



ХҒТАР 29.19.22; 29.19.04

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-100-112>

Ғылыми мақала

Хлоридіндегі гидроний иондарының динамикасына атомдық түсініктер және отын ұяшықтарын қолдану үшін декан қышқылы негізіндегі терең эвтектикалық еріткіш

Г.Д. Кабдрахимова^{ID}, А.У. Абуова^{ID}, Б.М. Сатанова^{ID}, Н.С. Солтанбек^{ID}, А.А. Темирбаева^{ID},
Үсен Е.Б.^{ID}, Ф.У. Абуова^{ID}

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

(E-mail: aisulu-us1980@yandex.kz)

Аңдатпа. Протон алмасу мембраналық отын жасушалары жоғары тұрақты, арзан және экологиялық таза протон өткізетін орталарды қажет етеді. Дегенмен, дәстүрлі протон өткізетін электролиттер сусыз немесе ылғалдылығы төмен ортада шектеулі термиялық тұрақтылық және протонның қозғалғыштығын төмендету сияқты қиындықтарға тап болады. Бұл зерттеуде гидроний иондарын тасымалдау үшін ықтимал балама орта ретінде холин хлориді және декан қышқылы негізіндегі терең эвтектикалық еріткіштерді қарастырамыз. Дисперсиялық түзетуі бар тығыздық функционалдық теориясы есептеулері терең эвтектикалық еріткіштердің құрылымдарын гидроний ионы жоқ және бар болған кезде оңтайландыру үшін қолданылды, олардың құрылымдық және электрондық қасиеттері туралы нақты ақпарат береді. Оңтайландырылған геометриялар холин хлориді және декан қышқылы арасындағы сутектік байланыс желілерін көрсетеді, олар гидроний ионын біріктірген кезде одан әрі реттеледі. Молекулярлық электростатикалық потенциалды карталау тиімді протонды байланыстыратын аймақтарды анықтайды, ал шекаралық молекулалық орбитальды зерттеу гидроний иондарының өзара әрекеттесуінен туындаған электрондық таралу мен тұрақтылықтың өзгерістерін анықтайды. Нәтижелер холин хлориді және декан қышқылы матрицасы күшті сутегі байланысы арқылы гидроний иондарын тұрақтандырып, протонның тасымалдануын жақсартатынын көрсетеді. Бұл жұмыс еріткіш-гидроний өзара әрекеттесулері туралы атомдық деңгейде білім береді, отын элементтерін қолдану үшін арнайы терең эвтектикалық еріткіштердің негізіндегі электролиттерді ұтымды жобалау үшін негіз қалады және болашақ зерттеулерді эксперименттік тексеруге және протон алмасу мембраналық отын жасушалары жүйелеріне біріктіруге бағыттайды.

Түйін сөздер: гидроний ионы; терең эвтектикалық ерітінді; холин хлориді; декан қышқылы; отын элементтері

Жіберілді 20.08.2025. Өзгертілді 03.09.2025. Қабылданды 05.09.2025. Онлайн қол жетімді 30.09.2025.

¹*хат-хабар авторы

Кіріспе

Протон алмасу мембраналық отын жасушалары жоғары тиімділікпен, төмен шығарындылармен және портативті электрониканы, тасымалдауды және стационарлық электр энергиясын өндіруді қоса алғанда, кең ауқымды қолданбаларға жарамдылығы бар перспективалы тұрақты энергия технологиясы ретінде пайда болды [1]. Протон өткізгіш электролит протон алмасу мембраналық отын жасушалары жұмыс істеуі үшін өте маңызды, өйткені ол протондардың анодтан катодқа өтуіне мүмкіндік береді, сонымен қатар жанармайдың өтуіне жол бермеу үшін физикалық кедергі ретінде әрекет етеді. Дәстүрлі электролиттер, мысалы, перфторсульфон қышқылының полимерлері (мысалы, Нафийон) толығымен гидратталған кезде тамаша протон өткізгіштікке ие; дегенмен, олар төмен ылғалдылықта төмен өткізгіштікке, шектеулі термиялық тұрақтылыққа және жоғары өндірістік шығындарға ие [2-4]. Бұл кемшіліктер арзан, термиялық төзімді және экологиялық таза балама протон өткізетін орталарды іздеуге түрткі болды.

Жасыл еріткіштердің жаңа класы ретінде алғаш рет сипатталған терең эвтектикалық еріткіштер соңғы жылдары әдеттен тыс физикалық-химиялық ерекшеліктеріне, соның ішінде төмен ұшқыштыққа, тамаша термиялық тұрақтылыққа, ауыспалы тұтқырлыққа және кең электрохимиялық тұрақтылық терезелеріне байланысты көп көңіл бөлді [5]. Терең эвтектикалық еріткіштер сутегі байланысының акцепторын және сутегі байланысының донорын белгілі бір молярлық қатынаста араластыру арқылы түзіледі және сутегі байланысының қарқынды әрекеттесуіне байланысты олардың жеке компоненттеріне қарағанда балқу температурасы айтарлықтай төмен. Холин хлориді негізіндегі комбинациялар биодырату қабілетіне, төмен уыттылығына және кең таралған қолжетімділігіне байланысты терең эвтектикалық еріткіштер жүйелері арасында ерекше қызықты.

Холин хлорид және декан қышқылы сияқты ұзын тізбекті май қышқылдарынан алынғандар сияқты гидрофобты терең эвтектикалық еріткіштердің электрохимиялық қолданбаларға қосымша артықшылықтар береді, соның ішінде ылғалды ортада жақсартылған тұрақтылық пен суды сіңіруді азайту, бұл белгілі бір отын ұяшықтарының конфигурацияларында өнімділіктің төмендеуін азайтуға көмектеседі [6]. Алайда, мұндай терең эвтектикалық еріткіштердің протон өткізгіш электролиттер ретінде, әсіресе гидроний иондарын тасымалдау арқылы жұмыс істеу қабілеті негізінен атом деңгейінде зерттелмеген. Гидрий иондарының терең эвтектикалық еріткіштер матрицасымен қалай әрекеттесетінін түсіну олардың протон алмасу мембраналық отын қолданбалары үшін орындылығын анықтауда өте маңызды.

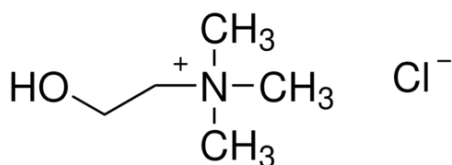
Есептеу әдістері, әсіресе тығыздық функционалдық теориясы есептеулері, терең эвтектикалық еріткіштер жүйелерінің құрылымдық, кинетикалық және электрлік аспектілерін молекулалық деңгейде зерттеудің тиімді құралы болып табылады [7]. Оңтайландырылған құрылымды анықтау, молекулалық электростатикалық потенциалды талдау және шекаралық молекулалық орбиталды карталау гидроний иондары бар және онсыз терең эвтектикалық еріткіштердегі сутегі байланысының, зарядтың таралуының және электрондық ауысулардың табиғаты туралы терең түсінік береді.

Мұндай нәтижелер терең эвтектикалық еріткіштер ортасының гидроний ионының тұрақтылығы мен қозғалғыштығына қалай әсер ететінін түсіндіре алады, олардың екеуі де протонды өткізу үшін өте маңызды.

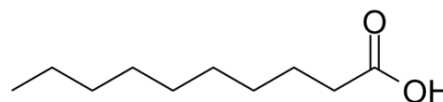
Бұл мақалада біз гидроний ионы жоқ және бар болған кезде холин хлорид және декан қышқылы терең эвтектикалық еріткіштің протон өткізгіштігімен байланысты құрылымдық және электрондық қасиеттерін түсіндіру мақсатында жүйелі тығыздық функционалдық теориясы негізіндегі зерттеу туралы хабарлаймыз. Терең эвтектикалық еріткіш желісін өзгертуге гидроний иондарының қатысуын анықтау үшін оңтайландырылған геометриялар, сутегі байланысының үлгілері, молекулалық электростатикалық потенциалдар карталары және молекулалық орбиталық үлестірімдері зерттеледі. Біздің нәтижелер гидрофобты терең эвтектикалық еріткіш ішіндегі гидроний ионының динамикасы туралы іргелі білім беріп қана қоймайды, сонымен қатар отын ұяшықтарын пайдалану үшін оңтайландырылған терең эвтектикалық еріткіш негізіндегі электролиттерді ұтымды жобалау үшін нұсқаулар береді. Бұл жаңалық тәжірибелік зерттеулер мен осы материалдарды келесі ұрпақтың протон алмасу мембраналық отын жасушалары жүйелеріне енгізу үшін негізді белгілейді.

Әдіснама

Композициялық материалдың репрезентативті моделі ретінде терең эвтектикалық еріткіштердің комбинациясы алынды, холин хлориды, декан қышқылы, су және гидроний ионы 1-суретте көрсетілгендей РЕМ репрезентативті моделі ретінде алынды [8-10].



Холин хлорид



Декан қышқылы

Сурет 1. Холин хлорид және декан қышқылының 2D структурасы.

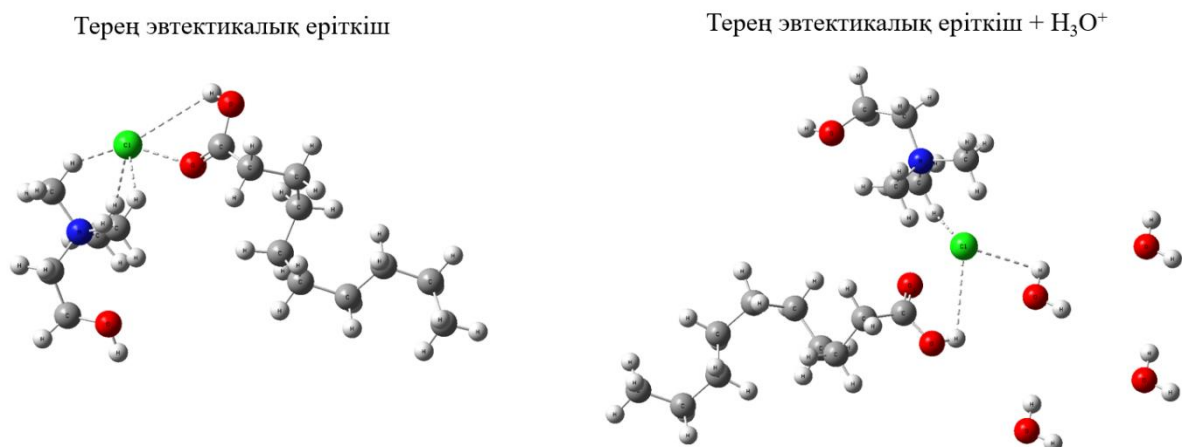
Холин хлоридінің (ChCl) және декан қышқылының (DA) молекулалық құрылымдары 1-суретте көрсетілгендей, бастапқыда олардың белгілі химиялық конфигурациялары арқылы жасалды. Барлық кванттық химия есептеулері теорияның B3LYP деңгейінде 6-311p)+G(қойылған) негізінде тығыздықтың функционалдық теориясы (DFT) көмегімен орындалды. Осы мақалада қолданылған функционал мен базис сет бұрындары біздің басқа да есептерімізде органикалық молекулалардың оптимизациясын жасауда есепті нақты шығаруға көмектесті [3-5]. Осы мақаланың есебінде де органикалық молекула қолданылғандықтан осы бір базис пен функционал тандалды. Бұл есептеу тәсілі сутегі байланысын, диполь-диполь әрекеттесулерін және терең эвтектикалық еріткіштерді (DES) өндіруде және тұрақтылығында маңызды болып табылатын басқа әлсіз молекулааралық күштерді тиімді сипаттау мүмкіндігіне байланысты тандалды.

Жасырын еріткіш модельдердің әсерінен толық оңтайландырылған геометрияларға қол жеткізу үшін барлық есептеулер газ фазасында орындалды. Геометрияны оңтайландыру энергия мен градиенттер үшін конвергенция шарттары орындалғанға дейін жүргізілді. Әрбір оңтайлы конфигурация үшін ықтимал сутегі байланысының учаскелерін анықтауға мүмкіндік беретін электронға бай және электронға тапшы аймақтарды көрсету үшін молекулалық электростатикалық потенциал (МЭП) карталары жасалды. Гидроний иондарының қосылуынан туындаған электрондық құрылымдық өзгерістерді түсінуге мүмкіндік беретін шекаралық молекулалық орбиталь (FMO) талдауы арқылы ең жоғары орналасқан молекулалық орбиталь (HOMO) және ең төменгі бос молекулалық орбиталь (LUMO) таралулары мен энергия аралықтары анықталды. Екі жүйе зерттелді: (i) оңтайландырылған ChCl-DA DES және (ii) гидроний ионының айқын қосылған бірдей DES. Екі жүйенің салыстырмалы сараптамасы гидроний ионынан туындаған құрылымдық қайта құруларды, сутектік байланыс үлгілерін және электрондық меншік өзгерістерін бағалауға мүмкіндік берді. Бұл нәтижелер гидрофобты DES негізіндегі электролиттерде гидроний ионының тұрақтылығын және потенциалды протонды тасымалдауды басқаратын атомдық механизмдерді түсінуге негіз береді.

Нәтижелер мен талқылау

2-суретте B3LYP/6-311+G(d,p) теория деңгейіндегі DFT есептеулеріне негізделген гидроний ионының (H_3O^+) жоқ (сол жақта) және қатысуындағы (оң жақта) холинхлорид-декан қышқылының (ChCl-DA) терең эвтектикалық еріткішінің (DES) оңтайлы геометриялары көрсетілген. Нәтижелер DES құрылымын тұрақтандырудағы сутегі байланысының маңыздылығын, сондай-ақ гидроний иондарының қосылуынан туындаған қосымша құрылымдық қайта құруды анық көрсетеді.

Холин хлорид және декан қышқылы

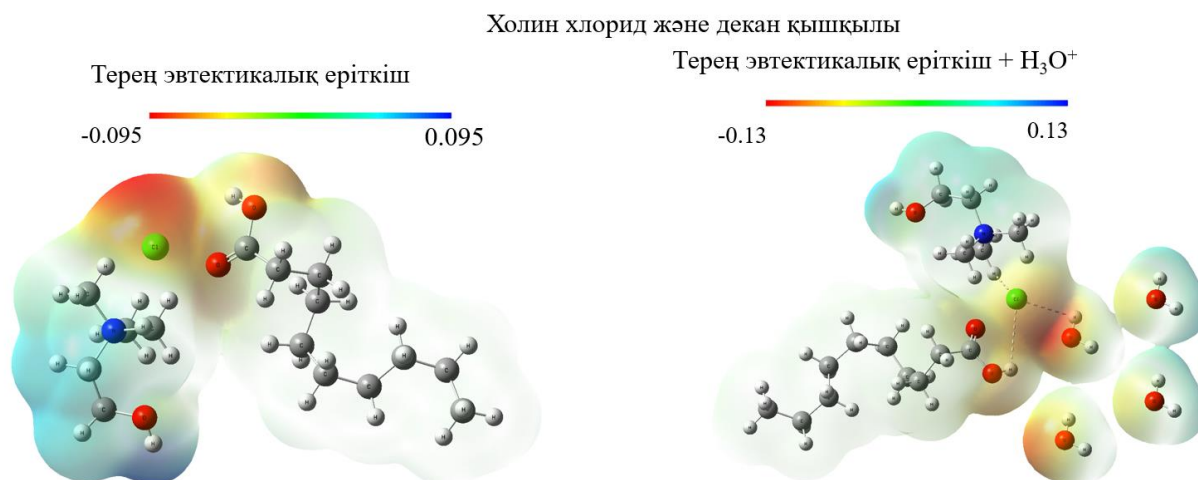


Сурет 2. Холин хлорид және декан қышқылының оптимизацияланған структурасы. Түстердің сипаттамасы: ақ (сутегі); сұр (көміртегі); қызыл (оттегі); көк (азот); жасыл (хлор).

Гидрийсіз (H_3O^+) DES-те хлорид анионы холиннің гидроксил тобымен де, декан қышқылының карбон қышқылы тобымен де қатынасатын негізгі сутегі байланысының акцепторы ретінде әрекет етеді. Бұл өзара әрекеттесу кең көлемді сутегімен байланысқан желіні құруға ықпал ету арқылы DES-тің балқу нүктесінің айтарлықтай төмендеуіне әкеледі. Молекулалық орналасу күшті ион-диполь және диполь-диполь күштерін көрсетеді, олар DES термодинамикалық тұрақтылығы үшін қажет.

Гидрий ионының қосылуы айтарлықтай құрылымдық өзгерістерді тудырады. H_3O^+ түрлері декан қышқылының молекулаларынан хлорид ионымен және оттегі атомдарымен сутегі-байланыс желісіне тиімді интеграцияланатын бірнеше сутегі байланыстарын құрайды. Бұл қосу DA тізбектерінің бағдарын аздап өзгертеді және хлорид орталығының айналасындағы жергілікті геометрияны өзгертеді. Сутегі байланыстарының жоғарылауы DES матрицасында протонды тұрақтандыруды күшейтеді деп күтілуде.

Бұл құрылымдық өзгерістер молекулалық электростатикалық потенциалды (МЭП) зерттеумен расталады, бұл гидроний ионының және жақын донорлық учаскелердің жанында оң потенциалды аймақтардың жоғарылауын көрсетеді. Сонымен қатар, шекаралық молекулярлық орбиталық (HOMO-LUMO) үлестірімдері гидроний иондарын қоса алғанда, жүйенің электронды түрде поляризациялануы мүмкін екенін білдіретін энергетикалық алшақтықты біршама азайтатынын көрсетеді. Белгілі бір операциялық жағдайларда бұл модификация протонды секіруге немесе Гроттусс түріндегі тасымалдауға мүмкіндік береді.



Сурет 3. Холин хлорид және декан қышқылының молекулалық электростатикалық потенциалдар картасы.

3-суретте гидроний ионының (H_3O^+) жоқтығында (сол жақта) және (оң жақта) холинхлорид-декан қышқылы (ChCl-DA) терең эвтектикалық еріткіш (DES) үшін молекулалық электростатикалық потенциал (МЭП) карталары көрсетілген, B3LYP/6-311+G(d) есептеулер негізінде. MEP визуализациясы электрофильді және нуклеофильді әрекеттесулерге бейім аймақтарды көрсете отырып, DES жүйесінің зарядтың таралуы мен реактивті учаскелеріне жарық түсіреді.

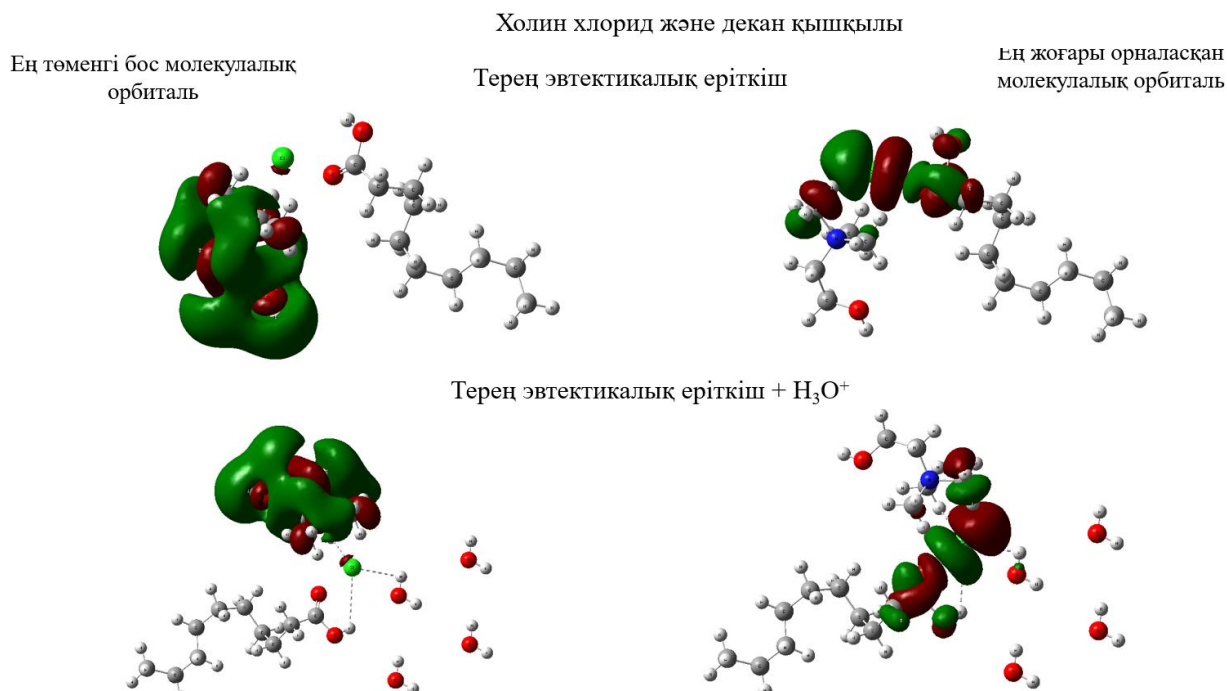
Гидрийсіз DES-те хлорид ионының ең күшті теріс потенциалы бар, бұл оның протон донорларымен сутегі байланыстарын құру қабілетін көрсететін терең қызыл аймақ (мәні

~-0,095 а.у.) арқылы көрінеді. Холиннің гидроксил тобы мен декан қышқылының карбоксил тобының сутегі байланысын жеткізуші ретіндегі белсенділігіне сәйкес келетін локализацияланған оң әлеуеті бар (көк). Жалпы карта полярлық және полярлық емес домендердің теңдестірілген таралуын көрсетеді, бұл DES амфифилді табиғатын қолдайды.

H_3O^+ қосу электростатикалық потенциал диапазонын кеңейтеді, максималды теріс потенциал шамамен -0,13 а.у. гидроний мен декан қышқылының хлорид ионын және оттегі атомдарын қоршап алады. Бұл күшейту локализацияланған электрон тығыздығының жоғарылауын білдіреді, бұл сутегі байланысының өзара әрекеттесуін арттырады. Гидрий ионы қуатты протон донорлары ретінде жұмыс істейтін оның үш сутегі атомына сәйкес келетін көптеген қарқынды оң потенциалдық учаскелерді (көк) енгізеді. Бұл аймақтар DES ішінде көбірек сутегі байланысына ықпал етеді, нәтижесінде сутегі байланысының тығыз және байланыс желісі пайда болады.

Электростатикалық потенциалдағы мұндай өзгерістер протонды тасымалдау үшін өте маңызды. Құрамында H_3O^+ бар DES күшейтілген полярлығы және локализацияланған зарядты бөлу Grothuss механизмі арқылы протонның секіруін жақсарту арқылы отын ұяшықтарының электролит жағдайында өткізгіштікті жақсартуы мүмкін. Нәтижесінде, МЕР талдауы гидроний ионының қосылуы тек геометрияны өзгертіп қана қоймай, сонымен қатар электрохимиялық өнімділікті жақсартуға мүмкіндік беретін электронды ландшафтты айтарлықтай өзгертетінін көрсететін құрылымдық деректерді растайды.

Сонымен қатар зарядтардың таралу картасы 3 суретте электростатикалық потенциалдар картасы арқылы бейнеленді. Нақтырақ айтқанда теріз зарядтар қызыл түсте, оң зарядтар көк түсте бейнеленген.



Сурет 4. Холин хлорид және декан қышқылының ең төменгі бос молекулалық орбиталы және де ең жоғарғы орналасқан молекулалық орбиталы. Қызыл және де жасыл изосурфейс молекула орбитальдарының орналасатын орындарын бейнелейді.

4-суретте гидроний ионының (H_3O^+) болмаған (жоғарғы) және (төменгі) жағындағы холинхлорид-декан қышқылы (ChCl-DA) терең эвтектикалық еріткіш (DES) үшін HOMO және LUMO үлестірімдері көрсетілген. Шекаралық молекулярлық орбитальды (FMO) талдау DES жүйесінің электрондық құрылымы мен реактивтілігін, әсіресе протонды тасымалдау және электрохимиялық тұрақтылық тұрғысынан жарықтандырады.

Гидрийсіз DES-де HOMO тығыздығы негізінен декан қышқылының хлорид иондары мен оттегі атомдарына шоғырланған. Бұл бұл орындардың химиялық әрекеттесулерде бастапқы электрон донорлары ретінде қызмет ететінін көрсетеді. Керісінше, LUMO негізінен холиннің гидроксил тобына және декан қышқылы тізбегінің бөліктеріне таралады, бұл ықтимал электронды акцепторлық учаскелерді көрсетеді. Бұл конфигурациядағы есептелген HOMO-LUMO аралығы өзгермеген DES-тің өткізбейтін табиғатына сәйкес келетін электр тұрақтылығының қарапайым деңгейін көрсетеді.

Гидроний ионы болған кезде орбиталық таралулар күрт өзгереді. HOMO электртеріс орталықтардың (хлорид және оттегі атомдары) айналасында шоғырланған күйінде қалады, бірақ гидроний түрлерінің жанында жоғары тығыздық пайда болады, бұл сол аймақта үлкен электрон беру мүмкіндігін білдіреді. LUMO дистрибуциясы гидроний ионын және басқа DES компоненттерін қамтитын үлкенірек молекулалық аймаққа кеңейе отырып, ауысады. Бұл кеңейтілген LUMO қамтуы зарядты тасымалдау процестеріне көмектесуі мүмкін үлкен электронды делокализацияны көрсетеді.

H_3O^+ болуы HOMO-LUMO аралығының аздап қысқаруын тудырады, бұл молекуланың поляризациялану қабілетінің жоғарылауын және Гроттусс механизмі сияқты протон өткізгіштік әдістерінің ықтимал күшеюін көрсетеді. Электрондық құрылымдағы бұл өзгеріс MEP талдауынан сутегі-байланыс тығыздығының хабарланған өсуіне сәйкес келеді, бұл протонның қозғалғыштығының жоғарылауын көрсетеді.

Осылайша, FMO талдауы гидроний қосындысы DES геометриясын және электростатикалық потенциалын өзгертіп қана қоймайды, сонымен қатар оның электрлік сипаттамаларын жақсартады, бұл оның протон алмасу мембранасының отын ұяшықтарын қолдану үшін қолайлы екенін көрсетеді.

Қорытынды

Бұл зерттеу гидроний иондарының холинхлорид-декан қышқылымен терең эвтектикалық еріткішпен әрекеттесуіне атомдық түсінік береді, оның отын ұяшықтарын қолдану үшін протон өткізгіш орта ретіндегі әлеуетін көрсетеді. Дисперсиялық түзетулермен тығыздықтың функционалдық теориясын пайдалана отырып, біз гидроний ионының жоқтығы мен бар болуы кезіндегі терең эвтектикалық еріткішпен геометриясын оңтайландырдық, бұл протонның қосылуынан туындаған құрылымдық қайта құруды тікелей салыстыруға мүмкіндік берді. Нәтижелер гидроний ионының терең эвтектикалық еріткішпен желісіне холин хлоридімен де, декан қышқылымен де күшті сутегі-байланыс әрекеттесуі арқылы біріктірілетінін көрсетті, нәтижесінде молекуланың бағдары мен байланыс ұзындығында шамалы өзгерістер болды.

Молекулалық электростатикалық потенциалды картаға түсіру гидроний ионының құрылымдық тұрақтануын қолдайтын терең эвтектикалық еріткішпен протонға

жақындығы жоғары аймақтарды анықтады. Ең жоғары орналасқан молекулалық орбиталь және ең төменгі бос молекулалық орбиталь таралуларын талдау гидроний ионының қосылуы тұрақтылыққа да, протонның қозғалғыштығына да әсер ететін электрондық құрылымға әсер ететінін көрсетті. Бұл қорытындылар холинхлорид-декан қышқылымен терең эвтектикалық еріткішпен гидроний ионын тұрақтандыру үшін оңтайлы ортаны қамтамасыз ететінін көрсетеді, бұл протон алмасу мембраналық отын жасушалары электролиттерінде сәтті протонды өткізу үшін қажет.

Бұл есептеу талдауы терең эвтектикалық еріткішпен гидроний өзара әрекеттесулері туралы іргелі түсінікті қамтамасыз еткенімен, болашақ зерттеулер протонды тасымалдау арналарын зерттеу үшін молекулалық динамикалық модельдеуге, сондай-ақ өткізгіштік, жылу тұрақтылығын және отын ұяшықтарының өнімділігін бағалау үшін эксперименталды валидацияға назар аударуы керек. Бұл біріктірілген зерттеулер келесі ұрпақ отын ұяшықтары технологиялары үшін жақсартылған протонды тасымалдау сипаттамалары бар гидрофобты терең эвтектикалық еріткіш негізіндегі электролиттерді ұтымды жобалауға жол ашады. Болашақта әртүрлі жасыл еріткіштердің полимерлермен интеграциясы нәтижесінде пайда болған мембраналардың протон өткізгіштігін есептік жолмен және де эксперименттік жолмен тексеру керек.

Алғыс айту, мүдделер қақтығысы

Бұл жұмысты Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті гранты № AP26100243 «Терең эвтектикалық еріткіштері бар металлоорганикалық рамалық-полимерлі композиттер негізінде протон алмасу мембраналарын жобалау және жасау: біріктірілген есептеу және эксперименттік зерттеу» арқылы қаржыландырылды. Авторлар осы мақалада баяндалған жұмысқа әсер етуі мүмкін белгілі бәсекелес қаржылық мүдделері немесе жеке қарым-қатынастары жоқ екенін хабарлайды.

Авторлардың қосқан үлесі

Кабдрахимова Г.Д. – мақаланың тұжырымдамасына немесе рәсімделуіне елеулі үлес, мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау;

Абуова А.У. – зерттеу нәтижелерін жинау, мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау;

Темирбаева А.А., Усен Е.Б. – алынған нәтижелерді талдау және түсіндіру;

Сатанова Б.М., Солтанбек Н.С. – жариялау үшін мақаланың соңғы нұсқасын бекіту;

Абуова Ф.У. – жұмыстың барлық аспектілері үшін жауапты болуға келісім беру, деректердің дұрыстығына және мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді зерттеу және шешу.

Әдебиеттер тізімі

1. Туребаева, П. Д., Гусляков, А. Н., Хлебников, А. И., Бефус, Е. А., Мещеряков, Е. П., Бакибаев, А. А., & Еркасов, Р. Ш. Адсорбция водяного пара бамбус урилом и исследование его аквакомплексов методом DFT (2024).

2. Исанова, М.К., Турекул, Н.А., Жиенбеков, Н.Э. ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ПЛОТНОГО РАЗОГРЕТОГО БЕРИЛЛИЯ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ, Журнал проблем эволюции открытых систем, 26(2), 37-44, 2024
3. Nurkenov, O.A., Abulyaissova, L.K., & Zhaksybayeva, G. S. Структурные и спектральные свойства хинолизидиновых алкалоидов: квантово-химические расчеты, Chemical Bulletin of Kazakh National University, 94(3), 28-36 (2019)
4. Vimukhanov, A., & Aldongarov, A. A. Сравнительное исследование DFT функционалов и базисных наборов для описания люминесцентных спектров шестикординатных комплексов кремния, Recent Contributions to Physics, 84(1), 56-64 (2023)
5. Абуова, Ф. Исследование упругих свойств кристалла Na₂SO₄-V методом DFT, BULLETIN OF THE LN GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS. ASTRONOMY SERIES, 149(4), 178-198 (2024)
6. Тыченгулова, А., & Катпаева, К. МН НЕГІЗІНДЕ ӨТПЕЛІ МЕТАЛДАР КАТАЛИЗАТОРЛАРЫНДАҒЫ ФОТОАКТИВАЦИЯНЫҢ БАСТАПҚЫ КЕЗЕҢІН ЗЕРТТЕУ, «Доклады НАН РК», 347(3), 58-70 (2023)
7. Акилбеков, А. Т., Базарбекулы, Б. А., & Сагатов, Н. Е. Первопринципные расчеты стабильности фосфидов никеля при высоких давлениях, BULLETIN OF THE LN GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS. ASTRONOMY SERIES, 132(3), 67-73 (2020)
8. Мерхатулы, Н., Искандеров, А. Н., Абеуова, С. Б., & Булумбаева, А. О. СИНТЕЗ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОПРЯЖЕННЫХ N, N-ДИФЕНИЛАНИЛИНИЛАЗУЛЕНОВ, SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY, (2), 157-168 (2025)
9. Бектенов, Н.А., Косжанова, Г.Ж. ВЕРМИКУЛИТ ЖӘНЕ ОНЫҢ НЕГІЗІНДЕ МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН СОРБЕНТТІҢ КВАНТТЫ-ХИМИЯЛЫҚ МОДЕЛІН ЕСЕПТЕУГЕ ШОЛУ, Известия НАН РК. Серия химии и технологии, (1), 33-42 (2025)
10. Usseinov, A., Koishybayeva, Z., & Akilbekov, A. Hybrid DFT of electronic and vibrational properties of iron doped B-GA₂O₃ crystals. BULLETIN OF THE LN GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS. ASTRONOMY SERIES, 144(3), 16-30 (2023)

**Г.Д. Кабдрахимова, А.У. Абуова, Б.М. Сатанова, Н.С. Солтанбек, А.А. Темирбаева, Усен Е.Б.,
Ф.У. Абуова**

*Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
(E-mail: aisulu-us1980@yandex.kz)*

Атомные концепции динамики ионов гидроксония в хлориде и глубоком эвтектическом растворителе на основе декановой кислоты для применения в топливных элементах

Аннотация. Протонообменные мембранные топливные элементы требуют высокопрочных, недорогих и экологически чистых протонопроницаемых сред. Однако традиционные протон-проводящие электролиты сталкиваются с такими проблемами, как ограниченная термическая стабильность и снижение подвижности протонов в безводной среде или среде с низкой влажностью. В этом исследовании мы рассматриваем глубокие эвтектические растворители на основе хлорида холина и декановой кислоты в качестве потенциальной альтернативной среды

для переноса ионов гидроксония. Расчеты теории функционала плотности с дисперсионной поправкой использовались для оптимизации структур глубоких эвтектических растворителей без и в присутствии Иона гидроксония, предоставляя точную информацию об их структурных и электронных свойствах. Оптимизированная геометрия показывает сети водородных связей между хлоридом холина и декановой кислотой, которые дополнительно регулируются при слиянии Иона гидроксония. Картирование молекулярного электростатического потенциала определяет области, которые эффективно связывают протоны, в то время как пограничное молекулярное орбитальное исследование выявляет изменения в распределении электронов и стабильности, вызванные взаимодействием ионов гидроксония. Результаты показывают, что матрица хлорида холина и декановой кислоты может стабилизировать ионы гидроксония за счет сильной водородной связи и улучшить транспорт протонов. Эта работа дает знания о взаимодействиях растворителя и гидроксония на атомном уровне, закладывает основу для рационального проектирования электролитов на основе специальных глубоких эвтектических растворителей для использования топливных элементов и направляет будущие исследования на экспериментальную проверку и интеграцию в протонообменные мембранные системы топливных элементов.

Ключевые слова: ион гидроксония; раствор глубокой эвтектики; хлорид холина; декановая кислота; топливные элементы.

G.D. Kabdrakhimova, A.U. Abuova, B.M. Satanova, N.S. Soltanbek, A.A. Temirbayeva, E.B. Ussen, F.U. Abuova

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

(E-mail: aisulu-us1980@yandex.kz)

Atomic Concepts of Hydroxonium Ion Dynamics in Chloride and Deep Decanoate Eutectic Solvent for Fuel Cell Applications

Abstract. Proton-exchange membrane fuel cells require high-strength, inexpensive, and environmentally friendly proton-permeable media. However, traditional proton-conducting electrolytes face problems such as limited thermal stability and reduced proton mobility in anhydrous or low-humidity environment. In this study, we consider deep eutectic solvents based on choline chloride and decanoic acid as a potential alternative medium for the transport of hydroxonium ions. Calculations of the density functional theory with dispersion correction were used to optimize the structures of deep eutectic solvents without and in the presence of hydroxonium ion, providing accurate information about their structural and electronic properties. The optimized geometry shows a network of hydrogen bonds between choline chloride and decanoic acid, which are further regulated by the fusion of the hydroxonium ion. Molecular electrostatic potential mapping identifies regions that effectively bind protons, while boundary molecular orbital investigation reveals changes in electron distribution and stability caused by the interaction of hydroxonium ions. The results show that the matrix of choline chloride and decanoic acid can stabilize hydroxonium ions due to strong hydrogen bonding and improve proton transport. This work provides knowledge about the interactions of solvent and hydroxonium

at the atomic level, lays the foundation for the rational design of electrolytes based on special deep eutectic solvents for the use of fuel cells, and directs future research towards experimental verification and integration into proton-exchange membrane systems of fuel cells.

Keywords: hydroxonium ion; deep eutectic solution; choline chloride; decanoic acid; fuel cells.

References

1. P.D. Turebayeva, A.N. Guslyakov, A.I. Khlebnikov, E.A. Befus, E.P. Meshcheryakov, A.A. Bakibayev, & R.Sh. Erkasov. Adsorbtsiya vodyanogo para bambus urilom i issledovanie ego akvakompleksov metodom DFT [Adsorption of water vapor by bamboo uril and investigation of its aqua complexes by the DFT method] (2024). [in Russian]
2. M.K. Isanova, N.A. Turekul, & N.E. Jienbekov. Issledovanie koeffitsienta diffuzii plotnogo razogretogo berylliya metodom funktsionala plotnosti [Study of the diffusion coefficient of dense heated beryllium by the density functional method], Zhurnal problem evolyutsii otkrytykh sistem [Journal of Problems of Evolution of Open Systems], 26(2), pp. 37–44 (2024). [in Russian]
3. O.A. Nurkenov, L.K. Abulyaissova, & G.S. Zhaksybayeva. Strukturnye i spektralnye svoystva khinolizidinovykh alkaloidov: kvantovo-khimicheskie raschety [Structural and spectral properties of quinolizidine alkaloids: quantum-chemical calculations], Chemical Bulletin of Kazakh National University, 94(3), pp. 28–36 (2019). [in Russian]
4. A. Bimukhanov, & A.A. Aldongarov. Srovnitelnoe issledovanie DFT funktsionalov i basisnykh naborov dlya opisaniya lyuminescentnykh spektrov shestikoordinatsionnykh kompleksov kremniya [Comparative study of DFT functionals and basis sets for describing luminescence spectra of hexacoordinated silicon complexes], Recent Contributions to Physics, 84(1), pp. 56–64 (2023). [in Russian]
5. F. Abuova. Issledovanie uprugikh svoystv kristalla Na₂SO₄-V metodom DFT [Investigation of elastic properties of Na₂SO₄-V crystal by the DFT method], Vestnik ENU im. L.N. Gumilyova. Seriya Fizika. Astronomiya [BULLETIN of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Physics. Astronomy Series], 149(4), pp. 178–198 (2024). [in Russian]
6. A. Tychengulova, & K. Katpayeva. MN negizinde otpeli metallardagy katalizatorlardagy fotoaktivatsiyanyn bastapky kezenin zertteu [Study of the initial stage of photoactivation in transition metal catalysts based on Mn], Doklady NAN RK [Reports of the NAS RK], 347(3), pp. 58–70 (2023). [in Kazakh]
7. A.T. Akilbekov, B.A. Bazarbekuly, & N.E. Sagatov. Pervoprintsipnye raschety stabilnosti fosfidov nikelya pri vysokikh davleniyakh [First-principles calculations of nickel phosphide stability under high pressures], Vestnik ENU im. L.N. Gumilyova. Seriya Fizika. Astronomiya [BULLETIN of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Physics. Astronomy Series], 132(3), pp. 67–73 (2020). [in Russian]
8. N. Merkhataly, A.N. Iskanderov, S.B. Abeuova, & A.O. Bulumbayeva. Sintez i fotofizicheskie svoystva sopryazhennykh N,N-difenilnilinilazulenov [Synthesis and photophysical properties of conjugated N,N-diphenylanilinoazulenes], Seriya Khimiya i Tekhnologiya [Series Chemistry and Technology], (2), pp. 157–168 (2025). [in Russian]
9. N.A. Bektenov, & G.Zh. Koszhanova. Vermikulit zhane onyn negizinde modifikatsiyalangan sorbenttin kvantty-khimiyalyk modelin esepteuge sholu [Review of quantum-chemical modeling of vermiculite and modified sorbents based on it], Izvestiya NAN RK. Seriya Khimii i Tekhnologii [Proceedings of the NAS RK. Series Chemistry and Technology], (1), pp. 33–42 (2025). [in Kazakh]

10. A. Usseinov, Z. Koishybayeva, & A. Akilbekov. Hybrid DFT of electronic and vibrational properties of iron-doped β -Ga₂O₃ crystals, BULLETIN of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Physics. Astronomy Series 144(3), pp. 16–30 (2023).

Авторлар туралы мәлімет:

Кабдрахимова Г.Д. – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Мұңайтпасова 13, 010000, Астана, Қазақстан

Абуова А.У. – хат-хабар авторы, PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, техникалық физика кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Мұңайтпасова 13, 010000, Астана, Қазақстан

Солтанбек Н.С. – докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының докторанты, Мұңайтпасова 13, 010000, Астана, Қазақстан

Темирбаева А.А. – Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, техникалық физика кафедрасының докторанты, Мұңайтпасова 13, 010000, Астана, Қазақстан

Үсен Е.Б. – Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының магистранты, Мұңайтпасова 13, 010000, Астана, Қазақстан

Абуова Ф.У. – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Мұңайтпасова 13, 010000, Астана, Қазақстан

Кабдрахимова Г.Д. – PhD, ассоциированный профессор кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Мунайтпасова, 13, 010000, Астана, Казахстан

Абуова А.У. – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор кафедры технической физики Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Мунайтпасова, 13, 010000, Астана, Казахстан

Солтанбек Н.С. – докторант кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Мунайтпасова, 13, 010000, Астана, Казахстан

Темирбаева А.А. – докторант кафедры технической физики Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Мунайтпасова, 13, 010000, Астана, Казахстан

Үсен Е.Б. – магистрант кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Кажымукана, 11, 010000, Астана, Казахстан

Абуова Ф. У. – PhD, ассоциированный профессор кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Мунайтпасова, 13, 010000, Астана, Казахстан

Kabdrakhimova G.D. – PhD, associate professor, Department of Nuclear Physics, new materials and technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhimukhan 13, 010000, Astana, Kazakhstan

Abuova A.U. – corresponding author, PhD, associate professor, Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhimukhan 13, 010000, Astana, Kazakhstan

Soltanbek N.S. – Doctoral student, Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhimukhan 13, 010000, Astana, Kazakhstan

Temirbaeva A.A. – Doctoral student, Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Munaitpassova 13, 010000, Astana, Kazakhstan

Ussen E.B. – Master's Student, Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhimukhan 13, 010000, Astana, Kazakhstan

Abuova F.U. – PhD, Associate Professor, Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhimukhan 13, 010000, Astana, Kazakhstan



Copyright: © 2025 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).