaganbetov Z. et al. (2022) // *Journal of PLANTS*. -2022. 11. 2283. <https://doi.org/10.3390/plants11172283>

Badr-Eldin S.M., Elkheshen S.A., Ghorab M.M. (2008). Inclusion complexes of tadalafil with natural and chemically modified β -cyclodextrins. I: Preparation and in-vitro evaluation // *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*. – 2008. –70(3). – 819-827.

Wen X., Tan F., Jing Z., Lui Z. (2004). Preparation and study the 1:2 inclusion complex of carvedilol with β -cyclodextrin // *Pharmaceutical and biomedical analysis*. – 2004. -34. – 517-523. [https://doi.org/10.1016/S0731-7085\(03\)00576-4](https://doi.org/10.1016/S0731-7085(03)00576-4)

Figueiras A., Carvalho R.A., Ribeiro L., Torres-Labandeira J.J., Veiga F.J.B. (2007). Solid-state characterization and dissolution profiles of the inclusion complexes of omeprazole with native and chemically modified β -cyclodextrin // *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*. – 67(2). – 531-539. <https://doi.org/10.1016/j.ejpb.2007.03.005>

Ribeiro A., Figueiras A., Santos D., Veiga F. (2009). Preparation and Solid-State Characterization of Inclusion Complexes Formed Between Miconazole and Methyl- β -Cyclodextrin // *AAPS Pharm. Sci. Tech*. – 2009. – 9(4). – 1102-1109.

Schneider H.J., Hacket F., Rüdiger V., Ikeda H. (1998). NMR Studies of Cyclodextrins and Cyclodextrin Complexes // *Chemical reviews*. – 1998. -98(5). –1755-1786. <https://doi.org/10.1021/cr970019t>

Iskineyeva A., Fazylov S., Bakirova R., Sarsenbekova A., Pustolaikina I., Seilkhanov Olzhas, Alsouk A. A., Elkaeed E. B., Eissa I.H., Metwaly A.M. (2022). Combined In Silico and Experimental Investigations of Resveratrol Encapsulation by Beta-Cyclodextrin // *Journal of Plants*. – 11. – 1678. <https://doi.org/10.3390/plants11131678>

Loftsson T., K. Másson, Sigurdsson H.H. (2002). Cyclodextrins and drug permeability through semi-permeable cellophane membranes // *International Journal of Pharmaceutics*. –2002. - 232(1-2), – 101-107. [https://doi.org/10.1016/S0378-5173\(01\)00895-X](https://doi.org/10.1016/S0378-5173(01)00895-X)

Kedik S.A., Panov A.V., Tyukova V.S., Zolotareva M.S. (2016). Cyclodextrins and their application in pharmaceutical industry (review) // *Drug development & registration*. –2016. – 3. – 68-75.

Hirayama F., Uekama K. (2007). Cyclodextrin-based controlled drug release system // *Adv. Drug. Rev*. 2007. – 36(1). – 125-141.

Tiwari G. (2010). Cyclodextrins in delivery systems: Applications / Tiwari Gaurav, Tiwari Ruchi, Rai Awani K // *J. Pharm. Bio Sci*. -2010. - 2(2). - 72-79.

Fedorova P.Yu., Andreson R.K., Alekhine E.K., Usanov N.G. (2011). Natural cyclic oligosaccharides cyclodextrins, in substance delivery systems // *Medical Bulletin of Bashkortostan*. – 2011. – Vol.6, No.4. – 125-131. [https://doi.org/10.1016/s0169-409x\(98\)00058-1](https://doi.org/10.1016/s0169-409x(98)00058-1)

Davis M.E., Brewster M.E. (2004). Cyclodextrin-based pharmaceuticals: past, present and future // *Nature reviews drug discovery*. – 2004. – 3(12). – 1023-1035.

Varan G., Varana C., Erdo N. et al. (2017). Amphiphilic cyclodextrin nanoparticles // *International Journal of Pharmaceutics*. -2017. –No.16733. –P.1-13.

Loftson T., Brewster M.E. (2010). Pharmaceutical applications of cyclodextrins: basic science and product development. – *Journal of pharmacy and pharmacology*. – 62. – 1607-1621. <https://doi.org/10.1111/j.2042-7158.2010.01030.x>

- Havalch T.M., Dudchik N.V., Tarun E.I. et al. (2021). Biologically active properties of hydrolysed and fermented milk proteins // *Biointerface Research in Applied Chemistry*. – 2021 –11. –8626-8638.
- Szejtli J. *Cyclodextrin Technology* (1988). Dordrecht, Netherlands: Kluwer Academic Publishers. –1988. – 441.
- Martin Del Valle E.M. (2004). Cyclodextrins and their uses: a review // *Processes Biochemistry*. – 2004. –39(9). –1033-1046.
- Shim S.Y., Ahn J., Kwak H.S. (2003). Functional properties of cholesterol-removed whipping cream treated by beta-cyclodextrin // *Journal of Dairy Science*. – 2003. – Vol.86. – P.2767-2772. [https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302\(03\)73873-9](https://doi.org/10.3168/jds.S0022-0302(03)73873-9)
- Shaw P.E., Wilson C.W. (1983). Debittering Citrus Juices with β -Cyclodextrin Polymer // *Journal of Food Science*. –1983. -Vol. 48. – P.646-650. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.1983.tb10811.x>
- Wagner C.W., Wilson C.W., Shaw P.E. (1988). – Reduction of Grapefruit Bitter Components in a Fluidized β -Cyclodextrin Polymer Bed. *Journal of Food Science*. – 1998. –53. – 516. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.1988.tb07745.x>
- Szente L., Szejtli J. (1996). Cyclodextrins in pesticides // *Compr. Supramol. Chem.* –1996. – 3. – 503–514.
- Chernykh E.V., Brichkin S.B. (2010). Supramolecular complexes based on cyclodextrins // *High Energy Chemistry*. – 2010. –44(2). – 83-100. <https://doi.org/10.1134/s0018143910020013>.
- Han C.P. and Li H.B. (2008). Novel β -cyclodextrin modified quantum dots as fluorescent probes for polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) // *Chinese Chemical Letters*. – 2008.-19(2). – 215. <https://doi.org/10.1016/j.ccl.2007.11.008>
- Bocanegradiaz A., Mohallem N.D.S., Sinis Terra R.D. (2003). Preparation of a Ferrofluid Using Cyclodextrin and Magnetite. // *J. Braz. Chem. Soc.* – 2003. -14(6). – 89. <https://doi.org/10.1590/S0103-50532003000600011>
- Racuciu M., Creanga D.E., Badescu V., and Airinei A. (2007). Synthesis and properties of magnetic nanoparticles coated with biocompatible compounds // *J. Optoelectron. Adv. Mater.* – 2007. –9(5). – 1530.
- Chen H.L., Zhao B., and Wang Z. (2006). Cyclodextrin in Artificial Enzyme Model, Rotaxane, and Nano-material Fabrication // *Journal of inclusion phenomena and macrocyclic chemistry*. – 56. – 17. DOI 10.1007/s10847-006-9054-9
- Wang L.H., Zhang J., Wang X., Huang Q., Pan D. (2008). Gold nanoparticle optical probes for target-responsive DNA structures // *Gold. Bull.* – 2008. – 41.– 37-41.
- Liu D., Wang Z., Jiang X. (2011). Gold nanoparticle for the calorimetric and fluoresen detection of ions and small organic molecules // *Nanoscale*. – 2011. – 41. – 1421-1433.
- Koichiro S., Keegan M., Yasuo N. (2021). Saize-controlled synthesis of cyclodextrine-capped gold nanoparticles for molecular recognition using surface-enhanced Raman scattering // *Nanoscale Advances*. – 2021. –1-7. <https://doi.org/10.1039/D1NA00125f>.
- Liu J., Alvarez J., Ong W., Roman E., and Kaifer A.E. (2001). Phase Transfer of Hydrophilic, Cyclodextrin-Modified Gold Nanoparticles to Chloroform Solutions // *American Chemical Society*. –2001. –123. – 11148. <https://doi.org/10.1021/ja003957a>
- Barrientos L., Yutronic N., Del Monte F., Gutier rez M.C., and Jara P. (2007). Ordered arrangement of gold nanoparticles on an α -cyclodextrin–dodecanethiol inclusion compound produced by magnetron sputtering // *New J. Chem.* – 2007. –31. – 1400. <https://doi.org/10.1039/B706346F>
- Alvarez J., Liu J., Roman E., and Kaifer A.E. (2000). Water-soluble platinum and palladium nanoparticles modified with thiolated β -cyclodextrin Electronic supplementary information (ESI) available // *Chem. Commun.* –2000. –1151. <https://doi.org/10.1039/b002423f>
- Xue C., Palaniappan K., Arumugam G., Hackney S.A., Liu, J. and Liu H. (2007). Sonogashira reactions catalyzed by water-soluble, β -cyclodextrin-capped palladium nanoparticles // *J. Catal. Lett.* –2007. –116(3-4). – 94. <https://doi.org/10.1007/s10562-007-9108-7>

МАЗМҰНЫ

ФИЗИКА

М.Б. Альбатырова, А.Ж. Алибек, А.С. Жетписбаева РУТНОН ПАЙДАЛАНУ АРҚЫЛЫ ФИЗИКАЛЫҚ ҚҰБЫЛЫСТАРДЫ МОДЕЛЬДЕУ.....	7
Н. Бейсен, Э. Кеведо, С. Тоқтарбай, М. Жакипова, М. Алимкулова Q-МЕТРИКА ҚИСЫҚТЫҒЫНЫҢ МЕНШІКТІ МӘНДЕРІ.....	17
Г. Бекетова, Н. Жантурина*, З. Аймаганбетова, А. Бекешев ЦЕЗИЙГЕ НЕГІЗДЕЛГЕН ҚОСАРЛАНҒАН ГАЛОИДТЫ ПЕРОВСКИТТЕРДІҢ ОПТИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ.....	31
С.Б. Дубовиченко, Н.А. Буркова, А.С. Ткаченко, Д.М. Зазулин ЖАЛПЫ БӨЛІМДЕРІ ЖӘНЕ ПРОЦЕСС ҚАРҚЫМЫ $n^{12}C$	43
А. Касымов, А. Адылканова, А. Бектемисов, К. Астемесова, Г. Турлыбекова ГИБРИДТІ КҮН КОЛЛЕКТОРЫНДА ҚОЛДАНУҒА АРНАЛҒАН БИДИСТИЛЬДЕНГЕН СУ НЕГІЗІНДЕГІ TiO_2/Al_2O_3 ГИБРИДТІ НАНОСҰЙЫҚТЫҢ ТҮТҚЫРЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ.....	52
А.Е. Кемелбекова, Д.М. Мухамедшина, К.А. Мить, Р.С. Мендыханов, К.К. Елемесов СИРЕК ЖЕР МЕТАЛДАРЫН НЕГІЗІНДЕГІ ФОТОСЕЗІМТАЛ ҚҰРЫЛЫМДАРДЫ ЖАСАУ ЖӘНЕ ЗЕРТТЕУ.....	63
Е.Т. Кожажулов, Д.М. Жексебай, С.А. Сарманбетов, Н.М. Үсіпов, К.Т. Көпбай АҚПАРАТТЫҚ ЭНТРОПИЯНЫҢ НЕГІЗІНДЕ САНДЫҚ МОДУЛЯЦИЯНЫ АНЫҚТАУ.....	73
Е.М. Мырзакулов, А.С. Бұланбаева ҚАРА ҚҰРДЫМ ШЕШІМДЕРІ ЖӘНЕ ОНЫҢ ТЕРМОДИНАМИКАСЫ.....	84
Д.М. Насирова, В.О. Курмангалиева, А.А. Ғазизова ШАҒЫН ЖҰЛДЫЗДАРДАҒЫ ЭНЕРГИЯ КӨЗДЕРІ.....	95
А. Серебрянский, А. Халикова МАШИНАЛЫҚ ОҚЫТУ ӘДІСТЕРІН ҚОЛДАНЫП ШОЛУ ЖӘНЕ МОНИТОРИНГТІ ФОТОМЕТРЛІК БАҚЫЛАУЛАРЫНАН АЙНЫМАЛЫ ЖҰЛДЫЗДАРДЫ ІЗДЕУ.....	103

ХИМИЯ

Б.С. Абжалов, А.Б. Башов, А.К. Мамырбекова, С.А. Жұмаділлаева, М.О. Алтынбекова ҚЫШҚЫЛ ОРТАДА ВИСМУТ ЭЛЕКТРОДЫНЫҢ ЭЛЕКТРОХИМИЯЛЫҚ ҚАСИЕТІНЕ АЙНЫМАЛЫ ТОКТЫҢ ЖИЛПІ МЕН ТЫҒЫЗДЫҒЫНЫҢ ӘСЕРІ.....	116
Е.Г. Гилязов, Д.К. Кулбатыров, М.Д. Уразгалиева, К.Р. Мақсот ТІКЕЛЕЙ АЙДАУДАН АЛЫНҒАН БЕНЗИННІҢ ОКТАН САНЫН АРТТЫРАТЫН ОКСИГЕНАТТАРДЫҢ ТИІМДІЛІГІ.....	127

Д.Ж. Калиманова, А.К. Мендигалиева, А.Б. Медетова, О.С. Сембай ХИМИЯ САБАҚТАРЫНДА ЭЛЕКТРОНДЫҚ БІЛІМ РЕСУРСТАРЫН, ОЙЫН ТЕХНОЛОГИЯЛАРЫН ПАЙДАЛАНЫП ОҚУШЫЛАРДЫҢ НӘТИЖЕЛЕРІН ЖИЫНТЫҚ БАҒАЛАУ.....	140
Л.М. Калимолдина, Г.С. Султангазиева, С.О. Абилкасова АЛМАТЫ ҚАЛАСЫНЫҢ СУ РЕСУРСТАРЫНЫҢ ХИМИЯЛЫҚ ЗАТТАРМЕН ЛАСТАНУ ДЕҢГЕЙІН ЗЕРТТЕУ.....	152
Б.К. Кенжалиев, А.К. Койжанова, М.Б. Ерденова, Д.Р. Магомедов, К.М. Смаилов ҮЙІНДІ КЕНДЕРДЕН МЫС АЛУДЫ БИОХИМИЯЛЫҚ ЖӘНЕ ХИМИЯЛЫҚ ТОТЫҚТЫРУ ӘДІСТЕРІМЕН ОҢТАЙЛАНДЫРУ.....	167
Г.М. Мадыбекова, Т.Т. Туребаева, Б.Ж. Муталиева, Д.М. Лесбекова, А.Б. Исаева БЕЛСЕНДІ АГЕНТТЕРДІ ЖЕТКІЗУ ҮШІН МИКРОКАПСУЛЯЦИЯЛЫҚ ӘДІСТЕРДІ ҚОЛДАНУДЫҢ АРТЫҚШЫЛЫҚТАРЫ МЕН ПОЦЕНЦИАЛЫ: ШОЛУ.....	183
Б.К. Масалимова, Б. Джанекова, С.М. Наурызкулова NI-RU ҚҰРАМДЫ КҮРДЕЛІ ОКСИДТЕРГЕ НЕГІЗДЕЛГЕН КОМПОЗИТТЕР ҚҰРАМЫН ЭНЕРГОДИСПЕРСТІ СПЕКТРОСКОПИЯ ӘДІСІМЕН САНДЫҚ ХИМИЯЛЫҚ ТАЛДАУ.....	198
С. Тұрғанбай, А.И. Ильин, Д.А. Аскарова, А.Б. Джумагазиева, З.С. Ашимханова ӨРТҮРЛІ СҮЙЫЛТУЛАРДАҒЫ АФС ЕРІТІНДІЛЕРІНДЕГІ ФИЗИКА- ХИМИЯЛЫҚ ТЕПЕ-ТЕНДІКТІ ЗЕРТТЕУ.....	209
А.М. Усербаева, Р.Г. Рыскалиева ХИМИЯ ПӘНІНЕН ОҚУ-ӘДІСТЕМЕЛІК КЕШЕН ҚҰРАСТЫРУДЫҢ ҒЫЛЫМИ ПЕДАГОГИКАЛЫҚ НЕГІЗДЕРІ.....	228
С.Д. Фазылов, О.А. Нұркенов, Ж.С. Нұрмағанбетов, Р.Е. Бәкірова, М.Ж. Жұрынов ЦИКЛОДЕКСТРИНДЕР ХИМИЯЛЫҚ ҚОСЫЛЫСТАРДЫҢ СУПРАМОЛЕКУЛАЛЫҚ КОНТЕЙНЕРЛЕРІ РЕТІНДЕ.....	241

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

М.Б. Альбатырова, А.Ж. Алибек, А.С. Жетписбаева МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ PYTON.....	7
Н. Бейсен, Э. Кеведо, С. Токтарбай, М. Жакипова, М. Алимкулова СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ КРИВИЗНЫ Q-МЕТРИКИ.....	17
Г. Бекетова, Н. Жантурина, З. Аймаганбетова, А. Бекешев ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВОЙНЫХ ГАЛОИДНЫХ ПЕРОВСКИТОВ НА ОСНОВЕ ЦЕЗИЯ.....	31
С.Б. Дубовиченко, Н.А. Буркова, А.С. Ткаченко, Д.М. Зазулин ПОЛНЫЕ СЕЧЕНИЯ И СКОРОСТЬ РАДИАЦИОННОГО $n^{12}\text{C}$ ЗАХВАТА.....	43
А. Касымов, А. Адылканова, А. Бектемисов, К. Астемесова, Г. Турлыбекова ИССЛЕДОВАНИЕ ВЯЗКОСТНЫХ СВОЙСТВ ГИБРИДНОЙ НАНОЖИДКОСТИ $\text{TiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ НА ОСНОВЕ БИДИСТИЛЛИРОВАННОЙ ВОДЫ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ГИБРИДНОМ СОЛНЕЧНОМ КОЛЛЕКТОРЕ.....	52
А.Е. Кемелбекова, Д.М. Мухамедшина, К.А. Мить, Р.С. Мендыханов, К.К. Елемесов СОЗДАТЬ И ИССЛЕДОВАТЬ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СТРУКТУРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ.....	63
Е.Т. Кожагулов, Д.М. Жексебай, С.А. Сарманбетов, Н.М. Усипов, К.Т. Копбай ИДЕНТИФИКАЦИЯ ЦИФРОВОЙ МОДУЛЯЦИИ НА ОСНОВЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ ЭНТРОПИИ.....	73
Е.М. Мырзакулов, А.С. Буланбаева РЕШЕНИЯ РЕГУЛЯРНОЙ ЧЕРНОЙ ДЫРЫ И ИХ ТЕРМОДИНАМИКА.....	84
Д.М. Насирова, В.О. Курмангалиева, А.А. Газизова ИСТОЧНИКИ ЭНЕРГИИ В КОМПАКТНЫХ ЗВЕЗДАХ.....	95
А. Серебрянский, А. Халикова ПОИСК ПЕРЕМЕННЫХ ЗВЕЗД В МОНИТОРИНГОВЫХ И ОБЗОРНЫХ ФОТОМЕТРИЧЕСКИХ НАБЛЮДЕНИЯХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ.....	103

ХИМИЯ

Б.С. Абжалов, А.Б. Башов, А.К. Мамырбекова, С.А. Джумадуллаева, М.О. Алтынбекова ВЛИЯНИЕ ЧАСТОТЫ И ПЛОТНОСТИ ПЕРЕМЕННОГО ТОКА НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВИСМУТОВОГО ЭЛЕКТРОДА В КИСЛОЙ СРЕДЕ.....	116
Е.Г. Гиладжов, Д.К. Кулбатыров, М.Д. Уразгалиева, К.Р. Мақсот ЭФФЕКТИВНОСТИ ОКСИГЕНАТОВ НА ПОВЫШЕНИЕ ОКТАНОВОГО ЧИСЛА ПРЯМОГОННОГО БЕНЗИНА.....	127

Д.Ж. Калиманова, А.К. Мендигалиева, А.Б. Медетова, О.С. Сембай СУММАТИВНОЕ ОЦЕНИВАНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ УЧАЩИХСЯ НА УРОКАХ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ, ИГРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ.....	140
Л.М. Калимолдина, Г.С. Султангазиева, С.О.Абилкасова ИССЛЕДОВАНИЕ УРОВНЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ХИМИЧЕСКИМИ ВЕЩЕСТВАМИ ВОДНЫХ РЕСУРСОВ ГОРОДА АЛМАТЫ.....	152
Б.К. Кенжалиев, А.К. Койжанова, М.Б. Ерденова, Д.Р. Магомедов, К.М. Смаилов ОПТИМИЗАЦИЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ МЕДИ ИЗ ОТВАЛЬНЫХ РУД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ БИОХИМИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ОКИСЛЕНИЯ.....	167
Г.М. Мадыбекова, Т.Т. Туребаева, Б.Ж. Муталиева, Д.М. Лесбекова, А.Б. Исаева ПРЕИМУЩЕСТВА И ПОТЕНЦИАЛ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДОВ МИКРОКАПСУЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ДОСТАВКИ АКТИВНЫХ АГЕНТОВ: ОБЗ ОР.....	183
Б.К. Масалимова, Б. Джанекова, С.М. Наурзкулова КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СОСТАВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ NI-RU – СОДЕРЖАЩИХ СЛОЖНЫХ ОКСИДОВ МЕТОДОМ ЭНЕРГОДИСПЕРСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.....	198
С. Тұрғанбай, А.И. Ильин, Д.А. Аскарова, А.Б. Джумагазиева, З.С. Ашимханова ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ В РАСТВОРАХ АФС ПРИ РАЗЛИЧНЫХ РАЗВЕДЕНИЯХ.....	209
А.М. Усербаева, Р.Г. Рыскалиева НАУЧНО – ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОСТАВЛЕНИЯ УЧЕБНО- МЕТОДИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ПО ХИМИИ.....	228
С.Д. Фазылов, О.А. Нуркенов, Ж.С. Нурмаганбетов, Р.Е. Бакирова, М.Ж. Журинов ЦИКЛОДЕКСТРИНЫ КАК СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОНТЕЙНЕРЫ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ.....	241

CONTENTS

PHYSICAL

M.B. Albatyrova, A.Zh. Alibek, A.S. Zhetpisbayeva MODELING PHYSICAL PHENOMENA USING PYTHON.....	7
N. Beissen, H. Quevedo, S. Toktarbay, M. Zhakipova, M. Alimkulova CURVATURE EIGENVALUES OF THE Q-METRIC.....	17
G. Beketova, N. Zhanturina, Z. Aimaganbetova, A. Bekeshev OPTICAL PROPERTIES OF DOUBLE HALIDE PEROVSKITES BASED ON CESIUM.....	31
S.B. Dubovichenko, N.A. Burkova, A.S. Tkachenko, D.M. Zazulin TOTAL CROSS-SECTIONS AND RATE OF $n^{12}\text{C}$ RADIATIVE CAPTURE.....	43
A. Kassymov, A. Adylkanova, A. Bektemissov, K. Astemessova, G. Turlybekova INVESTIGATION OF VISCOSITY PROPERTIES OF $\text{TiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ HYBRID NANOFLUID BASED ON BIDISTILLED WATER FOR USE IN A HYBRID SOLAR COLLECTOR.....	52
A.E. Kemelbekova, D.M. Mukhamedshina, K.A. Mit', R.S. Mendykanov, A.K. Shongalova CREATING AND RESEARCH ON PHOTSENSITIVE STRUCTURES USING RARE EARTH METALS.....	63
Y.T. Kozhagulov, D.M. Zhexebay, S.A. Sarmanbetov, N.M. Ussipov, K.T. Kopbay IDENTIFICATION OF DIGITAL MODULATION BASED ON INFORMATIONAL ENTROPY.....	73
Y. Myrzakulov, A. Bulanbayeva A REGULAR BLACK HOLE SOLUTIONS AND THEIR THERMODYNAMICS.....	84
D.M. Nassirova, V.O. Kurmangaliyeva, A.A. Gazizova SOURCES OF ENERGY IN COMPACT STARS.....	95
A. Serebryanskiy, A. Khalikova SEARCH FOR VARIABLE STARS IN MONITORING AND SURVEY PHOTO- METRIC OBSERVATIONS USING MACHINE LEARNING METHODS.....	103

CHEMISTRY

B.S. Abzhalov, A.B. Bayeshov, A.K. Mamyrbekova, S.A. Dzhumadullayeva, M.O. Altynbekova INFLUENCE OF AC FREQUENCY AND DENSITY ON THE ELECTROCHEMI- CAL BEHAVIOR OF BISMUTH ELECTRODE IN AN ACID MEDIUM.....	116
Y.G. Gilazhov, D.K. Kulbatyrov, M.D. Urazgalieva, K.R. Maksot EFFICIENCY OF OXYGENATES ON INCREASE OF OCTANE NUMBER OF STRAIGHT-RUN GASOLINE.....	127
D. Zh. Kalimanova, A. K. Mendigaliyeva, A.B. Medetova, O.S. Sembay SUMMATIVE ASSESSMENT OF STUDENTS' RESULTS IN CHEMISTRY LESSONS USING ELECTRONIC EDUCATIONAL RESOURCES, GAME	

TECHNOLOGIES.....	140
L.M. Kalimoldina, G.S. Sultangazieva, S.O. Abilkasova STUDY OF CHEMICAL POLLUTION LEVEL IN WATER RESOURCES OF ALMATY CITY.....	152
B.K. Kenzhaliev, A.K. Koizhanova, M.B. Yerdenova, D.R. Magomedov, K.M. Smailov OPTIMIZATION OF COPPER EXTRACTION FROM WASTE ORES USING BIOCHEMICAL AND CHEMICAL OXIDATION METHODS.....	167
G.M. Madybekova, T.T. Turebayeva, B.Zh. Mutaliev, D.M. Lesbekova, A.B. Issayeva ADVANTAGES AND POTENTIAL OF USING MICROCAPSULATION METHODS FOR DELIVERY OF ACTIVE AGENTS: A REVIEW.....	183
B.K. Massalimova, B. Janekova, S.M. Naurzkulova QUANTITATIVE CHEMICAL ANALYSIS OF THE COMPOSITION OF COMPOSITES BASED ON NI-RU-CONTAINING COMPLEX OXIDES BY ENERGY-DISPERSED SPECTROSCOPY.....	198
S. Turganbay, A.I. Ilin, D. Askarova, A.B. Jumagaziyeva, Z. Ashimkhanova STUDY OF PHYSICOCHEMICAL EQUILIBRIA IN API SOLUTIONS AT DIFFERENT DILUTIONS.....	209
A.M. Userbayeva, R.G. Ryskaliyeva SCIENTIFIC AND PEDAGOGICAL FOUNDATIONS OF THE PREPARATION OF AN EDUCATIONAL AND METHODOLOGICAL COMPLEX IN CHEMISTRY.....	228
S.D. Fazylov, O.A. Nurkenov, Zh.S. Nurmaganbetov, R.E. Bakirova, M.J. Jurinov CYCLODEXTRINS AS SUPRAMOLECULAR CONTAINERS OF CHEMICAL COMPOUNDS.....	241

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](http://www.nauka-nanrk.kz)

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

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

Подписано в печать 15.06.2024.

Формат 60x88^{1/8}. Бумага офсетная. Печать - ризограф.

19,0 п.л. Тираж 300. Заказ 2.