



МРНТИ 29.19.03

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2026-154-1-182-198>

Научная статья

## Расчёт оптических характеристик $\text{BaTiO}_3$ при комнатной температуре в рамках теории функционала плотности

У.Ж. Толеген<sup>1</sup>, Ф.У. Абуова<sup>1</sup>, Ж.Е. Зәкиева<sup>2</sup>, Г.А. Каптагай<sup>3</sup>, Е.Б. Үсен<sup>1</sup>,  
А.У. Абуова<sup>1\*</sup>, А.А. Кырыкбаева<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан, <sup>2</sup>Международный университет Астаны, Астана, Казахстан, <sup>3</sup>Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан, <sup>4</sup>Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

(E-mail: t-ulzhan@list.ru, abuova\_fu@enu.kz, zhadyrazakiyeva@gmail.com, gulbanu.kaptagai@mail.ru, erbol\_usen@mail.ru, abuova\_au@enu.kz, asemkyrykbaeva@gmail.com)

**Аннотация.** В работе исследованы оптические свойства  $\text{BaTiO}_3$  при комнатной температуре с использованием методов теории функционала плотности и ab initio молекулярной динамики. Актуальность исследования обусловлена широким применением  $\text{BaTiO}_3$  как сегнетоэлектрического и функционального оксидного материала в оптоэлектронике, фотонике и диэлектрических устройствах, где корректное описание ширины запрещённой зоны и края оптического поглощения имеет принципиальное значение.

Показано, что расчёты для статической кристаллической решётки существенно переоценивают порог оптического поглощения по сравнению с экспериментальными данными, что связано с игнорированием термических колебаний атомов и динамических искажений структуры. Для учёта температурных эффектов выполнено моделирование при  $T = 300$  К с вычислением энергий электронных переходов и сил осцилляторов вдоль молекулярно-динамической траектории. Электронная структура анализировалась в рамках зонной теории с учётом вклада различных k-точек зоны Бриллюэна, что позволило проследить изменение межзонных переходов во времени.

Установлено, что тепловые флуктуации кристаллической решётки приводят к динамическому нарушению локальной симметрии и модуляции межзонных переходов. В результате энергия разрешённых переходов испытывает временные колебания, а номинально запрещённые переходы приобретают конечную вероятность вследствие смешения электронных состояний различной симметрии. Оба механизма формируют низкоэнергетическое поглощение и вызывают красное смещение края спектра по сравнению со статическим расчётом.

Поступила 6.02.2026. После доработки 23.02.2026. Принята к печати 23.02.2026.  
Доступно онлайн 30.03.2026.

\*автор для корреспонденции

Полученное значение эффективного оптического порога, определённое путём статистического усреднения по молекулярно-динамической траектории, находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Показано, что наблюдаемая оптическая щель  $BaTiO_3$  при комнатной температуре определяется не только особенностями зонной структуры идеального кристалла, но и динамическим беспорядком решётки, обусловленным ангармоническими колебаниями атомов.

Расчёты были выполнены отдельно для различных  $k$ -точек зоны Бриллюэна, что позволило выявить их вклад в формирование края оптического поглощения и установить роль температурно-индуцированных флуктуаций в модификации электронных переходов.

**Ключевые слова:** метод функционала плотности, перовскит, оптическое поглощение, кристаллическая решетка, траектория молекулярной динамики.

---

## 1. Введение

Титанат бария ( $BaTiO_3$ ) среди перовскитных оксидов является одним из наиболее подробно изученных материалов как сегнетоэлектрик [1–3], высоко- $k$  диэлектрик [4,5] и фоторефрактивный материал [6,7], что подтверждается многочисленными экспериментальными и теоретическими исследованиями. Благодаря совокупности своих уникальных физических свойств  $BaTiO_3$  рассматривается как перспективный материал для широкого спектра технологических применений, включая затворные диэлектрики [8] в микроэлектронике, голографические системы [9] хранения информации, фотокаталитические процессы [10,11], а также многослойные керамические конденсаторы [12].

В зависимости от температуры  $BaTiO_3$  может существовать в пяти различных кристаллических модификациях, последовательно сменяющих друг друга при нагреве: ромбоэдрической, орторомбической, тетрагональной, кубической и гексагональной. Особый интерес представляет тетрагональная фаза, существующая в температурном диапазоне приблизительно 290–390 К, поскольку именно в этом интервале проявляются её выраженные сегнетоэлектрические и оптические свойства.

Оптические свойства  $BaTiO_3$  в значительной степени зависят от внешних факторов, таких как температура, приложенное электрическое поле и механическое напряжение, особенно в тетрагональной фазе, обладающей сегнетоэлектрическими свойствами. Сегнетоэлектрики характеризуются спонтанной поляризацией, чувствительной к внешним воздействиям, которая напрямую влияет на оптические параметры, включая показатель преломления, коэффициент экстинкции и ширину запрещённой зоны [13–16].

Экспериментальные измерения спектров оптического поглощения высококристаллического  $BaTiO_3$  при комнатной температуре показывают наличие чёткого края поглощения в области 3.2–3.4 эВ [17–22]. Этот пороговый уровень связан с прямыми межзонными переходами, подтверждёнными как спектроскопией отражения и пропускания, так и эллипсометрией [17,20]. Значения ширины запрещённой зоны варьируются в за-

висимости от метода синтеза, ориентации плёнки, наличия дефектов и толщины образцов. Так, например, в тонкоплёночных структурах, полученных методом химического осаждения или напыления, наблюдаются сдвиги края поглощения на 0.1–0.3 эВ [18,19].

Измерения на температурных зависимостях показывают, что при нагреве наблюдается красный сдвиг края оптического поглощения, обусловленный флуктуациями межатомных расстояний и уменьшением симметрии решётки [21,22]. Эти эффекты особенно выражены в области сегнетоэлектрического фазового перехода (около 393 К), где резко изменяется кристаллическая структура материала [23].

В настоящей работе проводится моделирование оптического поглощения при комнатной температуре с учётом вклада каждой  $k$ -точки зоны Бриллюэна. Показано, что тепловое движение атомов оказывает существенное влияние на оптическое поглощение  $\text{BaTiO}_3$ . Смещение атомов относительно равновесных положений приводит к «осветлению» электронных переходов, которые в статической решётке являются оптически запрещёнными, а также вызывает флуктуации энергий электронных переходов.

## 2. Методы

### 2.1. Теоретические подходы

Вычислительная характеристика свойств материалов в данной работе основана на использовании трех взаимосвязанных методологических подходов: расчёта электронной структуры основного состояния, анализа линейного оптического поглощения и моделирования теплового движения атомных ядер.

#### 2.1.1. Электронная структура основного состояния

Атомистическая модель системы задаётся набором ядерных координат  $\{R_i\}$ . Для выбранной атомистической конфигурации и заданного набора волновых векторов  $k$  решается система самосогласованных уравнений, в результате чего итерационно определяются полная электронная плотность, обменно-корреляционный потенциал, орбитали Кон-Шэма  $\psi_i^{KS}(k)$  (зонные состояния) и соответствующие им энергии  $\epsilon_i^{KS}(k)$ . Данные самосогласованные расчёты выполняются как для оптимизированной геометрии, так и вдоль временно-зависимой траектории  $\{R_i(t)\}$ .

Расчёт оптических свойств осуществляется в базисе орбиталей Кон-Шэма  $\psi_i^{KS}(k)$ .

#### 2.1.2. Линейное оптическое поглощение

Линейные оптические свойства анализируются на основе матричных элементов дипольного момента перехода, вычисляемых в различных  $k$ -точках обратного пространства:

$$D_{ij}(k) = e \langle \psi_i^{KS}(k) | \mathbf{r} | \psi_j^{KS}(k) \rangle, \quad (1)$$

где  $i$  и  $j$  – соответствуют начальному и конечному электронным состояниям,  $k$  – волновой вектор в обратном пространстве, а  $e$  – элементарный заряд.

На основе дипольных матричных элементов рассчитывается сила осциллятора перехода:

$$f_{ij}(k) = \frac{4\pi m v_{ij}(k)}{3e^2 \hbar} |D_{ij}(k)|^2, \quad (2)$$

где  $m$  – масса электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка, а  $v_{ij}$  – частота электронного перехода между состояниями  $i$  и  $j$ . Используя силы осцилляторов и предполагая отсутствие спин-орбитального взаимодействия, спектр оптического поглощения определяется выражением:  $\alpha(\nu, k) = \sum_{ij} f_{ij} \delta(\nu - \nu_{ij}(k))$ .

### 2.1.3. Тепловое движение атомных ядер

Для моделирования теплового движения атомов использовались процедуры нагрева системы и адиабатической молекулярной динамики (МД). На каждом временном шаге атомистическая система взаимодействует с термостатом, установленным на заданной температуре, что приводит к масштабированию ионных импульсов  $\{P_i\}$ . После достижения теплового равновесия траектория молекулярной динамики адиабатического основного состояния рассчитывается путём решения уравнений движения Ньютона.

Координаты атомов сохраняются на каждом временном шаге траектории молекулярной динамики для последующего анализа электронной структуры. Для адиабатических МД-расчётов оптимизированные геометрические модели нагревались до температуры 300 К с использованием термостата Нозе–Гувера с повторным масштабированием скоростей. После этого микроканонические траектории генерировались с применением алгоритма Верле [23].

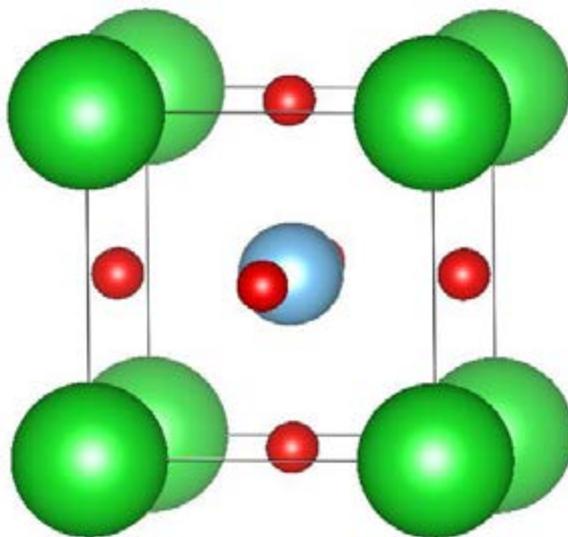
## 2.2. Вычислительные детали

Электронная структура, включающая кулоновские, корреляционные и обменные электрон-электронные взаимодействия, а также взаимодействие электронов с ионами, рассчитывалась в рамках теории функционала плотности путём самосогласованного решения уравнений Кона–Шэма, реализованного в программном пакете (**VASP**) [24, 25]. Использовались гибридный функционал Хейд–Скьюзериа–Эрнзергофа (HSE06) [26] и функционал Пердью–Бёрка–Эрнзергофа (PBE) [27] в обобщённой градиентной аппроксимации.

Для учёта локальной кулоновской корреляции электронов Ti-3d применялась параметризация Дударева [28] с параметром  $U-J = 2,6$  эВ. Все МД-расчёты выполнялись с использованием функционала PBE + U при температуре 300 К с контролем температуры термостатом Нозе–Гувера [31].

Моделирование, проведённое в данной работе, было выполнено для тетрагональной фазы BaTiO<sub>3</sub> (пространственная группа  $R4mm$ , #99), которая не является энергетически выгодной при нулевой температуре и существует при комнатных условиях. Атом бария

имеет координационное число шесть по отношению к анионам кислорода, тогда как атом титана обладает координационным числом двенадцать. Октаэдры  $TiO_6$  образуют каркасную структуру за счёт соединения по вершинам, как показано на рисунке 1. Кроме того, катион  $Ti$  расположен в центре данной структуры.



**Рисунок 1. Кристаллическая структура тетрагональной модификации  $BaTiO_3$ .**

Исходная кристаллическая структура была получена из базы данных Materials Project. Использовалась суперячейка [32], размером  $3 \times 3 \times 3$ , построенная из примитивной ячейки, содержащая 135 атомов. Расчёты выполнялись с энергией отсечки плоских волн 500 эВ и сеткой  $k$ -точек  $2 \times 2 \times 2$ , центрированной в  $\Gamma$ -точке. Для постобработки данных, рассчитанных с помощью пакета VASP [33], применялся программный код VASPKIT.

### 3. Результаты и обсуждение

#### 3.1. Электронные свойства статической решётки

Результаты, представленные в данном разделе, были получены на основе расчётов PBE+U для оптимизированной геометрии суперячейки  $BaTiO_3$ . В таблице 1 приведены значения ширины запрещённой зоны ( $E_g$ ), рассчитанные во всех неприводимых точках зоны Бриллюэна. Эти значения были определены двумя способами: путём вычисления разности энергий между минимумом зоны проводимости (CBM) и максимумом валентной зоны (VBM), то есть  $E^{CBM-VBM} = E(CBM) - E(VBM)$ , а также путём определения минимальной энергии оптического перехода с ненулевой силой осциллятора ( $E_{optic}$ ). Расчёты были выполнены с использованием функционалов PBE+U и HSE06.

**Таблица 1. Рассчитанные значения энергий переходов  $E^{\text{CBM-VBM}}$  и  $E_{\text{optic}}$  в различных точках зоны Бриллюэна с использованием функционалов PBE и HSE06.**

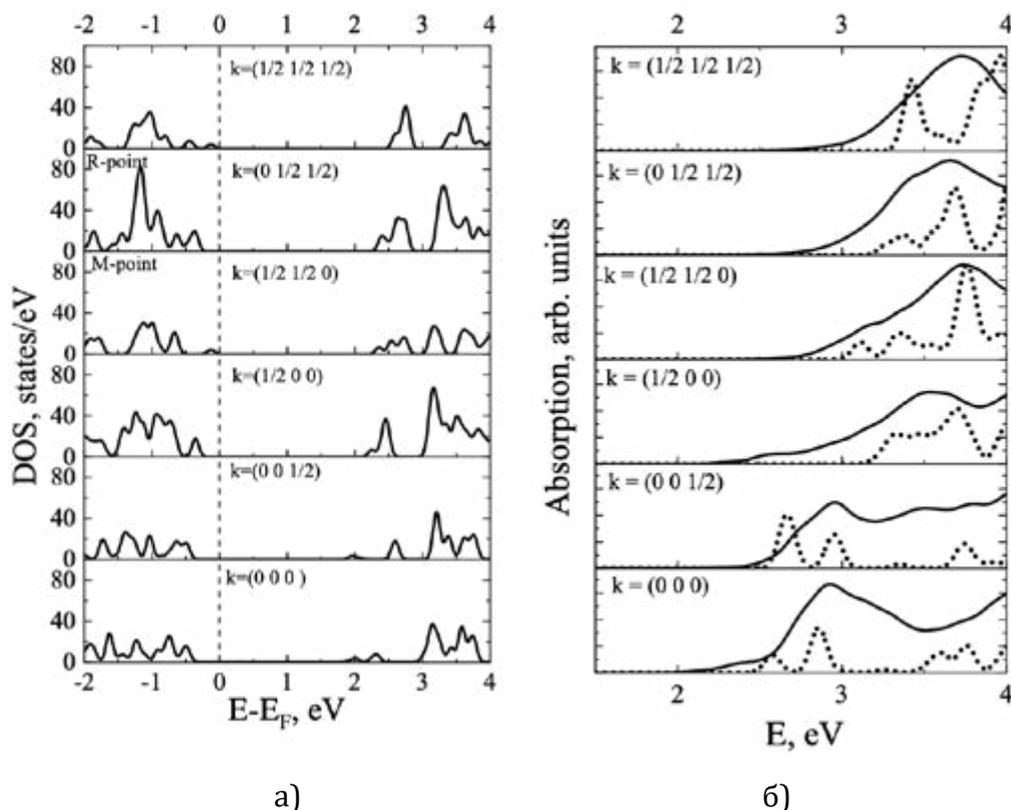
$k$ -точка	$E^{\text{CBM-VBM}}$ , эВ		$E_{\text{optic}}$ , эВ	
	PBE+U	HSE06	PBE+U	HSE06
$\Gamma=(0\ 0\ 0)$	2.40	3.56	2.58	3.70
$Z=(0\ 0\ \frac{1}{2})$	2.46	3.62	2.67	3.79
$X=(\frac{1}{2}\ 00)$	2.69	3.89	3.23	4.33
$M=(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0)$	2.51	3.73	3.11	4.34
$R=(0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$	2.77	3.97	3.38	4.47
$A=(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$	2.72	3.95	3.42	4.67

Максимум валентной зоны BaTiO<sub>3</sub> расположен в точке M, тогда как минимум зоны проводимости находится в точке  $\Gamma$ . В связи с этим BaTiO<sub>3</sub> классифицируется как полупроводник с непрямой запрещённой зоной, что согласуется с результатами, ранее опубликованными в литературе на основе расчётов PBE [37]. Расчётное значение непрямой запрещённой зоны BaTiO<sub>3</sub> в рамках PBE+U составляет 1.94 эВ, тогда как прямая запрещённая зона равна 2.48 эВ.

Дополнительно анализируется характер химической связи Ti-O, и показано, что она в значительной степени носит ионный характер, вследствие чего не прямые оптические переходы маловероятны. Электронная структура основного состояния BaTiO<sub>3</sub> была также рассчитана с учётом спин-орбитального взаимодействия. Результаты показали незначительное уменьшение значения прямой запрещённой зоны до 2.44 эВ, тогда как величина непрямой запрещённой зоны осталась неизменной. Учитывая слабое влияние спин-орбитального взаимодействия дальнейший анализ проводился без его учёта.

Значения  $E_g$ , полученные с использованием функционала PBE+U, существенно меньше соответствующих значений, рассчитанных с применением гибридного функционала HSE06. Значения  $E^{\text{CBM-VBM}}$ , рассчитанные в точке  $\Gamma$  с использованием HSE06, близки к величине 3.66 эВ, полученной ранее в рамках функционала B3LYP [30], и существенно отличаются от результатов PBE0, дающих значение около 4.1 эВ [38]. При этом значения  $E^{\text{CBM-VBM}}$  и  $E_{\text{optic}}$  различаются между собой. Минимальное значение  $E_{\text{optic}}$  значительно превышает экспериментально наблюдаемое значение порога оптического поглощения, равное приблизительно 3.2 эВ [30,39]. Причины такого расхождения между теоретическими и экспериментальными данными обсуждаются далее в разделе 3.2.

Вблизи уровня Ферми валентная зона формируется преимущественно за счёт  $O-2p$  состояний, тогда как зона проводимости определяется  $Ti-3d$  состояниями. Верх валентной зоны расположен в точке А и находится вблизи точки М, тогда как минимум зоны проводимости расположен в точке Г и близок к точке Z. В настоящей работе рассматриваются только прямые оптические переходы, несмотря на то что в литературе теоретически допускалась возможность непрямых переходов вследствие наличия ковалентной составляющей связи  $Ti-O$  [40].

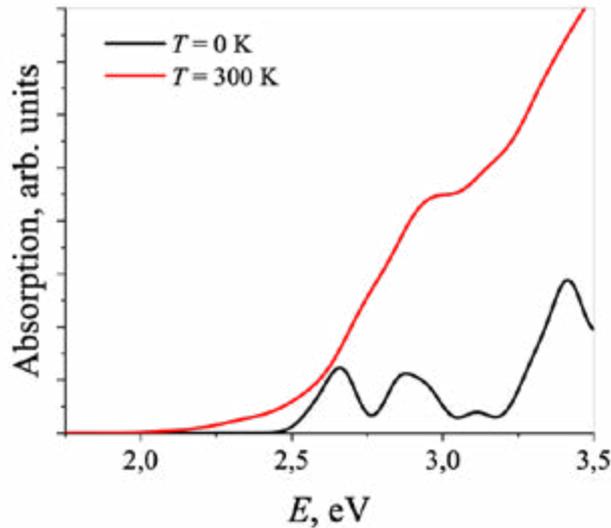


**Рисунок 2. (а) Плотность электронных состояний (DOS). (б) Спектры оптического поглощения, рассчитанные для статической кристаллической решётки (пунктирные линии) и при температуре  $T = 300$  К (сплошные линии) в различных  $k$ -точках зоны Бриллюэна.**

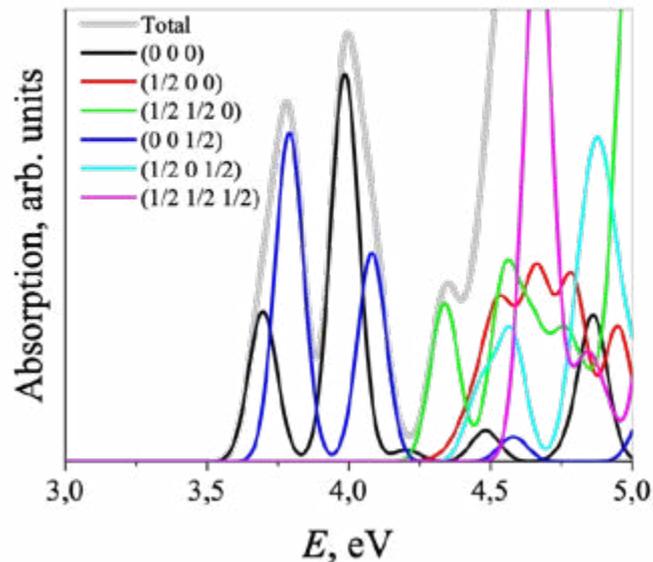
Результаты расчётов плотности электронных состояний (DOS), выполненных в приближении  $PBE + U$ , для всех неприводимых точек зоны Бриллюэна, приведённых в таблице 1, показаны на рисунке 2(а). Во всех рассмотренных  $k$ -точках валентной зоны (ВЗ) и зоны проводимости (ЗП) присутствуют подзоны, в которых электронные состояния отсутствуют. Это приводит к появлению энергетических интервалов в спектре оптического поглощения, в которых электроны с заданным значением волнового вектора не поглощают электромагнитное излучение (рис. 3(б), пунктирные линии).

При учёте всех значений  $k$  суммарное оптическое поглощение указывает на то, что  $BaTiO_3$  поглощает во всём энергетическом диапазоне выше оптической щели  $E_{optic}$  (рис.

3(а)). Аналогичные данные для статической кристаллической решётки, рассчитанные с использованием функционала HSE06, представлены на рис. 3(б).



а)



б)

**Рисунок 3. (а) Полные спектры линейного оптического поглощения, рассчитанные в рамках PBE + U для статической кристаллической решётки  $\text{BaTiO}_3$  и при температуре  $T = 300$  К.**

**(б) Спектры линейного оптического поглощения, рассчитанные с использованием функционала HSE06 для статической кристаллической решётки  $\text{BaTiO}_3$ : суммарное поглощение и вклад каждой неприводимой  $k$ -точки зоны Бриллюэна.**

### 3.2. Оптические свойства при температуре 300 К

Для учёта температурных эффектов оптические свойства  $\text{BaTiO}_3$  рассчитывались вдоль траектории *ab initio* молекулярной динамики при  $T = 300$  К. Молекулярно-динамическое моделирование выполнялось в рамках теории функционала плотности с использованием функционала PBE+U. В каждой точке траектории вычислялись энергии электронных переходов и соответствующие силы осцилляторов, после чего проводилось статистическое усреднение по конфигурациям. Такой подход позволяет учитывать мгновенные тепловые искажения кристаллической решётки и связанное с ними изменение вероятностей оптических переходов.

Для учёта температурного влияния на оптические свойства  $\text{BaTiO}_3$  были рассчитаны энергии электронных переходов и силы осцилляторов вдоль траектории *ab initio* молекулярной динамики при  $T = 300$  К в рамках функционала PBE+U. Такой подход позволяет учитывать мгновенные искажения кристаллической решётки и их влияние на спектр поглощения.

На рисунке 4 представлены энергии переходов и силы осцилляторов для переходов, являющихся оптически разрешёнными в статической структуре. В отличие от равновесной решётки, при конечной температуре наблюдаются значительные временные флуктуации энергий переходов относительно значения, рассчитанного для оптимизированной геометрии.

Тепловые колебания приводят к непрерывному изменению длин связей Ti–O и углов в октаэдрах  $\text{TiO}_6$ , что вызывает модуляцию энергетического расстояния между валентной и зоной проводимости. В результате энергия разрешённого межзонного перехода становится распределённой во времени, формируя набор мгновенных значений ниже энергии перехода в статической решётке.

При этом силы осцилляторов остаются конечными на протяжении всей траектории, что указывает на сохранение характера разрешённого перехода. Следовательно, основной вклад температурного эффекта связан не с появлением новых переходов, а со смещением энергии существующего межзонного перехода.

Флуктуации энергий переходов приводят к уменьшению эффективного порога оптического поглощения и формируют красное смещение края спектра при комнатной температуре. Таким образом, снижение наблюдаемой оптической щели обусловлено динамической модуляцией энергии разрешённых переходов вследствие тепловых колебаний решётки.

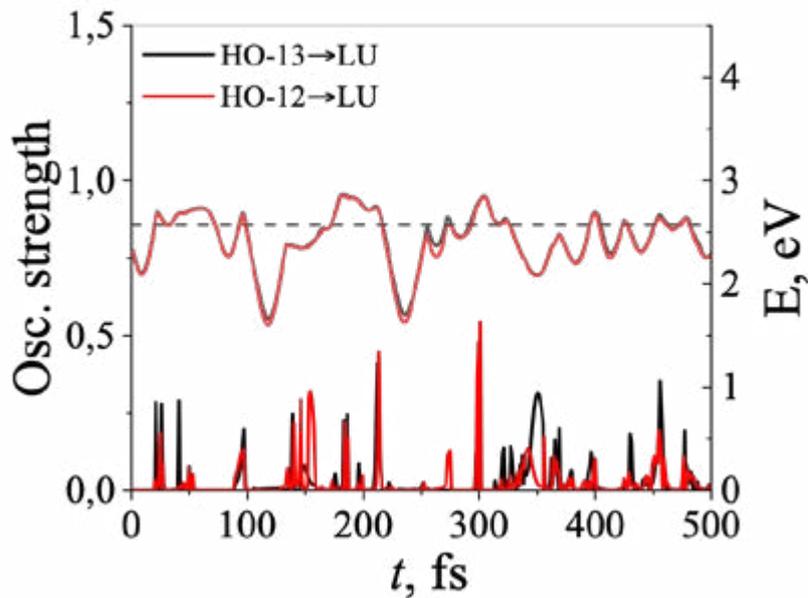


Рисунок 4. Силы осцилляторов (левая ось) и энергии электронных переходов (правая ось) рассчитанные вдоль траектории молекулярной динамики при температуре  $T = 300$  К. Горизонтальные чёрные штриховые линии соответствуют энергиям переходов, рассчитанным для статической решётки.

#### 4. Заключение

В работе выполнено теоретическое исследование оптических свойств  $\text{BaTiO}_3$  с учётом температурных эффектов на основе комбинации теории функционала плотности и *ab initio* молекулярной динамики.

Показано, что расчёты статической решётки не позволяют корректно воспроизвести экспериментальный порог оптического поглощения. Установлено, что тепловые колебания атомов приводят к динамическому нарушению симметрии кристалла и изменению вероятностей электронных переходов.

Выявлены два механизма формирования низкоэнергетического поглощения:

1. модуляция энергии разрешённых межзонных переходов;
2. активация запрещённых переходов вследствие мгновенных искажений октаэдров  $\text{TiO}_6$ .

Оба эффекта вызывают красное смещение края поглощения и приводят к уменьшению эффективной оптической щели при комнатной температуре. Полученные результаты показывают, что оптические свойства  $\text{BaTiO}_3$  определяются динамическим состоянием решётки, а не только электронной структурой равновесной геометрии.

Представленный подход может быть использован для корректного описания оптических свойств других оксидных перовскитов при конечных температурах.

### **Вклад авторов:**

**Толеген У.Ж.** – подготовка текста статьи и списка литературы, обработка экспериментальных данных.

**Абуова Ф.У.** – руководство исследованием, утверждение окончательной версии статьи и согласование её публикации.

**Абуова А.У.** – проведение экспериментальных исследований, подготовка экспериментального оборудования, организация и контроль сбора данных в ходе эксперимента.

**Үсен Е.Б., Закиева Ж.Е.** – участие в разработке концепции исследования.

**Каптагай Г.А., Кырыкбаева А.А.** – выполнение расчетов, представленных в статье, получение результатов в виде выражений и формул, подготовка сопроводительного письма и направили его в редакцию.

### **Список литературы**

1. K. J. Choi, M. Biegalski, Y. L. Li, A. Sharan, J. Schubert, R. Uecker, P. Reiche, Y. B. Chen, X. Q. Pan, V. Gopalan, L.-Q. Chen, D. G. Schlom, and C. B. Eom, Enhancement of ferroelectricity in strained BaTiO<sub>3</sub> thin films, *Science* 306, с. 1005–1009 (2004).
2. V. Buscaglia, M. T. Buscaglia, and G. Canu, BaTiO<sub>3</sub>-based ceramics, in *Encyclopedia of Materials: Technical Ceramics and Glasses*, ed. M. Pomeroy (Elsevier, Oxford, 2021), с. 311–344.
3. M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials* (Oxford University Press, Oxford, 2001).
4. M. T. Buscaglia, M. Viviani, V. Buscaglia, L. Mitoseriu, A. Testino, P. Nanni, Z. Zhao, M. Nygren, C. Harnagea, D. Piazza, and C. Galassi, Grain size and ferroelectric properties of dense nanocrystalline BaTiO<sub>3</sub> ceramics, *Phys. Rev. B* 73, 064114 (2006).
5. S. S. Parizi, D. Caruntu, A. Rotaru, and G. Caruntu, Synthesis and characterization of perovskite oxides, *Mater. Adv.* 3, с. 6474–6484 (2022).
6. D. Kip, Photorefractive waveguides in oxide crystals: fabrication, properties, and applications, *Appl. Phys. B* 67, с. 131–150 (1998).
7. Z. Hasan, M. A. Rahman, D. K. Das, and H. K. Rouf, Recent advances in BaTiO<sub>3</sub>-based materials, *Sci. Rep.* 13, 10487 (2023).
8. H. Lee, J. F. McGlone, S. I. Rahman, C. Chae, C. Joishi, J. Hwang, and S. Rajan, Strain and polarization effects in ferroelectric thin films, *Phys. Status Solidi RRL* 18, 2400042 (2024).
9. W. R. Lopes, H. F. A. Medeiros, G. S. Santos, T. C. Araujo, J. F. Carvalho, P. V. dos Santos, and M. T. de Araujo, Optical constants of BaTiO<sub>3</sub> thin films, *J. Opt. Soc. Am. A* 35, с. 1919–1928 (2018).
10. S. Chandrappa, S. N. Myakala, N. A. Koshi, S. J. Galbao, S.-C. Lee, S. Bhattacharjee, D. Eder, A. Cherevan, and D. H. K. Murthy, Doping effects on BaTiO<sub>3</sub> absorption edge, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 16, с. 8763–8771 (2024).
11. T. M. Inerbaev, A. U. Abuova, Z. Y. Zakiyeva, F. U. Abuova, Y. A. Mastrikov, M. Sokolov, D. Gryaznov, and E. A. Kotomin, Electronic structure and optical properties of BaTiO<sub>3</sub>, *Molecules* 29, 2707 (2024).
12. M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials* (Oxford University Press, Oxford, 2001).
13. M. T. Buscaglia, M. Viviani, V. Buscaglia et al., Electrical and optical behavior of BaTiO<sub>3</sub> ceramics, *Phys. Rev. B* 73, 064114 (2006).

14. S. S. Parizi, D. Caruntu, A. Rotaru, and G. Caruntu, Synthesis and characterization of perovskite oxides, *Mater. Adv.* 3, c. 6474–6484 (2022).
15. Z. Hasan, M. A. Rahman, D. K. Das, and H. K. Rouf, Recent advances in BaTiO<sub>3</sub>-based materials, *Sci. Rep.* 13, 10487 (2023).
16. W. R. Lopes, H. F. A. Medeiros, G. S. Santos et al., Optical constants of BaTiO<sub>3</sub> thin films, *J. Opt. Soc. Am. A* 35, c. 1919–1928 (2018).
17. S. Chandrappa, S. N. Myakala, N. A. Koshi et al., Doping effects on BaTiO<sub>3</sub> absorption edge, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 16, c. 8763–8771 (2024).
18. M. L. Moreira, M. F. C. Gurgel, G. P. Mambrini et al., Influence of structure on BaTiO<sub>3</sub> absorption, *J. Phys. Chem. A* 112, c. 8938–8942 (2008).
19. M.-S. Zhang, Z. Yin, Q. Chen et al., Optical properties of BaTiO<sub>3</sub> nanopowders, *Solid State Commun.* 119, c. 659–663 (2001).
20. H. Gao, J. Cao, L. Liu, and Y. Yang, Temperature dependence of optical band gap in BaTiO<sub>3</sub>, *J. Mol. Struct.* 1003, c. 75–81 (2011).
21. E. Orhan, J. A. Varela, A. Zenatti et al., Structural defects and optical gap in BaTiO<sub>3</sub> ceramics, *Phys. Rev. B* 71, 085113 (2005).
22. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov et al., Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study, *Phys. Rev. B* 57, c. 1505–1509 (1998).
23. Y. Y. Huang, Y. L. Yang, L. Y. Zhang, V. Laletin, V. Shur, R. Y. Jing, and L. Jin, Optical and structural properties of BaTiO<sub>3</sub>-based compounds, *J. Alloys Compd.* 1006, 1006 (2024).
24. M. K. Mahata, T. Koppe, K. Kumar, H. Hofsäss, and U. Vetter, Defect-induced luminescence in perovskite oxides, *Sci. Rep.* 10, 8775 (2020).
25. J. Hao, Y. Zhang, and X. Wei, A lead-free ferroelectric material with large polarization, *Angew. Chem. Int. Ed.* 50, c. 6876–6880 (2011).
26. X. Tian, Z. Wu, Y. Jia, J. Chen, R. K. Zheng, Y. Zhang, and H. Luo, Optical modulation in ferroelectric thin films, *Appl. Phys. Lett.* 102, 042907 (2013).
27. H. Sun, X. Wu, D. F. Peng, and K. W. Kwok, Enhanced dielectric and optical properties in modified BaTiO<sub>3</sub>, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 9, c. 34042–34049 (2017).
28. Y. Zhou, R. Xiong, P. Wang, X. Wu, B. Sa, C. Lin, M. Gao, T. Lin, and C. Zhao, First-principles study of defect states in BaTiO<sub>3</sub>, *J. Materiomics* 8, c. 586–595 (2022).
29. E. Orhan, J. A. Varela, A. Zenatti, M. F. C. Gurgel, F. M. Pontes, E. R. Leite, E. Longo, P. S. Pizani, A. Beltrán, and J. Andrés, Electronic structure and optical absorption of BaTiO<sub>3</sub>, *Phys. Rev. B* 71, 085113 (2005).
30. T. Watanabe, D. Hoshi, M. Ishida, and T. Ohba, Surface adsorption phenomena on oxide materials, *Langmuir* 34, c. 10250–10253 (2018).
31. M.-S. Zhang, Z. Yin, Q. Chen, W. Zhang, and W. Chen, Study of optical properties of BaTiO<sub>3</sub> nanopowders, *Solid State Commun.* 119, c. 659–663 (2001).
32. G. Kresse and D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B* 59, c. 1758–1775 (1999).
33. G. Kresse and J. Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Phys. Rev. B* 54, c. 11169–11186 (1996).
34. J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential, *J. Chem. Phys.* 118, c. 8207–8215 (2003).
35. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77, c. 3865–3868 (1996).

36. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, Electron correlations in transition-metal oxides, *Phys. Rev. B* 57, с. 1505–1509 (1998).
37. F. Maldonado, S. Jácome, and A. Stashans, First-principles study of electronic and optical properties of perovskites, *Comput. Condens. Matter* 13, с. 49–54 (2017).
38. P. E. Blöchl, Projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B* 50, с. 17953–17979 (1994).
39. S. Nosé, A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods, *J. Chem. Phys.* 81, с. 511–519 (1984).
40. A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W. D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder, and K. A. Persson, Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation, *APL Mater.* 1, 011002 (2013).

У.Ж. Толеген<sup>1</sup>, Ф.У. Абуова<sup>1</sup>, Ж.Е. Закиева<sup>2</sup>, Г. Ә. Каптагай<sup>3</sup>,  
Е.Б. Үсен<sup>1</sup>, А.У. Абуова<sup>1\*</sup>, А.А.Қырықбаева<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

<sup>2</sup> Астана Халықаралық университеті, Астана, Қазақстан

<sup>3</sup>Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

<sup>4</sup>Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

(E-mail: 1t-ulzhan@list.ru, abuova\_fu@enu.kz, zhadyrazakiyeva@gmail.com, gulbanu.kaptagai@mail.ru, erbol\_usen@mail.ru, abuova\_au@enu.kz, asemkyrykbaeva@gmail.com )

### Бөлме температурасындағы ВаТіО<sub>3</sub> оптикалық қасиеттері: DFT-модельдеу

**Аңдатпа.** Жұмыста ВаТіО<sub>3</sub> материалдарының бөлме температурасындағы оптикалық қасиеттері тығыздық функционалы теориясы және ab initio молекулалық динамика әдістерін қолдану арқылы зерттелді. Зерттеудің өзектілігі ВаТіО<sub>3</sub>-тың сегнетоэлектрлік және функционалдық оксидтік материал ретінде оптоэлектроникада, фотоникада және диэлектрлік құрылғыларда кеңінен қолданылуымен байланысты, мұнда тыйым салынған аймақ ені мен оптикалық жұтылу шегін дұрыс сипаттау аса маңызды.

Статикалық кристалдық тор үшін жүргізілген есептеулер тәжірибелік деректермен салыстырғанда оптикалық жұтылу шегін айтарлықтай жоғары бағалайтыны көрсетілді, бұл атомдардың жылулық тербелістерін және құрылымның динамикалық бұрмалануларын ескермеумен түсіндіріледі. Температуралық әсерлерді есепке алу мақсатында T = 300 K кезінде модельдеу жүргізіліп, молекулалық-динамикалық траектория бойында электрондық ауысу энергиялары мен осциллятор күштері есептелді. Электрондық құрылым аймақтық теория аясында талданып, Бриллюэн аймағының әртүрлі k-нүктелерінің үлесі қарастырылды.

Кристалдық тордың жылулық флуктуациялары локалдық симметрияның динамикалық бұзылуына және аймақаралық ауысулардың модуляциясына әкелетіні анықталды. Нәтижесінде, рұқсат етілген ауысулар энергиясы уақыт бойынша тербеледі, ал тыйым салынған ауысулар симметриясы әртүрлі электрондық күйлердің араласуы салдарынан нөлден өзге ықтималдыққа ие болады. Бұл екі механизм төмен энергиялы жұтылуды қалыптастырып, спектр жиегінің қызыл ығысуын туындатады.

Молекулалық-динамикалық траектория бойынша статистикалық орташалау арқылы анықталған тиімді оптикалық шек тәжірибелік нәтижелермен жақсы сәйкестік көрсетті. ВаТіО<sub>3</sub>-тың бөлме температурасындағы бақыланатын оптикалық саңылауы тек идеал кристалдың ай-

мақтық құрылымымен ғана емес, сонымен қатар, атомдардың ангармониялық тербелістерінен туындайтын тордың динамикалық ретсіздігімен де анықталатыны көрсетілді.

Есептеулер Бриллюэн аймағының әртүрлі  $k$ -нүктелері үшін жеке жүргізілді, бұл олардың оптикалық жұтылу жиегін қалыптастырудағы үлесін және температура әсерінен туындайтын флуктуациялардың электрондық ауысуларды модификациялаудағы рөлін анықтауға мүмкіндік берді.

**Түйін сөздер:** тығыздық функционалы әдісі, перовскит, оптикалық жұтылу, кристалдық тор, молекулалық динамика траекториясы.

**U.Zh. Tolegen<sup>1</sup>, F.U. Abuova<sup>1</sup>, Zh.Ye. Zakiyeva<sup>2</sup>, G.A. Kaptagay<sup>3</sup>, Ye.B. Usen<sup>1</sup>,  
A.U. Abuova<sup>1\*</sup>, A.A. Kyrykbayeva<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>*L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

<sup>2</sup>*Astana International University, Astana, Kazakhstan*

<sup>3</sup>*Kazakh National Women's Teacher Training University, Almaty, Kazakhstan*

<sup>4</sup>*Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan*

(E-mail: 1t-ulzhan@list.ru, abuova\_fu@enu.kz, zhadyrazakiyeva@gmail.com, gulbanu.kaptagai@mail.ru, erbol\_usen@mail.ru, abuova\_au@enu.kz, asemkyrykbaeva@gmail.com)

### **Optical properties of BaTiO<sub>3</sub> at room temperature: DFT Modeling**

**Abstract.** The optical properties of BaTiO<sub>3</sub> at room temperature were investigated using density functional theory and ab initio molecular dynamics. The relevance of this study is related to the wide application of BaTiO<sub>3</sub> as a ferroelectric and functional oxide material in optoelectronics, photonics, and dielectric devices, where an accurate description of the band gap and optical absorption edge is essential.

It is shown that calculations performed for a static crystal lattice significantly overestimate the optical absorption threshold compared to experimental data, due to the neglect of thermal atomic vibrations and dynamic structural distortions. To account for temperature effects, simulations were carried out at  $T = 300$  K, and the energies of electronic transitions and oscillator strengths were calculated along the molecular dynamic's trajectory. The electronic structure was analyzed within the framework of band theory, taking into account contributions from different  $k$ -points of the Brillouin zone.

Thermal fluctuations of the crystal lattice are found to cause dynamic symmetry breaking and modulation of interband transitions. As a result, the energies of allowed transitions exhibit temporal fluctuations, while nominally forbidden transitions acquire finite probability due to the mixing of electronic states with different symmetry. Both mechanisms contribute to low-energy absorption and lead to a red shift of the absorption edge compared to the static calculation.

The effective optical threshold obtained by statistical averaging over the molecular dynamic's trajectory is in good agreement with experimental data. It is demonstrated that the observed room-temperature optical band gap of BaTiO<sub>3</sub> is determined not only by the band structure of the ideal crystal but also by the dynamic lattice disorder associated with anharmonic atomic vibrations.

The calculations were performed separately for different  $k$ -points of the Brillouin zone, which allowed us to identify their contributions to the formation of the absorption edge and to clarify the role of temperature-induced fluctuations in modifying electronic transitions.

**Keywords:** density functional theory, perovskite, optical absorption, crystal lattice, molecular dynamics trajectory.

## References

1. K. J. Choi, M. Biegalski, Y. L. Li, A. Sharan, J. Schubert, R. Uecker, P. Reiche, Y. B. Chen, X. Q. Pan, V. Gopalan, L.-Q. Chen, D. G. Schlom, and C. B. Eom, Enhancement of ferroelectricity in strained BaTiO<sub>3</sub> thin films, *Science* 306, p. 1005–1009 (2004).
2. V. Buscaglia, M. T. Buscaglia, and G. Canu, BaTiO<sub>3</sub>-based ceramics, in *Encyclopedia of Materials: Technical Ceramics and Glasses*, ed. M. Pomeroy (Elsevier, Oxford, 2021), p. 311–344.
3. M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials* (Oxford University Press, Oxford, 2001).
4. M. T. Buscaglia, M. Viviani, V. Buscaglia, L. Mitoseriu, A. Testino, P. Nanni, Z. Zhao, M. Nygren, C. Harnagea, D. Piazza, and C. Galassi, Grain size and ferroelectric properties of dense nanocrystalline BaTiO<sub>3</sub> ceramics, *Phys. Rev. B* 73, 064114 (2006).
5. S. S. Parizi, D. Caruntu, A. Rotaru, and G. Caruntu, Synthesis and characterization of perovskite oxides, *Mater. Adv.* 3, p. 6474–6484 (2022).
6. D. Kip, Photorefractive waveguides in oxide crystals: fabrication, properties, and applications, *Appl. Phys. B* 67, p. 131–150 (1998).
7. Z. Hasan, M. A. Rahman, D. K. Das, and H. K. Rouf, Recent advances in BaTiO<sub>3</sub>-based materials, *Sci. Rep.* 13, 10487 (2023).
8. H. Lee, J. F. McGlone, S. I. Rahman, C. Chae, C. Joishi, J. Hwang, and S. Rajan, Strain and polarization effects in ferroelectric thin films, *Phys. Status Solidi RRL* 18, 2400042 (2024).
9. W. R. Lopes, H. F. A. Medeiros, G. S. Santos, T. C. Araujo, J. F. Carvalho, P. V. dos Santos, and M. T. de Araujo, Optical constants of BaTiO<sub>3</sub> thin films, *J. Opt. Soc. Am. A* 35, p. 1919–1928 (2018).
10. S. Chandrappa, S. N. Myakala, N. A. Koshi, S. J. Galbao, S.-C. Lee, S. Bhattacharjee, D. Eder, A. Cherevan, and D. H. K. Murthy, Doping effects on BaTiO<sub>3</sub> absorption edge, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 16, p. 8763–8771 (2024).
11. T. M. Inerbaev, A. U. Abuova, Z. Y. Zakiyeva, F. U. Abuova, Y. A. Mastrikov, M. Sokolov, D. Gryaznov, and E. A. Kotomin, Electronic structure and optical properties of BaTiO<sub>3</sub>, *Molecules* 29, 2707 (2024).
12. M. E. Lines and A. M. Glass, *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Materials* (Oxford University Press, Oxford, 2001).
13. M. T. Buscaglia, M. Viviani, V. Buscaglia et al., Electrical and optical behavior of BaTiO<sub>3</sub> ceramics, *Phys. Rev. B* 73, 064114 (2006).
14. S. S. Parizi, D. Caruntu, A. Rotaru, and G. Caruntu, Synthesis and characterization of perovskite oxides, *Mater. Adv.* 3, p. 6474–6484 (2022).
15. Z. Hasan, M. A. Rahman, D. K. Das, and H. K. Rouf, Recent advances in BaTiO<sub>3</sub>-based materials, *Sci. Rep.* 13, 10487 (2023).
16. W. R. Lopes, H. F. A. Medeiros, G. S. Santos et al., Optical constants of BaTiO<sub>3</sub> thin films, *J. Opt. Soc. Am. A* 35, p. 1919–1928 (2018).
17. S. Chandrappa, S. N. Myakala, N. A. Koshi et al., Doping effects on BaTiO<sub>3</sub> absorption edge, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 16, p. 8763–8771 (2024).
18. M. L. Moreira, M. F. C. Gurgel, G. P. Mambrini et al., Influence of structure on BaTiO<sub>3</sub> absorption, *J. Phys. Chem. A* 112, p. 8938–8942 (2008).
19. M.-S. Zhang, Z. Yin, Q. Chen et al., Optical properties of BaTiO<sub>3</sub> nanopowders, *Solid State Commun.* 119, p. 659–663 (2001).
20. H. Gao, J. Cao, L. Liu, and Y. Yang, Temperature dependence of optical band gap in BaTiO<sub>3</sub>, *J. Mol. Struct.* 1003, p. 75–81 (2011).

21. E. Orhan, J. A. Varela, A. Zenatti et al., Structural defects and optical gap in BaTiO<sub>3</sub> ceramics, *Phys. Rev. B* 71, 085113 (2005).
22. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov et al., Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study, *Phys. Rev. B* 57, p. 1505–1509 (1998).
23. Y. Y. Huang, Y. L. Yang, L. Y. Zhang, V. Laletin, V. Shur, R. Y. Jing, and L. Jin, Optical and structural properties of BaTiO<sub>3</sub>-based compounds, *J. Alloys Compd.* 1006, 1006 (2024).
24. M. K. Mahata, T. Koppe, K. Kumar, H. Hofsäss, and U. Vetter, Defect-induced luminescence in perovskite oxides, *Sci. Rep.* 10, 8775 (2020).
25. J. Hao, Y. Zhang, and X. Wei, A lead-free ferroelectric material with large polarization, *Angew. Chem. Int. Ed.* 50, p. 6876–6880 (2011).
26. X. Tian, Z. Wu, Y. Jia, J. Chen, R. K. Zheng, Y. Zhang, and H. Luo, Optical modulation in ferroelectric thin films, *Appl. Phys. Lett.* 102, 042907 (2013).
27. H. Sun, X. Wu, D. F. Peng, and K. W. Kwok, Enhanced dielectric and optical properties in modified BaTiO<sub>3</sub>, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 9, p. 34042–34049 (2017).
28. Y. Zhou, R. Xiong, P. Wang, X. Wu, B. Sa, C. Lin, M. Gao, T. Lin, and C. Zhao, First-principles study of defect states in BaTiO<sub>3</sub>, *J. Mater. Chem.* 8, p. 586–595 (2022).
29. E. Orhan, J. A. Varela, A. Zenatti, M. F. C. Gurgel, F. M. Pontes, E. R. Leite, E. Longo, P. S. Pizani, A. Beltrán, and J. Andrés, Electronic structure and optical absorption of BaTiO<sub>3</sub>, *Phys. Rev. B* 71, 085113 (2005).
30. T. Watanabe, D. Hoshi, M. Ishida, and T. Ohba, Surface adsorption phenomena on oxide materials, *Langmuir* 34, p. 10250–10253 (2018).
31. M.-S. Zhang, Z. Yin, Q. Chen, W. Zhang, and W. Chen, Study of optical properties of BaTiO<sub>3</sub> nanopowders, *Solid State Commun.* 119, p. 659–663 (2001).
32. G. Kresse and D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B* 59, p. 1758–1775 (1999).
33. G. Kresse and J. Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Phys. Rev. B* 54, p. 11169–11186 (1996).
34. J. Heyd, G. E. Scuseria, and M. Ernzerhof, Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential, *J. Chem. Phys.* 118, p. 8207–8215 (2003).
35. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77, p. 3865–3868 (1996).
36. S. L. Dudarev, G. A. Botton, S. Y. Savrasov, C. J. Humphreys, and A. P. Sutton, Electron correlations in transition-metal oxides, *Phys. Rev. B* 57, p. 1505–1509 (1998).
37. F. Maldonado, S. Jácome, and A. Stashans, First-principles study of electronic and optical properties of perovskites, *Comput. Condens. Matter* 13, p. 49–54 (2017).
38. P. E. Blöchl, Projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B* 50, p. 17953–17979 (1994).
39. S. Nosé, A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods, *J. Chem. Phys.* 81, p. 511–519 (1984).
40. A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W. D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder, and K. A. Persson, Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation, *APL Mater.* 1, 011002 (2013).

#### **Сведения об авторах:**

**Толеген УЖ.** – докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

**Абуова Ф.У.** – PhD, доцент, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

**Каптагай Г.А.** – PhD, доцент, Казахский национальный женский педагогический университет, ул. Гоголя, 114, Алматы, Казахстан

**Закиева Ж.Е.** – PhD, Международный университет Астана, Астана, Казахстан.

**Усен Е.Б.** – магистрант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

**Абуова А.У.** – автор для корреспонденции, PhD, доцент, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, Казахстан.

**Кырыкбаева А.А.** – Казахский национальный педагогический университет имени Абая, ул. Достык 13, Алматы, Казахстан

**Толеген УЖ.** – докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі, 13, Астана, Қазақстан.

**Абуова Ф.У.** – PhD, доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі, 13, Астана, Қазақстан.

**Каптагай Г.А.** – PhD, доцент, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Гоголь көшесі, 114, Алматы, Қазақстан.

**Закиева Ж.Е.** – PhD, Астана халықаралық университеті, Астана, Қазақстан.

**Усен Е.Б.** – магистрант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі, 13, Астана, Қазақстан.

**Абуова А.У.** – хат-хабар авторы, PhD, доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі, 13, Астана, Қазақстан.

**Кырыкбаева А.А.** – Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Достық көшесі, 13, Алматы, Қазақстан.

**Tolegen U.Zh.** – doctoral student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana, Kazakhstan.

**Abuova F.U.** – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana, Kazakhstan.

**Kaptagay G.A.** – PhD, Associate Professor, Kazakh National Women’s Teacher Training University, 114 Gogol Street, Almaty, Kazakhstan.

**Zakiyeva Zh. Ye.** – PhD, Astana International University, Astana, Kazakhstan.

**Usen E.B.** – master’s student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana, Kazakhstan.

**Abuova A.U.** – the corresponding author, PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana, Kazakhstan.

**Kyrykbaeva A.A.** – Abai Kazakh National Pedagogical University, 13 Dostyk Street, Almaty, Kazakhstan.



**Copyright:** © 2026 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/>).