

ISSN (Print) 2616-6836
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

ХАБАРШЫСЫ

BULLETIN

of L.N. Gumilyov
Eurasian National University

ВЕСТНИК

Евразийского национального
университета имени Л.Н. Гумилева

ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

№3(152)/ 2025

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Астана, 2025

Astana, 2025

Бас редакторы:
Жумадилов К.Ш.,
PhD, проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан

Бас редактордың орынбасары: Абуова Ф.У., PhD, доц., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан

Редакция алқасы:

Ержанов Қ.Қ.	PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Кайнарбай А.Ж.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Козловский А.Л.	PhD, Ядролық физика институты, Астана, Қазақстан
Морзабаев А.К.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Салиходжа Ж.М.	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Усеинов А.Б.	PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
Джансейтов Д.М.	PhD, Ядролық физика институты, Астана, Қазақстан
Шункеев К.Ш.	ф.-м.ғ.д., Қ.Жұбанов ат. АӨУ, Ақтөбе, Қазақстан
Исадыков А.Н.	PhD, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей
Шарафуллин И.Ф.	ф.-м.ғ.д., Башқұрт мемлекеттік университеті, Уфа, Ресей
Сакута С.Б.	ф.-м.ғ.д., Ұлттық зерттеу институты Курчатов институты, Мәскеу, Ресей
Лущик А.Ч.	ф.-м.ғ.д., Тарту университеті, Тарту, Эстония
Попов А.И.	ф.-м.ғ.д., Латвия университеті, Рига, Латвия
Хоши М.	PhD, Хиросима Университеті, Хиросима, Жапония
Тойода Ш.	PhD, Окаяма Ғылым Университеті, Окаяма, Жапония
Ертурк С.	PhD, Нийде Университеті, Нийде, Түркия
Килин Д.	PhD, Солтүстік Дакота мемлекеттік университеті, Фарго, АҚШ
Юлун Хан	PhD, Солтүстік Дакота мемлекеттік университеті, Фарго, АҚШ

Редакцияның мекенжайы: **010008, Қазақстан, Астана қ., Сәтбаев к-сі, 2**
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 402 б.
Тел.: +7 (7172) 709-500, (ішкі 31-410).
E-mail: vest_phys@enu.kz

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы
Меншіктенуші: КеАҚ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті"
Мерзімділігі: жылына 4 рет
Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігімен тіркелген
02.02.2021ж. № KZ66VPY00031918 қайта есепке қою туралы куәлігі
Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Астана қ., Қажымұқан к-сі 13/1
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті
Тел: +7 (7172)709-500 (ішкі 31-410). Сайт: <http://bulphysast.enu.kz>

Editor-in-Chief:

K. Zhumadilov,

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

Deputy Editor-in-Chief: F. Abuova, PhD, Ass. Prof., L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Editorial board:

K. Yerzhanov	PhD, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Qainarbai	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Kozlovskiy	PhD, Institute of Nuclear Physics», Astana, Kazakhstan
A. Morzabaev	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
Zh. Salikhodzha	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
A. Useinov	PhD, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
D. Dzhanseytov	PhD, Institute of Nuclear Physics, Astana, Kazakhstan
K. Shunkeyev	Doctor of Phys.-Math. Sciences, K. Zhubanov University, Aktobe, Kazakhstan
A. Isadykov	PhD, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
I. Sharafullin	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Bashkir State University, Ufa, Russia
S. Sakuta	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Kurchatov Institute, Moscow, Russia
A. Lushchik	Doctor of Phys.-Math. Sciences, University of Tartu, Tartu, Estonia
A. Popov	Doctor of Phys.-Math. Sciences., University of Latvia, Riga, Latvia
M. Hoshi	PhD, Hiroshima University, Hiroshima, Japan
Sh. Toyoda	PhD, Okayama University of Science, Okayama, Japan
S. Yerturk	PhD, Niğde Ömer Halisdemir University, Niğde, Türkiye
Dmitri Kilin	PhD, North Dakota State University, Fargo, USA
Yulun Han	PhD, North Dakota State University, Fargo, USA

Editorial address: **2, Satpayev str., of. 402**

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan, 010008

Tel.: **+7 (7172) 709-500, (ext. 31-410),**

E-mail: **vest_phys@enu.kz**

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University. PHYSICS. ASTRONOMY Series

Owner: Non-profit joint-stock company «L.N. Gumilyov Eurasian National University»

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan

Rediscount certificate № KZ66VPY00031918 from 02.02.2021

Address of Printing Office: 13/1 Kazhimukan str., Astana, Kazakhstan 010008

L.N. Gumilyov Eurasian National University

Tel: +7 (7172) 709-500, (ext.31-410). Website: <http://bulphysast.enu.kz>

Главный редактор:
Жумадилов К.Ш.,
PhD, проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Зам. главного редактора: Абуова Ф.У., PhD, доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Редакционная коллегия:

Ержанов К.К.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Кайнарбай А.Ж.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Козловский А.Л.	PhD, РГП «Институт ядерной физики», Астана, Казахстан
Морзабаев А.К.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Салиходжа Ж.М.	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Усеинов А.Б.	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Джансейтов Д.М.	PhD, РГП «Институт ядерной физики», Астана, Казахстан
Шункеев К.Ш.	д.ф.-м.н., Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан
Исадыков А.Н.	PhD, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
Шарафуллин И.Ф.	д.ф.-м.н., Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
Сакута С.Б.	д.ф.-м.н., Национальный исследовательский институт Курчатовский институт, Москва, Россия
Луцник А.Ч.	д.ф.-м.н., Тартуский университет, Тарту, Эстония
Попов А.И.	д.ф.-м.н., Латвийский университет, Рига, Латвия
Хоши М.	PhD, Университет Хиросимы, Хиросима, Япония
Тойода Ш.	PhD, Университет Науки Окаямы, Окаяма, Япония
Ертурк С.	PhD, Университет Нийде, Нийде, Турция
Килин Д.	PhD, Государственный университет Северной Дакоты, Фарго, США
Юлун Хан	PhD, Государственный университет Северной Дакоты, Фарго, США

Адрес редакции: **010008, Казахстан, г. Астана, ул. Сатпаева, 2**
Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, каб. 402
Тел.: **+7(7172) 709-500, (вн. 31-410),**
E-mail: **vest_phys@enu.kz**

Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева

Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

Собственник: НАО «Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева» Периодичность: 4 раза в год
Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан Свидетельство о постановке на переучет № KZ66VPY00031918 от 02.02.2021 г.

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Астана, ул. Кажымукана, 13/1,

Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева

Тел.: +7(7172)709-500 (вн.31-410). Сайт: <http://bulphysast.enu.kz>

МАЗМҰНЫ/ CONTENTS/ СОДЕРЖАНИЕ

Астрономия сериясы – серия Астрономия – Astronomy series

Рида Фатима, Мохд Шахалам. Хаббл телескопының бақылау деректерімен дәрежелік космологиялық модельді шектеу.....	
Rida Fatima, Mohd Shahalam. Constraining power-law cosmology with observational Hubble data.....	
Рида Фатима, Мохд Шахалам. Ограничение степенной космологической модели данными наблюдений телескопа Хаббла.....	8
К.К. Ержанов, А.Н. Амангельдиев, А.Б. Алтайбаева, Г.Б. Бауржан. Сфералық метрикадағы $F(R, X, \varphi)$ моделінің шешімі.....	
K.K. Yerzhanov, A.N. Amangeldiyev, A.B. Altaybayeva, G.B. Baurzhan. Solution for the $F(R, X, \varphi)$ model in the spherical metric.....	
К.К. Ержанов, А.Н. Амангельдиев, А.Б. Алтайбаева, Г.Б. Бауржан. Решение для $F(R, X, \varphi)$ модели в сферической метрике.....	18

Физика сериясы – серия Физика – Physics series

Б.К. Рахадиллов, Н.М. Магазов, А. Әпсежанова, М.Б. Баяндинова. Электр доғасын металдандыру кезінде құйма және ұнтақ сүйреу негізінде жабындарды салыстырмалы талдау.....	
B.K. Rakhadilov, N.M. Magazov, A. Änsezhanova, M.B. Bayandinova. Comparative analysis of coatings on the basis of cast and cored wire at electric arc metallization.....	
Б.К. Рахадиллов, Н.М. Магазов, А. Әпсежанова, М.Б. Баяндинова. Сравнительный анализ покрытий на основе литой и порошковой проволоки при электродуговой металлизации.....	26
С.Ж. Көшкінбаев, Н.К. Смайлов, А.К. Сейтханова, Ж. Жаңатайұлы. Ғарыш инфрақұрылымындағы деформацияны FBG сенсорларымен дәл бақылау.....	
S.Zh. Koshkinbaev, N.K. Smailov, A.K. Seytkhanova, Zh. Zhanatayuly. Precise control of deformation in space infrastructure with FBG sensors.....	
С.Ж. Көшкінбаев, Н.К. Смайлов, А.К. Сейтханова, Ж. Жаңатайұлы. Точный контроль деформации в космической инфраструктуре с помощью датчиков FBG.....	41
Н.С. Нурсултанова, К.Ш. Жумадилов, Ж.О. Насилов, В.Ф. Степаненко, Ш. Тойода, М. Хоши Қазақстан аумағындағы фондық сәулеленуді тіс эмалі негізіндегі ЭПР дозиметрия әдісімен бағалау.....	
N.S. Nursultanova, K.Sh. Zhumadilov, Zh.O. Nasilov, V.F. Stepanenko, Sh. Toyoda, M. Hoshi Assessment of Background Radiation in Kazakhstan Using EPR Dosimetry of Tooth Enamel...	
Н.С. Нурсултанова, К.Ш. Жумадилов, Ж.О. Насилов, В.Ф. Степаненко, Ш. Тойода, М. Хоши Оценка фоновой радиации на территории Казахстана методом ЭПР дозиметрии по зубной эмали.....	56

Ж. Кули, Н.Б. Бакранов, Б.Ж. Сейтов, Ф.Р. Капсаламова, Д.И. Бакранова, С.А. Пазылбек Жұмсақ тұндыру әдісі арқылы BiVO_4/ZnO гетероқұрылымын орнықты қалыптастыру Zh. Kuli, N.B. Bakranov, B.Zh. Seitov, F.R. Kapsalamova, D.I. Bakranova, S.A. Pazyzbek Stable Formation of BiVO_4/ZnO Heterostructure via a Soft Deposition Method.....	67
Ж. Кули, Н.Б. Бакранов, Б.Ж. Сейтов, Ф.Р. Капсаламова, Д.И. Бакранова, С.А. Пазылбек Стабильное формирование BiVO_4/ZnO гетероструктуры методом мягкого осаждения	
Н. Сағатов, Д. Сағатова. Жаңа марганец гексабориді: тұрақтылық және механикалық қасиеттер.....	
N. Sagatov, D. Sagatova. New manganese hexaboride: stability and mechanical properties.....	
Н. Сағатов, Д. Сағатова. Новый гексаборид марганца: стабильность и механические свойства.....	85
Г.Д. Кабдрахимова, А.У. Абуова, Б.М. Сатанова, Н.С. Солтанбек, А.А. Темирбаева, Үсен Е.Б., Ф.У. Абуова. Хлоридтегі гидроний иондарының динамикасына атомдық түсініктер және отын ұяшықтарын қолдану үшін деканоат қышқылы негізіндегі терең эвтектикалық еріткіш.....	
G.D. Kabdrakhimova, A.U. Abuova, B.M. Satanova, N.S. Soltanbek, A.A. Temirbayeva, E.B. Ussen, F.U. Abuova. Atomic Concepts of Hydroxonium Ion Dynamics in Chloride and Deep Decanoate Eutectic Solvent for Fuel Cell Applications.....	
Г.Д. Кабдрахимова, А.У. Абуова, Б.М. Сатанова, Н.С. Солтанбек, А.А. Темирбаева, Үсен Е.Б., Ф.У. Абуова. Атомные концепции динамики ионов гидроксония в хлориде и глубоком эвтектическом растворителе на основе деканоатовой кислоты для применения в топливных элементах	100
Т. Кульсартов, Ә. Теміржанов, Ж. Заурбекова, Ә. Шаймерденов, С. Әскербеков, П. Харкин, О. Мильц, Д. Сайранбаев, И. Кенжина, Т. Жолдыбаев	
Зерттеу ядролық реакторлардың құрамында бериллий бар материалдарынан тритийдің активтенбейтін бөліну процестерін эксперименттік зерттеулер және есептеу.....	
T. Kulsartov, A. Temirzhanov, Zh. Zaurbekova, A. Shaimerdenov, S. Askerbekov, P. Kharkin, O. Milts, D. Sairanbayev, I. Kenzhina, T. Zholdybayev Computational and experimental studies of processes of non-activation release of tritium from beryllium-containing materials of research nuclear reactors.....	
Т. Кульсартов, А. Теміржанов, Ж. Заурбекова, А. Шаймерденов, С. Әскербеков, П. Харкин, О. Мильц, Д. Сайранбаев, И. Кенжина, Т. Жолдыбаев Расчетно-экспериментальные исследования процессов без активационного выделения трития из бериллийсодержащих материалов исследовательских ядерных реакторов.....	113
Г. Турсумбаева, Г. Баубекова, Р. Асылбаев, Ж. Карипбаев, А. Кисабекова, А.Т. Акилбеков Энергиясы 231 МэВ Xe^{132} иондарымен сәулеленген $\text{YAG}:\text{Ce}$ монокристалдарының оптикалық және люминесценциялық қасиеттері.....	
G. Tursumbayeva, G. Baubekova, R. Asylbaev, Zh. Karipbayev, A. Kissabekova, A. Akilbekov Optical and luminescent properties of $\text{YAG}:\text{Ce}$ single crystals irradiated with 231 MeV Xe^{132} ions	
Г. Турсумбаева, Г. Баубекова, Ж. Карипбаев, Р. Асылбаев, А. Кисабекова, А.Т. Акилбеков Оптические и люминесцентные свойства монокристаллов $\text{YAG}:\text{Ce}$ облученных ионами Xe^{132} с энергией 231 МэВ.....	131
И.А. Чупраков, Ю.М. Гледенов, Э. Сансарбаяр, А.К. Бекбаев, Б. Мұхаметұлы, Е.С. Коршиков, Н.Т. Темербулатова. Жылдам нейтрондар тудыратын ядролық реакцияларды зерттеуге арналған зарядталған бөлшектер спектрометрі	
I.A. Chuprakov, Yu.M. Gledenov, E. Sansarbaya, A.K. Bekbayev, B. Mukhametuly, E.S. Korshikov, N.T. Temerbulatova. Charged particle spectrometer for the investigation of nuclear reactions induced by fast neutrons.....	
И.А. Чупраков, Ю.М. Гледенов, Э. Сансарбаяр, А.К. Бекбаев, Б. Мухаметұлы, Е.С. Коршиков, Н.Т. Темербулатова. Спектрометр заряженных частиц для исследования ядерных реакций, вызванных быстрыми нейтронами.....	143

Т.Б. Қоштыбаев, А.М. Татенов, М.Е. Алиева, К.К. Жантлеуов. Ауқымды классикалық жүйелердегі флуктуациялар.....

T.B. Koshtybayev, A.M. Tatenov, M.E. Aliyeva, K.K. Zhantleuov. Fluctuations in large classical systems.....

Т.Б. Қоштыбаев, А.М. Татенов, М.Е. Алиева, К.К. Жантлеуов. Флуктуации в больших классических системах.....

155

Ж.Т. Карипбаев, З. Умар, Г.М. Аралбаева, А. Бақытқызы, А.М. Жунусбеков, К.К. Қумарбеков, А.И. Попов. $Gd_3Ga_5O_{12}$ -дағы дефект жағдайларын және 4f-электрондардың рөлін әдістермен модельдеу

Z.T. Karipbayev, Z. Umar, G.M. Aralbayeva, A. Bakytkyzy, A.M. Zhunusbekov, K.K. Kumarbekov, A.I. Popov. Modeling defect states and the role of 4F electrons in $Gd_3Ga_5O_{12}$ using DFT methods

Ж.Т. Карипбаев, З. Умар, Г.М. Аралбаева, А. Бақытқызы, А.М. Жунусбеков, К.К. Қумарбеков, А.И. Попов. Моделирование дефектных состояний и роли 4f-электронов в $Gd_3Ga_5O_{12}$ методами DFT.....

169



IRSTI 29.05.41
Scientific article

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-8-17>

Constraining power-law cosmology with observational Hubble data

Rida Fatima, Mohd Shahalam 

Department of Physics, Integral University, Lucknow, India

(E-mail: mohdshahamu@gmail.com)

Abstract. In this work, we analyze observational constraints on power-law cosmology, a simple yet insightful model of the universe's expansion. This framework is primarily characterized by two parameters: the Hubble constant (H_0), which sets the present expansion rate, and the deceleration parameter (q), which describes the nature of cosmic acceleration or deceleration. By employing the latest compilation of 31 observational Hubble data points, we place bounds on these parameters with improved accuracy. Our analysis shows that power-law cosmology is capable of providing a remarkably good fit to the data, with the obtained 1σ estimates remaining consistent with recent results in the literature. This agreement highlights the relevance of the model as a phenomenological description of cosmic expansion. However, despite its success in reproducing large-scale trends, the model has limitations, particularly in addressing the finer dynamical features, such as the transition from deceleration to acceleration in cosmic history. Overall, it is shown that although power-law cosmology provides an elegant and phenomenologically viable description of many aspects of cosmic evolution, it remains insufficient to solve all observational problems, in particular the dynamical transition of cosmic acceleration.

Keywords: Cosmic acceleration, data analysis, Hubble data, redshift, power-law cosmology

Introduction

The Standard Cosmological Model (SM) of the Universe, namely the Λ CDM framework supplemented with an inflationary phase, has been remarkably successful in explaining a wide range of observations. Nevertheless, the cosmological constant problem continues to be one of the major unresolved issues of modern cosmology [1], motivating the exploration of alternative models. Among these, power-law cosmology offers an interesting framework to address several classical problems of the standard model, including the age, flatness, and

Received 25.09.2025. Revised 26.09.2025. Accepted 30.09.2025. Available online 30.09.2025.

*the corresponding author

horizon problems. In this approach, the cosmic expansion is described by the scale factor $a(t)$, with β as a positive constant. Scenarios with $\beta \approx 1$ have been studied extensively in different contexts [2-9], while phantom power-law cosmology has been explored in Ref. [10]. Notably, power-law cosmology naturally avoids the horizon and flatness problems, accommodates high-redshift objects (mitigating the age problem), and offers dynamical approaches to the fine-tuning issue associated with the cosmological constant [11-15]. A power-law expansion with β provides an excellent fit to a variety of cosmological observations. Models supporting such a coasting evolution are falsifiable through classical cosmological tests, as they exhibit clear and verifiable predictions. Tests such as galaxy number counts versus redshift and angular diameter distance measurements [16] favor this type of evolution, though their reliability is limited by evolutionary effects (e.g., mergers). By contrast, Type Ia supernovae, being robust standard candles, and $H(z)$ measurements have emerged as far more reliable probes.

Cosmological parameters form the backbone of any model, as their precise determination is essential for describing the present cosmic expansion. In particular, the Hubble constant (H_0), which measures the current expansion rate, and the deceleration parameter (q), which characterizes its acceleration or deceleration, are of central importance. In recent years, numerous efforts have been devoted to constraining H_0 . For instance, Freedman et al. [17] obtained $H_0 = 72 \pm 8$ km/s/Mpc, while the most recent Planck results give $H_0 = 67.4 \pm 0.5$ km/s/Mpc [18]. In addition, several works have constrained H_0 , q , and β in open, closed, and flat power-law cosmologies. Numerical results for the flat case are summarized in Table 2. Recently, Rani et. al. [19] investigated observational constraints on power-law cosmology using $H(z)$ and SN Ia data, providing a detailed discussion of its viability. In the present work, we perform a similar analysis for the flat case, employing the most recent datasets of $H(z)$ measurements [20]. The structure of this paper is as follows: Section 2 outlines the mathematical framework of the power-law cosmology ansatz. Section 3 discusses the methodology used to constrain the model's power index with the $H(z)$ data set. Finally, Section 4 presents a summary of the main results.

Mathematical Framework of Power-Law Cosmology

The observed large-scale homogeneity and isotropy of the universe indicate that its geometry can be described by the Friedmann–Lemaître–Robertson–Walker (FLRW) metric. For a spatially flat FLRW metric, the line element is given by

$$ds^2 = c^2 dt^2 - a^2(t) [dr^2 + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2)], \quad (2.1)$$

Here, c denotes the speed of light, t represents the proper time, and (r, θ, ϕ) are the spherical polar co-moving coordinates. The function $a(t)$ is known as the cosmic scale factor or expansion parameter that describes the time evolution of the universe. In this work, we consider the general framework of power-law cosmology, where the scale factor evolves as

$$a(t) = a_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^\beta, \quad (2.2)$$

with t_0 denoting the present age of the Universe and β a dimensionless positive constant. Here and throughout, the subscript 0 refers to the present-day values of cosmological parameters. The Hubble parameter in this model is

$$H = \frac{\dot{a}}{a} = \frac{\beta}{t}, \quad H_0 = \frac{\beta}{t_0}. \quad (2.3)$$

The relation between the scale factor and the redshift is

$$\frac{a(t)}{a_0} = \frac{1}{1+z}. \quad (2.4)$$

Accordingly, the age of the Universe at redshift z can be written as

$$t(z) = \frac{\beta}{H(z)}, \quad (2.5)$$

where

$$H(z) = H_0 (1+z)^{1/\beta}. \quad (2.6)$$

The acceleration of the Universe is quantified by the deceleration parameter q , defined as

$$q = -\frac{\ddot{a}}{aH^2} = \frac{1}{\beta} - 1, \quad (2.7)$$

where $q < 0$ indicates an accelerating universe, while $q \geq 0$ corresponds to a decelerating or coasting expansion. In terms of q , Eq. (2.6) can be recast as

$$H(z) = H_0 (1+z)^{1+q}. \quad (2.8)$$

Equation (2.8) highlights that the parameters H_0 and q govern the cosmic history in power-law cosmology. In this paper, we focus on constraining these two parameters using the latest 31 data points of $H(z)$ measurements.

Table 1: Hubble parameter measurements at different redshifts [20]

0.0900	69.0	12.0
0.1700	83.0	8.0
0.2700	77.0	14.0
0.4000	95.0	17.0
0.9000	117.0	23.0
1.3000	168.0	17.0

1.4300	177.0	18.0
1.5300	140.0	14.0
1.7500	202.0	40.0
0.4800	97.0	62.0
0.8800	90.0	40.0
0.1791	75.0	4.0
0.1993	75.0	5.0
0.3519	83.0	14.0
0.5929	104.0	13.0
0.6797	92.0	8.0
0.7812	105.0	12.0
0.8754	125.0	17.0
1.0370	154.0	20.0
0.0700	69.0	19.6
0.1200	68.6	26.2
0.2000	72.9	29.6
0.2800	88.8	36.6
1.3630	160.0	33.6
1.9650	186.5	50.4
0.3802	83.0	13.5
0.4004	77.0	10.2
0.4247	87.1	11.2
0.4497	92.8	12.9
0.4783	80.9	9.0
0.4700	89.0	23.0

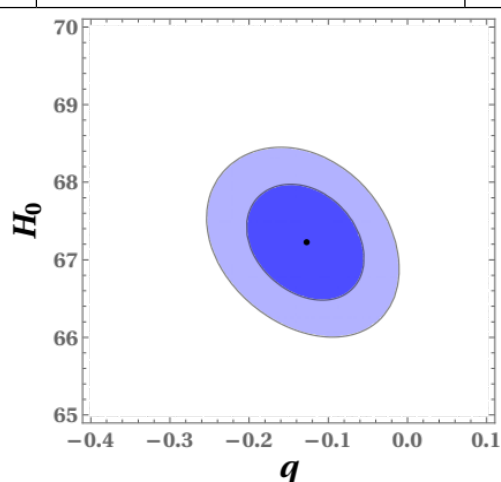


Figure 1. Likelihood contours in the q - H_0 plane obtained from $H(z)$ data. The 1σ (dark shaded) and 2σ (light shaded) confidence regions are shown, with H_0 in units of km/s/Mpc. The black dot marks the best-fit values of q and H_0 .

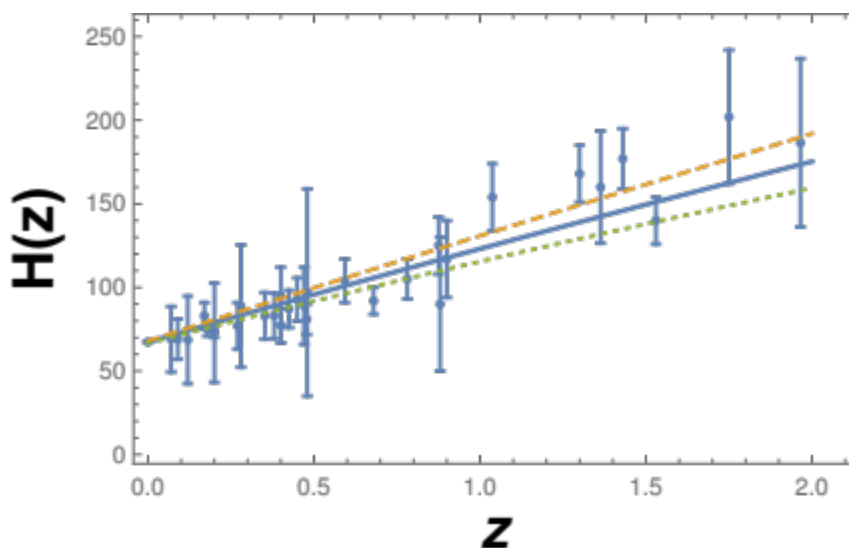


Figure 2. Observational $H(z)$ data points with error bars. The solid curve represents the best-fit model, while the dashed and dotted curves correspond to the maximum and minimum values within the 1σ region. The fit shows excellent agreement with the observational data, particularly at redshifts $z < 1$. The $H(z)$ is expressed in units of km/s/Mpc.

Data Analysis: Observational Hubble data

We constrain the parameters H_0 and q using the latest 31 data points of $H(z)$ measurements in the redshift range $0.07 \leq z \leq 1.75$, see Table 1. To complete the dataset, we additionally include the most precise determination of the Hubble constant from the *Planck* results. The results are summarized in Table 2. The χ^2 function is defined as

$$\chi_H^2(q, H_0) = \sum_{j=1}^{31} \frac{(H_{exp}(z_j; q, H_0) - H_{obs}(z_j))^2}{\sigma_j^2} \quad (3.1)$$

where H_{exp} is the theoretical prediction from power-law cosmology, H_{obs} the observed value, and σ_j the corresponding 1σ error. The model involves two free parameters, q and H_0 . Since power-law cosmology requires $\beta > 0$, the parameter space is restricted to $q > -1$ and $H_0 \geq 0$. Minimizing the χ^2 function yields the best-fit values

$$q = -0.1273, H_0 = 67.2264 \text{ km/s/Mpc}, \chi_{\delta}^2 = 0.6404,$$

where $\chi_{\delta}^2 = \chi_{min}^2 / \text{d.o.f.}$ The 1σ confidence intervals are found to be

$$q = -0.1273_{-0.0760}^{+0.0724}, H_0 = 67.2264_{-0.7469}^{+0.7471} \text{ km/s/Mpc}.$$

These results demonstrate that the power-law cosmological model is consistent with the most recent $H(z)$ measurements and supports an accelerating universe, in agreement with other independent observations. The 1σ (dark shaded) and 2σ (light shaded) likelihood contours in the $q-H_0$ plane are shown in Fig. 1, with the black dot marking the best-fit

point. Fig. 2 exhibits the observational $H(z)$ data points with error bars. The solid curve represents the best-fit model, while the dashed and dotted curves correspond to the maximum and minimum values within the 1σ region. The fit shows excellent agreement with the observational data, particularly at redshifts $z < 1$.

Table 2: Summary of the numerical results for a flat universe

Data	q	H_0 (km/s Mpc)	Reference
$H(z)$ (31 points)	$-0.1273^{+0.0724}_{-0.0760}$	$67.2264^{+0.7471}_{-0.7469}$	This work
$H(z)$ (14 points)	$-0.18^{+0.12}_{-0.12}$	$67.2264^{+0.7471}_{-0.7469}$	[21]
$H(z)$ (29 points)	$-0.0440^{+0.0496}_{-0.0508}$	$65.1738^{+1.6035}_{-1.5990}$	[19]

Conclusion

Precision cosmological observations provide a powerful tool for probing the fundamental properties of the Universe. In this work, we have examined power-law cosmology, characterized by $a(t) \propto t^\beta$, which exhibits several distinctive features. For $\beta \geq 1$, this model naturally addresses the horizon, flatness, and age problems, and offers a framework to dynamically alleviate the cosmological constant problem. We have constrained the key cosmological parameters, the Hubble constant H_0 and the deceleration parameter q , using the latest $H(z)$ observations. A notable advantage of this model is its simplicity, requiring only two free parameters to fit the data. The resulting numerical constraints are summarized in Tables 2. Our analysis indicates a negative value of the deceleration parameter, consistent with an accelerating Universe, confirming that $H(z)$ is well described by the power-law model. The estimated values of H_0 agree closely with independent determinations reported in the literature, as discussed in Section 1. Contour and error bar plots (Figs. 1 and 2) further demonstrate the consistency of the best-fit model with observational data. Despite its several appealing features, power-law cosmology is limited in capturing the redshift-dependent transition from deceleration to acceleration, as the deceleration parameter q is constant in this model. In summary, while power-law cosmology provides an elegant and phenomenologically viable description of many aspects of cosmic evolution, it remains insufficient to address all observational challenges, particularly the dynamical transition of cosmic acceleration.

Acknowledgments

MS acknowledges Integral University, Lucknow for financial support through Seed Money Grant 2024-2025 (Project Sanction No.: IUL/ICEIR/SMP/2024-04).

The contribution of the authors

Rida Fatima – Performed the theoretical part of the manuscript.

Mohd Shahalam – Developed the research idea and framework. Performed the data analysis part, wrote the manuscript, and supervised the project.

References

1. V. Sahni and A. A. Starobinsky, The Case for a Positive Cosmological Lambda-term, *Int. J. Mod. Phys. D* 9, 373 (2000).
2. D. Lohiya, M. Sethi, A programme for a problem-free cosmology within the framework of a rich class of scalar tensor theories, *Class. Quantum Grav.*, 16, 1545 (1999).
3. Meetu Sethi, Annu Batra, and Daksh Lohiya, Comment on “Observational constraints on power-law cosmologies”, *Phys. Rev. D* 60, 108301 (1999).
4. A. Batra, D. Lohiya, S. Mahajan, A. Mukherjee, Nucleosynthesis in a Universe with a Linearly Evolving Scale Factor, *International Journal of Modern Physics D* 9, p. 757–773 (2000).
5. S. Gehlaut, A. Mukherjee, S. Mahajan, D. Lohiya, A Freely Coasting Universe, *Spacetime & Substance* 4 (2002).
6. A. Dev, M. Safanova, D. Jain, D. Lohiya, Constraints on Power-Law Cosmology from Observations, *Physics Letters B* 548 (2002) 12.
7. G. Sethi, P. Kumar, S. Pandey, D. Lohiya, “Cosmological Constraints on a Power Law Universe”, *Spacetime & Substance*, 6 (2005).
8. G. Sethi, A. Dev, D. Jain, Power-Law Cosmology and Observational Constraints, *Physics Letters B* 624 (2005).
9. Z.-H. Zhu, M. Hu, J. S. Alcaniz, Y.-X. Liu, Testing power-law cosmology with galaxy clusters, *Astronomy & Astrophysics* 483 (2008).
10. C. Kaeonikhom, B. Gumjudpai, E. N. Saridakis, Observational constraints on phantom power-law cosmology, *Physics Letters B* 695 (2011).
11. A. D. Dolgov, (In) The Very Early Universe, Cambridge U.P. Cambridge, England (1982).
12. L. H. Ford, Quantum Instability of De Sitter Space?, *Physical Review D* 35 (1987).
13. P. Mannheim, D. Kazanas, Exact Vacuum Solution to Conformal Weyl Gravity and Galactic Rotation Curves, *General Relativity and Gravitation* 22 (1990).
14. R. E. Allen, “Four Testable Predictions of Instanton Cosmology”, arXiv:astro-ph/9902042 (1999).
15. S. Weinberg, The Cosmological Constant Problem, *Reviews of Modern Physics* 61 (1989).
16. E. W. Kolb, A Coasting Cosmology, *The Astrophysical Journal* 344 (1989).
17. W. L. Freedman et al., Final Results from the Hubble Space Telescope Key Project to Measure the Hubble Constant, *The Astrophysical Journal* 553 (2001).
18. N. Aghanim et al. (Planck Collaboration), Planck 2018 results. VI. Cosmological parameters, *Astronomy & Astrophysics* 641 (2020). doi:10.1051/0004-6361/201833910.
19. S. Rani, A. Altaibayeva, M. Shahalam, J. K. Singh, R. Myrzakulov, Constraints on cosmological parameters in power-law cosmology, *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics JCAP* 03 (2015).
20. S. Vagnozzi, A. Loeb, M. Moresco, Eppure è piatto? The cosmic chronometer take on spatial curvature and cosmic concordance, *The Astrophysical Journal* 908 (2021).

21. S. Kumar, Observational constraints on Hubble constant and deceleration parameter in power-law cosmology, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 422 (2012).

Рида Фатима, Мохд Шахалам

Физика факультеті, Интеграл университеті, Лакхнау, Үндістан

(E-mail: mohdshahamu@gmail.com)

Хаббл телескопының бақылау деректерімен дәрежелік космологиялық модельді шектеу

Аңдатпа. Бұл жұмыста біз космологияның бақылаушы шектеулерін талдаймыз-ғаламның кеңеюінің қарапайым, бірақ мағыналы моделі. Бұл модель екі параметрмен сипатталады: Қазіргі кеңею жылдамдығын белгілейтін Хаббл константасы (H_0) және ғарыштық үдеудің немесе баяулаудың табиғатын сипаттайтын баяулау параметрі (q). Хабблдың 31 бақылау нүктесінің соңғы жинағын қолдана отырып, біз осы параметрлерге жоғары дәлдікпен шектеулер қоямыз. Біздің талдауымыз көрсеткендей, космология деректердің таңқаларлықтай жақсы сәйкестігін қамтамасыз ете алады, алынған 1σ бағалары әдебиетте жарияланған соңғы нәтижелерге сәйкес келеді. Бұл сәйкестік ғарыштық кеңеюдің феноменологиялық сипаттамасы ретінде модельдің өзектілігін көрсетеді. Дегенмен, оның ауқымды трендтерді сәтті қайталауына қарамастан, модельде шектеулер бар, әсіресе тарихтағы баяулаудан үдеуге көшу сияқты нәзік динамикалық сипаттамаларды қарастырған кезде. Жалпы, көрсетілген космология ғарыштық эволюцияның көптеген аспектілерін талғампаз және феноменологиялық тұрғыдан тиімді сипаттауды қамтамасыз еткенімен, ол барлық бақылау мәселелерін, атап айтқанда ғарыштық үдеудің динамикалық ауысуын шешу үшін әлі де жеткіліксіз.

Түйін сөздер: ғарыштық жеделдету, деректерді талдау, Хаббл деректері, қызылға жылжу, қуат заңы космологиясы

Рида Фатима, Мохд Шахалам

Физический факультет Интегрального университета, Лакхнау, Индия

(E-mail: mohdshahamu@gmail.com)

Ограничение степенной космологической модели данными наблюдений телескопа Хаббла

Абстракт. В данной работе мы анализируем наблюдательные ограничения степенной космологии – простой, но содержательной модели расширения Вселенной. Эта модель характеризуется двумя параметрами: постоянной Хаббла (H_0), которая задаёт современную скорость расширения, и параметром замедления (q), который описывает природу космического ускорения или замедления. Используя последнюю компиляцию из 31 точки наблюдений Хаббла, мы устанавливаем ограничения на эти параметры с повышенной точностью. Наш анализ показывает, что степенная космология способна обеспечить удивительно хорошее соответствие

данным, при этом полученные оценки 1σ остаются согласованными с недавними результатами, опубликованными в литературе. Это соответствие подчёркивает актуальность модели как феноменологического описания космического расширения. Однако, несмотря на её успешное воспроизведение крупномасштабных трендов, модель имеет ограничения, особенно при рассмотрении более тонких динамических характеристик, таких как переход от замедления к ускорению в истории. В целом показано что, хотя степенная космология обеспечивает элегантное и феноменологически жизнеспособное описание многих аспектов космической эволюции, ее по-прежнему недостаточно для решения всех наблюдательных задач, в частности динамического перехода космического ускорения.

Ключевые слова: космическое ускорение, анализ данных, данные Хаббла, красное смещение, степенная космология

References

1. V. Sahni and A.A. Starobinsky, The Case for a Positive Cosmological Lambda-term, *Int. J. Mod. Phys. D* 9, 373 (2000).
2. D. Lohiya, M. Sethi, A programme for a problem-free cosmology within the framework of a rich class of scalar tensor theories, *Class. Quantum Grav.*, 16, 1545 (1999).
3. Meetu Sethi, Annu Batra, and Daksh Lohiya, Comment on “Observational constraints on power-law cosmologies”, *Phys. Rev. D* 60, 108301 (1999).
4. A. Batra, D. Lohiya, S. Mahajan, A. Mukherjee, Nucleosynthesis in a Universe with a Linearly Evolving Scale Factor, *International Journal of Modern Physics D* 9, p. 757–773 (2000).
5. S. Gehlaut, A. Mukherjee, S. Mahajan, D. Lohiya, A Freely Coasting Universe, *Spacetime & Substance* 4 (2002).
6. A. Dev, M. Safanova, D. Jain, D. Lohiya, Constraints on Power-Law Cosmology from Observations, *Physics Letters B* 548 (2002) 12.
7. G. Sethi, P. Kumar, S. Pandey, D. Lohiya, “Cosmological Constraints on a Power Law Universe”, *Spacetime & Substance*, 6 (2005).
8. G. Sethi, A. Dev, D. Jain, Power-Law Cosmology and Observational Constraints, *Physics Letters B* 624 (2005).
9. Z.-H. Zhu, M. Hu, J. S. Alcaniz, Y.-X. Liu, Testing power-law cosmology with galaxy clusters, *Astronomy & Astrophysics* 483 (2008).
10. C. Kaeonikhom, B. Gumjudpai, E. N. Saridakis, Observational constraints on phantom power-law cosmology, *Physics Letters B* 695 (2011).
11. A. D. Dolgov, (In) The Very Early Universe, Cambridge U.P. Cambridge, England (1982).
12. L. H. Ford, Quantum Instability of De Sitter Space?, *Physical Review D* 35 (1987).
13. P. Mannheim, D. Kazanas, Exact Vacuum Solution to Conformal Weyl Gravity and Galactic Rotation Curves, *General Relativity and Gravitation* 22 (1990).
14. R. E. Allen, “Four Testable Predictions of Instanton Cosmology”, arXiv:astro-ph/9902042 (1999).
15. S. Weinberg, The Cosmological Constant Problem, *Reviews of Modern Physics* 61 (1989).
16. E. W. Kolb, A Coasting Cosmology, *The Astrophysical Journal* 344 (1989).
17. W. L. Freedman et al., Final Results from the Hubble Space Telescope Key Project to Measure the Hubble Constant, *The Astrophysical Journal* 553 (2001).

18. N. Aghanim et al. (Planck Collaboration), Planck 2018 results. VI. Cosmological parameters, *Astronomy & Astrophysics* 641 (2020). doi:10.1051/0004-6361/201833910.
19. S. Rani, A. Altaibayeva, M. Shahalam, J. K. Singh, R. Myrzakulov, Constraints on cosmological parameters in power-law cosmology, *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics JCAP* 03 (2015).
20. S. Vagnozzi, A. Loeb, M. Moresco, Eppur è piatto? The cosmic chronometer take on spatial curvature and cosmic concordance, *The Astrophysical Journal* 908 (2021).
21. S. Kumar, Observational constraints on Hubble constant and deceleration parameter in power-law cosmology, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 422 (2012).

Information about the authors:

Rida Fatima – bachelor student, Department of Physics, Integral University, Lucknow 226026, India

Mohd Shahalam – the corresponding author, PhD, Professor of Department of Physics, Integral University, Lucknow 226026, India

Рида Фатима – бакалавриат студенті, Интегралдық университетінің физика факультеті, Лакхнау 226026, Үндістан

Мохд Шахалам – хат-хабар авторы, PhD, физика кафедрасының профессоры, Интеграл университеті, Лакхнау 226026, Үндістан

Рида Фатима – студентка бакалавриата физического факультета Интегрального университета, Лакхнау, 226026, Индия

Мохд Шахалам – PhD, профессор физического факультета Интегрального университета, Лакхнау, 226026, Индия



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/>).



Решение для $F(R, X, \varphi)$ модели в сферической метрике

К.К. Ержанов^{id}, А.Н. Амангельдиев^{id}, А.Б. Алтайбаева^{id}, Г.Б. Бауржан^{id}

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

(E-mail: aamangeldiev525@gmail.com)

Аннотация. В работе рассматриваются аналитические и численные подходы к построению решений в рамках обобщённой гравитационной модели вида $F(R, X, \varphi)$. Особое внимание уделено исследованию метрик сферической симметрии, позволяющих изучить поведение гравитационных и скалярных степеней свободы в компактных объектах и космологических моделях. Показано, что введение нелинейной зависимости функции действия от комбинации $F(R, X, \varphi)$ существенно расширяет класс допустимых решений по сравнению с традиционной $F(R)$ – гравитацией. Анализируются условия существования статических и динамических решений, их устойчивость, а также возможные физические интерпретации в контексте модифицированной теории гравитации и астрофизики. Полученные результаты открывают перспективы для описания тёмной материи, тёмной энергии и гравитационных коллапсов в рамках единого формализма. Дополнительно рассматриваются возможные проявления модели в сценариях ранней Вселенной, включая инфляционную динамику и фазовые переходы, а также влияние на образование структур и эволюцию космологических возмущений. Подчёркивается роль численных методов в исследовании сложных режимов, где аналитические решения оказываются недоступными. Особое внимание уделяется сравнительному анализу с известными решениями в общей теории относительности, что позволяет выявить новые физические эффекты и ограничения на параметры модели. Представленные результаты могут быть полезны при разработке альтернативных космологических сценариев и в дальнейшем применены к анализу астрофизических наблюдений, включая гравитационно-волновые сигналы и динамику компактных звёздных объектов.

Ключевые слова: метрика Шварцшильда, тензор Риччи, уравнение Клейна – Гордона, радиальная координата, модифицированная гравитация

Введение

Современная космология и теория гравитации выходят за рамки классической общей теории относительности (ОТО), так как последние десятилетия наблюдательные данные указывают на наличие тёмной материи и тёмной энергии, природа которых остаётся неясной. Одним из наиболее продуктивных направлений исследований являются модифицированные гравитационные теории, в которых действие зависит не только от скаляра кривизны R , но и от дополнительных инвариантов и полей. К числу таких моделей относится обобщённая $F(R, X, \varphi)$ – гравитация [1], где X описывает кинетический член скалярного поля, а φ играет роль динамической скалярной степени свободы.

Рассмотрение данной модели в сферически симметричной метрике является особенно важным, так как такие решения имеют непосредственное применение в астрофизике и космологии: они описывают строение компактных объектов, чёрных дыр, звёздных конфигураций, а также позволяют исследовать сценарии коллапса и расширения Вселенной. Сферическая симметрия при этом значительно упрощает математический анализ, сохраняя при этом физическую значимость решений.

Целью данной работы является исследование условий существования решений для $F(R, X, \varphi)$ – модели в сферической метрике, анализ их устойчивости и возможных физических интерпретаций.

Теоретическая часть

Модель инкапсулирует богатый ландшафт гравитационных явлений, предоставляя возможности для изучения отклонений от общей теории относительности. Мы анализируем геодезическое движение как для массивных, так и для безмассовых частиц в сферически симметричном статическом пространстве-времени, обобщая метрики Шварцшильда в этой расширенной гравитационной структуре [2].

Для сферически симметричной статической метрики мы предполагаем:

$$ds^2 = -A(r)dt^2 + B(r)dr^2 + M(r)(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2), \quad (1)$$

где $A(r)$, $B(r)$ и $M(r)$ определяются только из радиальной координаты r . Это стандартная форма метрики, описывающая сферически симметричное пространство-время, которая используется для анализа кручения и динамики в искривленном пространстве. Тензор Риччи для такой метрики можно описать следующим образом

$$R = -\frac{1}{B} \left(\frac{A''}{A} + \frac{2M''}{M} - \frac{A'}{2A} \frac{B'}{B} - \frac{M'B'}{MB} - \frac{A'^2}{2A^2} - \frac{M'^2}{2M^2} - \frac{2B}{M} \right). \quad (2)$$

Уравнения движения примет вид:

$$f_R \left(2 \frac{A''}{A} - \frac{A'B'}{AB} - \frac{A'^2}{A^2} + 2 \frac{M'A'}{MA} \right) = -2Bf + 4 \left[f_R'' + f_R' \left(\frac{M'}{M} - \frac{B'}{2B} \right) \right], \quad (3)$$

$$f_R \left(2 \frac{A''}{A} - 4 \frac{M''}{M} - \frac{A'B'}{AB} - 2 \frac{M'B'}{MB} - \frac{A'^2}{A^2} - 2 \frac{M'^2}{M^2} \right) = -2Bf + 2f'_R \left(\frac{A'}{A} + 2 \frac{M'}{M} \right) - 2\varepsilon f_X \phi'^2, \quad (4)$$

$$f_R \left(2 \frac{M''}{M} - \frac{B'M'}{BM} + \frac{M'A'}{MA} - \frac{4B}{M} \right) = -2Bf + 4 \left[f_R'' + \frac{1}{2} f'_R \left(\frac{A'}{A} - \frac{B'}{B} + \frac{M'}{M} \right) \right] \quad (5)$$

Уравнение Клейна – Гордона [3] выглядит следующим образом:

$$f_X \left[\phi'' + \frac{1}{2} \phi' \left(\frac{A'}{A} - \frac{B'}{B} + 2 \frac{M'}{M} \right) \right] + f'_X \phi' + \varepsilon B f_\phi = 0 \quad (6)$$

Объединяем уравнения (3), (4), (5), получаем следующее [4]:

$$2f'_R \frac{B'}{B} + \varepsilon f_X \phi'^2 - 2 \frac{B}{M} f_R + Bf = 0, \quad (7)$$

где $f = (C_1 R)^2 + C_3 X + C_4 \phi$, $f_R = 2C_1^2 R$, $f_X = C_3$. Если мы введем такие параметры что $A = B^{-1}$, $A' = -B^{-2} B'$, $A'' = 2B^{-3} B'^2 - B'^{-2} B''$, $M = const$, мы можем подставить эти выражения в уравнение (64), и получим следующее [5]:

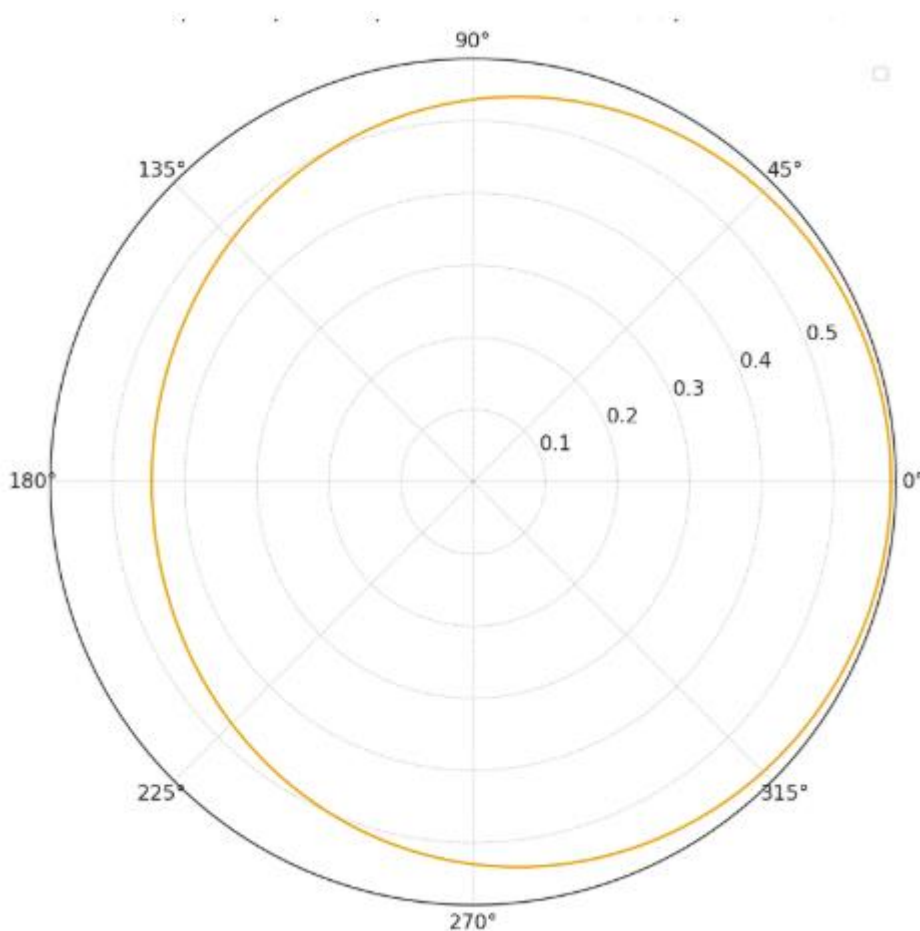
$$R = \frac{2}{M} - \frac{2B'^2}{B^3} + \frac{B''}{B^2}. \quad (8)$$

Заменяем выражение (7) на (8) получаем

$$\begin{aligned} & \frac{8C_1^2}{M} - 8C_1^2 \frac{B'^2}{B^3} + 4C_1^2 \frac{B''}{B^2} - B \left(C_1^2 \left(\frac{2}{M} - \frac{2B'^2}{B^3} + \frac{B''}{B^2} \right)^2 + C_2^2 X^2 + 2C_2 X C_1 \left(\frac{2}{M} - \frac{2B'^2}{B^3} + \frac{B''}{B^2} \right) + \frac{2C_3}{M} - 2C_3 \frac{B'^2}{B^3} + C_3 \frac{B''}{B^2} \right) - \\ & - 2 \left(\frac{B}{M} + \frac{B'}{B} \right) (C_1 C_2 X + C_3) + 2C_1^2 \left(\frac{2}{M} - \frac{2B'^2}{B^3} + \frac{B''}{B^2} \right) \frac{2B}{M} + 2C_1^2 \left(\frac{2}{M} - \frac{2B'^2}{B^3} + \frac{B''}{B^2} \right) 2 \frac{B'}{B} = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Если мы предположим что $C_3 = -C_1 C_2 X$, $C_5 = -X C_4 - \frac{3C_3 C_2}{4C_1}$, то мы можем получить следующее решение для $B(r)$:

$$B = \frac{4C_1^2 M (4C_1^2 + C_3 M + 2C_1 C_2 M X)}{M^2 \left((r + C_2)^2 + 16C_1^3 + C_2 M X (r + C_2)^2 + 4C_1 C_2 C_3 M^2 X (r + C_2)^2 + 4C_1^2 M (2C_3 + C_2^2 M X^2) (r + C_2)^2 + 4C_1^4 (4r^2 - M^2 C_1 + 8r C_2 + 4C_2^2) \right)}. \quad (10)$$

Рисунок 1. Движение частицы для решения $B(r)$

На рисунке приведена полярная кривая, полученная численным решением уравнения $r=B(r, \theta)$. Радиус-вектор $r(\theta)$ найден методом фиксированной точки для каждого угла. Полученное решение образует почти симметричную замкнутую кривую. Форма кривой демонстрирует слабую зависимость от угла θ , что соответствует почти круговой симметрии.

Теперь, если учесть, что r стремится к слишком большому значению, то из уравнений (3), (4), (5) можно получить $f(r)$:

$$f(r) = 1 - \frac{2G_0 M_0}{r} \left(1 + \frac{G_0^2 M_0^2 \varepsilon}{6r} \right)^{-3} \quad (11)$$

График функции для этого решения выглядит следующим образом:

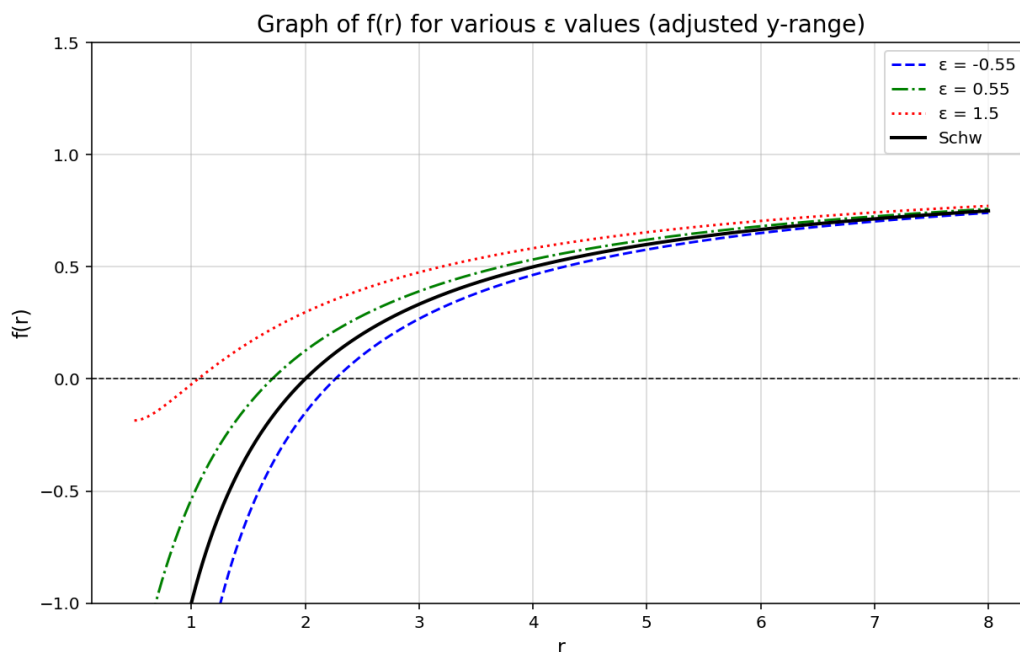


Рисунок 2 график для решения $f(r)$ задачи Шварцшильда

Из графика видно, что при малых радиусах различие между кривыми существенно: отрицательные значения ε смещают положение горизонта событий $f(r)=0$ к большим r , а положительные значения уменьшают радиус горизонта. Однако при увеличении радиуса все решения постепенно сходятся к чёрной кривой, то есть к классическому Шварцшильдовскому решению. Таким образом, параметр ε влияет только на ближнюю область около горизонта, тогда как на больших расстояниях модифицированная метрика асимптотически совпадает с решением Шварцшильда.

Заключение

В рамках $F(R, X, \varphi)$ – модели в сферической метрике получены уравнения, описывающие динамику гравитационного поля и скалярной компоненты. Показано, что наличие дополнительных инвариантов и скалярного поля существенно расширяет класс возможных решений по сравнению с общей теорией относительности. В частности, изменяются свойства фотонной сферы и параметры сильного гравитационного линзирования. Такие эффекты могут иметь наблюдаемые астрофизические следствия и использоваться для тестирования модифицированных теорий гравитации. Таким образом, исследование данной модели открывает перспективы для описания тёмной материи, тёмной энергии и структуры компактных объектов.

Благодарность

Данное исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP23489289).

Вклад авторов

Ержанов К.К. – разработал концепцию и дизайн исследования.

Амангельдиев А.Н. – осуществил сбор и анализ данных.

Алтайбаева А.Б. – выполнила обзор литературы.

Бауыржан Г.Б. – осуществил редактирование рукописи и обеспечил техническую поддержку исследования.

Список литературы

1. Einstein A. The foundation of the general theory of relativity, *Annalen der Physik* 49, p. 769–822(1916). DOI: 10.1002/andp.19163480702.
2. Lütfüoğlu B.C., Saka E.U., Shermatov A., Ibragimov I., Rayimbaev J., Muminov S. Gravitational quasinormal modes of Dymnikova black holes, *arxiv*, p. 1–2 (2025). DOI: arXiv:2509.24633.
3. Yerzhanov K.K., Baurzhan G., Altaybaeva A., Myrzakulov R. Inflation from the symmetry of the generalized cosmological model, *Symmetry (Basel)* (2021). DOI: <https://www.webofscience.com/wos/woscc/full-record/WOS:000554820300163>.
4. Momeni D., Yerzhanov K.K., Myrzakulov R. Quantized black hole and Heun function, *Canadian Journal of Physics* 90, p. 877–881(2012). DOI: <https://www.webofscience.com/wos/woscc/full-record/WOS:000308973200006>.
5. Ibrokhimov T., Turakhanov Z., Atamuratov F., Abdujabbarov A., Yerzhanov K.K., Baurzhan G., Abduvokhidov A. Testing regular scale-dependent black hole space time using particle dynamics: Shadow and gravitational weak lensing, *Physics of the Dark Universe* (2025). DOI: <https://www.webofscience.com/wos/woscc/full-record/WOS:001398426900001>.

K.K. Yerzhanov, A.N. Amangeldiyev, A.B. Altaybayeva, G.B. Baurzhan

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

(E-mail: aamangeldiev525@gmail.com)

Solution for the $F(R, X, \varphi)$ model in the spherical metric

Abstract. This paper considers analytical and numerical approaches to constructing solutions within the framework of a generalized gravitational model of the form $F(R, X, \varphi)$. Particular attention is paid to the study of spherical symmetry metrics, which make it possible to study the behavior of gravitational and scalar degrees of freedom in compact objects and cosmological models. It is shown that the introduction of a nonlinear dependence of the action function on the combination $F(R, X, \varphi)$ significantly expands the class of admissible solutions compared to traditional $F(R)$ – gravity. The conditions for the existence of static and dynamic solutions, their stability, and possible physical interpretations in the context of a modified theory of gravity and astrophysics are analyzed. The obtained results open up prospects for describing dark matter, dark energy, and gravitational collapses within a unified formalism. Additionally, possible manifestations of the model in scenarios of the early Universe are considered, including inflationary dynamics and phase transitions, as well as the influence of cosmological perturbations on the formation of structures and the evolution of cosmological perturbations. The role of numerical methods in studying complex regimes where analytical solutions are inaccessible is emphasized. Particular attention is given to comparative analysis with known solutions in general relativity, which allows for the identification of new physical effects and constraints on the model parameters. The presented results may be useful in developing alternative cosmological scenarios and can be further applied to the analysis of astrophysical observations, including gravitational-wave signals and the dynamics of compact stellar objects.

Key words: Schwarzschild metric, Ricci tensor, Klein–Gordon equation, radial coordinate, modified gravity

К.К. Ержанов, А.Н. Амангельдиев, А.Б. Алтайбаева, Г.Б. Бауржан
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан
(E-mail: aamangeldiev525@gmail.com)

Сфералық метрикадағы $F(R, X, \varphi)$ моделінің шешімі

Аннотация. Бұл жұмыс $F(R, X, \varphi)$ түріндегі жалпыланған гравитациялық модельде шешімдерді құрудың аналитикалық және сандық тәсілдерін қарастырады. Сфералық симметрия метрикасын зерттеуге ерекше назар аударылады, олар ықшам нысандар мен космологиялық модельдердегі гравитациялық және скалярлық еркіндік дәрежелерінің мінез-құлқын зерттеуге мүмкіндік береді. Әрекет функциясының $F(R, X, \varphi)$ комбинациясына сызықты емес тәуелділігін енгізу дәстүрлі $F(R)$ – ауырлық күшімен салыстырғанда рұқсат етілген шешімдер класын едәуір кеңейтетіні көрсетілген. Статикалық және динамикалық шешімдердің болу шарттары, олардың тұрақтылығы және гравитация мен астрофизиканың өзгертілген теориясы контекстіндегі мүмкін физикалық интерпретациялар талданады. Алынған нәтижелер біртұтас формализм аясында қараңғы материяны, қараңғы энергияны және гравитациялық күйреуді сипаттау перспективаларын ашады. Сонымен қатар, инфляциялық динамика мен фазалық ауысуларды қоса алғанда, ерте Әлемнің сценарийлеріндегі модельдің ықтимал көріністері, сондай-ақ құрылымның қалыптасуына және космологиялық бұзылулардың эволюциясына космологиялық бұзылулардың әсері қарастырылады. Аналитикалық шешімдер қол жетімсіз күрделі режимдерді зерттеуде сандық әдістердің рөлі ерекше атап өтіледі. Модель параметрлеріне жаңа физикалық әсерлер мен шектеулерді анықтауға мүмкіндік беретін жалпы салыстырмалылықтағы белгілі шешімдермен салыстырмалы талдауға ерекше назар аударылады. Ұсынылған нәтижелер альтернативті космологиялық сценарийлерді әзірлеуде пайдалы болуы мүмкін және әрі қарай астрофизикалық бақылауларды, соның ішінде гравитациялық-толқын сигналдарын және ықшам жұлдыздық объектілердің динамикасын талдауға қолданылуы мүмкін.

Түйінді сөздір: Шварцшильд метрикасы, Риччи тензоры, Клейн – Гордон теңдеуі, радиалдық координата, өзгертілген ауырлық

References

1. Einstein A. The foundation of the general theory of relativity, *Annalen der Physik* 49, p. 769–822(1916). DOI: 10.1002/andp.19163480702.
2. Lütfüoğlu B.C., Saka E.U., Shermatov A., Ibragimov I., Rayimbaev J., Muminov S. Gravitational quasinormal modes of Dymnikova black holes, *arxiv*, p. 1–2 (2025). DOI: arXiv:2509.24633.
3. Yerzhanov K.K., Baurzhan G., Altaybaeva A., Myrzakulov R. Inflation from the symmetry of the generalized cosmological model, *Symmetry (Basel)* (2021). DOI: <https://www.webofscience.com/wos/woscc/full-record/WOS:000554820300163>.
4. Momeni D., Yerzhanov K.K., Myrzakulov R. Quantized black hole and Heun function, *Canadian Journal of Physics* 90, p. 877–881(2012). DOI: <https://www.webofscience.com/wos/woscc/full-record/WOS:000308973200006>.

5. Ibrokhimov T., Turakhanov Z., Atamuratov F., Abdujabbarov A., Yerzhanov K.K., Baurzhan G., Abduvokhidov A. Testing regular scale-dependent black hole space time using particle dynamics: Shadow and gravitational weak lensing, Physics of the Dark Universe (2025). DOI: <https://www.webofscience.com/wos/woscc/full-record/WOS:001398426900001>.

Сведения об авторах:

К.К. Ержанов – PhD, кафедра общей и теоретической физики Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайтпасова 13, Астана, 10008, Казахстан

А.Н. Амангельдиев – автор для корреспонденции, докторант кафедры общей и теоретической физики Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайтпасова 13, Астана, 10008, Казахстан

А.Б. Алтайбаева – PhD, кафедра общей и теоретической физики Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайтпасова 13, Астана, 10008, Казахстан

Г.Б. Бауржан – PhD, кафедра космической техники и технологий Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева, ул. Мунайтпасова 13, Астана, 10008, Казахстан

К.К. Ержанов – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің жалпы және теориялық физика кафедрасы, Мұнайтпасов көшесі, 13, Астана, 10008, Қазақстан

А.Н. Амангельдиев – хат-хабар авторы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, жалпы және теориялық физика кафедрасының докторанты, Мұнайтпасов көшесі, 13, Астана, 10008, Қазақстан

А.Б. Алтайбаева – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің жалпы және теориялық физика кафедрасы, Мұнайтпасов көшесі, 13, Астана, 10008, Қазақстан

Г.Б. Бауржан – PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Ғарыштық техника және технологиялар кафедрасы, Мұнайтпасов көшесі, 13, Астана, 10008, Қазақстан

К.К. Yerzhanov – PhD, Department of general and theoretical physics of L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov St., Astana, 10008, Kazakhstan

A.N. Amangeldiyev – the corresponding author, Doctoral student of the Department of General and Theoretical Physics of L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov St., Astana, 10008, **Kazakhstan**

A.B. Altaybayeva – PhD, Department of general and theoretical physics of L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov St., Astana, 10008, Kazakhstan

G.B. Baurzhan – PhD, Department of Space Engineering and Technology of L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasov St., Astana, 10008, 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/>).



МРНТИ 55.22.01

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-26-40>

Научная статья

Сравнительный анализ покрытий на основе литой и порошковой проволоки при электродуговой металлизации

Б.К. Рахадиллов¹, Н.М. Магазов², А. Апсежанова², М.Б. Баяндинова^{3,4*}

¹ТОО «PlasmaScience», 070018, Казахстан, г. Усть-Каменогорск

²Научный центр защитных и функциональных покрытий, Восточно-Казахстанский технический университет имени Даулета Серикбаева, 070010, Казахстан, г. Усть-Каменогорск

³ТОО «Институт композиционных материалов» 070010, Казахстан, г. Усть-Каменогорск

⁴Восточно-Казахстанский университет имени Сарсена Аманжолова, 070002, Казахстан, г. Усть-Каменогорск

(E-mail: shohmanovamb@gmail.ru)

Аннотация. В статье представлен комплексный сравнительный анализ покрытий, полученных методом электродуговой металлизации с использованием литой и порошковой проволоки на подложках из стали 65Г. Основное внимание уделено влиянию технологических параметров процесса – скорости подачи проволоки, давления рабочего газа, дистанции распыления и температуры предварительного нагрева подложки – на формирование структуры, толщину, пористость и микротвёрдость покрытий. Установлено, что использование порошковой проволоки обеспечивает формирование более плотных и равномерных слоёв с минимальной пористостью (до 4,3 %) и повышенной микротвёрдостью (до 245 HV), в то время как литая проволока демонстрирует менее стабильные результаты. Экспериментально доказано, что повышение давления газа до 7–9 МПа способствует уплотнению покрытия за счёт увеличения кинетической энергии частиц, а чрезмерный предварительный нагрев подложки вызывает рост пористости и снижение толщины. Оптимальные режимы позволили достичь толщины покрытия до 712 мкм при сохранении низкой шероховатости. Полученные результаты подтверждают целесообразность применения порошковой проволоки и оптимизированных параметров электродуговой металлизации для создания износо- и коррозионностойких покрытий, востребованных в машиностроении, энергетике и смежных отраслях промышленности. Работа демонстрирует практическую значимость выбранного подхода и вносит вклад в развитие технологий поверхностного упрочнения.

Ключевые слова: электродуговая металлизация, порошковая проволока, литая проволока, сталь 65Г, покрытие, пористость, микротвёрдость, шероховатость.

Поступила 10.04.2025. После доработки 17.07.2025. Принята к печати 29.08.2025. Доступна онлайн 30.09.2025.

*автор для корреспонденции

Введение

В условиях современных требований к надёжности и долговечности изделий особое значение приобретает совершенствование методов упрочнения и защиты поверхностей. Одним из таких эффективных и широко применяемых методов является электродуговая металллизация, позволяющая формировать покрытия с высокими эксплуатационными характеристиками.

Электродуговая металллизация позволяет получить покрытия с высокими физико-механическими характеристиками. Однако для достижения оптимального качества покрытия необходимо учитывать множество факторов, влияющих на его характеристики. Ключевыми параметрами являются микроструктура, усталостная прочность, скорость износа, коррозионная стойкость, пористость покрытия, твердость, прочность, эффективность осаждения, адгезионная прочность, шероховатость поверхности и содержание оксидов [1,2]. На итоговые свойства покрытия существенно влияют различные пары по результатам исследования толщины и пористости покрытий в зависимости от изменения параметров метры технологии термического электродугового напыления. Среди них можно выделить напряжение, ток, скорость подачи проволоки, расстояние распыления (SoD), геометрию сопла, среду покрытия (инертная, окружающая или вакуумная камера), давление распыляемого газа, исходный материал, тип распыляемого газа (воздух или азот), предварительный нагрев поверхности подложки или последующую термообработку ламелей покрытия [3–9]. Также важны методы подготовки поверхности, такие, как дробеструйная обработка, пескоструйная обработка и грубая резьба.

Многочисленные исследования подтвердили важность оптимизации параметров термического напыления для достижения требуемых характеристик металлических покрытий. Например, Ариф и др. [2] изучили влияние расстояния напыления (SoD) на характеристики латунных покрытий, наносимых на низкоуглеродистую сталь, установив, что увеличение напряжения и SoD приводит к росту шероховатости поверхности, при этом эффективность осаждения (DE) значительно снижается. В работе [10] исследованы характеристики стальных покрытий при изменении давления газа-носителя, SoD и мощности факела, выявив, что плотность покрытия увеличивается при повышении давления газа-носителя и сокращении SoD. Джонсон и др. [11] продемонстрировали, что параметры напыления влияют на пористость и твердость цинковых покрытий. Кумар и др. [12] оптимизировали параметры для двухпроводного дугового напыления алюминиевого покрытия. Работа Кумара и Пандей [13] показала, как параметры плазменного напыления влияют на толщину покрытия и шероховатость поверхности. Тем не менее, неправильный выбор режимов ЭДМ может привести к высокой пористости, высокому содержанию оксидов, низкой эффективности напыления и высокой шероховатости поверхности [7, 14]. Это подчеркивает необходимость оптимизации параметров ЭДМ для получения эффективных покрытий для конкретных применений [15].

Актуальность исследования заключается в том, что современные технологические процессы требуют повышения долговечности и эксплуатационной надёжности деталей машин и конструкций, работающих в условиях значительных нагрузок и агрессивных сред. Электродуговая металлизация является одним из перспективных методов упрочнения и восстановления изношенных поверхностей, позволяя значительно продлить срок службы изделий. В связи с этим актуальной задачей является выбор оптимального материала проволоки, обеспечивающего наилучшие свойства покрытий с точки зрения адгезии, износостойкости.

Целью настоящего исследования являлось определение оптимального режима электродуговой металлизации и технологических параметров напыления, обеспечивающих формирование покрытий с минимальной пористостью. Кроме того, на основе выбранного оптимального режима проведено сравнительное исследование с применением литой и порошковой проволоки с целью оценки их влияния на микротвёрдость полученных покрытий.

Для достижения поставленной цели выполнялись следующие задачи: – изучить влияние основных технологических параметров электродуговой металлизации (скорости подачи проволоки, давления газа, дистанции напыления, температуры предварительного нагрева подложки) на толщину и пористость формируемых покрытий; - определить оптимальный режим напыления, обеспечивающий получение покрытий с минимальной пористостью и равномерной структурой; – провести сравнительный анализ микротвёрдости покрытий, сформированных с применением литой и порошковой проволоки, при одинаковых оптимальных условиях напыления.

Материалы и методы исследований

Материалы и методы получения металлизации

В напылении применялась установка электродуговой металлизации, включающая распылительный пистолет, источник питания и поршневой компрессор. Для напыления использовался сверхзвуковой дуговой металлизатор SX-600 (Гуанчжоу, Китай), включающий источник питания, дуговой распылитель, систему управления и подачу сжатого воздуха (рис. 1). Принцип работы основан на расплавлении проволочных электродов электрической дугой и распылении расплава струёй воздуха. Расплавленные частицы осаждаются на поверхность, образуя сплошное покрытие, толщина которого регулируется числом проходов и скоростью движения распылителя. Проволока подаётся через направляющие, дуга возникает между их концами, а сжатый воздух (более 100 м/с) переносит расплав на поверхность, формируя покрытие с высокой адгезией и низкой пористостью.

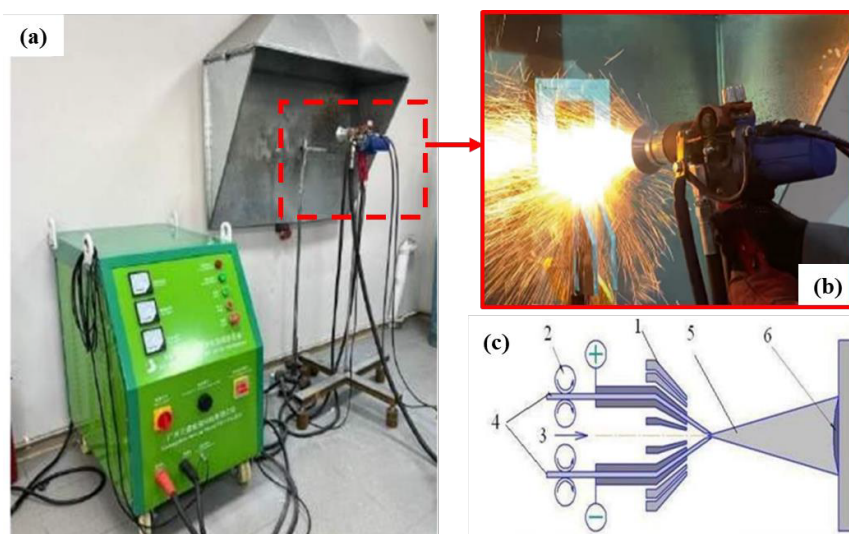


Рисунок 1. Общий вид комплекса для высокоскоростной электродуговой металлизации SX-600 (а); внешний вид распылительного пистолета (b); технологическая схема (с): 1 – корпус металлизатора, 2 – механизм подачи проволоки, 3 – канал для подачи сжатого воздуха, 4 – электродные проволоки, 5 – зона электрической дуги с распыленными частицами проволоки, 6 – сформированное напыленное покрытие [8]

В качестве подложки была использована сталь 65Г. Подложки были вырезаны из листового материала. Каждый образец имеет высоту 4 мм, длину 25 мм и ширину 10 мм. Для получения однородной и ровной поверхности образцы шлифовались на наждачной бумаге с зернистостью от 100 до 360.

С целью определения оптимальных условий напыления были проведены эксперименты по режимам, приведённым в таблице 1, при изменении давления газа (P), скорости подачи проволоки (V) и расстояния от сопла распылительного пистолета до поверхности образца (SoD). Напряжение составляло 42 ± 3 В, распыляющим газом служил воздух. Образцы напылялись равномерно в течение 10 секунд при комнатной температуре. Обозначения образцов соответствуют варьируемым параметрам: V – скорость подачи, D – дистанция, P – давление, T – предварительный нагрев.

Таблица 1. Режимы напыления при изменении режимов электродуговой металлизации

Образец	P, Па	V, см/с	D, мм	Образец	P, Па	V, см/с	D, мм
V1	9	2	200	P1	6	12	200
V2	9	4	200	P2	7	12	200
V3	9	8	200	P3	8	12	200
V4	9	12	200	P4	9	12	200
D1	9	12	100	T1	9	12	200
D2	9	12	150	T2	9	12	200
D3	9	12	200	T3	9	12	200
D4	9	12	250	T4	9	12	200

Пористость определяли с помощью оптического микроскопа Альтами МЕТ 5С с программным обеспечением для количественного анализа изображения. Подготовленные образцы не имели следов шлифования, полирования или выкрошивания структурных составляющих. Программное обеспечение «Altami», которым оснащен микроскоп, программа позволяет производить различные измерения выделенных графических объектов, в том числе измерять их площади [95]. Для всех преобразований использовался графический редактор Маркер. На СЭМ-изображении появляются поры, в покрытии выделяются красным цветом, поэтому, используя инструмент «Волшебная палочка» и задав интервал цвета, можно выделить поры. После этого Результат измерения отображался в табличном виде.

Пористость TiN покрытия в процентах вычислялась по формуле

$$P = \frac{BA}{TA} \times 100\% \quad (1)$$

где P – содержание пор, %,

TA (TotalArea) – общая площадь покрытия,

BA (BlackArea) – общая площадь черных областей.

Подставляя эти значения в формулу (1), определяли объемную пористость покрытия.

Толщина покрытий определялась с использованием СЭМ. Для анализа образцы покрытий были подготовлены путём поперечного скалывания, обеспечивающего чистую зону разлома. Перед исследованием срезы закреплялись на держателе под углом, обеспечивающим чёткий обзор поперечного сечения. СЭМ-изображения поперечного сечения получали при ускоряющем напряжении 15-20 кВ в режиме высоковакуумного сканирования. Толщина покрытия измерялась с помощью встроенного программного обеспечения микроскопа по калиброванной шкале, при этом учитывались средние значения, полученные по нескольким сечениям (не менее 5 точек измерения на каждом образце). Полученные значения усреднялись для повышения точности оценки. Измерения проводились на приборе Tescan Vega (Чехия).

По полученным результатам варьирования режимов были выбраны следующие условия (таблица 2) сверхзвуковой дуговой металлизации для проведения сравнительного анализа покрытий, сформированных с использованием литой и порошковой проволоки при электродуговой металлизации. В качестве материала для напыления использовались два типа проволоки – порошковая и литая, изготовленные из сталей марок Ст70 и Ст45. Все проволоки имели одинаковый диаметр 1,6 мм. Такой размер выбран ввиду его универсальности и совместимости с применяемыми распылительными системами электродуговой металлизации. Проволоки диаметром 1,6 мм обеспечивают оптимальное соотношение между стабильной подачей и эффективностью распыления, что способствует формированию равномерного покрытия [26]. Кроме того, использование стандартного диаметра упрощает настройку оборудования, поддерживает постоянные условия экспериментов и позволяет минимизировать влияние параметров подачи на характеристики наносимого слоя. Основные технологические характеристики используемых проволок приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Режимы напыления при сверхзвуковой дуговой металлизации

Параметр	Значение
Напряжение U, В	40
Ток I, А	250
Скорость подачи проволоки, см/с	12
Давление рабочего газа, МПа	0,7
Температура нагрева подложки, °С	250
Дистанция от распылителя до поверхности подложки, мм	150

Таблица 3 – Параметры напыляемых проволок

№	Маркировка образца	Название проволоки	Тип проволоки	Размер проволоки, мм
1	Л1	Ст70	литьевая	1,6
2	П1		порошковая	1,6
3	Л2	Ст45	литьевая	1,6
4	П2			1,6

Методы исследований

Микротвердость образцов определяли на приборе Metolab 502 ($\pm 3\%$) по методу Виккерса [16]. Параметры измерения: нагрузка 0,025 г, время выдержки 10 с. Число Виккерса (HV) рассчитывается по формуле:

$$HV = 1.854 \frac{P}{d^2} \quad (2)$$

где P – приложенная нагрузка, d – средняя диагональ вмятины.

Результаты и обсуждения

Толщина и пористость покрытий являются одними из основных свойств, характеризующих покрытия [17]. Полученные результаты демонстрируют зависимость этих параметров от условий напыления. Скорость подачи проволоки оказывает существенное влияние на формирование покрытий: с её увеличением возрастает их толщина (рис. 2). При подаче проволоки со скоростью 8 и 12 см/с пористость снижалась до 8,38% и 4,33% соответственно. Это связано с тем, что при более высокой скорости увеличивается объём напыляемого материала, благодаря чему покрытие формируется более равномерным и плотным. Дополнительно при интенсивной подаче возрастает количество частиц, осаждающихся на поверхность, что усиливает их ударное воздействие на ранее нанесённые слои. В результате покрытие уплотняется, а количество пор и пустот уменьшается.

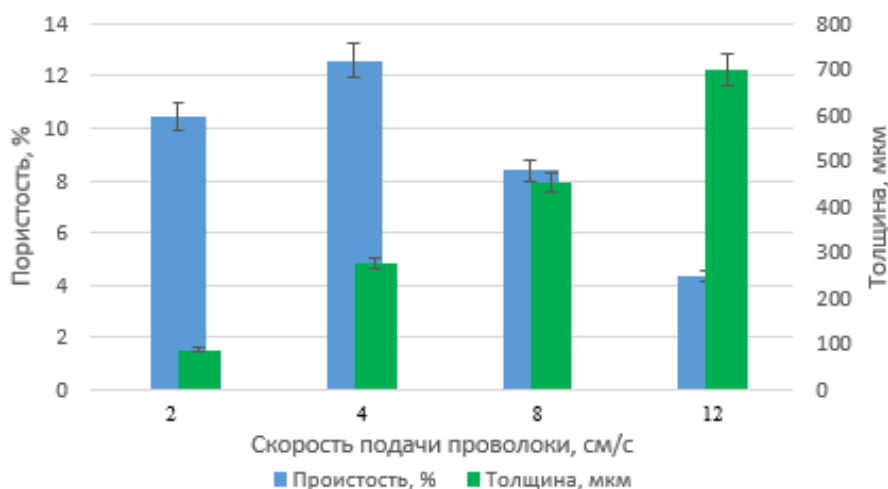


Рисунок 4. Влияние скорости подачи проволоки на толщину и пористость покрытия

Как показано на рисунке 3, максимальная толщина образцов (712 и 699 мкм) наблюдается при давлениях рабочего газа 7 и 9 МПа соответственно. Минимальные значения пористости также были зафиксированы для этих режимов. Эти давления можно считать наиболее оптимальными для формирования толстых и плотных покрытий. Повышение давления газа в установке электродуговой металлизации приводит к увеличению скорости транспортировки расплавленных частиц к поверхности подложки. При давлении 7-9 МПа частицы приобретают более высокую кинетическую энергию, что способствует их эффективному уплотнению и плотному прилеганию к ранее нанесённым слоям. В результате происходит более качественное формирование связей между распылёнными частицами, снижается количество макро- и микропустот, что отражается в уменьшении пористости.

Кроме того, высокая кинетическая энергия частиц обеспечивает частичное размягчение поверхностного слоя покрытия и способствует лучшему смачиванию подложки. Это также повышает адгезию и способствует росту толщины за счёт более эффективного накопления материала. Наряду с этим следует отметить, что избыточное увеличение давления газа (свыше 9 МПа) может приводить к появлению турбулентных потоков и интенсивному остыванию расплавленных частиц, что теоретически может снижать качество напыления и вызывать дефекты.

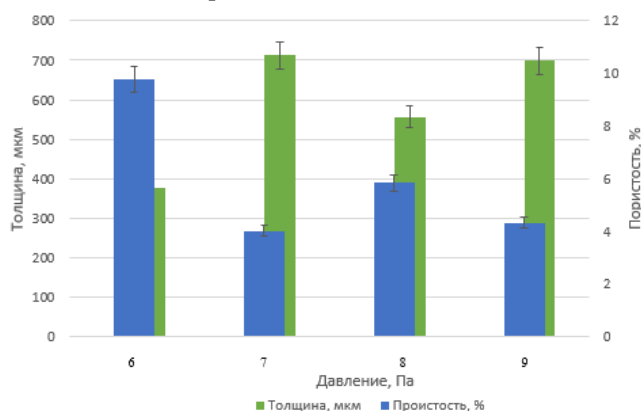


Рисунок 5. Влияние давления на толщину и пористость покрытия

Исследование влияния температуры предварительного нагрева подложки (рис. 4) показывает, что максимальная толщина покрытия в 423 мкм была достигнута при комнатной температуре, при этом пористость покрытия составила всего 4,33%. Однако с повышением температуры до 150 °С толщина покрытия снизилась до 285,2 мкм, при этом наблюдалось увеличение пористости до 19,48%. При дальнейшем увеличении температуры до 200 °С толщина покрытия уменьшилась еще больше, составив 120,6 мкм, а пористость достигла своего максимального значения – 27,13%. При нагреве подложки до 250 °С толщина покрытия увеличилась до 202,1 мкм, в то время как пористость снизилась до 8,31%.

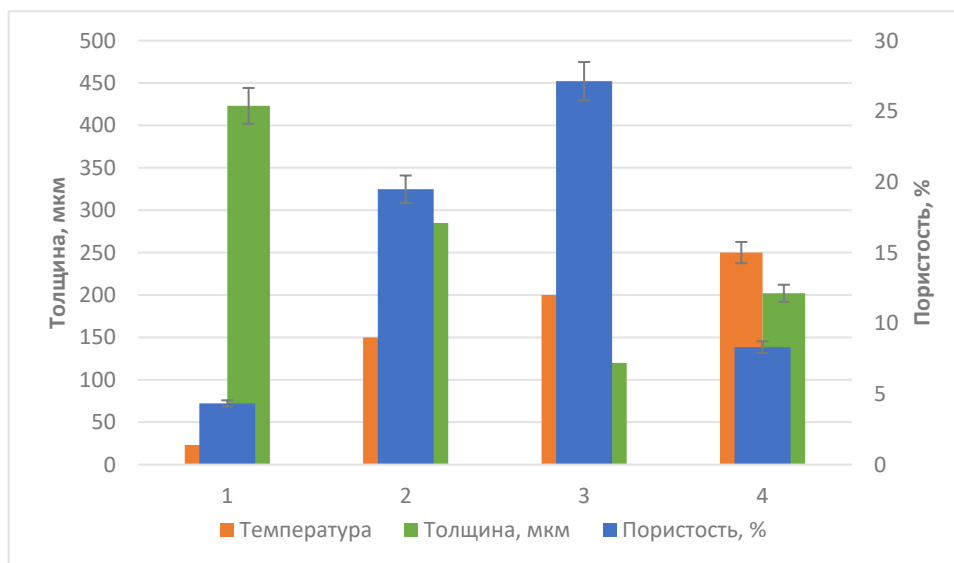


Рисунок 6. Влияние предварительного нагрева подложки на толщину и пористость покрытия

На рисунке 3 видно, что при нагреве подложки до 150 °С толщина покрытия снижается с 423 до 285,2 мкм, а пористость увеличивается до 19,48%. Это связано с изменением условий затвердевания распылённых частиц. При этой температуре снижается тепловой градиент между частицей и подложкой, что замедляет кристаллизацию и ослабляет сцепление капель с поверхностью. В результате возможны стекание или отскок частиц, образование микропустот и, как следствие, рост пористости и уменьшение толщины.

При дальнейшем нагреве до 250 °С наблюдается частичное восстановление толщины (до 202,1 мкм) и снижение пористости до 8,31%. Это, вероятно, связано с повышенной пластичностью подложки и лучшим «вплавлением» частиц, а также с термической стабилизацией нанесённого слоя. На качество покрытия наибольшее влияние оказывают давление газа и температура подложки, поскольку они определяют кинетику осаждения и тепломеханические условия формирования слоя.

Более близкие дистанции напыления обеспечивают большую толщину покрытия (рис. 5). При дистанции 150 мм получено самое толстое покрытие. Однако с увеличением расстояния толщина уменьшается. Таким образом, дистанция 150 мм является оптимальной для получения толстого слоя, что снижает эксплуатационные затраты. При этом пористость при 100-150 мм остаётся повышенной. Напыление с расстояния

200 мм даёт более плотные покрытия, а дальнейшее увеличение до 250 мм приводит к снижению толщины вдвое и резкому росту пористости. Поэтому дальнейшее увеличение дистанции оказалось нецелесообразным.

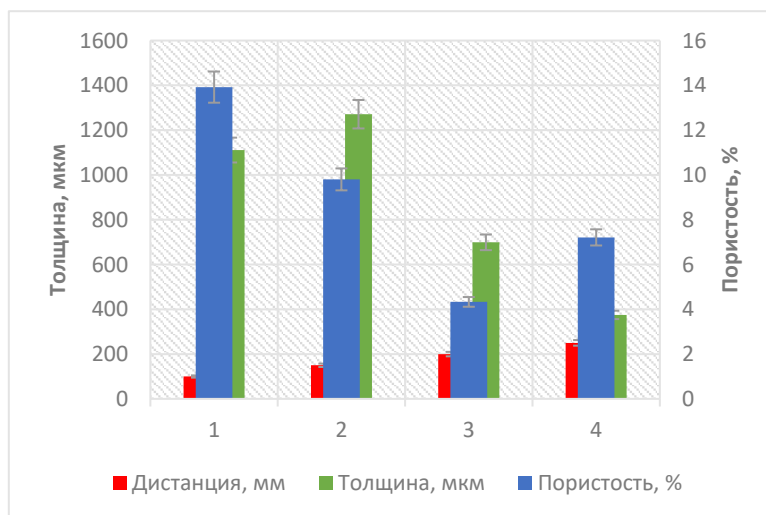


Рисунок 7. Зависимость толщины покрытий и пористости от дистанции

Микротвёрдость покрытия как один из ключевых параметров была измерена после нанесения. На рисунке 6 приведены значения твёрдости в зависимости от состава и типа используемой проволоки.

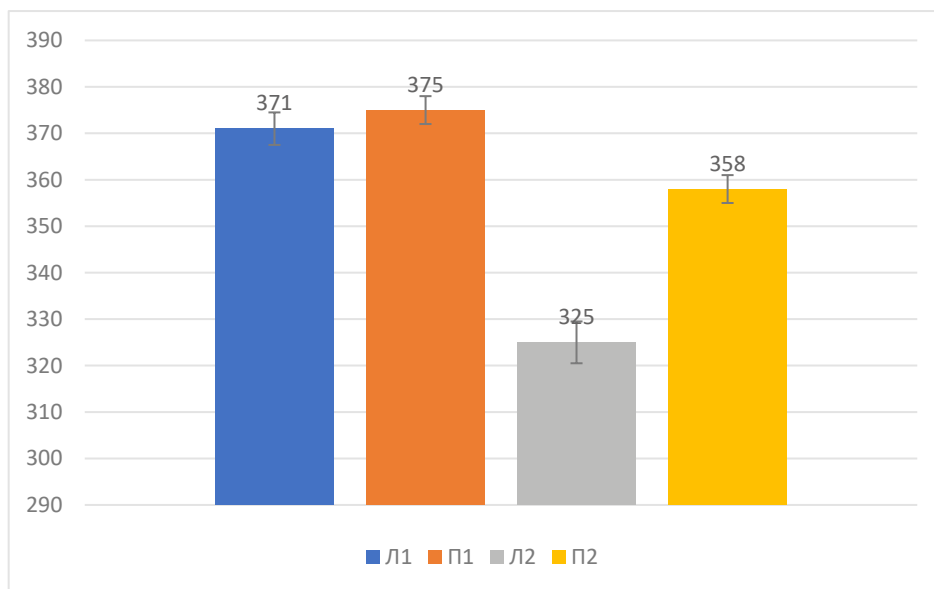


Рисунок 8. Микротвердость покрытий при изменении химического состава и типа стальных проволок

Покрyтия из порошковой проволоки в обоих случаях (Ст70 и Ст45) демонстрируют более высокую микротвердость, вероятно, за счёт более равномерной структуры,

дисперсных включений или особенностей фазового состава. Микротвердость покрытий на основе стали Ст70 выше, чем у Ст45, что соответствует исходным характеристикам сталей.

Для оценки значимости полученных результатов проведено сравнение с данными других авторов. В работе Johnson и соавторов [11] при электродуговом нанесении цинковых покрытий достигнута толщина 650 мкм при пористости около 6–7%, тогда как в настоящем исследовании при использовании порошковой проволоки достигнута толщина до 712 мкм и снижена пористость до 4,3%. Аналогично, в работе Qadir и др. [15] снижение шероховатости до уровня 17–18 мкм наблюдалось при давлении газа 6–8 МПа, в то время как в данном исследовании при тех же параметрах удалось достичь шероховатости до 15,95 мкм, что указывает на формирование более однородной структуры. Результаты исследования Hui и др. [13] также подтверждают зависимость пористости от предварительного нагрева подложки. При температуре 200 °С авторы отмечают рост пористости до 20%. В настоящей работе эта тенденция также выявлена, причём при температуре 200 °С пористость достигла 27,13%, но при дальнейшем нагреве до 250 °С наблюдалось её резкое снижение до 8,31%. Согласно Liao и др. [17], микротвёрдость сталей при напылении может достигать 150–220 HV. В данной работе покрытия из порошковой проволоки демонстрируют значения 238–245 HV, что свидетельствует о высокой плотности структуры и повышенной прочности.

Таким образом, сравнительный анализ подтверждает конкурентоспособность полученных покрытий и обосновывает научную новизну представленного подхода.

Заключение

В ходе исследования установлено, что тип применяемой проволоки оказывает существенное влияние на физико-механические и структурные характеристики покрытий, полученных методом электродуговой металллизации.

Покрытия, сформированные с использованием порошковых проволок, обладают меньшей пористостью, более однородной структурой и высокой микротвёрдостью, что делает их более предпочтительными для получения защитных и упрочняющих покрытий.

Оптимизация технологических параметров напыления (давления газа, расстояния до подложки и предварительного нагрева) позволяет значительно улучшить характеристики покрытий.

Установлено, что чрезмерный предварительный нагрев подложки приводит к снижению толщины и увеличению пористости покрытий, а увеличение дистанции напыления свыше 200 мм негативно влияет на их плотность.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке и совершенствовании технологий нанесения защитных покрытий в машиностроении, энергетике, авиастроении и других отраслях промышленности, где требуется высокая износостойкость и коррозионная стойкость рабочих поверхностей.

Благодарность, конфликт интересов

Данное исследование финансируется Комитетом по науке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № BR21882370).

Вклад авторов

Рахадиллов Б.К. – руководство, концептуализация;

Магазов Н.М. – администрирование проекта, получение финансирования, методология;

Апсежанова А. – исследование;

Баяндинова М.Б. – формальный анализ, написание, рецензирование и редактирование.

Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Список литературы

1. Tabieva E.E., Zhurerova L.G., Baizhan D. Influence of electrolyte-plasma hardening technological parameters on the structure and properties of banding steel 2, Key Engineering Materials 839, с. 57–62(2020), <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.839.57>
2. Popova N.A., Zhurerova L.G., Nikonenko E.L., Skakov M.K. Effect of plasma electrolytic nitro-carburizing on phase composition of 0.3 C-1Mn-1Si-Fe steel, Inorganic Materials: Applied Research 8, с. 130–135(2017), <https://doi.org/10.1134/S2075113317010300>
3. Kakimzhanov D.N., Rakhadilov B.K., Tyurin Y.N., Kolisnichenko O.V., Zhurerova L.G., Dautbekov M.K. Influence of pulsed plasma treatment on phase composition and hardness of Cr₃C₂-NiCr coatings. Eurasian Journal of Physics and Functional Materials 5, с. 45–51(2021) <https://DOI:10.32523/ejpfm.2021050106>
4. Ramezani M., Mohd Ripin Z., Pasang T., Jiang C.P. Surface engineering of metals: Techniques, characterizations and applications. Metals 13, с. 1299(2023) <https://doi.org/10.3390/met13071299>
5. Kengesbekov A., Rakhadilov B., Sagdoldina Z., Buitkenov D., Dosymov Y., Kylyshkanov M. Improving the efficiency of air plasma spraying of titanium nitride powder. Coatings 12, с. 1644(2022) <https://doi.org/10.3390/coatings12111644>
6. Bauyrzhan R., Alexander P., Zhuldyz S., Dastan B., Vyacheslav B., Mukhamedova A. Effect of bilayer thickness and bias potential on the structure and properties of (TiZr/Nb)N multilayer coatings as a result of Arc-PVD deposition. Materials 15, с. 7696(2022) <https://doi.org/10.3390/ma15217696>
7. Rakhadilov B., Zhurerova L., Sagdoldina Z., Kenesbekov A., Bayatanova L. Morphological changes in the dislocation structure of structural steel 20GL after electrolytic-plasma hardening of the surface. Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques 15, с. 408–413(2021)
8. Rakhadilov B.K., Baizhan D.R., Sagdoldina Z.B., Buitkenov D.B., Maulet M. Phase composition and structure of composite Ti/HA coatings synthesized by detonation spraying. AIP Conference Proceedings 2297, с. 010001(2020) <https://doi.org/10.1063/5.0029754>
9. Rakhadilov B.K., Kenesbekov A.B., Kowalevski P., Ocheredko Y.A., Sagdoldina Z.B. Development of air-plasma technology for hardening cutting tools by applying wear-resistant coatings. News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan 3, с. 54–62(2020) <https://doi.org/10.32014/2020.2518-170X.54>
10. Yu H.L., Zhang W., Wang H.M., Ji X.C., Song Z.Y., Li X.Y., Xu B.S. In-situ synthesis of TiC/Ti composite coating by high-frequency induction cladding. Journal of Alloys and Compounds 701, с. 244–255(2017) <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.084>
11. Sidorov S.A., Mironov D.A., Khoroshenkov V.K., Khlusova E.I. Surfacing methods for increasing the service life of rapidly wearing working tools of agricultural machines. Welding International 30, с. 808–812(2016)

12. Sun R., Shi Y., Pei Z., Li Q., Wang R. Heat transfer and temperature distribution during high-frequency induction cladding of 45 steel plate, *Applied Thermal Engineering* 139, с. 1-10(2018)
13. Hui R., Wang Z., Kesler O., Rose L., Jankovic J., Yick S., Ghosh D. Thermal plasma spraying for SOFCs: Applications, potential advantages, and challenges, *Journal of Power Sources* 170, с. 308-323(2007) <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.03.075>
14. Chahal H.K., Matthews S., Jones M.I. Fabrication of calcium phosphate coatings by the inflight reaction of precursor feedstocks using plasma spraying, *Journal of Thermal Spray Technology* 32, с. 1465-1481(2023)
15. Qadir D., Sharif R., Nasir R., Awad A., Mannan H.A. A review on coatings through thermal spraying, *Chemical Papers* 78, p.71-91(2024)
16. Lopez J. Microhardness testing of plastics: Literature review, *Polymer Testing* 12, с. 437-458(1993) [https://doi.org/10.1016/0142-9418\(93\)90016-I](https://doi.org/10.1016/0142-9418(93)90016-I)
17. Liao X.J., Zhang L., Sun Y.Q., Luo X.T., Li C.X., Yang G.J., Li C.J. Effect of inter-splat bonding quality on the dependence of wear behavior of plasma-sprayed stainless steel coating on applied load, *Journal of Thermal Spray Technology* 33, с. 1-11(2024)
18. Abdivakhidov K., Sharipov K. Corrosion-resistant protective coatings for metals: A review of metallic and non-metallic coatings, *AIP Conference Proceedings* 3045, с. 060011(2024) <https://doi.org/10.1063/5.0197373>

Б.К. Рахадиллов¹, Н.М. Магазов², А. Әпсежанова², М.Б. Баяндинова^{3,4*}

¹"PlasmaScience" ЖШС, Қазақстан, Өскемен қ.

²Қорғау және функционалдық жабындар ғылыми орталығы,
Дәулет Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті, Қазақстан, Өскемен қ.

³"Композициялық материалдар институты" ЖШС Қазақстан, Өскемен қ.

⁴Сәрсен Аманжолов атындағы Шығыс Қазақстан университеті, Қазақстан, Өскемен қ.
(E-mail: shohmanovamb@gmail.ru)

Электр доғасын металдандыру кезінде құйма және ұнтақ сүйреу негізінде жабындарды салыстырмалы талдау

Аңдатпа. Мақалада 65Г болаттан жасалған үлгілерде құйма және ұнтақ сымдарын қолданып электр доғалық металдандыру әдісімен алынған жабындарға кешенді салыстырмалы талдау ұсынылған. Негізгі назар технологиялық параметрлердің – сым беру жылдамдығының, жұмысшы газ қысымының, бүрку қашықтығы мен субстратты алдын ала қыздыру температурасының – жабындардың құрылымына, қалыңдығына, кеуектілігіне және микроқаттылық әсеріне аударылған. Ұнтақ сымын пайдалану минималды кеуектілікпен (4,3 %-ға дейін) және жоғары микроқаттылықпен (245 HV-ге дейін) тығыз әрі біркелкі қабаттарды түзуге мүмкіндік беретіні анықталды, ал құйма сым тұрақсыздау нәтижелер көрсетті. Эксперименттік жолмен газ қысымын 7-9 МПа-ға дейін арттыру бөлшектердің кинетикалық энергиясын жоғарылатып, жабынды нығайтатыны, ал субстратты шамадан тыс алдын ала қыздыру кеуектіліктің өсуіне және қалыңдықтың төмендеуіне әкелетіні дәлелденді. Оңтайлы режимдер жабын қалыңдығын 712 мкм-

ге дейін жеткізіп, төмен кедір-бұдырлықты сақтауға мүмкіндік берді. Алынған нәтижелер ұнтақ сымын және электр доғалық металдандырудың оңтайландырылған параметрлерін қолданудың машинажасау, энергетика және өнеркәсіптің басқа салаларында тозуға және коррозияға төзімді жабындар алу үшін орынды екенін растады. Жұмыс таңдалған тәсілдің практикалық маңызын көрсетіп, беткі беріктендіру технологияларын дамытуға үлес қосады.

Түйін сөздер: электр доғалы металдандыру, ұнтақ сым, құйылған сым, 65Г Болат, жабын, кеуектілік, микроқаттылық, кедір-бұдыр.

B.K. Rakhadilov¹, N.M. Magazov², A. Apsezhanova², M.B. Bayandinova^{3,4*}

¹«PlasmaScience» LLP, 070018, Kazakhstan, Ust-Kamenogorsk

²Scientific Centre of protective and functional coatings, East-Kazakhstan Technical University named after Daulet Serikbayev, 070010, Kazakhstan, Ust-Kamenogorsk

³«Institute of Composite Materials» LLP, 070010, Kazakhstan, Ust-Kamenogorsk

⁴East-Kazakhstan University named after Sarsen Amanzholov, 070010, Kazakhstan, Ust-Kamenogorsk
(E-mail: shohmanovamb@gmail.ru)

Comparative analysis of coatings based on cast and cored wire at electric arc metallisation

Abstract: The article presents a comprehensive comparative analysis of coatings obtained by electric arc metallisation using cast and powder wire on 65G steel substrates. The main focus is on the influence of process parameters – wire feed rate, working gas pressure, spraying distance, and substrate preheating temperature – on the formation of the structure, thickness, porosity, and microhardness of the coatings. It has been established that the use of powder wire ensures the formation of denser and more uniform layers with minimal porosity (up to 4.3%) and increased microhardness (up to 245 HV), while cast wire demonstrates less stable results. It has been experimentally proven that increasing the gas pressure to 7–9 MPa contributes to the compaction of the coating by increasing the kinetic energy of the particles, while excessive preheating of the substrate causes an increase in porosity and a decrease in thickness. Optimal conditions allowed a coating thickness of up to 712 µm to be achieved while maintaining low roughness. The results confirm the feasibility of using powder wire and optimised parameters of electric arc metallisation to create wear- and corrosion-resistant coatings that are in demand in mechanical engineering, energy, and related industries. The work demonstrates the practical significance of the chosen approach and contributes to the development of surface hardening technologies.

Key words: electric arc metallisation, flux cored wire, cast wire, 65G steel, coating, porosity, microhardness, roughness.

References

1. Tabieva E.E., Zhurerova L.G., Baizhan D. Influence of electrolyte-plasma hardening technological parameters on the structure and properties of banding steel 2, Key Engineering Materials 839, p. 57–62(2020), <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.839.57>
2. Popova N.A., Zhurerova L.G., Nikonenko E.L., Skakov M.K. Effect of plasma electrolytic nitrocarburizing on phase composition of 0.3 C-1Mn-1Si-Fe steel, Inorganic Materials: Applied Research 8, p. 130–135(2017), <https://doi.org/10.1134/S2075113317010300>

3. Kakimzhanov D.N., Rakhadilov B.K., Tyurin Y.N., Kolisnichenko O.V., Zhurerova L.G., Dautbekov M.K. Influence of pulsed plasma treatment on phase composition and hardness of Cr_3C_2 -NiCr coatings. *Eurasian Journal of Physics and Functional Materials* 5, p.45–51(2021) <https://DOI:10.32523/ejpfm.2021050106>
4. Ramezani M., Mohd Ripin Z., Pasang T., Jiang C.P. Surface engineering of metals: Techniques, characterizations and applications. *Metals* 13, p.1299(2023) <https://doi.org/10.3390/met13071299>
5. Kengesbekov A., Rakhadilov B., Sagdoldina Z., Buitkenov D., Dosymov Y., Kylyshkanov M. Improving the efficiency of air plasma spraying of titanium nitride powder. *Coatings* 12, p.1644(2022) <https://doi.org/10.3390/coatings12111644>
6. Bauyrzhan R., Alexander P., Zhuldyz S., Dastan B., Vyacheslav B., Mukhamedova A. Effect of bilayer thickness and bias potential on the structure and properties of (TiZr/Nb)N multilayer coatings as a result of Arc-PVD deposition. *Materials* 15, p.7696(2022) <https://doi.org/10.3390/ma15217696>
7. Rakhadilov B., Zhurerova L., Sagdoldina Z., Kenesbekov A., Bayatanova L. Morphological changes in the dislocation structure of structural steel 20GL after electrolytic-plasma hardening of the surface. *Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques* 15, pp. 408-413(2021)
8. Rakhadilov B.K., Baizhan D.R., Sagdoldina Z.B., Buitkenov D.B., Maulet M. Phase composition and structure of composite Ti/HA coatings synthesized by detonation spraying. *AIP Conference Proceedings* 2297, p.010001(2020) <https://doi.org/10.1063/5.0029754>
9. Rakhadilov B.K., Kenesbekov A.B., Kowalevski P., Ocheredko Y.A., Sagdoldina Z.B. Development of air-plasma technology for hardening cutting tools by applying wear-resistant coatings. *News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan* 3, p.54-62(2020) <https://doi.org/10.32014/2020.2518-170X.54>
10. Yu H.L., Zhang W., Wang H.M., Ji X.C., Song Z.Y., Li X.Y., Xu B.S. In-situ synthesis of TiC/Ti composite coating by high-frequency induction cladding. *Journal of Alloys and Compounds* 701, p.244–255(2017) <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.084>
11. Sidorov S.A., Mironov D.A., Khoroshenkov V.K., Khlusova E.I. Surfacing methods for increasing the service life of rapidly wearing working tools of agricultural machines. *Welding International* 30, p.808–812(2016)
12. Sun R., Shi Y., Pei Z., Li Q., Wang R. Heat transfer and temperature distribution during high-frequency induction cladding of 45 steel plate, *Applied Thermal Engineering* 139, p.1-10(2018)
13. Hui R., Wang Z., Kesler O., Rose L., Jankovic J., Yick S., Ghosh D. Thermal plasma spraying for SOFCs: Applications, potential advantages, and challenges, *Journal of Power Sources* 170, p.308-323(2007) <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2007.03.075>
14. Chahal H.K., Matthews S., Jones M.I. Fabrication of calcium phosphate coatings by the in-flight reaction of precursor feedstocks using plasma spraying, *Journal of Thermal Spray Technology* 32, p.1465-1481(2023)
15. Qadir D., Sharif R., Nasir R., Awad A., Mannan H.A. A review on coatings through thermal spraying, *Chemical Papers* 78, p.71-91(2024)
16. Lopez J. Microhardness testing of plastics: Literature review, *Polymer Testing* 12, p.437-458(1993) [https://doi.org/10.1016/0142-9418\(93\)90016-I](https://doi.org/10.1016/0142-9418(93)90016-I)
17. Liao X.J., Zhang L., Sun Y.Q., Luo X.T., Li C.X., Yang G.J., Li C.J. Effect of inter-splat bonding quality on the dependence of wear behavior of plasma-sprayed stainless steel coating on applied load, *Journal of Thermal Spray Technology* 33, p.1-11(2024)

18. Abdivakhidov K., Sharipov K. Corrosion-resistant protective coatings for metals: A review of metallic and non-metallic coatings, AIP Conference Proceedings 3045, p.060011(2024) <https://doi.org/10.1063/5.0197373>

Сведения об авторах:

Рахадиллов Б.К. – PhD, профессор, "PlasmaScience" ЖШС Бас директоры, 070018, Өскемен қ., Қазақстан

Магазов Н.М. – "Қорғау және функционалдық жабындар" ҒО басшысы, Дәулет Серікбаев атындағы Шығыс Қазақстан техникалық университеті, 070010, Өскемен қ., Қазақстан

Әпсежанова А. – ғылыми қызметкер, "Қорғау және функционалдық жабындар" ҒО, 070010, Өскемен қ., Қазақстан

Баяндинова М.Б. – "Композициялық материалдар институты" ЖШС аға ғылыми қызметкері, С. Аманжолов атындағы ШҚУ, физика кафедрасының сениор лекторы, 070002, Өскемен қ., Қазақстан

Рахадиллов Б.К. – PhD, профессор, генеральный директор ТОО «PlasmaScience», 070018, г. Усть-Каменогорск, Казахстан

Магазов Н.М. – руководитель НЦ "Защитные и функциональные покрытия", Восточно-Казахстанский технический университет имени Даулета Серикбаева, 070010, г. Усть-Каменогорск, Казахстан

Апсежанова А. – научный сотрудник, НЦ "Защитные и функциональные покрытия", 070010, г. Усть-Каменогорск, Казахстан

Баяндинова М.Б. – старший научный сотрудник ТОО «Институт композиционных материалов», сениор-лектор ВКУ им. С. Аманжолова, 070002, г. Усть-Каменогорск, Казахстан

Rakhadilov B.K. – PhD, Professor, h-index-14, General Director of "PlasmaScience" LLP, 070018, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Magazov N.M. – Head of SC "Protective and functional coatings", East Kazakhstan Technical University named after Daulet Serikbayev, 070010, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Apsezhanova A. – Research Associate, NTs "Protective and functional coatings", 070010, Ust-Kamenogorsk, Kazakhstan

Bayandinova M.B. – Senior Researcher, "Institute of Composite Materials" LLP, Senior Lecturer, East Kazakhstan Technical University named after S. Amanzholov, 070002, Ust-Kamenogorsk, 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/>).



XҒТАР 29.31.29
Ғылыми мақала

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-41-55>

Ғарыш инфрақұрылымындағы деформацияны FBG сенсорларымен дәл бақылау

С.Ж. Көшкінбаев^{1,2}, Н.К. Смайлов^{*1}, А.К. Сейтханова³, Ж. Жаңатайұлы¹

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

²Мирас университеті, Шымкент, Қазақстан

³Ә. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, Павлодар, Қазақстан

(E-mail: smailov@satbayev.university)

Аңдатпа. Ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдық деформацияны дәл әрі үздіксіз бақылау ғарыш аппараттарының сенімділігі мен ұзақмерзімділігін қамтамасыз етудің негізгі шарты болып саналады. Ғарыштық орта табиғаты жағынан ерекше әрі күрделі: инфрақұрылым элементтері тұрақсыз механикалық жүктемелерге, зымыран ұшыру кезіндегі күшті дірілдерге, температураның күрт ауытқуларына және жоғары деңгейдегі радиациялық сәулеленуге жиі ұшырайды. Бұл факторлардың бірлескен әсері уақыт өте келе материалдардың қасиеттерін әлсіретіп, құрылымдық тозуды жылдамдатады, микроақаулардың пайда болуына ықпал етеді және қауіпті апаттық жағдайларға әкелуі мүмкін. Сондықтан ғарыш аппараттарының ұзақмерзімді қызметін қамтамасыз ету үшін олардың құрылымдық күйін нақты уақытта үздіксіз мониторингтеу қажеттілігі туындайды. Осы тұрғыда талшықты Брэгг торы (FBG) сенсорлары заманауи әрі тиімді шешім ретінде қарастырылады. Бұл сенсорлардың басты артықшылықтарына ықшамдылығы, жеңіл салмағы, электромагниттік кедергілерге төзімділігі, жоғары сезімталдығы және бір уақытта бірнеше параметрді өлшеу мүмкіндігі жатады. Мұндай сипаттамалар оларды ғарыштағы шектеулі масса мен энергия ресурстары жағдайында аса қолайлы етеді. Мақалада FBG сенсорларының жұмыс принциптері, Брэгг толқын ұзындығының температура мен деформацияға сезімталдық қасиеті, оларды ғарыштық құрылымдарға орнату әдістері және алынған деректерді интерпретациялау тәсілдері кеңінен талданады. Сонымен қатар, сенсорлардың радиациялық төзімділігі, температуралық бейімділігі және ғарыштағы қолдану тиімділігіне ерекше назар аударылады.

Түйін сөздер: FBG сенсоры, ғарыш инфрақұрылымы, құрылымдық деформация, оптикалық талшық, Брэгг торы, температураны бақылау

Жіберілді 08.08.2025. Өзгертілді 04.09.2025. Қабылданды 05.09.2025. Онлайн қол жетімді 30.09.2025.

^{1*}хат-хабар авторы

Кіріспе

Ғарыш инфрақұрылымының сенімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз ету үшін құрылымдық деформацияларды дәл әрі үзіліссіз бақылау маңызды екені белгілі. Осы мақсатта соңғы жылдары FBG технологиясына негізделген сенсорлар кеңінен зерттелуде. FBG сенсорларын құрылымдық жүктемелерді бағалау үшін маңызды екенін көрсетті [1]. Бұл сенсорлар әртүрлі механикалық әсерлерге жауап беру қабілеті мен нақты уақыттағы ақпарат алмасу мүмкіндігімен ерекшеленеді. FBG сенсорлары температура мен механикалық деформацияны қатар өлшеу қабілетінің арқасында күрделі жағдайларда нақты мәлімет алуға мүмкіндігі ашылып отыр [2]. Ғарыштық аппараттың қатты қону кезіндегі құрылым реакциясын әртүрлі жер беті жағдайларында зерттеген тәжірибелер де бұл сенсорлардың жоғары сезімталдығын растады [3]. Сонымен қатар, бірдей зерттеулер FBG сенсорларының сенімділігі мен температуралық тұрақтылығын тағы да айқындады [2].

Механикалық әсерлерді тіркеу мақсатында жүргізілген тәжірибелерде де FBG сенсорлары құрылымның уақытша жауаптарын дәл өлшей алатындығы анықталды [4]. Бұл сенсорлар гидравликалық жүйелердегі тербеліс пен жүктемелерді бақылау үшін де тиімді құралға айналды [5]. Ғарыш аппараттарының жылу оқшаулағыш қабаттарына енгізілген FBG сенсорлары құрылымда пайда болатын зақымдарды алдын-ала анықтауға мүмкіндік береді [6,7]. Мұндай бақылау жүйелері құрылымдық тұрақтылықты сақтаумен қатар ұзақ мерзімді ғарыш миссияларының қауіпсіздігін арттыруда маңызды рөл атқарады. Сонымен қатар, турбиналар мен күрделі құрылымдарда жүргізілген тербеліс мониторингі бұл сенсорлардың көпсалалы қолданысқа ие екенін дәлелдейді [5].

Ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдық деформацияларды жоғары дәлдікпен бақылау қазіргі заманғы ғарыштық инженериядағы маңызды міндеттердің бірі. FBG сенсорлары құрылымдық күйді бақылауға арналған аса тиімді технология ретінде кеңінен қолданылып келеді [8]. FBG сенсорлары жарықтың белгілі бір толқын ұзындығын шағылыстыратын торлы құрылымға негізделген, бұл қасиеті оны деформация мен температураның өзгеруін дәл тіркейтін құрал ете алады. Олардың нақты өлшем жүргізу қабілеті, электромагниттік кедергілерге төзімділігі және шағын көлемі ғарыштық жүйелерге біріктіруге аса қолайлы етеді [9]. Еске алатын тағы бір жағдай бір талшық бойымен бірнеше сенсор орнатуға мүмкіндік беретін мультиплекстеу қабілеті күрделі құрылымдардың кең аумақты мониторингін ұйымдастыруға жол ашады. FBG сенсорлары ғарыштық құрылымдарда орын алатын деформация процестерін нақты уақыт режимінде тіркеу арқылы құрылымдық тұтастықты бақылауға жол ашады. Бұл сенсорлар ғарыш аппараттарының жүктемеге ұшыраған бөліктеріндегі динамикалық өзгерістерді, тербеліс пен кернеуді үздіксіз бақылауға бағытталған жүйелерге оңай біріктіріледі [10]. Мысалы, оларды жылу оқшаулағыш қабаттармен біріктіру арқылы құрылым ішіндегі жылулық өзгерістер мен термиялық жүктемелерді де тіркеуге болады, бұл миссия тиімділігі мен ұзақ мерзімділігін біршама арттырады [11].

FBG технологияларын әртүрлі конфигурацияларда оңай орнатуға болады. Бұл сенсорлар үлкен панельдермен қоса тірек құрылымдарында әртүрлі аймақтарға

бейімделіп, сенсорлық желі құруды жеңілдетеді [12]. Осылайша, жүйе тек белгілі бір нүктелерде ғана емес, жалпы құрылым бойымен толық бақылау жүргізуге мүмкіндік береді. Бұл деформация процестерінің кеңістіктік таралуын нақты бағалауға және шекті жүктемелерді болжауға жол ашады [13]. FBG сенсорларының сезімталдығы мен дәлдігі, сондай-ақ ұзақ мерзімді тұрақтылығы олардың ғарыштық инфрақұрылымдағы тиімділігін арттырады. Олар құрылымның геометриялық өзгерістерін, жүктеме әсерінен туындаған кернеулерді және пішіндік ауытқуларды үнемі бақылап, құрылым қауіпсіздігін қамтамасыз етеді [14]. Ғарыштық антенналардың тербелісін тіркеу немесе күн батареясының панельдерін нақты туралау сынды міндеттерді шешу кезінде FBG сенсорлары аса маңызды рөл атқарады [15].

1-кесте. FBG сенсорларын ғарыштық құрылымдарда қолданудың жинақтық кестесі

№	Қолдану саласы	Функционалдық маңыздылығы	Қолданылған әдебиеттер
1	Температура және механикалық жүктеме мониторингі	Температура мен деформацияны бір сенсор арқылы қатар өлшейді	[2], [10], [6]
2	Тербеліс пен динамикалық жүктеме бақылауы	Турбиналарда және гидравликалық жүйелерде тербелістерді нақты уақыт режимінде анықтайды	[5], [4], [15]
3	Жылу оқшаулау құрылымдарын бақылау	FBG сенсорларын термоқабаттарға енгізу арқылы құбылысты ерте анықтауға болады	[7], [11], [6]
4	Ғарыш құрылымдарының тұтастығын сақтау	Құрылымдық күйді үздіксіз тіркеу арқылы шекті жүктемелерге дейінгі процестерді бақылау	[9], [10], [13]
5	Көпнүктелі кеңістіктік мониторинг	Бір талшық бойымен бірнеше сенсор орнатуға болады,	[8], [12], [13]

Әдістемелік материалдар

Ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдық деформацияны дәл бақылау ғарыш аппараттарының ұзақмерзімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз етудегі негізгі мәселе. Дәстүрлі өлшеу құралдары экстремалды жағдайларда дәлдігін жоғалтады, сондықтан FBG сенсорлары перспективалы шешім ретінде ұсынылады [16]. FBG негізіндегі спектрлік бөлу әдісі құрылымдағы бүйірлік кернеулерді нақты және бағытталған түрде бақылауға мүмкіндік береді [17]. Сенсор модулін орнату кезінде сигналдың жоғалуын болдырмау үшін дәнекерлеу дәлдігі мен қорғаныш қабатының маңызы ерекше атап көрсетілген [18]. Сонымен қатар, температура мен деформация әсерін ажырату үшін компенсациялық әдістер мен алдын ала калибрлеу тәсілдері қолданылады [19].

Алынған нәтижелер FBG сенсорларының нақты уақыт режимінде деформацияны сенімді тіркей алатынын көрсетеді. Қажетті дәлдікке жету үшін референстік сенсорлар немесе арнайы талшық конфигурациялары енгізілген [18]. Зерттеулер FBG

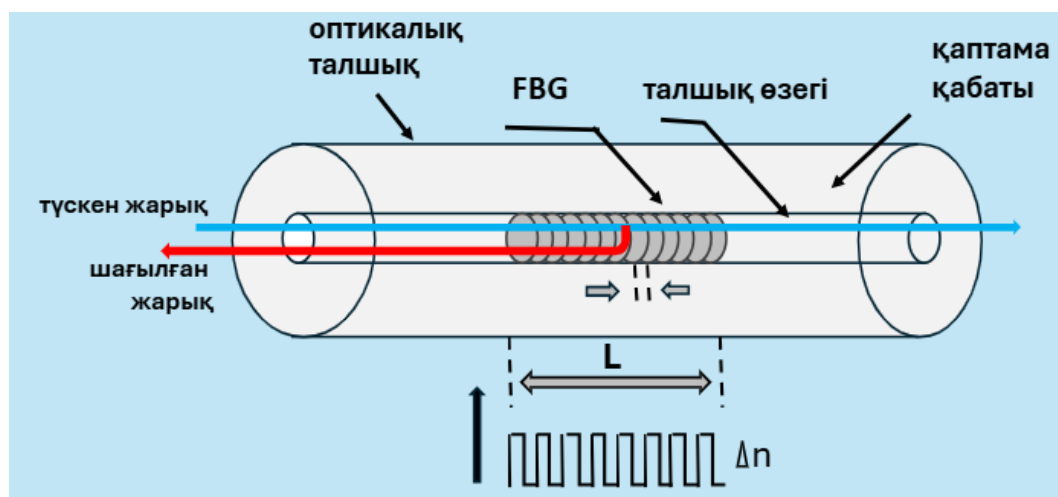
технологиясының ғарыштық мониторинг жүйелерінде қолдануға толық мүмкіндік беретінін көрсетеді [20].

Маңызды аспектілері. FBG сенсорларының физикалық принципі бірмодальді оптикалық талшық өзегіндегі периодты дифракциялық торға негізделген. Брэгг толқын ұзындығы сенсордың температура мен деформацияға жоғары сезімталдығын сипаттайды [21]. Бұл байланыс (1) және (2) формулалармен көрсетілген:

$$\lambda_B = 2 n_{eff} \Lambda_0 \quad (1)$$

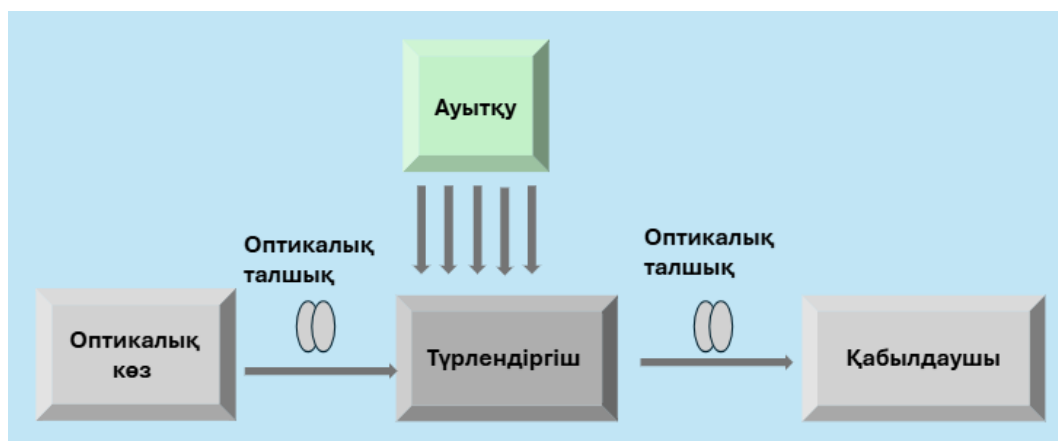
$$\frac{\Delta \lambda_B}{\lambda_B} = (\alpha_f + \xi) \Delta T + (1 - P_e) \Delta \epsilon \quad (2)$$

Бұл формулалар арқылы сенсордың жарықпен әрекеттесу механизмі түсіндіріледі [22]. Сондай-ақ, FBG торларын жасау процесінде лазерлік әдіспен талшық өзегіндегі сыну көрсеткішінің периодты модуляциясы жүзеге асырылады, бұл оның ғарыштағы қолданысына негіз болады [11].



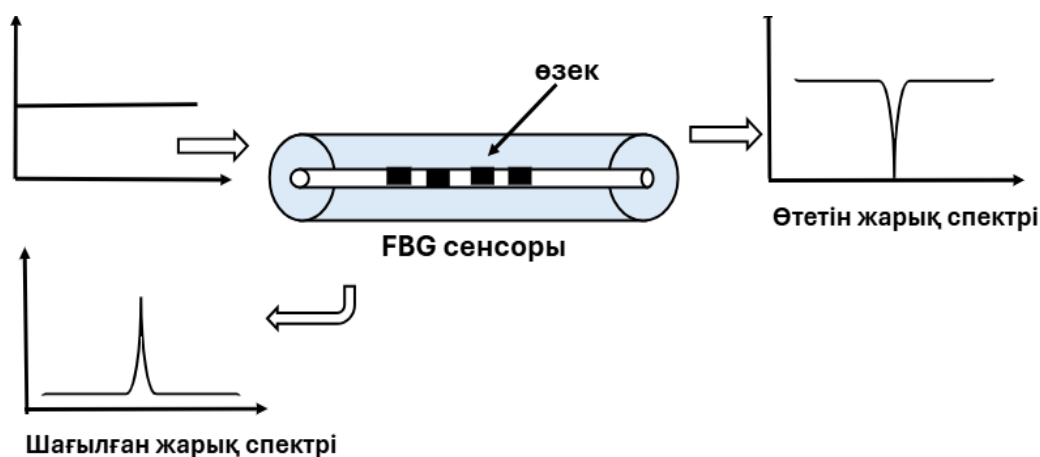
Сурет 1. FBG жұмыс істеу принципінің сызбасы

Талшықты сенсорлық жүйенің типтік блок-схемасы 2-суретте көрсетілген. Бұл арқылы сенсордың жұмыс істеуін түсіне аламыз. Ішкі сенсорларда оптикалық талшық түрлендіргіш рөлін атқарады және жарықтың қасиеттерін тікелей бұзылыстарға жауап ретінде модуляциялайды, ал сыртқы сенсорларда модуляциялау үшін сыртқы орта қолданылады. Схемаға көз жүгіртсек қабылдаушыға дейінгі орын алатын жағдайлар көрсетілген [24].



Сурет 2. Типтік оптикалық талшықты сенсорлық жүйенің блок-схемасы

Талшық кең спектрлі жарықпен сәулелендірілгенде, Брэгг торлары белгілі бір жарық спектрін Брэгг толқын ұзындығын шағылыстырады. Бұл спектрін Брэгг толқын ұзындығының мәні сенсор басына әсер ететін жылулық және механикалық өзгерістерге сәйкес ығысады, ал қалған жарық спектрі еркін өтіп отырады. FBG сенсорының жұмыс істеу принципі бойынша, шағылысқан жарықтың орталық толқын ұзындығы сенсорлық ақпарат көзі ретінде есептеледі. Бұл 3-суретте бейнеленген. [25]. Брэгг толқын ұзындығы тордың құрылымдық параметрлеріне сәйкес келеді, яғни ол Брэгг шартын қанағаттандырады. Суретте FBG сенсорының әсерін анық көре аламыз [26].



Сурет 3. FBG-нің әсерінің нәтижелік суреті

Жүйелі нәтижелерге қол жеткізу мақсатында бірінеше негізгі әдістерді айта кетейік :

1. Орнату әдістері.

Еркін кеңістік арқылы байланысқан FBG сенсорлары мен таратылған FBG массивтері ғарыш құрылымдарында сенсорларды қашықтан, сымсыз әрі жүйелі түрде орнатуға мүмкіндік беретін тиімді әдістер болып табылады; бұл тәсілдер радиацияға төзімді,

жеңіл конфигурация құруға мүмкіндік беріп, қанат, панель және корпус тәрізді кең беттерде деформацияны нақты әрі кең ауқымда бір мезетте өлшеуге жағдай жасайды [27, 17].

2. Деформация түрлерін анықтау дәлдігі

Көлденең кернеу мен бүйірлік деформацияны нақты уақыт режимінде жоғары дәлдікпен өлшеуге мүмкіндік беретін спектрді бөлу әдісі мен діріл мен температураны бір мезетте бір ғана FBG сенсоры арқылы бақылауға мүмкіндік беретін интегралды тәсіл ғарыш кемелерінің механикалық күйін тұрақты әрі жедел қадағалауға, сондай-ақ көпдеңгейлі құрылымдардағы динамикалық деформацияларды тиімді анықтауға жағдай жасайды [29, 30].

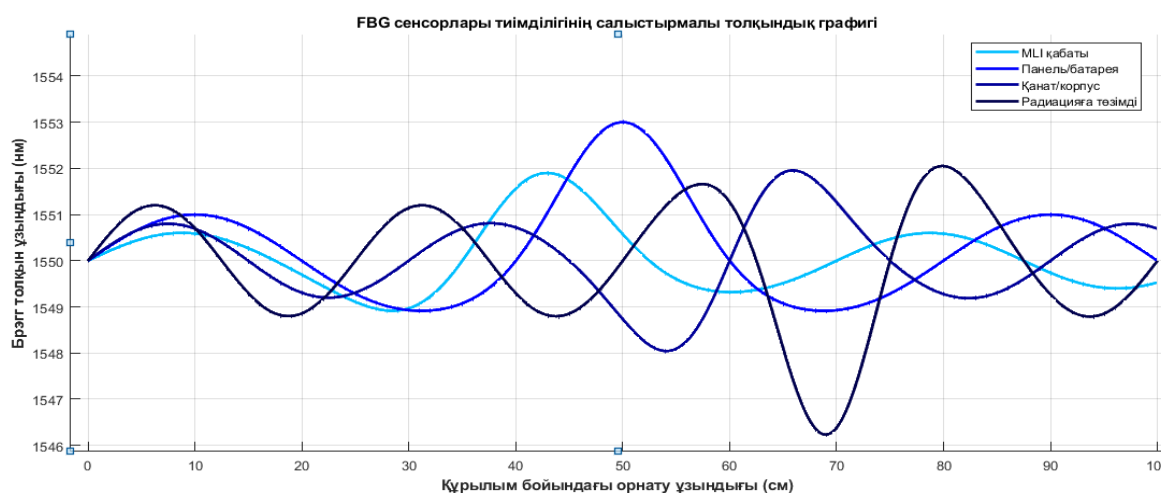
3. Тұрақтылық әдісі бойынша

Радиациялық әсер мен температуралық өзгерістерге төзімділік FBG сенсорларының ғарыштық ортада сенімді жұмыс істеуінің маңызды шарттарының бірі. Арнайы қатайтылған FBG сенсорлары ғарыштағы жоғары радиация деңгейіне төтеп беріп, ұзақмерзімді және тұрақты өлшемдер алуға мүмкіндік береді, бұл оларды ғарыш миссияларында құрылымдық күйді үздіксіз бақылауға тиімді құрал етеді [31]. Сонымен қатар, температураның күрт ауытқуына бейімделу үшін машиналық оқыту әдістерімен біріктірілген өзін-өзі қалпына келтіретін FBG жүйелері өлшеу дәлдігін арттырып, қатал жағдайларда да деректер сапасын сақтай отырып, сенсордың жалпы тұрақтылығын қамтамасыз етеді [27].

Нәтижелер мен талдаулар

Осы мақалада қарастырылған талдау нәтижелері FBG сенсорларының ғарыш инфра-құрылымындағы құрылымдық деформацияларды нақты уақыт режимінде және жоғары дәлдікпен тіркеуге қабілетті екенін көрсететін болады. Көрсетілген әртүрлі механикалық және температуралық әсерлер жағдайында сенсорлардың сезімталдығы, тұрақтылығы және сенімділігі тәжірибелік деректерге сәйкес бірқатар нәтижелер аламыз. Зерттеу барысында алынған спектрлік ауытқулар, деформацияға жауап беру уақыты мен температуралық компенсация әдістерінің тиімділігі FBG технологиясының ғарыштық қолданбалар үшін болашағы зор екенін дәлелдейтін болады. Бұдан бөлек, радиацияға төзімділігі күшейтілген сенсорлармен жүргізілген сынақтар олардың ұзақ мерзімді миссияларда қолдануға жарамдылығын нақтылай алуы. Алынған нәтижелер сенсор жүйелерін жетілдіруге, ғарыш инфрақұрылымының қауіпсіздігін арттыруға және құрылымдық тұтастықты үнемі бақылауға мүмкіндік беретініне көз жеткіземіз.

1. FBG сенсорларының орнатылу салалары бойынша тиімділік графигі 4-суретте көрсетілген. Бұл график осы бағытта зерттелген мәліметтерге сүйеніп matlab программасынан алынды. Бұл әртүрлі ғарыш құрылымдарында FBG сенсорларын орнатудың сезімталдық тиімділігі мен құрылымдық реакцияларға жауап беру қабілетін көрсетеді. Графиктің вертикаль осі толқын ұзындығының кеңістіктік амплитудасын сипаттаса, горизонталь осі құрылым бойынша кеңістіктік орынды немесе құрылым элементтерін білдіреді.



Сурет 4. FBG сенсорларының орнатылу салалары бойынша тиімділік графигі

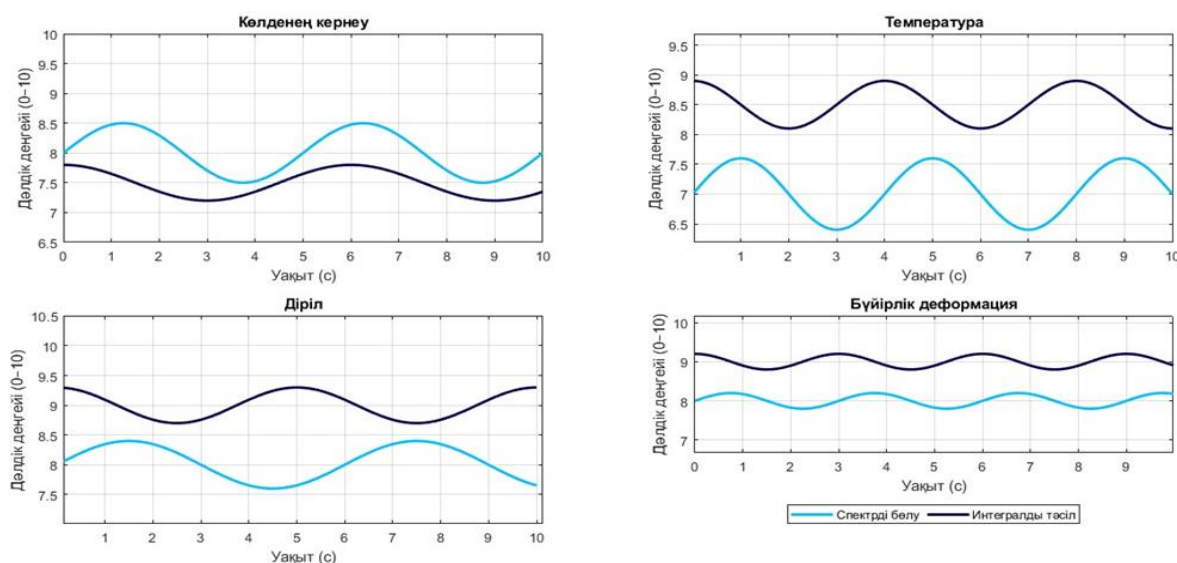
Бұл жерде: Амплитуда неғұрлым жоғары болса – сенсор деформацияны соғұрлым нақты әрі қарқынды сезеді.

Период қысқарған сайын – сенсор тез өзгертін динамикалық процестерге бейім келеді.

Толқын сипаты – орнатылған құрылым типінің механикалық жүктемесіне тәуелді.

2. FBG сенсорларының деформация түрлері бойынша дәлдік динамикасын сипаттайтын график 5-суретте көрсетілген. Matlab программасына қолданылған әдебиеттердегі зерттеулерге сүйеніп алынды. Бұл жерде график FBG сенсорларының әртүрлі құрылымдық деформация түрлерін анықтаудағы уақыт ішіндегі сезімталдық дәлдігін сипаттайды. График төрт түрлі деформацияға бөлінген: көлденең кернеу, температуралық өзгеріс, діріл және бүйірлік деформация.

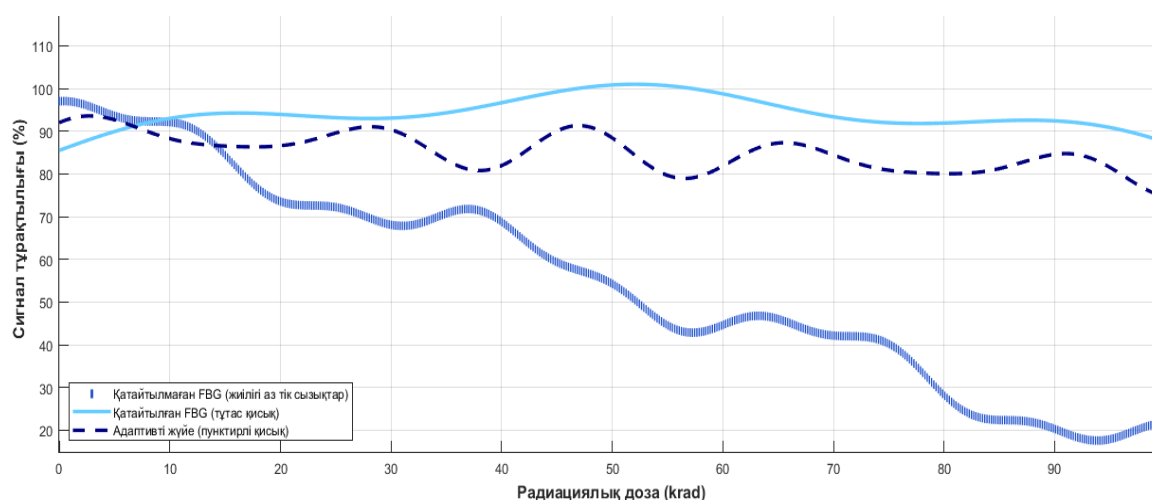
Әр графикте екі сенсорлық әдістің – спектрді бөлу (ашық көк) және интегралды тәсіл (қою көк) – уақыт осі бойындағы реакциялары бейнеленеді.



Сурет 5. FBG сенсорларын деформация салалары бойынша салыстыру

FBG сенсорларының радиациялық ортадағы тұрақтылығын сипаттайтын график 6 – суретте көрсетілген. Сызбадағы гарфиктер сілтемедегі әдебиеттерден және сыртқы мәлімет көздеріне негізделіп matlab программасынан алдық. Бұл жерде әртүрлі конфигурациядағы FBG сенсорларының радиациялық дозаның артуына байланысты сигнал тұрақтылығының өзгерісі бейнеленген. Диаграмма сенсорлардың нақты жұмыс шарттарында қаншалықты сенімді және дәл өлшем бере алатынын салыстырмалы түрде анықтауға мүмкіндік береді.

Горизонталь ось радиациялық дозаны көрсетсе, вертикаль ось сенсордың сигналдық тұрақтылық деңгейін пайыздық өлшемде сипаттайды. Сигнал тұрақтылығы сенсордың деформация немесе температура сияқты параметрлерді дұрыс, үзіліссіз және ауытқусыз тіркей алу қабілетін көрсететін маңызды көрсеткіш.



Сурет 6. FBG сенсорлары: радиациялық әсерге байланысты тұрақтылық

Қорытынды

Ғарыш инфрақұрылымының қауіпсіздігі мен ұзақмерзімділігін қамтамасыз ету үшін құрылымдық деформацияларды нақты әрі үздіксіз бақылау басты талаптарының бірі екенін байқадық. Осы мақалада талданған FBG сенсорлары қажетті дәлдік, сезімталдық және тұрақтылық көрсеткіштері бойынша жоғары тиімді құрал екенін көрсетті. FBG сенсорларының негізгі артықшылықтарын: температура мен деформацияны бір уақытта өлшеу мүмкіндігі, электромагниттік кедергілерге төзімділігі т.б. мүмкіндігін қысқаша анықтадық.

Зерттеу нәтижелері сенсорлар тербеліс, температура, көлденең және бүйірлік деформация сияқты көптеген параметрлерді жоғары дәлдікпен өлшей отырып, ғарыш аппараттарының құрылымдық тұтастығын үздіксіз бақылауға мүмкіндік бере алатыны қысқаша дәлелденді. FBG сенсорлары ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдық денсаулықты бағалау мен деформация мониторингі үшін сенімді әрі жан-жақты шешім ретінде танылып, Алдағы уақытта одан әрі дамуы ғарыш саласындағы қауіпсіздік пен тиімділікті жаңа деңгейге көтеретін болады.

Алғыс айту, мүдделер қайшылығы

Бұл зерттеу Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігінің Ғылым комитеті тарапынан қаржыландырылды (Грант ИРН AP26197431, «Талшықты Брэгг торларын пайдалана отырып, ғарыштық инфрақұрылымдағы деформацияларды жоғары дәлдікпен бақылауға арналған құрылымдар мен технологияларды әзірлеу»).

Авторлар мүдделер қақтығысының жоқтығын мәлімдейді.

Авторлардың үлестері. Н.К. Смайлов, С.Ж. Көшкінбаев, А.К. Сейтханова, Ж. Жаңатайұлы: концептуализация, зерттеу, әдістеме, визуализация, түпнұсқалық жазу, бақылау, ресурстар, шолу, редакциялау және қаржыландыру

Әдебиеттер тізімі

Angela Brindisi, Cristian Vendittozzi, Lidia Travascio, Luigi Di Palma, Michele Ignarra, Vincenzo Fiorillo, Antonio Concilio. A Preliminary Assessment of an FBG-Based Hard Landing Monitoring System, *Photonics* 8, 450 (2021). <https://doi.org/10.3390/photonics8100450>

Fuling Yang, Kehui Zhu, Xiaoyi Yu, Tianze Liu, Ke Lu, Zelong Wang, Yan Li. Air Gap Fiber Bragg Grating for Simultaneous Strain and Temperature Measurement, *Micromachines* 15(1), 140 (2024). <https://doi.org/10.3390/mi15010140>

Angela Brindisi, Cristian Vendittozzi, Lidia Travasci, Marika Belardo, Michele Ignarra, Vincenzo Fiorillo, Antonio Concilio. An FBG-Based Hard Landing Monitoring System: Assessment for Drops on Different Soils, *Photonics* 12(3), 197(2025). <https://doi.org/10.3390/photonics12030197>

Dmitry Kiesewetter, Sergey Krivosheev, Sergey Magazinov, Victor Malyugin, Sergey Varzhel, Elizaveta Loseva, Sauletbek Koshkinbayev, Nurzhigit Smailov. Application of Fiber Bragg Gratings as a Sensor of Pulsed Mechanical Action, *Sensors* 22(19), 7289(2022). <https://doi.org/10.3390/s22197289>

Xavier Sánchez-Botello, Rafael Roig, Oscar de la Torre, Javier Madrigal, Salvador Sales, Xavier Escaler. Assessment of Fiber Bragg Grating Sensors for Monitoring Shaft Vibrations of Hydraulic Turbines, *Sensors* 23(15), 6695(2023). <https://doi.org/10.3390/s23156695>

Guang Yan, Boli Wan, Heng Huang, Wuyi Li. Damage and Failure Monitoring of Aerospace Insulation Layers Based on Embedded Fiber Bragg Grating Sensors, *Polymers* 16(24), 3543(2024). <https://doi.org/10.3390/polym16243543>

Gang Wang, Jiajian Wang, Jian Meng, Liang Ren, Xing Fu. Design, Calibration, and Application of a Wide-Range Fiber Bragg Grating Strain Sensor, *Sensors* 25(4), 1192(2025). <https://doi.org/10.3390/s25041192>

Kangyu Chen, Hengzhen Fan, Hong Bao. Discontinuous Deformation Monitoring of Smart Aerospace Structures Based on Hybrid Reconstruction Strategy and Fiber Bragg Grating, *Sensors* 24(11), 3603(2024). <https://doi.org/10.3390/s24113603>

Ana Fernández-Medina, Malte Frövel, Raquel López Heredero, Tomás Belenguer, Antonia de la Torre, Carolina Moravec, Ricardo San Julián, Alejandro Gonzalo, María Cebollero, Alberto Álvarez-Herrero. Embedded Fiber Bragg Grating Sensors for Monitoring Temperature and Thermo-Elastic Deformations in a Carbon Fiber Optical Bench, *Sensors* 23(14), 6499(2023). <https://doi.org/10.3390/s23146499>

Hun-Kook Choi, Young-Jun Jung, Bong-Ahn Yu, Jae-Hee Sung, Ik-Bu Sohn, Jong-Yeol Kim, Md. Shamim Ahsan. Femtosecond-Laser-Assisted Fabrication of Radiation-Resistant Fiber Bragg Grating Sensors, *Appl. Sci.* 12(2), 886(2022). <https://doi.org/10.3390/app12020886>

Alessandro Aimasso, Carlo Giovanni Ferro, Matteo Bertone, Matteo D. L. Dalla Vedova, Paolo Maggiore. Fiber Bragg Grating Sensor Networks Enhance the In Situ Real-Time Monitoring Capabilities of MLI Thermal Blankets for Space Applications *Micromachines* 14(5), 926(2023). <https://doi.org/10.3390/mi14050926>

Alaa N.D. Alhussein, Mohammed R.T. M. Qaid, Timur Agliullin, Bulat Valeev, Oleg Morozov and Airat Sakhabutdinov. Fiber Bragg Grating Sensors: Design, Applications, and Comparison with Other Sensing Technologies, *Sensors* 25(7), 2289 (2025). <https://doi.org/10.3390/s25072289>

Damien Kinet, Patrice Mégret, Keith W. Goossen, Liang Qiu, Dirk Heider, Christophe Caucheteur. Fiber Bragg Grating Sensors toward Structural Health Monitoring in Composite Materials: Challenges and Solutions, *Sensors* 14(4), 7394-7419(2014). <https://doi.org/10.3390/s140407394>

Manuel González-Gallego, Félix Terroba Ramírez, Juan Luis Martínez-Vicente, Miguel González del Val, Juan José López-Cela, Malte Frövel. Fiber Bragg Gratings Sensor Strain-Optic Behavior with Different Polymeric Coatings Subjected to Transverse Strain, *Polymers* 16(9), 1223(2024). <https://doi.org/10.3390/polym16091223>

Zhen Ma, Xiyuan Chen. Fiber Bragg Gratings Sensors for Aircraft Wing Shape Measurement: Recent Applications and Technical Analysis, *Sensors* 19(1), 55(2019). <http://dx.doi.org/10.3390/s19010055>

Yifan, Shuidong Xiong, Ji Xia. An All-Fiber Optical Sensor Combined with FBG and CFBG-FP for Attitude Estimation, *Sensors* 22(15), 5562(2022). <https://doi.org/10.3390/s22155562>

Jie Xiong, Wen Zhang, Yanming Song, Ke Wen, Yinghao Zhou, Guanghui Chen, Lianqing Zhu. Spectral Splitting Sensing Using Optical Fiber Bragg Grating for Spacecraft Lateral Stress Health Monitoring, *Appl. Sci.* 13(7), 4161(2023). <https://doi.org/10.3390/app13074161>

Alfredo Guemes, Luis Eduardo Mujica, Daniel del-Río-Velilla, Antonio Fernandez-Lopez. Structural Health Monitoring by Fiber Optic Sensors, *Photonics* 12(6), 604(2025). <https://doi.org/10.3390/photonics12060604>

Shiuh-Chuan Her, Wei-Nan Lin. Simultaneous Measurement of Temperature and Mechanical Strain Using a Fiber Bragg Grating Sensor, *Sensors* 20(15), 4223(2020). <http://dx.doi.org/10.3390/s20154223>

Antreas Theodosiou. Recent Advances in Fiber Bragg Grating Sensing, *Sensors* 24(2), 532(2024). <https://doi.org/10.3390/s24020532>

Qi Wu, Yoji Okabe, Fengming Yu. Ultrasonic Structural Health Monitoring Using Fiber Bragg Grating, *Sensors* 18(10), 3395(2018). <http://dx.doi.org/10.3390/s18103395>

Lei Zhang, Bin Shi, Luigi Zeni, Aldo Minardo, Honghu Zhu, Lixiang Jia. An Fiber Bragg Grating-Based Monitoring System for Slope Deformation Studies in Geotechnical Centrifuges, *Sensors* 19(7), 1591(2019) <http://dx.doi.org/10.3390/s19071591>

Veeresh Ramnarine, Vidyadhar Peesapati, Siniša Djurović. Fiber Bragg Grating Sensors for Condition Monitoring of High-Voltage Assets: A Review, *Energies* 16(18), 6709(2023). <https://doi.org/10.3390/en16186709>

Asep Andi Suryandi, Nur Sarma, Anees Mohammed, Vidyadhar Peesapati, Siniša Djurović. Fiber Optic Fiber Bragg Grating Sensing for Monitoring and Testing of Electric Machinery: Current State of the Art and Outlook, *Machines* 10(11), 1103(2022). <https://doi.org/10.3390/machines10111103>

Shengtao Niu, Ru Li. The Enhanced Measurement Method Based on Fiber Bragg Grating Sensor for Structural Health Monitoring, *Micromachines* 16(4), 368(2025). <https://doi.org/10.3390/mi16040368>

Michael Augustine Arockiyadoss, Amare Mulatie Dehnaw, Yibeltal Chanie Manie, Stotaw Talbachew Hayle, Cheng-Kai Yao, Chun-Hsiang Peng, Pradeep Kumar, Peng-Chun Peng. Self-Healing Fiber Bragg

Grating Sensor System Using Free-Space Optics Link and Machine Learning for Enhancing Temperature Measurement, Electronics 13(7), 1276(2024). <https://doi.org/10.3390/electronics13071276>

Zhen Ma, Xiyuan Chen, Cundeng Wang, Bingbo Cui. Real-Time Wing Deformation Monitoring via Distributed Fiber Bragg Grating and Adaptive Federated Filtering, Sensors 25(14), 4343(2025). <https://doi.org/10.3390/s25144343>

Cheng-Kai Yao, Pradeep Kumar, Bing-Xian Liu, Amare Mulatie Dehnaw and Peng-Chun Peng. Simultaneous Vibration and Temperature Real-Time Monitoring Using Single Fiber Bragg Grating and Free Space Optics, Appl. Sci. 14(23), 11099(2024). <https://doi.org/10.3390/app142311099>

Adriana Morana, Emmanuel Marin, Laurent Lablonde, Thomas Blanchet, Thierry Robin, Guy Cheymol, Guillaume Laffont, Aziz Boukenter, Youcef Ouerdane, Sylvain Girard. Radiation Effects on Fiber Bragg Gratings: Vulnerability and Hardening Studies, Sensors 22(21), 8175(2022). <https://doi.org/10.3390/s22218175>

С.Ж. Кошкинбаев^{1,2}, Н.К. Смайлов*¹, А.К. Сейтханова³, Ж. Жанатайұлы¹

¹Казахский национальный технический университет им. К. Сатпаева, Алматы, Казахстан

²Университет Мирас, Шымкент, Казахстан

³Павлодарский педагогический университет им. Алкея Маргулана, Павлодар, Казахстан

(E-mail:smailov@satbayev.university)

Точный контроль деформации в космической инфраструктуре с помощью датчиков FBG

Аннотация. Точный и непрерывный мониторинг структурных деформаций в космической инфраструктуре является ключевым условием обеспечения надежности и долговечности космических аппаратов. Космическая среда по своей природе уникальна и сложна: элементы инфраструктуры подвергаются нестабильным механическим нагрузкам, сильным вибрациям при запуске ракет, резким колебаниям температуры и высокому уровню радиации. Совокупное воздействие этих факторов со временем ослабляет свойства материалов, ускоряет структурное старение, способствует возникновению микродефектов и может привести к аварийным ситуациям. Поэтому для гарантии долгосрочной эксплуатации космических аппаратов необходимо осуществлять непрерывный мониторинг их структурного состояния в режиме реального времени. В этом контексте волоконные решётки Брэгга (FBG) рассматриваются как современное и эффективное решение. Их основные преимущества включают компактность, малый вес, устойчивость к электромагнитным помехам, высокую чувствительность и возможность одновременного измерения нескольких параметров. Такие характеристики делают их особенно подходящими в условиях ограниченных ресурсов массы и энергии в космосе. В статье подробно анализируются принципы работы FBG-сенсоров, чувствительность брэгговской длины волны к температуре и деформации, методы их интеграции в космические конструкции и подходы к интерпретации полученных данных. Кроме того, особое внимание уделяется радиационной стойкости, температурной адаптивности и общей эффективности применения данных сенсоров в космических условиях.

Ключевые слова: датчик FBG, космическая инфраструктура, структурная деформация, оптическое волокно, сетка Брэгга, контроль температуры

S.Zh. Koshkinbaev^{1,2}, N.K. Smailov^{*1}, A.K. Seytkhanova³, Zh. Zhanatayuly¹

¹*Kazakh National Technical University named after K. Satpayev, Almaty, Kazakhstan*

²*Miras University, Shymkent, Kazakhstan*

³*Pavlodar Pedagogical University named after Alkey Margulan, Pavlodar, Kazakhstan*

(E-mail: smailov@satbayev.university)

Precise control of deformation in space infrastructure with FBG sensors

Abstract. Accurate and continuous monitoring of structural deformation in space infrastructure is a key factor in ensuring the reliability and long-term operation of spacecraft. The space environment is inherently unique and complex: infrastructure elements are frequently exposed to unstable mechanical loads, strong vibrations during rocket launches, abrupt temperature fluctuations, and high levels of radiation. The combined influence of these factors gradually weakens material properties, accelerates structural degradation, promotes the formation of micro-defects, and may ultimately lead to hazardous failures. Therefore, real-time continuous monitoring of the structural state is essential to guarantee the long-term performance of spacecraft. In this regard, Fiber Bragg Grating (FBG) sensors are considered a modern and effective solution. Their main advantages include compact size, lightweight, resistance to electromagnetic interference, high sensitivity, and the ability to measure multiple parameters simultaneously. Such characteristics make them highly suitable under the limited mass and energy resources available in space. This article provides a comprehensive analysis of the working principles of FBG sensors, the sensitivity of Bragg wavelength to temperature and strain, installation techniques on space structures, and approaches for interpreting the acquired data. Furthermore, particular attention is given to the radiation resistance, thermal adaptability, and overall effectiveness of these sensors in space applications.

Keywords: FBG sensor, space infrastructure, structural deformation, optical fiber, Bragg mesh, temperature control.

References

Angela Brindisi, Cristian Vendittozzi, Lidia Travascio, Luigi Di Palma, Michele Ignarra, Vincenzo Fiorillo, Antonio Concilio. A Preliminary Assessment of an FBG-Based Hard Landing Monitoring System, *Photonics* 8, 450 (2021). <https://doi.org/10.3390/photonics8100450>

Fuling Yang, Kehui Zhu, Xiaoyi Yu, Tianze Liu, Ke Lu, Zelong Wang, Yan Li. Air Gap Fiber Bragg Grating for Simultaneous Strain and Temperature Measurement, *Micromachines* 15(1), 140 (2024). <https://doi.org/10.3390/mi15010140>

Angela Brindisi, Cristian Vendittozzi, Lidia Travasci, Marika Belardo, Michele Ignarra, Vincenzo Fiorillo, Antonio Concilio. An FBG-Based Hard Landing Monitoring System: Assessment for Drops on Different Soils, *Photonics* 12(3), 197(2025). <https://doi.org/10.3390/photonics12030197>

Dmitry Kiesewetter, Sergey Krivosheev, Sergey Magazinov, Victor Malyugin, Sergey Varzhel, Elizaveta Loseva, Sauletbek Koshkinbayev, Nurzhigit Smailov. Application of Fiber Bragg Gratings as a Sensor of Pulsed Mechanical Action, *Sensors* 22(19), 7289(2022). <https://doi.org/10.3390/s22197289>

Xavier Sánchez-Botello, Rafel Roig, Oscar de la Torre, Javier Madrigal, Salvador Sales, Xavier Escaler. Assessment of Fiber Bragg Grating Sensors for Monitoring Shaft Vibrations of Hydraulic Turbines, *Sensors* 23(15), 6695(2023). <https://doi.org/10.3390/s23156695>

Guang Yan, Boli Wan, Heng Huang, Wuyi Li. Damage and Failure Monitoring of Aerospace Insulation Layers Based on Embedded Fiber Bragg Grating Sensors, *Polymers* 16(24), 3543(2024). <https://doi.org/10.3390/polym16243543>

Gang Wang, Jiajian Wang, Jian Meng, Liang Ren, Xing Fu. Design, Calibration, and Application of a Wide-Range Fiber Bragg Grating Strain Sensor, *Sensors* 25(4), 1192(2025). <https://doi.org/10.3390/s25041192>

Kangyu Chen, Hengzhen Fan, Hong Bao. Discontinuous Deformation Monitoring of Smart Aerospace Structures Based on Hybrid Reconstruction Strategy and Fiber Bragg Grating, *Sensors* 24(11), 3603(2024). <https://doi.org/10.3390/s24113603>

Ana Fernández-Medina, Malte Frövel, Raquel López Heredero, Tomás Belenguer, Antonia de la Torre, Carolina Moravec, Ricardo San Julián, Alejandro Gonzalo, María Cebollero, Alberto Álvarez-Herrero. Embedded Fiber Bragg Grating Sensors for Monitoring Temperature and Thermo-Elastic Deformations in a Carbon Fiber Optical Bench, *Sensors* 23(14), 6499(2023). <https://doi.org/10.3390/s23146499>

Hun-Kook Choi, Young-Jun Jung, Bong-Ahn Yu, Jae-Hee Sung, Ik-Bu Sohn, Jong-Yeol Kim, Md. Shamim Ahsan. Femtosecond-Laser-Assisted Fabrication of Radiation-Resistant Fiber Bragg Grating Sensors, *Appl. Sci.* 12(2), 886(2022). <https://doi.org/10.3390/app12020886>

Alessandro Aimasso, Carlo Giovanni Ferro, Matteo Bertone, Matteo D. L. Dalla Vedova, Paolo Maggiore. Fiber Bragg Grating Sensor Networks Enhance the In Situ Real-Time Monitoring Capabilities of MLI Thermal Blankets for Space Applications *Micromachines* 14(5), 926(2023). <https://doi.org/10.3390/mi14050926>

Alaa N. D. Alhussein, Mohammed R. T. M. Qaid, Timur Agliullin, Bulat Valeev, Oleg Morozov and Airat Sakhabutdinov. Fiber Bragg Grating Sensors: Design, Applications, and Comparison with Other Sensing Technologies, *Sensors* 25(7), 2289 (2025). <https://doi.org/10.3390/s25072289>

Damien Kinet, Patrice Mégret, Keith W. Goossen, Liang Qiu, Dirk Heider, Christophe Caucheteur. Fiber Bragg Grating Sensors toward Structural Health Monitoring in Composite Materials: Challenges and Solutions, *Sensors* 14(4), 7394-7419(2014). <https://doi.org/10.3390/s140407394>

Manuel González-Gallego, Félix Terroba Ramírez, Juan Luis Martínez-Vicente, Miguel González del Val, Juan José López-Cela, Malte Frövel. Fiber Bragg Gratings Sensor Strain-Optic Behavior with Different Polymeric Coatings Subjected to Transverse Strain, *Polymers* 16(9), 1223(2024). <https://doi.org/10.3390/polym16091223>

Zhen Ma, Xiyuan Chen. Fiber Bragg Gratings Sensors for Aircraft Wing Shape Measurement: Recent Applications and Technical Analysis, *Sensors* 19(1), 55(2019). <http://dx.doi.org/10.3390/s19010055>

Yifan, Shuidong Xiong, Ji Xia. An All-Fiber Optical Sensor Combined with FBG and CFBG-FP for Attitude Estimation, *Sensors* 22(15), 5562(2022). <https://doi.org/10.3390/s22155562>

Jie Xiong, Wen Zhang, Yanming Song, Ke Wen, Yinghao Zhou, Guanghui Chen, Lianqing Zhu. Spectral Splitting Sensing Using Optical Fiber Bragg Grating for Spacecraft Lateral Stress Health Monitoring, *Appl. Sci.* 13(7), 4161(2023). <https://doi.org/10.3390/app13074161>

Alfredo Guemes, Luis Eduardo Mujica, Daniel del-Río-Velilla, Antonio Fernández-López. Structural Health Monitoring by Fiber Optic Sensors, *Photonics* 12(6), 604(2025). <https://doi.org/10.3390/photonics12060604>

Shiuh-Chuan Her, Wei-Nan Lin. Simultaneous Measurement of Temperature and Mechanical Strain Using a Fiber Bragg Grating Sensor, *Sensors* 20(15), 4223(2020). <http://dx.doi.org/10.3390/s20154223>

Antreas Theodosiou. Recent Advances in Fiber Bragg Grating Sensing, *Sensors* 24(2), 532(2024). <https://doi.org/10.3390/s24020532>

Qi Wu, Yoji Okabe, Fengming Yu. Ultrasonic Structural Health Monitoring Using Fiber Bragg Grating, *Sensors* 18(10), 3395(2018). <http://dx.doi.org/10.3390/s18103395>

Lei Zhang, Bin Shi, Luigi Zeni, Aldo Minardo, Honghu Zhu, Lixiang Jia. An Fiber Bragg Grating-Based Monitoring System for Slope Deformation Studies in Geotechnical Centrifuges, *Sensors* 19(7), 1591(2019) <http://dx.doi.org/10.3390/s19071591>

Veeresh Ramnarine, Vidyadhar Peesapati, Siniša Djurović. Fiber Bragg Grating Sensors for Condition Monitoring of High-Voltage Assets: A Review, *Energies* 16(18), 6709(2023). <https://doi.org/10.3390/en16186709>

Asep Andi Suryandi, Nur Sarma, Anees Mohammed, Vidyadhar Peesapati, Siniša Djurović. Fiber Optic Fiber Bragg Grating Sensing for Monitoring and Testing of Electric Machinery: Current State of the Art and Outlook, *Machines* 10(11), 1103(2022). <https://doi.org/10.3390/machines10111103>

Shengtao Niu, Ru Li. The Enhanced Measurement Method Based on Fiber Bragg Grating Sensor for Structural Health Monitoring, *Micromachines* 16(4), 368(2025). <https://doi.org/10.3390/mi16040368>

Michael Augustine Arockiyadoss, Amare Mulatie Dehnaw, Yibeltal Chanie Manie, Stotaw Talbachew Hayle, Cheng-Kai Yao, Chun-Hsiang Peng, Pradeep Kumar, Peng-Chun Peng. Self-Healing Fiber Bragg Grating Sensor System Using Free-Space Optics Link and Machine Learning for Enhancing Temperature Measurement, *Electronics* 13(7), 1276(2024). <https://doi.org/10.3390/electronics13071276>

Zhen Ma, Xiyuan Chen, Cundeng Wang, Bingbo Cui. Real-Time Wing Deformation Monitoring via Distributed Fiber Bragg Grating and Adaptive Federated Filtering, *Sensors* 25(14), 4343(2025). <https://doi.org/10.3390/s25144343>

Cheng-Kai Yao, Pradeep Kumar, Bing-Xian Liu, Amare Mulatie Dehnaw and Peng-Chun Peng. Simultaneous Vibration and Temperature Real-Time Monitoring Using Single Fiber Bragg Grating and Free Space Optics, *Appl. Sci.* 14(23), 11099(2024). <https://doi.org/10.3390/app142311099>

Adriana Morana, Emmanuel Marin, Laurent Lablonde, Thomas Blanchet, Thierry Robin, Guy Cheymol, Guillaume Laffont, Aziz Boukenter, Youcef Ouerdane, Sylvain Girard. Radiation Effects on Fiber Bragg Gratings: Vulnerability and Hardening Studies, *Sensors* 22(21), 8175(2022). <https://doi.org/10.3390/s22218175>

Авторлар туралы мәліметтер:

Көшкінбаев С.Ж. – PhD, қауымдастырылған профессоры, Қ.Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық университеті, Алматы, Қазақстан «Мирас» университеті, 160000, Шымкент қ., Қазақстан.

Смайлов Н.Қ. – хат-хабар авторы, PhD, қауымдастырылған профессоры, Қ.Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық университеті, 050013, Алматы, Қазақстан.

Сейтханова А.Қ. – PhD, қауымдастырылған профессоры, Ә.Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, 140000, Павлодар, Қазақстан.

Жаңатайұлы Ж. – «Ғарыштық техника және технология» мамандығы бойынша бакалавриant, электроника телекоммуникация және ғарыштық технология кафедрасы, Сәтбаев университеті, 050022, Алматы, Қазақстан.

Кошкинбаев С.Ж. – PhD, ассоциированный профессор, Казахский национальный технический университет имени К. Сатпаева, Алматы, Казахстан, Университет Мира, 160000, Шымкент, Казахстан.

Смайлов Н.К. – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор, Казахский национальный технический университет имени К. Сатпаева, 050013, Алматы, Казахстан.

Сейтханова А.К. – PhD, ассоциированный профессор, НАО «Павлодарский педагогический университет имени А. Маргулана», 140000, г. Павлодар, Казахстан.

Жанатайұлы Ж. – бакалавр по специальности «Космическая техника и технологии», кафедра электроники телекоммуникаций и космических технологий, Университет им. Сатпаева, 050022, Алматы, Республика Казахстан.

Koshkinbayev S.Zh. – PhD, Associate Professor, Kazakh National Technical University, 160000, Almaty, Kazakhstan, Miras University, Shymkent, Kazakhstan.

Smailov N.K. – Corresponding Author, PhD, Associate Professor, K. Satpayev Kazakh National Technical University, 050013, Almaty, Kazakhstan.

Seitkhanova A.K. – PhD, Associate Professor, A. Margulan Pavlodar Pedagogical University, 140000, Pavlodar, Kazakhstan.

Zhanatayuly Zh. – bachelor student in "Space Engineering and Technology", Department of Electronics, Telecommunications and Space Technologies, Satbayev University, 050022, Almaty, 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/>).



МРНТИ 29.15.01

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-56-66>

Научная статья

Оценка фоновой радиации на территории Казахстана методом ЭПР дозиметрии по зубной эмали

Н.С. Нурсултанова^{1*}, К.Ш. Жумадилов¹, Ж.О. Насилов¹, В.Ф. Степаненко²,
Ш. Тойода³, М. Хоши⁴

¹Международная кафедра ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

²МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии», Обнинск, Россия

³Институт палеонтологии и геохронологии Университета науки Окаяма, Окаяма, Япония

⁴Университет Хиросима, Хиросима, Япония

(E-mail: nazjan777.nn@gmail.com)

Аннотация. В данной обзорной статье проводится комплексный анализ современных исследований, посвящённых ЭПР-дозиметрии с использованием зубной эмали. Рассматриваются фундаментальные аспекты формирования радиационно-индуцированных сигналов, их физико-химическая природа и особенности взаимодействия с природными центрами парамагнитной активности. Анализируются свойства зубной эмали и её модельных систем, включая синтетические апатиты, а также методы регистрации, идентификации и количественной обработки ЭПР-спектров. Особое внимание уделено практическим аспектам дозиметрии, включая подготовку образцов, условия облучения и алгоритмы извлечения информации о дозе. Обсуждаются вопросы линейности дозового отклика, энергетической зависимости сигнала и факторов неопределённости. Актуальность исследования обусловлена растущей потребностью в надёжных методах оценки индивидуальных доз облучения при радиационных авариях, а также в задачах медицинской и экологической дозиметрии. ЭПР-дозиметрия с использованием зубной эмали демонстрирует высокий потенциал как независимый инструмент ретроспективной оценки дозы, обладающий стабильностью сигналов во времени и высокой чувствительностью к ионизирующему излучению. Представленный обзор охватывает как теоретические, так и прикладные аспекты метода, способствуя формированию целостного представления о его возможностях, ограничениях и путях дальнейшего развития. В заключение рассматриваются перспективы дальнейшего развития метода, включая совершенствование спектрального анализа, уточнение моделей формирования сигнала и расширение областей применения ЭПР-дозиметрии в радиационной безопасности и биомедицинских исследованиях.
Ключевые слова: ЭПР-дозиметрия, зубная эмаль, парамагнитный резонанс, радионуклиды.

Поступила 02.09.2025. После доработки 05.09.2025. Принята к печати 08.09.2025. Доступна онлайн 30.09.2025.

^{1*}автор для корреспонденции

Введение

Фоновая радиация представляет собой совокупность ионизирующего излучения, обусловленного природными и техногенными источниками, и является неотъемлемой частью окружающей среды. Основными природными источниками радиационного фона являются космическое излучение, радионуклиды земной коры (уран-238, торий-232, калий-40), а также радиоактивный радон и его дочерние продукты. В то же время антропогенные факторы, включая остаточное радиационное загрязнение после ядерных испытаний, аварий на ядерных объектах и медицинские источники облучения, могут вносить дополнительный вклад в общую дозовую нагрузку на население [1].

Метод электронно-парамагнитного резонанса (ЭПР), используемый для исследования зубной эмали, является одним из наиболее эффективных подходов к ретроспективной оценке индивидуального радиационного облучения. Высокая чувствительность зубной эмали к накоплению ионизирующего излучения объясняется ее минеральным составом, в основе которого лежат кристаллы гидроксиапатита $[\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2]$ [2]. В процессе минерализации происходит частичная замена фосфатных и гидроксильных групп карбонатными соединениями, которые под воздействием ионизирующего излучения формируют устойчивые CO_2^- радикалы [3].

Поглощенная доза, зафиксированная в зубной эмали с помощью ЭПР-спектроскопии, отражает совокупное облучение, накопленное в течение всей жизни зуба, и включает как внешние, так и внутренние источники радиационного воздействия. В условиях естественного радиационного фона основными внешними факторами являются радиоактивные элементы земной коры и космическое излучение, тогда как внутреннее облучение обусловлено биокумуляцией природных радионуклидов, таких, как уран (U), торий (Th), калий-40 (K-40) и стронций-90 (Sr-90) [4]. Распределение и величина накопленной дозы могут значительно варьироваться в зависимости от географических и геологических характеристик местности.

Данное исследование направлено на детальную количественную оценку влияния фонового ионизирующего излучения с использованием ЭПР-анализов зубной эмали, что позволяет определить уровни накопленного радиационного воздействия и выявить возможные закономерности его пространственного распределения.

Материалы и методы

В рамках данного обзорного исследования была проведена систематическая оценка современных научных публикаций, посвященных применению метода электронно-парамагнитного резонанса (ЭПР)-дозиметрии для оценки фоновой радиации на население. Поиск литературы осуществлялся в международных базах данных Scopus, Web of Science, PubMed и Google Scholar за период 1990-2024 гг. Основное внимание уделялось публикациям, содержащим данные о применении ЭПР-дозиметрии зубной эмали для оценки хронического радиационного воздействия. В анализ включались как оригинальные экспериментальные исследования, так и систематические обзоры и

технические отчеты, позволяющие проследить динамику развития метода и выявить его актуальные направления. Предпочтение отдавалось публикациям на английском и русском языках с доступными количественными данными, что обеспечивало возможность последующего сравнительного анализа [2],[4],[5].

После отбора релевантных публикаций был проведен их критический анализ с целью выделения ключевых тенденций, методологических подходов и выявления расхождений в результатах различных исследований. Особое внимание уделялось сравнительному анализу методик ЭПР-дозиметрии, включая различные подходы к подготовке образцов, характеристики используемых спектрометров и способы калибровки дозиметрической шкалы. Анализ полученных дозовых значений позволил определить диапазоны накопленного облучения в различных регионах, оценить зависимость накопленных доз от природно-техногенных факторов, а также провести статистическую обработку данных для выявления закономерностей. Существенной частью исследования стало изучение методов интерпретации и верификации результатов, включающее сравнение доз, полученных методом ЭПР, с данными других дозиметрических подходов, анализ возможных ошибок и неопределенностей, а также выявление систематических погрешностей, связанных с вариабельностью природного радиационного фона и индивидуальными особенностями зубной эмали.

Результаты и обсуждение

В обзор включены исследования, посвящённые применению метода ЭПР-дозиметрии для оценки накопленного радиационного воздействия в различных условиях. Анализ охватывает работы, выполненные с использованием зубной эмали в качестве природного дозиметра. Основное внимание уделено сопоставлению методологических подходов различных авторов, включая калибровочные техники, обработку сигналов и интерпретацию полученных доз. Рассмотрены исследования, направленные на реконструкцию доз у населения, проживающего в районах с различными уровнями фоновой и техногенной облучения, а также работы, оценивающие влияние медицинского рентгеновского облучения и аварийных ситуаций. Полученные результаты демонстрируют значительную вариативность накопленных доз, что подчёркивает важность стандартизации методик ЭПР-дозиметрии и необходимости учёта факторов, влияющих на точность измерений.

ЭПР-дозиметрия широко применяется для ретроспективной оценки накопленных доз облучения, особенно в исследованиях, связанных с радиационным воздействием на зубную эмаль. В различных работах использовались различные модели ЭПР-спектрометров, обеспечивающих высокую точность измерений [4],[5]. Например, в исследовании [4] применялся ЭПР-спектрометр JEOL JES-FA100 (Япония), который позволяет регистрировать радиационно-индуцированные сигналы с высокой чувствительностью. Аналогичный прибор использовался в исследовании [7], что подтверждает его надежность и распространенность в дозиметрических исследованиях.

В то же время в работе [8] (2005) для измерений применялся Bruker ECS 106 (X-band EPR spectrometer), с помощью которого была проведена оценка накопленных доз облучения

зубной эмали в различных регионах Индии. Данный метод также использовался для дозиметрии выживших после атомных бомбардировок Хиросимы и Нагасаки, жертв радиационной аварии в Гоянии (Бразилия) и работников ядерного комплекса Маяк (Россия).

Таким образом, применение ЭПР-спектрометров различных моделей в исследованиях дозиметрии зубной эмали свидетельствует о высокой точности и воспроизводимости метода, что делает его надежным инструментом для ретроспективного определения накопленных доз радиационного облучения.

В исследованиях [7], а также [4] для оценки накопленных доз облучения использовался метод калибровочной зависимости, основанный на сравнении интенсивности ЭПР-сигнала зубной эмали с калибровочной кривой, полученной для образцов с известными дозами. В свою очередь, в работе [8] применялся не только метод калибровочной кривой, но и метод добавочной дозы, при котором образцы эмали подвергались дополнительному облучению от источника ^{60}Co для построения зависимости доза–сигнал. Использование метода добавочной дозы в дополнение к калибровочной зависимости позволяет более точно оценивать накопленные дозы, особенно в случае слабых радиационно-индуцированных сигналов, что расширяет возможности ретроспективной дозиметрии [9].

Для проведения ЭПР-измерений во всех рассмотренных исследованиях использовалась стандартная методика подготовки зубной эмали. В работах [7], [4], а также [8] эмаль отделялась от дентина, так как дентин создаёт высокий фоновый сигнал, мешающий точности измерений. Далее эмаль измельчалась в порошок с размером частиц 0,2–0,5 мм, причём в исследовании [8] использовалась агатовая ступка, а в казахстанских работах – механическое дробление. В работе [8] проводилась дополнительная очистка порошка 5М NaOH в ультразвуковой ванне и травление 20% уксусной кислотой, чего не делалось в других исследованиях. Для устранения механически индуцированных парамагнитных центров после измельчения образцы выдерживались 14 суток перед измерениями. Подготовленные порошки затем помещались в кварцевые капилляры диаметром 3 мм и взвешивались с точностью 100 ± 5 мг. Такой подход к подготовке образцов обеспечивал высокую точность измерений и позволял корректно оценивать накопленные дозы облучения [5].

В исследовании [7], [4], а также [8] использовались различные статистические методы для анализа накопленных доз облучения, полученных методом ЭПР-дозиметрии зубной эмали. В работе [7] применялась линейная регрессия (метод наименьших квадратов) для оценки возрастной зависимости накопленных доз, а также t-тест для сравнения доз между разными участками зубов. Было показано, что фоновая доза в регионах Семеновка и Бегень является относительно однородной ($p = 0,57$), а средняя накопленная доза составляла $34 \pm 3,9$ мГр. В исследовании [4] также применялся t-тест, но в сравнении доз между жителями Астаны, Степногорска и работниками урановой промышленности различия не были статистически значимыми ($p > 0,05$), за исключением тенденции к повышенным дозам в Степногорске ($p = 0,0623$). В отличие от этих исследований, в работе [8] использовались линейная регрессия для выявления возрастной зависимости дозы, а также метод гауссового распределения для анализа фонового облучения.

Здесь были обнаружены значимые региональные различия ($p < 0,05$), а также влияние медицинского рентгеновского облучения на накопленные дозы ($4,03 \pm 2,9$ мГр на один рентгеновский снимок) [2].

Таблица 1. Сравнительный анализ статистических методов и результатов исследований по ЭПР-дозиметрии зубной эмали

Исследование	Статистические методы	Основные результаты
Степногорск, Казахстан	– Линейная регрессия (метод наименьших квадратов) – t-тест – Деконволюция ЭПР-спектров	– Средняя фоновая доза: $34 \pm 3,9$ мГр – Различия между щёчной и язычной сторонами зубов не значимы ($p = 0,57$) – Накопленная доза увеличивается с возрастом
Астана, Казахстан	– t-тест (GraphPad) – Сравнение доз между группами	– Различие доз между городами Астана и Степногорск не значимо ($p = 0,1463$) – Различие между Степногорском и работниками урановой промышленности приближается к значимости ($p = 0,0623$)
Индия	– Линейная регрессия – Гауссовое распределение – Сравнение средних значений	– Средняя годовая доза: $0,96 \pm 0,14$ мГр/год – Различия между регионами значимы ($p < 0,05$) – Влияние рентгена: $4,03 \pm 2,9$ мГр на снимок

Мы провели t-тест анализ данных, представленных в трех исследованиях: Степногорск, Казахстан [4], область Абай, Казахстан [7], и Индия [8]. В результате анализа было установлено, что различия между группами статистически значимы ($p = 0.0419$). Для уточнения различий был выполнен попарный t-тест, который показал:

- Степногорск, Казахстан vs. Индия – различия значимы ($p = 0.0071$), что указывает на более высокие накопленные дозы у жителей Степногорска, вероятно, вследствие воздействия Семипалатинского полигона.
- Степногорск, Казахстан vs. область Абай, Казахстан – различия не являются статистически значимыми ($p = 0.0789$), что свидетельствует о схожих уровнях радиационного фона в этих регионах.
- Область Абай, Казахстан vs. Индия – различия не значимы ($p = 0.3938$), что говорит о близких значениях накопленных доз у жителей этих регионов.

Таким образом, основное различие наблюдается между Степногорском и Индией, что подтверждает влияние локальных источников радиации на уровень накопленного облучения.

Было проведено сравнение накопленных доз облучения у жителей Степногорска, области Абай и Индии с использованием ЭПР-дозиметрии зубной эмали. Статистический анализ показал значимые различия между выборками ($p = 0.0071$), что указывает на неоднородность уровней радиационного воздействия в этих регионах.

Для визуализации данных построен график рассеяния, где разными маркерами обозначены дозы:

- Красные треугольники (▲) – Степногорск.
- Зелёные кружки (●) – область Абай.
- Синие перевернутые треугольники (▼) – Индия.

График демонстрирует, что значения доз в области Абай и Степногорске отличаются значительной вариативностью, что может быть связано с наследием радиационного фона Семипалатинского испытательного полигона. В то же время дозы в Индии более сгруппированы и в среднем ниже, что указывает на естественное радиационное облучение в регионе.

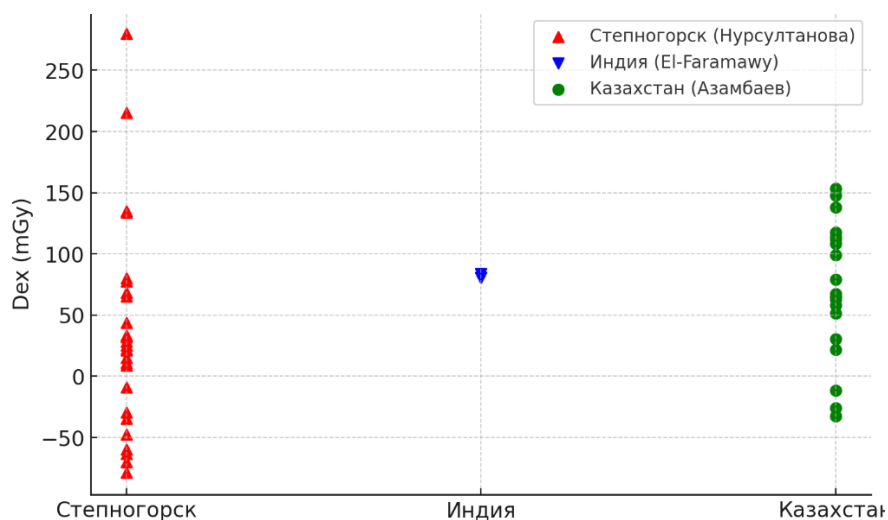


Рисунок 1. Сравнение накопленных доз облучения у жителей Степногорска, области Абай и Индии по данным ЭПР-дозиметрии зубной эмали.

Таким образом, анализ подтверждает значительные различия в накопленных дозах между регионами, что подчёркивает необходимость учета локальных факторов радиационного воздействия при проведении ретроспективной дозиметрии.

Заключение

В данном исследовании проведен сравнительный анализ накопленных доз ионизирующего облучения, определённых методом ЭПР-дозиметрии зубной эмали в различных регионах. Основное внимание уделено Степногорску, другим районам Казахстана и Индии. Результаты показали, что наиболее высокие дозы облучения зафиксированы у жителей Степногорска, что может быть связано с близостью к Семипалатинскому ядерному полигону. Метод ЭПР-дозиметрии продемонстрировал высокую чувствительность и воспроизводимость, позволяя оценивать дозовые нагрузки ретроспективно. Использование различных моделей ЭПР-спектрометров и методик подготовки образцов обеспечивает точность и сопоставимость данных. Статистический анализ подтвердил наличие значимых различий между регионами, особенно между Степногорском и Индией ($p = 0.0071$). При этом различия между Казахстаном и

Индией, а также между Степногорскими и другими регионами Казахстана, оказались незначимыми. Это свидетельствует о географической неоднородности радиационного фона. Полученные результаты подчеркивают важность учета локальных источников радиации при дозиметрических исследованиях. Метод ЭПР-анализов зубной эмали доказал свою эффективность как инструмент ретроспективной оценки хронического облучения населения.

Благодарность

Данная работа выполнена при финансовой поддержке по проекту Грантового финансирования Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (ИРН AP19678341, договор № 269/23-25 от 03.08.2023), а также в рамках программно-целевого финансирования Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (ИРН BR27101493, договор № 269/23-25 от 03.08.2023).

Вклад авторов

Все авторы внесли равный вклад в проведение исследования, анализ полученных результатов и подготовку рукописи. Каждый из авторов участвовал в обсуждении и согласовании окончательного варианта статьи.

Список литературы

1. P. Fattibene, F. Callens, EPR dosimetry with tooth enamel: A review, *Applied Radiation and Isotopes* 68(11), p. 2033–2116 (2010).
2. K. Zhumadilov, A.I. Ivannikov, V. Skvortsov, V. Stepanenko, Z. Zhumadilov, S. Endo, K. Tanaka, M. Hoshi, Tooth enamel EPR dosimetry: optimization of EPR spectra recording parameters and effect of sample mass on spectral sensitivity, *J. Radiat. Res.* 46, p. 435–442 (2005).
3. S. Toyoda, M. Ikeya, Thermal stability of paramagnetic centers in fossil tooth enamel: implication for ESR dating, *Journal of Archaeological Science* 18(2), p. 183–190 (1991).
4. Нурсултанова Н.С., Жумадилов К.Ш. Оценка влияния воздействия низких доз, *Вестник Евразийского национального университета им. Л. Н. Гумилева. Серия: Физико-математические науки* 2(118), p. 123–129 (2017).
5. K. Zhumadilov, A.I. Ivannikov, K.N. Apsalikov, Zh. Zhumadilov, S. Toyoda, D. Zarlyganova, E. Tieliewuhan, S. Endo, K. Tanaka, C. Miyazawa, T. Okamoto, M. Hoshi, Radiation dose estimation by tooth enamel EPR dosimetry for residents of Dolon and Bodene, *J. Radiat. Res.* 47, p. A47–A53 (2006).
6. K. Sh. Zhumadilov, A. I. Ivannikov, V. F. Stepanenko, V. G. Skvortsov, Sh. Toyoda, S. Endo, K. Tanaka, A. D. Kaprin, V. N. Galkin, S. A. Ivanov, T. V. Kolyzhenkov, U. A. Akhmedova, V. V. Bogacheva, M. Hoshi, EPR dosimetry of population living near the radioactive trace after the nuclear test on August 29, 1949, at the Semipalatinsk test site (2017).
7. С. . Азамбаев, К. Ш. Жумадилов, Қазақстан тұрғындарының тіс эмалі арқылы ЭПР әдісімен фондық дозаны бағалау, *Вестник ЕНУ* 2, p. 266 (2017).
8. N. A. El-Faramawy, Estimation of radiation levels by EPR measurement of tooth enamel in Indian populations, *Applied Radiation and Isotopes* 62(2), p. 207–211 (2005).

9. M. Rodzi, K. Zhumadilov, M. Ohtaki, A. Ivannikov, D. Bhattacharjee, A. Fukumura, M. Hoshi, Estimation of background doses for the Peninsular Malaysia population by ESR dosimetry of tooth enamel, Radiat. Environ. Biophys. 57(4), p. 363–368 (2018). DOI: <https://doi.org/10.1007/s00411-018-0748-1>

Н.С. Нурсултанова*¹, К.Ш. Жумадилов¹, Ж.О. Насилов¹, В.Ф. Степаненко², Ш. Тойода³, М. Хоши⁴

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, халықаралық ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасы, Қазақстан, Астана

²А.Ф. Цыба атындағы МРФО – ФМБА «Ұлттық медициналық радиология ғылыми орталығы» филиалы, Обнинск, Ресей

³Окаяма университеті, Ғылым институты, Палеонтология және геохронология институты, Жапония

⁴Хиросима университеті, Хиросима, Жапония
(E-mail: nazjan777.nn@gmail.com)

Қазақстан аумағындағы фондық сәулеленуді тіс эмалі негізіндегі ЭПР дозиметрия әдісімен бағалау

Андатпа. Бұл шолулық мақалада тіс эмалін пайдалану арқылы жүргізілетін ЭПР-дозиметрияға арналған қазіргі зерттеулер кешенді түрде талданады. Жұмыста радиация индуцирлеген сигналдардың қалыптасуының фундаменталды қырлары, олардың физика-химиялық табиғаты және парамагниттік белсенділік орталықтарымен өзара әрекеттесу ерекшеліктері қарастырылады. Тіс эмалінің қасиеттері мен оның модельдік жүйелері, соның ішінде синтетикалық апатиттер, сондай-ақ ЭПР-спектрлерін тіркеу, сәйкестендіру және сандық өңдеу әдістері талданады.

Дозиметрияның практикалық аспектілеріне ерекше назар аударылады: үлгілерді дайындау, сәулелендіру шарттары және дозалық ақпаратты алу алгоритмдері. Дозалық жауаптың сызықтылығы, сигналдың энергияға тәуелділігі және белгісіздік факторлары мәселелері талқыланады.

Зерттеудің өзектілігі радиациялық апаттар жағдайында жеке сәулелену дозасын сенімді бағалауға мүмкіндік беретін әдістерге өсіп келе жатқан қажеттілікпен, сондай-ақ медициналық және экологиялық дозиметриядағы міндеттермен негізделеді. Тіс эмалін пайдалану арқылы жүргізілетін ЭПР-дозиметрия уақыт өте келе сигналдардың тұрақтылығымен және иондаушы сәулеленуге жоғары сезімталдығымен ерекшеленіп, дозаны ретроспективті бағалаудың тәуелсіз құралы ретінде жоғары әлеуетке ие екендігін көрсетеді. Ұсынылған шолу жұмысы әдістің теориялық және қолданбалы аспектілерін қамти отырып, оның мүмкіндіктері, шектеулері және әрі қарай дамытудың жолдары жөнінде тұтас түсінік қалыптастырады.

Қорытынды бөлімде спектралдық талдауды жетілдіру, сигналдың қалыптасу модельдерін нақтылау және ЭПР-дозиметрияны радиациялық қауіпсіздік пен биомедициналық зерттеулер саласында кеңейте қолдану болашағы қарастырылады.

Түйін сөздер: ЭПР-дозиметрия, тіс эмалі, парамагниттік резонанс, радионуклидтер.

N. S Nursultanova*¹, K.Sh. Zhumadilov¹, Zh.O. Nasilov¹, V.F. Stepanenko², Sh. Toyoda³, M. Hoshi⁴

¹*International Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies,
L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

²*A.F. Tsyb Medical Radiological Research Center – Branch of the National Medical Research Radiological
Center, Obninsk, Russia*

³*Institute of Paleontology and Geochronology, Okayama University of Science, Japan*

⁴*Hiroshima University, Hiroshima, Japan*

(E-mail: ¹*nazjan777.nn@gmail.com)

Assessment of Background Radiation in Kazakhstan Using EPR Dosimetry of Tooth Enamel

Abstract. This review article provides a comprehensive analysis of contemporary studies devoted to EPR dosimetry using tooth enamel. The fundamental aspects of radiation-induced signal formation, their physico-chemical nature, and specific interactions with intrinsic paramagnetic centers are considered. The structural and dosimetric properties of tooth enamel and its model systems, including synthetic apatites, are analyzed, along with advanced approaches for the registration, identification, and quantitative evaluation of EPR spectra.

Special attention is given to the practical aspects of dosimetry, including sample preparation, irradiation conditions, and algorithms for extracting dose-related information. Issues of dose–response linearity, energy dependence of the signal, and sources of uncertainty are critically discussed.

The relevance of the study arises from the increasing demand for reliable methods of individual dose assessment in cases of radiation accidents, as well as in medical and environmental dosimetry. EPR dosimetry based on tooth enamel demonstrates high potential as an independent tool for retrospective dose reconstruction, characterized by long-term signal stability and high sensitivity to ionizing radiation. The review integrates both theoretical and applied aspects of the method, contributing to a holistic understanding of its capabilities, limitations, and avenues for further development.

In conclusion, the prospects for advancing the method are outlined, including improvements in spectral analysis, refinement of signal formation models, and the broadening of EPR dosimetry applications in radiation protection and biomedical research.

Keywords: EPR dosimetry, tooth enamel, paramagnetic resonance, radionuclides.

References

1. P. Fattibene, F. Callens, EPR dosimetry with tooth enamel: A review, *Applied Radiation and Isotopes*, 68(11), pp. 2033–2116 (2010).
2. K. Zhumadilov, A.I. Ivannikov, V. Skvortsov, V. Stepanenko, Z. Zhumadilov, S. Endo, K. Tanaka, M. Hoshi, Tooth enamel EPR dosimetry: optimization of EPR spectra recording parameters and effect of sample mass on spectral sensitivity, *J. Radiat. Res.*, 46, pp. 435–442 (2005).
3. S. Toyoda, M. Ikeya, Thermal stability of paramagnetic centers in fossil tooth enamel: implication for ESR dating, *Journal of Archaeological Science*, 18(2), pp. 183–190 (1991).
4. N.S. Nursultanova, & K.Sh. Zhumadilov. Otsenka vliyaniya vozdeystviya nizkikh doz [Assessment of the impact of low dose exposure], *Vestnik Evraziyskogo natsionalnogo universiteta im. L.N. Gumilyova*.

Seriya: Fiziko-matematicheskie nauki [Bulletin of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Series: Physical and Mathematical Sciences], 2(118), pp. 123–129 (2017). [in Russian]

5. K. Zhumadilov, A.I. Ivannikov, K.N. Apsalikov, Zh. Zhumadilov, S. Toyoda, D. Zarlyganova, E. Tieliewuhan, S. Endo, K. Tanaka, C. Miyazawa, T. Okamoto, M. Hoshi, Radiation dose estimation by tooth enamel EPR dosimetry for residents of Dolon and Bodene, J. Radiat. Res., 47, pp. A47–A53 (2006).

6. K. Sh. Zhumadilov, A.I. Ivannikov, V. F. Stepanenko, V. G. Skvortsov, Sh. Toyoda, S. Endo, K. Tanaka, A. D. Kaprin, V. N. Galkin, S.A. Ivanov, T.V. Kolyzhenkov, U. A. Akhmedova, V. V. Bogacheva, M. Hoshi, EPR dosimetry of population living near the radioactive trace after the nuclear test on August 29, 1949, at the Semipalatinsk test site (2017).

7. S.B. Azambaev, & K.Sh. Zhumadilov. Qazaqstan turghyndarynyn tis emali arqyly EPR ädisimen fonlyk dozany bagalau [Estimation of background dose using tooth enamel EPR method for Kazakhstan residents], Vestnik ENU [Bulletin of ENU], 2, p. 266 (2017). [in Kazakh]

8. N. A. El-Faramawy, Estimation of radiation levels by EPR measurement of tooth enamel in Indian populations, Applied Radiation and Isotopes, 62(2), pp. 207–211 (2005).

9. M. Rodzi, K. Zhumadilov, M. Ohtaki, A. Ivannikov, D. Bhattacharjee, A. Fukumura, M. Hoshi, Estimation of background doses for the Peninsular Malaysia population by ESR dosimetry of tooth enamel, Radiat. Environ. Biophys., 57(4), pp. 363–368 (2018). DOI: <https://doi.org/10.1007/s00411-018-0748-1>

Сведения об авторах:

Нурсултанова Н. – автор для корреспонденции, PhD докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Кажымукана, 13, г. Астана, Казахстан.

Жумадилов К.Ш. – PhD, профессор, заведующий международной кафедрой ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Кажымукана, 13, г. Астана, Казахстан.

Насилов Ж.О. – PhD докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Кажымукана, 13, г. Астана, Казахстан.

Степаненко В.Ф. – доктор биологических наук, профессор, заведующий лабораторией медико-экологической дозиметрии и радиационной безопасности МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России.

Тойода Ш. – профессор Института палеонтологии и геохронологии Университета науки Окаямы.

Хоши М. – почетный профессор Университета Хиросимы, Хиросима, Япония.

Нұрсұлтанова Н. – хат-хабар авторы, PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана қ., Қазақстан.

Жумадилов Қ.Ш. – хат-хабарларға жауапты автор, PhD, профессор, «ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар халықаралық кафедрасының» меңгерушісі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана қ., Қазақстан.

Насилов Ж.О. – PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көш., 13, Астана қ., Қазақстан.

Степаненко В.Ф. – биология ғылымдарының докторы, профессор, Ресей Федерациясы Денсаулық сақтау министрлігінің «Радиациялық медицина ұлттық ғылыми-зерттеу орталығы» ФМБА А.Ф. Цыба атындағы Медициналық радиологиялық ғылыми орталығы филиалының медико-экологиялық дозиметрия және радиациялық қауіпсіздік зертханасының меңгерушісі.

Тойода Ш. – Окаяма ғылым университеті, Палеонтология және геохронология институтының профессоры, Жапония.

Хоши М. – Хиросима университетінің құрметті профессоры, Хиросима қ., Жапония.

Nursultanova N. – Corresponding Author, PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana, Kazakhstan.

Zhumadilov K.Sh. – PhD, Professor, Head of the International Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana, Kazakhstan.

Nasilov Zh.O. – PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana, Kazakhstan.

Stepanenko V.F. – Doctor of Biological Sciences, Professor, Head of the Laboratory of Medical and Environmental Dosimetry and Radiation Safety, A.F. Tsyb Medical Radiological Research Center – Branch of the National Medical Research Radiological Center, Ministry of Health of the Russian Federation, Obninsk, Russia.

Toyoda Sh. – Professor, Institute of Paleontology and Geochronology, Okayama University of Science, Japan.

Hoshi M. – Professor Emeritus, Hiroshima University, Hiroshima, Japan.



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/>).



МРНТИ 29.15.01

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-67-84>

Научная статья

Стабильное формирование BiVO_4/ZnO гетероструктуры методом мягкого осаждения

Ж. Кули^{1,2}, Н.Б. Бакранов¹, Б.Ж. Сейтов³, Ф.Р. Капсаламова⁴, Д.И. Бакранова^{5*}, С.А. Пазылбек⁶

¹«Research Group altAir nanolab», Алматы, Казахстан

²Satbayev University, Алматы, Казахстан

³Международный казахско-турецкий университет имени Х.А. Ясави, Туркестан, Казахстан

⁴Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Казахстан

⁵SDU University, Каскелен, Казахстан

⁶Университет имени Ж.А. Ташенева, Шымкент, Казахстан

(E-mail: dinabakranova@gmail.com)

Аннотация. В этой работе представлены результаты мягкого двухступенчатого послойного (layer-by layer) осаждения ванадата висмута (BiVO_4) на синтезированные гидротермальным методом наностержни оксида цинка (ZnO) методом spin coating. Контроль вязкости, концентрации прекурсоров играет ключевую роль в регулировке толщины, однородности и стабильности сформированных пленок BV на ZnO. Характеризация полученных образцов проводилась с помощью комплекса методов. Сначала использовалась UV-Vis спектроскопия, которая позволила определить спектр поглощения в видимой области после нанесения BiVO_4 . Далее методом рентгеноструктурного анализа (XRD) было подтверждено наличие моноклинной фазы BiVO_4 и вюрцитной фазы ZnO , а также оценен уровень кристалличности образцов. Наконец, сканирующая электронная микроскопия (SEM) показала морфологию ZnO и стабильное покрытие их слоем BiVO_4 . Для оценки практических качеств гетероструктур BiVO_4/ZnO было проведено фотоэлектрохимическое измерение с линейным вольтамперным сканированием в полевых естественных условиях, демонстрирующие работоспособность пленок в реальных условиях. Полученные в ходе проведенных экспериментов результаты наглядно подтвердили, что предложенный нами метод двухступенчатого spin coating с оптимизированной вязкостью растворов позволяет создавать стабильные гетероструктуры, пригодные для применения в фотоэлектрохимических устройствах.

Ключевые слова: оксид цинка, ванадат висмута, гидротермальный синтез, фотоэлектрохимия, этиленгликоль, мягкое осаждение.

Поступила 21.07.2025. После доработки 03.09.2025. Принята к печати 05.09.2025. Доступна онлайн 30.09.2025.

^{1*}автор для корреспонденции

Введение

Оксид цинка (ZnO) является признанным фотокатализатором, который привлекает внимание исследователей благодаря совокупности уникальных свойств, включая высокую фотокаталитическую активность, нетоксичность, хорошую химическую стабильность и высокую подвижность электронов [1-3]. ZnO относится к полупроводниковым материалам с широкой прямой запрещённой зоной (около 3,3 эВ), что обеспечивает его высокую фоточувствительность в ультрафиолетовом диапазоне [4,5]. Эти характеристики делают ZnO одним из наиболее широко изучаемых материалов для фотоэлектрохимических приложений, таких, как деградация органических загрязнителей, фотосенсибилизированные солнечные элементы и расщепление воды. Однако основным ограничением применения ZnO является его неэффективное поглощение в видимой области солнечного спектра и склонность к рекомбинации фотогенерированных электронно-дырочных пар, что снижает эффективность процессов преобразования солнечной энергии.

Ванадат висмута (BiVO_4) представляет собой перспективный полупроводниковый оксид n-типа, который на сегодняшний день активно исследуется в качестве эффективного фотоанодного материала [6]. BiVO_4 обладает относительно узкой шириной запрещённой зоны (около 2,4-2,8 эВ), благодаря чему способен поглощать значительную часть видимого света солнечного спектра. Дополнительно он характеризуется высокой химической и фотостабильностью, нетоксичностью, а также хорошей устойчивостью к коррозии в водных средах. Известно, что BiVO_4 может кристаллизоваться в трёх различных модификациях: тетрагональной цирконоподобной, моноклинной шефферитовой и тетрагональной шефферитовой фазах [7]. Среди них именно моноклинная фаза проявляет наибольшую активность в фотоэлектрохимических процессах.

Создание гетероструктур на основе ZnO и BiVO_4 представляет собой один из наиболее эффективных подходов к повышению фотокаталитической и фотоэлектрохимической активности материалов за счёт комбинации их свойств и эффективного пространственного разделения фотогенерированных носителей заряда [8-10]. Благодаря различным ширинам запрещённых зон и выравниванию энергетических уровней, гетероструктуры типа BiVO_4/ZnO демонстрируют расширенное спектральное поглощение в ультрафиолетовой и видимой областях, а также улучшенное разделение электронов и дыр на границе раздела фаз. Это снижает вероятность рекомбинации и способствует повышению квантового выхода процессов фоторазложения воды.

В последние годы гетероструктуры BiVO_4/ZnO активно исследуются в контексте фотоэлектрохимического расщепления воды для получения водорода, где они демонстрируют значительные преимущества по сравнению с индивидуальными компонентами. Так, в работе Jinglin Li были синтезированы наноструктуры BiVO_4/ZnO в виде квантовых точек. В процессе кальцинации образовались прочные химические связи между BiVO_4 и ZnO (Bi-O-Zn мостики), что согласуется с нашими результатами, подтверждающими синергетическую эффективность данной гетероструктуры [11]. Кроме того, перспективным направлением является использование дополнительных

материалов в качестве кокатализаторов, как это показали Jih-Sheng Yang и Jih-Jen Wu [12], применив Co-Pi (фосфат кобальта). Данный подход может быть в дальнейшем адаптирован и модифицирован в нашей работе. Гетероструктуры BiVO_4/ZnO обладают высоким потенциалом для производства водорода путём фотоэлектрохимического расщепления воды [13-14]. В частности, комбинация высокой светопоглощающей способности BiVO_4 и высокой подвижности электронов в ZnO обеспечивает эффективный перенос заряда и устойчивую фотокаталитическую активность при освещении солнечным светом.

Таким образом, формирование нанокompозитных гетероструктур BiVO_4/ZnO является перспективным направлением в разработке новых материалов для солнечного водородного топлива и других фотоэлектрохимических приложений.

Материалы и методы

Синтез наностержней ZnO

Для обеспечения ориентированного роста наностержней ZnO на подложках из фторсодержащего оксида олова (FTO) предварительно наносился тонкий затравочный слой. Подложки очищали последовательно в ультразвуковой ванне: сначала в ацетоне, затем в изопропанолe, после чего ополаскивали дистиллированной водой. Раствор для формирования затравочного слоя готовили путём растворения 0.1 г ацетата цинка дигидрата $\text{Zn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (ZnAC) в 10 мл изопропанолe при температуре 70 °C с перемешиванием на магнитной мешалке, при необходимости добавляли 0.005-0.02 мл 70%-ой уксусной кислоты для достижения прозрачности раствора. Нанесение производили методом spin-coating, дозируя по 0,05 мл раствора на каждый цикл при скорости 3000 об/мин в течение 10 секунд. Процедуру повторяли 4-6 раз для достижения равномерного покрытия с промежуточной сушкой каждого слоя при 100 °C. После нанесения подложки подвергали термическому отжигу при температуре 350 °C в течение 1 часов на воздухе.

Формирование наностержней ZnO проводилось методом гидротермального синтеза. В 50 мл дистиллированной воды растворяли 0.439 г ZnAC и 0.280 г гексаметилентетрамина (НМТА). Подложку с нанесённым затравочным слоем помещали в реакционный стакан таким образом, чтобы она находилась в подвешенном положении. Стакан устанавливали на магнитную мешалку с функцией нагрева и контролем температуры. Процесс синтеза проводили при температуре 90 °C в течение 90 минут при скорости перемешивания 150-200 об/мин. Контроль температуры осуществлялся с помощью термopары, погружённой непосредственно в раствор.

Синтез нанослоев BiVO_4

Было принято решение разработать метод синтеза, который не оказывал бы агрессивного воздействия на структуру ZnO. В своей работе Lu Yan, Wei Zha, Zhifeng Liu [15] использовали этиленгликоль метиловый эфир в качестве растворителя прекурсоров для получения BiVO_4 . В настоящем исследовании выбор был сделан в пользу этиленгликоля (EG), поскольку он является менее токсичным по сравнению с этиленгликоль метилом

и характеризуется слабокислой реакцией среды. Следует отметить, что значение pH чистого этиленгликоля невозможно определить классическими методами, так как он относится к неводным растворителям. По этой причине pH и pK' таких систем, как правило, устанавливаются косвенными титриметрическими методами и рассматриваются как условные [16]. В проведённых экспериментах pH приготовленных растворов с добавлением EG находился в диапазоне около 6-7. Растворимость ZnO существенно зависит от кислотности среды. Известно, что материал хорошо растворяется в условиях кислой реакции с $pH < 2,7$, а также в некоторых органических растворителях [17-19].

В ходе настоящего эксперимента была протестирована методика двухэтапного синтеза тонкой плёнки $BiVO_4$. На первом этапе (I) был приготовлен раствор висмута: 0.094 г $Bi(NO_3)_3 \cdot 5H_2O$ (далее BiN_5W) было растворено в 6 мл EG. Отдельно был приготовлен раствор ванадия: 0.0227 г метаванадата аммония (NH_4VO_3 , далее NHV) растворили в 6 мл горячей дистиллированной воды (DiW) (70-80 °C). Для оценки поведения растворов при контакте была проведена проба: сначала на подложку нанесли каплю раствора Bi^{3+} , затем на ту же область добавили каплю VO_4^{3-} . В результате практически мгновенно произошло изменение цвета на насыщенно оранжевый, что свидетельствует о быстрой инициации реакции между ионами Bi^{3+} и VO_4^{3-} с образованием предварительных комплексов или геля $BiVO_4$.

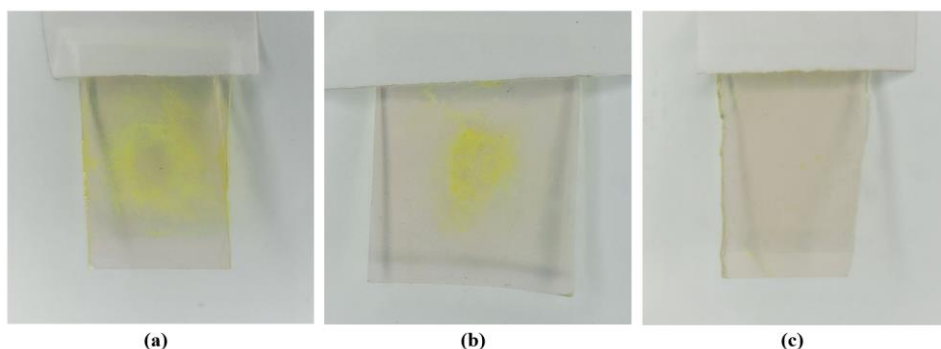
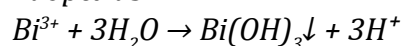


Рисунок 1. Синтез $BiVO_4$ с использованием EG и дистиллированной воды
(а) Образец, полученный на I ом этапе синтеза, (б) на II ом этапе синтеза,
(с) на III ом этапе синтеза

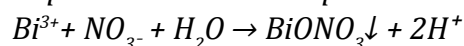
Полученная после пяти повторных циклов структура $BiVO_4$ демонстрирует неравномерное распределение материала на подложке, с выраженной зоной агломерации в центральной части, что показано на рисунке 1(а). На изображении наблюдается кольцевидное пожелтение, указывающее на то, что в ходе капельного нанесения растворов Bi^{3+} и VO_4^{3-} образование фазы $BiVO_4$ происходило преимущественно в месте начального контакта и смешивания ионов. Это подтверждает, что реакция между прекурсорами протекает быстро и локализованно, что приводит к агрегированию в области максимальной концентрации. Такой эффект может негативно сказаться на оптической и электронной однородности плёнки. Следовательно, для получения равномерного покрытия необходимо применять поэтапное послойное нанесение (layer-by-layer spin coating) с промежуточной сушкой.

На втором этапе (II) эксперимента для улучшения растворимости, текучести и равномерности нанесения в раствор висмута был добавлен сополярный спиртовой компонент. В частности, 0.094 г BiN_5W было растворено в смеси 6 мл EG и 3 мл изопропанола. Отдельно был приготовлен раствор ванадия: 0.0224 г NHV было растворено в 9 мл горячей DiW при температуре $\sim 70-80^\circ\text{C}$. Растворы были нанесены послойно методом drop casting на подложку с промежуточной сушкой, с повторением цикла $\text{Bi}^{3+}/\text{VO}_4^{3-}$ пять раз. Несмотря на разбавление раствора в смеси EG и изопропанола, наблюдалась выраженная агломерация продукта в центре нанесённой капли после последовательного добавления раствора VO_4^{3-} . Вероятной причиной такого поведения является гидролиз ионов Bi^{3+} в присутствии изопропанола, особенно при наличии следов воды. Из-за слабой полярности изопропанола и отсутствия стабилизирующих агентов, Bi^{3+} ионы теряют устойчивость и образуют гидрокси- или оксинитратные осадки, что приводит к преждевременной и локализованной реакции с NHV:

Гидролиз Bi^{3+} :

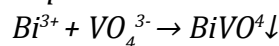


Образование оксинитрата висмута:

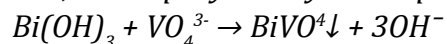


При контакте с раствором ванадата аммония происходит быстрая реакция ионов Bi^{3+} или гидроксидных форм с ванадатом:

Образование ванадата висмута:



или, если присутствует гидроксид:



В результате при нанесении растворов реакция между Bi^{3+} и VO_4^{3-} протекает локализованно и преимущественно в центре капли, где концентрация ионов максимальна. Это сопровождается образованием характерного жёлтого осадка BiVO_4 в виде агломератов, наглядно показано на рисунке 1(b).

На третьем этапе (III) в рамках оптимизации метода послойного нанесения BiVO_4 на подложку с наноструктурированным оксидом цинка был разработан новый двухступенчатый протокол с использованием смешанных растворителей. Раствор А готовили путём растворения 0.094 г. BiN_5W в смеси 6 мл EG в ультразвуковой ванне, только после полного растворения добавляли 3 мл DiW, что обеспечивало снижение вязкости. Раствор В получали следующим образом: 0.0227 г. NHV растворяли в 6 мл DiW при температуре 90°C с перемешиванием до полного растворения, после чего добавляли 3 мл EG. Нанесение осуществлялось пошагово: на подложку сначала наносилась капля (100-500 мкл) раствора А, затем проводилось вращение при 3000 об/мин на 10

секунд, после чего добавлялась капля раствора В и повторное вращение с такими же параметрами вращения. Такой цикл повторялся пять раз, после чего подложка сушилась при температуре 100 °С 5 минут, что продемонстрировано на рисунке 1(с). В общей сложности были подготовлены шесть образцов с количеством полных циклов (слоёв) от 5 до 30: 5, 10, 15, 20, 25 и 30. Готовый образец с нанесённым слоем BiVO_4 на подложку с наноструктурированным оксидом цинка дополнительно подвергали термическому отжигу в воздушной среде при температуре 350 °С в течение 1,5 часа. Предложенный подход позволил достичь контролируемого наращивания толщины плёнки BiVO_4 и более равномерного распределения материала по поверхности. Молярность раствора $\text{BiN5W} \approx 0.0216 \text{ M}$ в 6 мл EG и 3 мл воды. Молярность NHV в 6 мл воды и 3 мл EG ≈ 0.0216 . Это значит, что молярное соотношение ионов Bi^{3+} и VO_4^{3-} примерно 1:1, что идеально подходит для формирования стехиометрически сбалансированного BiVO_4 . Результаты циклов нанесения слоев продемонстрированы на рисунке 2. По мере увеличения числа подходов наблюдается постепенное утолщение и усиление окраски покрытия – от бледно-жёлтого слоя (5 циклов) к насыщенному зеленовато-жёлтому при максимальном количестве слоёв (30 циклов).

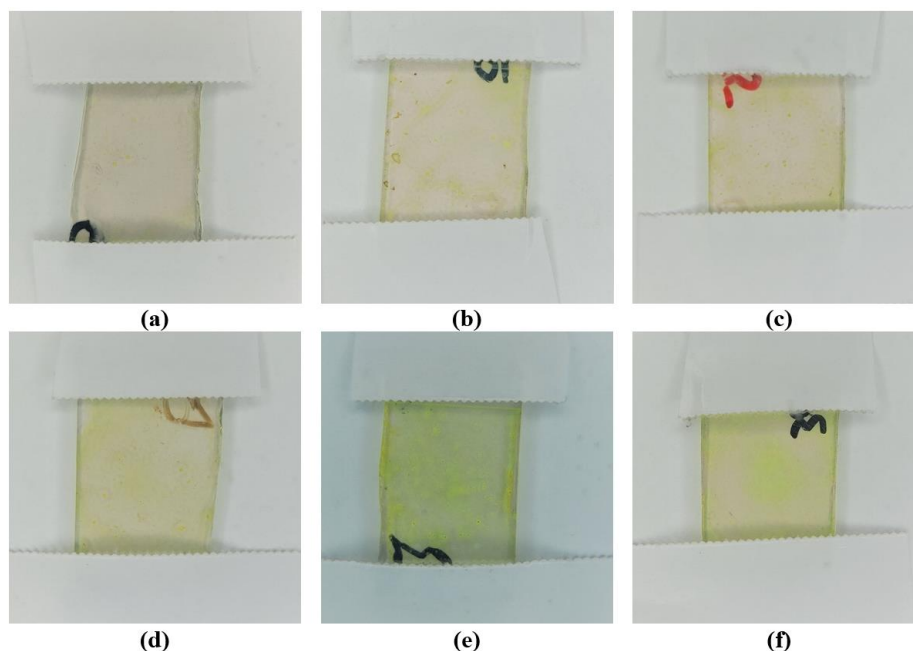


Рисунок 2. Фото ИТО подложек после послойного (layer-by-layer) нанесения растворов А и В методом spin-coating с различным числом циклов нанесения: (а) 5 циклов, (b) 10 циклов, (с) 15 циклов, (d) 20 циклов, (e) 25 циклов, (f) 30 циклов.

При нанесении растворов А и В в 30 циклов была получена гетероструктура BiVO_4/ZnO , визуально характеризующаяся равномерной жёлтой окраской поверхности (рисунок 3). В ходе экспериментов установлено, что процесс формирования плёнки на предварительно синтезированном наноструктурированном слое ZnO существенно отличается от нанесения на чистое стекло FTO.

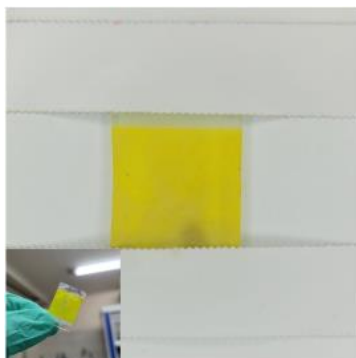


Рисунок 3. Гетероструктура BiVO_4/ZnO

Это связано с различиями в смачиваемости и гидрофильности подложек: поверхность ZnO обладает более выраженной гидрофильной природой и обеспечивает лучшее распределение растворов по подложке [20-22]. В результате формируется более плотное и толстое покрытие BiVO_4 по сравнению с аналогичным количеством циклов, нанесённых на FTO-стекло. Таким образом, наличие наноструктурированного ZnO способствует увеличению конечной толщины и равномерности плёнки BiVO_4 за счёт улучшенного смачивания и адгезии растворов прекурсоров. Это окажет влияние и на результаты электрохимических измерений, что будет описано в соответствующей главе.

Результаты и обсуждение

Все полученные образцы были всесторонне охарактеризованы с использованием набора аналитических методов. Рентгеноструктурный анализ (XRD) проводился с использованием дифрактометра Malvern PANalytical X'Pert Pro MPD (излучение $\text{Cu K}\alpha$, $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$, напряжение 30 кВ, ток 10 мА) в диапазоне от 5-70 градусов (2θ). Микроструктура и морфология наностержней дополнительно подтверждены методом сканирующей электронной микроскопии (SEM), выполненной на микроскопе JEOL JSM-6510LA и JEOL JSM-6490LA. Оптические свойства образцов изучены с применением спектрофотометра Peak Instruments C-7200 UV-Vis в диапазоне длин волн 300-700 нм. Полученные спектры демонстрировали выраженное поглощение в ультрафиолетовой области и высокую прозрачность в видимом диапазоне.

Анализ SEM снимков

На рисунке 4а, 4б и 4с продемонстрированы SEM снимки. На рисунке 4а наблюдается плотный массив упорядоченных наностержней ZnO . Структуры имеют высокую степень ориентации, близкую к перпендикулярной подложке, и однородный размерный ряд. Такая морфология характерна для гидротермального синтеза. Размер отдельных наностержней, судя по масштабу, порядка $\sim 100\text{-}200$ нм в поперечном сечении. На рисунке 4б показан чистый BiVO_4 . Видны рыхлые агломераты частиц неправильной формы, образующие сравнительно пористую плёнку. Частицы имеют размеры порядка 200-400 нм и располагаются хаотично, без выраженной текстурированной ориентации. Такая структура типична для осаждения из раствора с последующей термообработкой. Изображения материалов, полученных в нашей работе, согласуются с изображениями BiVO_4 , синтезированные Zhang, L., Herrmann, L.O., & Baumberg, J. J. [23].

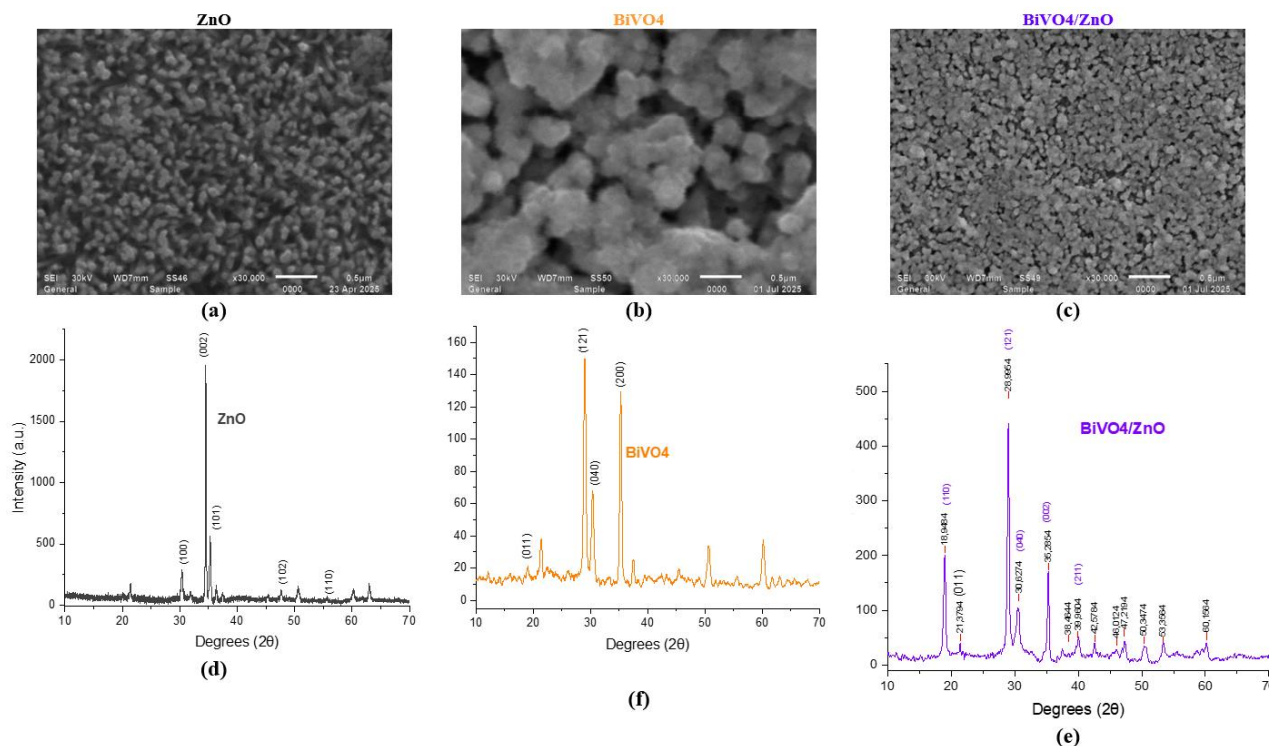


Рисунок 4. Морфологическая и структурная характеристика исходного ZnO, чистого BiVO_4 и гетероструктуры BiVO_4/ZnO . SEM изображения крупного плана: (a) ZnO наностержни, (b) нанослой BiVO_4 , (c) покрытие BiVO_4 на ZnO наностержнях. Соответствующие рентгенограммы: (d) ZnO, (f) BiVO_4 , (e) объединённый спектр гетероструктуры BiVO_4/ZnO .

На рисунке 4с показана гетероструктура BiVO_4/ZnO . После послойного нанесения BiVO_4 на ZnO поверхность покрыта более плотным слоем частиц. Наностержневая подложка частично сохраняется, но перекрыта равномерным покровом более мелких зерен BiVO_4 , что создаёт сплошной композитный слой. По сравнению с чистым BiVO_4 , покрытие выглядит более однородным и равномерно распределённым по поверхности.

Рентгеноструктурный анализ

На рисунке 4d, 4f и 4e продемонстрированы рентгеновские дифрактограммы чистого ZnO, чистого BiVO_4 , гетероструктура BiVO_4/ZnO соответственно. На рисунке 4d отчётливо видны интенсивные пики рентгенограммы при $2\theta \approx 31.7^\circ$, 34.4° и 36.2° , соответствующие плоскостям (100), (002) и (101) гексагональной структуры вюрцита ZnO (JCPDS 36 1451). Самый интенсивный пик (002) указывает на предпочтительную ориентацию кристаллов по оси c, характерную для наностержней, выросших перпендикулярно подложке. Дополнительно фиксируются менее интенсивные сигналы от плоскостей (102), (110) и других высокоиндексных граней.

На следующей дифрактограмме (рисунок 4f) продемонстрированы характерные пики моноклинной фазы BiVO_4 (пространственная группа I2/b). Основные рефлексы наблюдаются в области $2\theta \approx 28.9^\circ$ (плоскость (121)), 30.5° ((040)), а также $\sim 34.5^\circ$ ((200)).

Эти пики однозначно указывают на формирование кристаллической фазы BiVO_4 без значительных примесей.

На последней рентгенограмме (рисунок 4е) фиксируются дифракционные пики обеих фаз. Сохраняются сигналы ZnO при $\sim 31.7^\circ$, 34.4° , 36.2° , а также основные пики BiVO_4 при $\sim 28.9^\circ$, $\sim 30.5^\circ$ и $\sim 34.5^\circ$. Их одновременное присутствие подтверждает успешное формирование гетероструктуры BiVO_4/ZnO без появления новых фаз или аморфизации компонентов.

Оптический анализ образцов

На рисунке 5а и 5б представлены спектры поглощения в диапазоне 300-700 нм для образцов ZnO , BiVO_4 и их гетероструктуры BiVO_4/ZnO , полученные методом УФ-видимой спектроскопии.

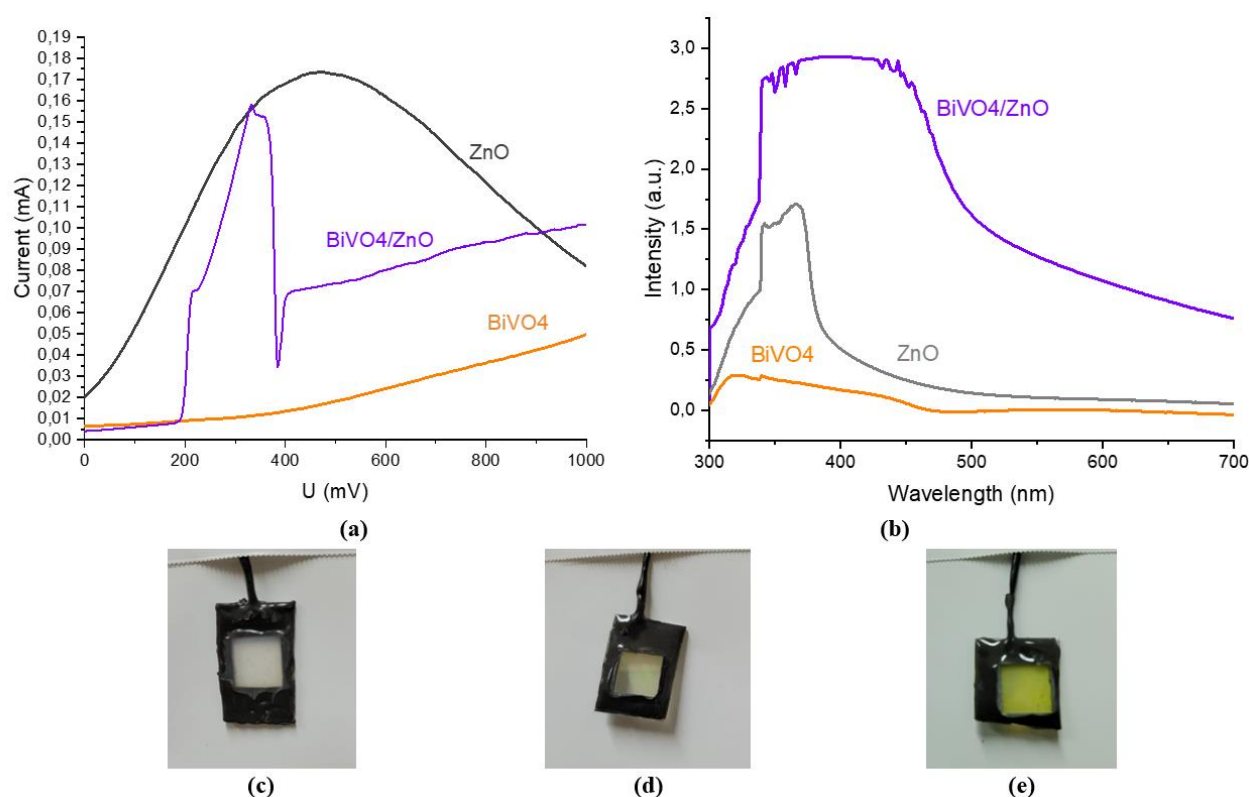


Рисунок 5. (а) Фототок для ZnO нанострежней, чистого BiVO_4 и гетероструктуры BiVO_4/ZnO при наружном освещении. (б) UV-Vis спектры поглощения пленок ZnO , BiVO_4 и BiVO_4/ZnO . (с) Подготовленный для фотоэлектрохимического эксперимента с активной площадью 1 см^2 ZnO , (д) 1 см^2 BiVO_4 , (е) 1 см^2 BiVO_4/ZnO

Чистый ZnO демонстрирует интенсивное поглощение преимущественно в ультрафиолетовой области с максимумом около 360-380 нм, что связано с широкой запрещенной зоной (~ 3.2 - 3.3 эВ) и ограниченной фоточувствительностью в видимом диапазоне. В отличие от него, BiVO_4 характеризуется более широким спектром поглощения, распространяющимся до области 520-550 нм, что обусловлено меньшей шириной запрещенной зоны (~ 2.4 - 2.5 эВ) и способностью эффективно использовать видимую часть солнечного излучения. Гетероструктура BiVO_4/ZnO демонстрирует

комбинированные характеристики спектрального поглощения обоих компонентов: высокая интенсивность в ультрафиолетовой области сочетается с заметным расширением поглощения в сторону видимого диапазона. При этом суммарное поглощение в области 400-500 нм значительно превышает таковое для индивидуальных компонентов, что свидетельствует о синергетическом эффекте при формировании гетероструктуры и высокой толщине гетероструктуры. Полученные результаты подтверждают, что интеграция BiVO_4 и ZnO позволяет значительно повысить эффективность использования солнечного света за счёт расширения диапазона поглощения и, следовательно, делает такие гетероструктуры перспективными материалами для фотоэлектрохимического расщепления воды и других фотокаталитических приложений.

Фотоэлектрохимическое измерение с линейным вольтамперным сканированием

Измерения проводились под естественным солнечным освещением в полевых условиях на открытом воздухе по координатам 43,2363533 N, 76,9318693 E (г. Алматы, Казахстан) 29 июня и 1 июля 2025. В качестве электролита использовался 0.5 М раствор сульфата натрия (Na_2SO_4) в объеме 80 мл, поскольку данный электролит является химически инертным и неагрессивным по отношению к наноструктурам ZnO и показал высокую функциональность в ряде научных работ [24]. На рисунке 6 продемонстрированы погодные условия (1,2,3) во время проведения анализов, а также снимок самой электрохимической ячейки (4)

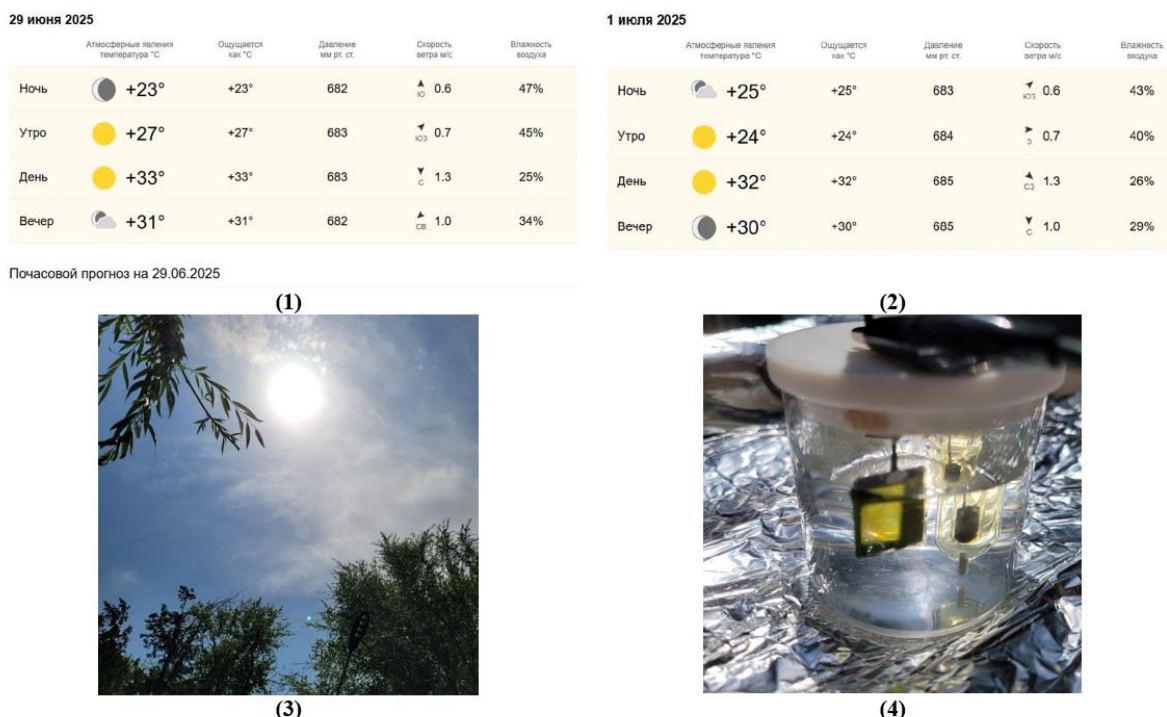


Рисунок 6. Условия полевых PEC экспериментов: (1) погодные условия 29 июня и (2) 1 июля 2025 года – температура, влажность, ветер и облачность; (3) реальное солнечное освещение в момент измерений; (4) экспериментальная установка – гетероструктура BiVO_4/ZnO в электролите под естественным освещением

Фотоэлектрохимические измерения проводились методом линейного вольтамперного сканирования (PEC-LSV) в диапазоне потенциалов от 0 до +1,0 В относительно электрода сравнения Ag/AgCl , используя потенциостат/гальваностат в стандартной трёхэлектродной ячейке. В качестве рабочего электрода использовались 3 образца: ZnO , BiVO_4 , BiVO_4/ZnO , изолированные эпоксидной смолой с открытой рабочей площадью 1 см^2 (рисунок 5с-5е). В качестве противоиэлектрода применялась платиновая пластина размером $0.5 \times 0.5 \text{ см}$, а электрод сравнения представлял собой электрод Ag/AgCl с насыщенным раствором KCl . На рисунке 5а представлены вольтамперные характеристики трех систем: ZnO , BiVO_4 и гетероструктуры BiVO_4/ZnO . Наибольший фототок продемонстрировал ZnO , для которого максимальное значение тока составило около 0.18 мА при потенциале порядка $350\text{--}400 \text{ мВ}$. Для BiVO_4 наблюдается наиболее низкий ток, монотонно возрастающий с увеличением напряжения, что связано с его относительно низкой проводимостью и особенностями зонной структуры. Гетероструктура BiVO_4/ZnO демонстрирует комбинированное поведение: на низких потенциалах ток невысокий, но начиная с $\sim 400 \text{ мВ}$ он возрастает и выходит на устойчивый рост при напряжении до 1000 мВ , и показывает наибольший ток, равный 0.101 мА/см^2 по сравнению с остальными $\text{ZnO} - 0.08 \text{ мА/см}^2$, $\text{BiVO}_4 - 0.049 \text{ мА/см}^2$. Характерной особенностью является выраженный спад тока в области $350\text{--}400 \text{ мВ}$, который может быть связан с перестройкой зонных уровней и выравниванием потенциалов Ферми на границе раздела фаз. При дальнейшем увеличении потенциала фототок постепенно восстанавливается, что указывает на формирование более стабильного гетероперехода и повышение эффективности пространственного разделения носителей заряда. Полученные результаты подтверждают перспективность применения гетероструктур BiVO_4/ZnO в фотоэлектрохимических системах. Следует отметить, что даже при сравнительно большой толщине слоя BiVO_4 образцы демонстрируют возрастающий фототок, что подчёркивает вклад гетероперехода в улучшение характеристик. В перспективе рекомендуется провести дополнительные исследования с образцами, синтезированными посредством 15-20 циклов осаждения BiVO_4 , чтобы более детально изучить влияние толщины активного слоя на фотоэлектрохимическую активность. В исследованиях часто указывают, что оптимальная толщина для PEC измерений у BiVO_4 равна $300\text{--}330 \text{ нм}$ [25-26].

Заключение

В настоящей работе был предложен и реализован мягкий двухступенчатый метод послойного нанесения ванадата висмута на наностержни оксида цинка с использованием этиленгликоля и водных растворов, что позволило получить равномерные и стабильные гетероструктуры BiVO_4/ZnO . Проведённые структурные и морфологические исследования (XRD, SEM) подтвердили формирование моноклинной кристаллической фазы BiVO_4 и сохранение гексагональной структуры ZnO без появления посторонних фаз, а также демонстрировали полное перекрытие наностержней плотным слоем BiVO_4 . Оптический анализ показал, что интеграция двух компонентов обеспечивает

комбинированное поглощение в ультрафиолетовом и видимом диапазонах, что подтверждает синергетический эффект гетероструктуры. Фотоэлектрохимические измерения, проведённые под естественным освещением, показали, что гетероструктура BiVO₄/ZnO превосходит по фототоку как индивидуальные ZnO, так и BiVO₄, достигая значения 0.101 мА/см² при 1.0 В, что указывает на перспективность предлагаемого метода синтеза и полученных материалов для использования в фотоэлектрохимическом расщеплении воды и солнечных энергетических приложениях.

Благодарность, конфликт интересов

Авторы заявляют, что получили финансовую поддержку для проведения исследования, написания и/или публикации данной статьи. Исследование было профинансировано Комитетом науки Министерства высшего образования и науки Республики Казахстан (Грант № AP23490626 «Исследование и разработка фотоэлектродов ZnO/BiVO₄ и Cu₂O/ZnO для создания высокоэффективных tandemных систем производства водорода под действием света»).

Вклад авторов

Кули Ж. – проведение экспериментов, сбор и первичная обработка экспериментальных данных, участие в подготовке иллюстративного материала, написание текста статьи.

Бакранов Н.Б. – разработка концепции исследования, постановка задачи, участие в интерпретации результатов, редактирование рукописи.

Сейтов Б.Ж. – синтез и структурная характеристика образцов, участие в интерпретации данных XRD и SEM, согласование окончательной версии статьи.

Капсаламова Ф.Р. – участие в анализе фотоэлектрохимических данных, участие в интерпретации результатов, редактирование рукописи.

Бакранова Д.И. – критический анализ и редактирование содержания, координация работы авторского коллектива, редактирование рукописи, подача статьи в журнал.

Пазылбек С.А. – участие в дизайне экспериментов, анализ данных, согласование окончательной версии статьи, проверка достоверности всех полученных результатов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательную версию статьи и несут ответственность за все её содержание.

Список литературы

1. Sharma, D. K., Shukla, S., Sharma, K. K., & Kumar, V. A review on ZnO: Fundamental properties and applications, Materials Today: Proceedings 49, с. 3028-3035, (2022). <http://dx.doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.238>
2. Raha, S., & Ahmaruzzaman, M.. ZnO nanostructured materials and their potential applications: progress, challenges and perspectives, Nanoscale Advances 4(8), с. 1868-1925, (2022). <https://doi.org/10.1039/D1NA00880C>
3. Noman, M. T., Amor, N., & Petru, M.. Synthesis and applications of ZnO nanostructures (ZONSS): A review, Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences 47(2), с. 99-141, (2022). <http://dx.doi.org/10.1080/10408436.2021.1886041>

4. Goktas, S., & Goktas, A. A comparative study on recent progress in efficient ZnO based nanocomposite and heterojunction photocatalysts: A review, *Journal of Alloys and Compounds* 863, 158734, (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.158734>
5. Ahmad, I., Bousbih, R., Mahal, A., Khan, W. Q., Aljohani, M., Amin, M. A., ... & Bayahia, H. Recent progress in ZnO-based heterostructured photocatalysts: A review, *Materials Science in Semiconductor Processing* 180(4), 108578, (2024). <http://dx.doi.org/10.1016/j.mssp.2024.108578>
6. Kim, J. H., & Lee, J. S. Elaborately modified BiVO₄ photoanodes for solar water splitting, *Advanced Materials* 31(20), 1806938, (2019). <https://doi.org/10.1002/adma.201806938>
7. Lopes, O. F., Carvalho, K. T., Nogueira, A. E., Avansi Jr, W., & Ribeiro, C. Controlled synthesis of BiVO₄ photocatalysts: evidence of the role of heterojunctions in their catalytic performance driven by visible-light, *Applied catalysis B: environmental* 188, 87-97, (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2016.01.065>
8. Feng, J., Cheng, L., Zhang, J., Okoth, O. K., & Chen, F. Preparation of BiVO₄/ZnO composite film with enhanced visible-light photoelectrocatalytic activity, *Ceramics International* 44(4), 3672-3677, (2018), <http://dx.doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.11.124>
9. Balachandran, S., Prakash, N., Thirumalai, K., Muruganandham, M., Sillanpää, M., & Swaminathan, M. Facile construction of heterostructured BiVO₄-ZnO and its dual application of greater solar photocatalytic activity and self-cleaning property, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 53(20), 8346-8356, (2014). <https://doi.org/10.1021/ie404287m>
10. Alhaddad, M., Amin, M. S., & Zaki, Z. I. Novel BiVO₄/ZnO heterojunction for amended photoreduction of mercury (II) ions, *Optical Materials* 127, 112251, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.112251>
11. Li, J., Yuan, H., Li, J., Zhang, W., Liu, Y., Liu, N., ... & Jiao, Z. The significant role of the chemically bonded interfaces in BiVO₄/ZnO heterostructures for photoelectrochemical water splitting, *Applied Catalysis B: Environmental* 285, 119833, (2021). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2020.119833>
12. Yang, J. S., & Wu, J. J. Low-potential driven fully-depleted BiVO₄/ZnO heterojunction nanodendrite array photoanodes for photoelectrochemical water splitting, *Nano Energy* 32, 232-240, (2017). <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.12.039>
13. Hou, H., Liu, H., Gao, F., Shang, M., Wang, L., Xu, L., ... & Yang, W. Packaging BiVO₄ nanoparticles in ZnO microbelts for efficient photoelectrochemical hydrogen production, *Electrochimica Acta* 283, 497-508, (2018). <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2018.06.148>
14. He, X., Tian, W., Bai, Z., Yang, L., & Li, L. Decoration of BiVO₄/ZnO Photoanodes with Fe-ZIF-8 to Simultaneously Enhance Charge Separation and Hole Transportation for Efficient Solar Water Splitting, *ChemPhotoChem* 6(12), e202200113, (2022). <https://doi.org/10.1002/cptc.202200113>
15. Yan, L., Zhao, W., & Liu, Z. 1D ZnO/BiVO₄ heterojunction photoanodes for efficient photoelectrochemical water splitting, *Dalton Transactions* 45(28), 11346-11352, (2016). <https://doi.org/10.1039/C6DT02027E>
16. Yin, H., Lee, E. S., Kim, D., Lee, K. H., Oh, K. T., & Bae, Y. H. Physicochemical characteristics of pH-sensitive poly (L-histidine)-b-poly (ethylene glycol)/poly (L-lactide)-b-poly (ethylene glycol) mixed micelles, *Journal of controlled release* 126(2), 130-138, (2008). <https://doi.org/10.1016/j.JCONREL.2007.11.014>
17. Reed, R. B., Ladner, D. A., Higgins, C. P., Westerhoff, P., & Ranville, J. F. Solubility of nano-zinc oxide in environmentally and biologically important matrices, *Environmental Toxicology and Chemistry* 31(1), 93-99, (2012). <https://doi.org/10.1002/etc.708>

18. Copur, M. Optimization of dissolution of Zn and Cd metals from Waelz sintering waste by in aqueous (NH₄)₂SO₄ solution, *Energy Educ. Sci. Technol. Part A Energy Sci. Res* 25, 17-19, (2010).
19. Wesolowski, D. J., Bénézeth, P., & Palmer, D. A. ZnO solubility and Zn₂ complexation by chloride and sulfate in acidic solutions to 290 C with in-situ pH measurement, *Geochimica et Cosmochimica Acta* 62(6), 971-984, (1998).
20. Han, J., Gao, W. Surface Wettability of Nanostructured Zinc Oxide Films, *J. Electron. Mater.* 38, 601-608 (2009). <https://doi.org/10.1007/s11664-008-0615-0>
21. Hu, H., Ji, H. F., & Sun, Y. The effect of oxygen vacancies on water wettability of a ZnO surface, *Physical Chemistry Chemical Physics* 15(39), 16557-16565, (2013). <https://doi.org/10.1039/C3CP51848E>
22. Lee, M., Kwak, G., & Yong, K. Wettability control of ZnO nanoparticles for universal applications, *ACS Applied materials & interfaces* 3(9), 3350-3356, (2011). <https://doi.org/10.1021/am2004762>
23. Zhang, L., Herrmann, L. & Baumberg, J. Size Dependent Plasmonic Effect on BiVO₄ Photoanodes for Solar Water Splitting, *Sci Rep* 5, 16660, (2015). <https://doi.org/10.1038/srep16660>
24. Kong, H., Gupta, S., Pérez-Torres, A. F., Höhn, C., Bogdanoff, P., Mayer, M. T., & Abdi, F. F. Electrolyte selection toward efficient photoelectrochemical glycerol oxidation on BiVO₄, *Chemical Science* 15(27), 10425-10435, (2024). <https://doi.org/10.1039/D4SC01651C>
25. Mohamed, N. A., Arzaee, N. A., Noh, M. F. M., Ismail, A. F., Safaei, J., Sagu, J. S., ... & Teridi, M. A. M. Electrodeposition of BiVO₄ with needle-like flower architecture for high performance photoelectrochemical splitting of water, *Ceramics International* 47(17), 24227-24239, (2021). <http://dx.doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.05.134>
26. Li, C., Chen, M., Xie, Y., Jian, J., Wang, H., & Jia, L. Boosting the solar water oxidation performance of BiVO₄ photoanode via non-stoichiometric ratio driven surface reconstruction, *Journal of Power Sources* 528, 231242, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2022.231242>

Ж. Кули^{1,2}, Н.Б. Бакранов¹, Б.Ж. Сейтов³, Ф.Р.Капсаламова⁴, Д.И. Бакранова^{5*} С.А. Пазылбек⁶

¹*«Research Group altAir nanolab», Алматы, Қазақстан*

²*Satbayev University, Алматы, Қазақстан*

³*Қожа Ахмет Ясауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті, Түркістан, Қазақстан*

⁴*Қазақстан-Британ техникалық университеті, Алматы, Қазақстан*

⁵*SDU University, Қаскелең, Қазақстан*

⁶*Ж.А. Тәшенев атындағы Университет, Шымкент, Қазақстан*

(E-mail: dinabakranova@gmail.com)

Жұмсақ тұндыру әдісі арқылы BiVO₄/ZnO гетероқұрылымын орнықты қалыптастыру

Аңдатпа. Бұл жұмыста гидротермиялық әдіспен синтезделген мырыш оксидінің (ZnO) наноөзектерінің бетіне spin coating әдісі арқылы (BiVO₄) висмут ванадатын жұмсақ екі сатылы қабаттап (layer-by layer) тұндыру нәтижелері келтірілген. Тұтқырлықты, прекурсорлардың концентрациясын бақылау ZnO-да қалыптасқан BV пленкаларының қалыңдығын, біркелкілігін және орнықтылығын реттеуде шешуші рөл атқарады. Алынған үлгілерді сипаттау әдістер кешенінің көмегімен жүргізілді. Алдымен UV-Vis спектроскопиясы қолданылды, бұл BiVO₄

тұндырғаннан кейін көрінетін аймақтағы жұту спектрін анықтауға мүмкіндік берді. Әрі қарай, рентгендік құрылымдық талдау (XRD) әдісімен BiVO_4 моноклиндік фазасының және ZnO вюрциттік фазасының бар екендігі расталды, сонымен қатар үлгілердің кристалдық деңгейі бағаланды. Ақырында, сканерлеуші электронды микроскопия (SEM) ZnO морфологиясын және олардың BiVO_4 қабатымен орнықты қапталғанын көрсетті. BiVO_4/ZnO гетероқұрылымдарының практикалық қасиеттерін бағалау үшін далалық табиғи жағдайларда сызықтық вольтамперлік сканерлеуге ие фотоэлектрхимиялық өлшеу жүргізілді, бұл нақты жағдайларда пленкалардың өнімділігін көрсетеді. Жүргізілген эксперименттер барысында алынған нәтижелер, ерітінділердің тұтқырлығы оңтайландырылған екі сатылы spin coating әдісі фотоэлектрхимиялық құрылымдарда қолдануға жарамды тұрақты гетероқұрылымдарды құруға мүмкіндік беретінін растады.

Түйін сөздер: мырыш тотығы, висмут ванадаты, гидротермалды синтез, фотоэлектрхимия, этиленгликоль, жұмсақ тұндыру.

Zh. Kuli^{1,2}, N.B.Bakranov¹, B.Zh. Seitov³, F.R. Kapsalamova⁴, D.I. Bakranova^{5*}, S.A. Pazylbek⁶

¹*«Research Group altAir nanolab», Almaty, Kazakhstan*

²*Satbayev University, Almaty, Kazakhstan*

³*Ahmet Yassawi University, Turkestan, Kazakhstan*

⁴*Kazakh-British Technical University, Almaty, Kazakhstan*

⁵*SDU University, Kaskelen, Kazakhstan*

⁶*Tashenev University, Shymkent, Kazakhstan*

(E-mail: dinabakranova@gmail.com)

Stable Formation of BiVO_4/ZnO Heterostructure via a Soft Deposition Method

Abstract. This work presents the results of a mild two-step layer-by-layer deposition of bismuth vanadate (BiVO_4) onto hydrothermally synthesized zinc oxide (ZnO) nanorods using the spin-coating method. Controlling the viscosity and precursor concentration plays a key role in tuning the thickness, uniformity, and stability of the BiVO_4 films formed on ZnO . The synthesized samples were characterized using a range of analytical techniques. First, UV-Vis spectroscopy was used to determine the absorption spectrum in the visible range after BiVO_4 deposition. Next, X-ray diffraction (XRD) confirmed the presence of the monoclinic phase of BiVO_4 and the wurtzite phase of ZnO , as well as the degree of crystallinity of the samples. Finally, scanning electron microscopy (SEM) revealed the morphology of ZnO nanorods and the stable coating of their surface with a BiVO_4 layer. To evaluate the practical performance of the BiVO_4/ZnO heterostructures, photoelectrochemical (PEC) measurements were conducted under natural outdoor conditions using linear sweep voltammetry, demonstrating the operability of the films in real environments. The results obtained during the experiments clearly confirmed that our proposed two-stage spin-coating method with optimized viscosity of solutions makes it possible to create stable heterostructures suitable for use in photoelectrochemical devices.

Keywords: zinc oxide, bismuth vanadate, hydrothermal synthesis, photoelectrochemistry, ethylene glycol, soft deposition.

References

1. Sharma, D.K., Shukla, S., Sharma, K.K., & Kumar, V. A review on ZnO: Fundamental properties and applications, *Materials Today: Proceedings* 49, c. 3028-3035, (2022). <http://dx.doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.238>
2. Raha, S., & Ahmaruzzaman, M.. ZnO nanostructured materials and their potential applications: progress, challenges and perspectives, *Nanoscale Advances* 4(8), c. 1868-1925, (2022). <https://doi.org/10.1039/D1NA00880C>
3. Noman, M. T., Amor, N., & Petru, M.. Synthesis and applications of ZnO nanostructures (ZONSS): A review, *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences* 47(2), c. 99-141, (2022). <http://dx.doi.org/10.1080/10408436.2021.1886041>
4. Goktas, S., & Goktas, A. A comparative study on recent progress in efficient ZnO based nanocomposite and heterojunction photocatalysts: A review, *Journal of Alloys and Compounds* 863, 158734, (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.158734>
5. Ahmad, I., Bousbih, R., Mahal, A., Khan, W. Q., Aljohani, M., Amin, M. A., ... & Bayahia, H. Recent progress in ZnO-based heterostructured photocatalysts: A review, *Materials Science in Semiconductor Processing* 180(4), 108578, (2024). <http://dx.doi.org/10.1016/j.mssp.2024.108578>
6. Kim, J. H., & Lee, J. S. Elaborately modified BiVO₄ photoanodes for solar water splitting, *Advanced Materials* 31(20), 1806938, (2019). <https://doi.org/10.1002/adma.201806938>
7. Lopes, O. F., Carvalho, K. T., Nogueira, A. E., Avansi Jr, W., & Ribeiro, C. Controlled synthesis of BiVO₄ photocatalysts: evidence of the role of heterojunctions in their catalytic performance driven by visible-light, *Applied catalysis B: environmental* 188, 87-97, (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2016.01.065>
8. Feng, J., Cheng, L., Zhang, J., Okoth, O. K., & Chen, F. Preparation of BiVO₄/ZnO composite film with enhanced visible-light photoelectrocatalytic activity, *Ceramics International* 44(4), 3672-3677, (2018), <http://dx.doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.11.124>
9. Balachandran, S., Prakash, N., Thirumalai, K., Muruganandham, M., Sillanpää, M., & Swaminathan, M. Facile construction of heterostructured BiVO₄-ZnO and its dual application of greater solar photocatalytic activity and self-cleaning property, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 53(20), 8346-8356, (2014). <https://doi.org/10.1021/ie404287m>
10. Alhaddad, M., Amin, M. S., & Zaki, Z. I. Novel BiVO₄/ZnO heterojunction for amended photoreduction of mercury (II) ions, *Optical Materials* 127, 112251, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.112251>
11. Li, J., Yuan, H., Li, J., Zhang, W., Liu, Y., Liu, N., ... & Jiao, Z. The significant role of the chemically bonded interfaces in BiVO₄/ZnO heterostructures for photoelectrochemical water splitting, *Applied Catalysis B: Environmental* 285, 119833, (2021). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2020.119833>
12. Yang, J.S., & Wu, J.J. Low-potential driven fully-depleted BiVO₄/ZnO heterojunction nanodendrite array photoanodes for photoelectrochemical water splitting, *Nano Energy* 32, 232-240, (2017). <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.12.039>
13. Hou, H., Liu, H., Gao, F., Shang, M., Wang, L., Xu, L., ... & Yang, W. Packaging BiVO₄ nanoparticles in ZnO microbelts for efficient photoelectrochemical hydrogen production, *Electrochimica Acta* 283, 497-508, (2018). <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2018.06.148>
14. He, X., Tian, W., Bai, Z., Yang, L., & Li, L. Decoration of BiVO₄/ZnO Photoanodes with Fe-ZIF-8 to Simultaneously Enhance Charge Separation and Hole Transportation for Efficient Solar Water Splitting, *ChemPhotoChem* 6(12), e202200113, (2022). <https://doi.org/10.1002/cptc.202200113>

15. Yan, L., Zhao, W., & Liu, Z. 1D ZnO/BiVO_4 heterojunction photoanodes for efficient photoelectrochemical water splitting, *Dalton Transactions* 45(28), 11346-11352, (2016). <https://doi.org/10.1039/C6DT02027E>
16. Yin, H., Lee, E.S., Kim, D., Lee, K. H., Oh, K. T., & Bae, Y.H. Physicochemical characteristics of pH-sensitive poly (L-histidine)-b-poly (ethylene glycol)/poly (L-lactide)-b-poly (ethylene glycol) mixed micelles, *Journal of controlled release* 126(2), 130-138, (2008). <https://doi.org/10.1016/J.JCONREL.2007.11.014>
17. Reed, R. B., Ladner, D. A., Higgins, C. P., Westerhoff, P., & Ranville, J. F. Solubility of nano-zinc oxide in environmentally and biologically important matrices, *Environmental Toxicology and Chemistry* 31(1), 93-99, (2012). <https://doi.org/10.1002/etc.708>
18. Copur, M. Optimization of dissolution of Zn and Cd metals from Waelz sintering waste by in aqueous $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ solution, *Energy Educ. Sci. Technol. Part A Energy Sci. Res* 25, 17-19, (2010).
19. Wesolowski, D.J., Bénézech, P., & Palmer, D.A. ZnO solubility and Zn^{2+} complexation by chloride and sulfate in acidic solutions to 290 C with in-situ pH measurement, *Geochimica et Cosmochimica Acta* 62(6), 971-984, (1998).
20. Han, J., Gao, W. Surface Wettability of Nanostructured Zinc Oxide Films, *J. Electron. Mater.* 38, 601-608 (2009). <https://doi.org/10.1007/s11664-008-0615-0>
21. Hu, H., Ji, H. F., & Sun, Y. The effect of oxygen vacancies on water wettability of a ZnO surface, *Physical Chemistry Chemical Physics* 15(39), 16557-16565, (2013). <https://doi.org/10.1039/C3CP51848E>
22. Lee, M., Kwak, G., & Yong, K. Wettability control of ZnO nanoparticles for universal applications, *ACS Applied Materials & Interfaces* 3(9), 3350-3356, (2011). <https://doi.org/10.1021/am2004762>
23. Zhang, L., Herrmann, L. & Baumberg, J. Size Dependent Plasmonic Effect on BiVO_4 Photoanodes for Solar Water Splitting, *Sci Rep* 5, 16660, (2015). <https://doi.org/10.1038/srep16660>
24. Kong, H., Gupta, S., Pérez-Torres, A. F., Höhn, C., Bogdanoff, P., Mayer, M. T., & Abdi, F. F. Electrolyte selection toward efficient photoelectrochemical glycerol oxidation on BiVO_4 , *Chemical Science* 15(27), 10425-10435, (2024). <https://doi.org/10.1039/D4SC01651C>
25. Mohamed, N.A., Arzaee, N.A., Noh, M.F. M., Ismail, A. F., Safaei, J., Sagu, J. S., ... & Teridi, M.A. M. Electrodeposition of BiVO_4 with needle-like flower architecture for high performance photoelectrochemical splitting of water, *Ceramics International* 47(17), 24227-24239, (2021). <http://dx.doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.05.134>
26. Li, C., Chen, M., Xie, Y., Jian, J., Wang, H., & Jia, L. Boosting the solar water oxidation performance of BiVO_4 photoanode via non-stoichiometric ratio driven surface reconstruction, *Journal of Power Sources* 528, 231242, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2022.231242>

Сведения об авторах:

Кули Ж.Т. – PhD докторант по специальности «Нanomатериалы и нанотехнологии, Сатпаев университет, главный специалист Лаборатории инженерного профиля, 050013, Алматы, Казахстан

Бакранов Н.Б. – PhD, главный научный сотрудник «Research Group altAir nanolab», ул.Навои, 208, 050043, Алматы, Казахстан

Сейтов Б.Ж. – PhD, заведующий кафедрой физики, Международный казахско-турецкий университет имени Ходжи Ахмета Яссави, 161200, Туркестан, Казахстан

Капсаламова Ф.Р. – PhD, ассистент-профессор, Казахстанско-Британский технический университет, Школа материаловедения и зеленых технологий, ул. Төле би, 59, 050000, Алматы, Казахстан

Бакранова Д.И. – PhD, ассоциированный профессор SDU University, факультет инженерии и естественных наук, ул. Абылай хана, 1/1, 040900, Каскелен, Казахстан

Пазылбек С.А. – доктор философии (PhD), ассоциированный профессор кафедры «Математика и информатика», Университет имени Ж.А. Ташенева, проспект Кунаева, 21, 160012, Шымкент, Казахстан

Құли Ж.Т. – PhD докторанты, Сәтбаев университеті, инженерлік бейіндегі зертхананың бас маманы, "Наноматериалдар және нанотехнологиялар" мамандығы бойынша PhD докторант, 050013, Алматы, Қазақстан

Бакранов Н.Б. – PhD, "research Group altAir nanolab" бас ғылыми қызметкері, Навои к-сі, 208, 050043, Алматы, Қазақстан

Сейтов Б.Ж. – PhD, физика кафедрасының меңгерушісі, Қожа Ахмет Яссауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті, 161200, Түркістан, Қазақстан

Капсаламова Ф.Р. – PhD, ассистент-профессор, Қазақстан-Британ техникалық университеті, материалтану және жасыл технологиялар мектебі, Төле би көшесі, 59, 050000, Алматы, Қазақстан

Бакранова Д.И. – PhD, SDU University қауымдастырылған профессоры, инженерия және жаратылыстану ғылымдары факультеті, Абылай хан көшесі 1/1, 040900, Каскелең, Қазақстан

Пазылбек С.А. – PhD докторы, "математика және информатика" кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Ж. А. Тәшенев атындағы Университет, Қонаев даңғылы 21, 160012, Шымкент, Қазақстан

Kuli Zh. T. – doctoral student in the specialty "Nanomaterials and Nanotechnology, Satpayev University, Chief Specialist of the Laboratory of Engineering, 050013, Almaty, Kazakhstan

Bakranov N.B. – PhD, Chief Researcher, Research Group altAir nanolab, Navoi St. 208, 050043, Almaty, Kazakhstan

Seitov B.Zh. – PhD, Head of the Department of Physics, Khoja Akhmet Yassawi International Kazakh-Turkish University, 161200 Turkestan, Kazakhstan

Kapsalamova F.R. – PhD, Assistant Professor, Kazakh-British Technical University, School of Materials Science and Green Technologies, 59 Tole bi str, 050000, Almaty, Kazakhstan

Bakranova D.I. – PhD, Associate Professor, SDU University, Faculty of Engineering and Natural Sciences, 1/1 Abylai Khan str, 040900, Kaskelen, Kazakhstan

Pazylbek S.A. – PhD, Associate Professor, Department of Mathematics and Computer Science, Zh.A. Tashenev University, 21 Kunaev Avenue, 160012, Shymkent, 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/>).



IRSTI 29.19.03
Scientific article

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-85-99>

New manganese hexaboride: stability and mechanical properties

N. Sagatov^{*1,2} , D. Sagatova^{1,3} 

¹Sobolev Institute of Geology and Mineralogy SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

²Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation

³Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

(E-mail: n.e.sagatov@gmail.com)

Abstract. Through *ab initio* evolutionary crystal structure prediction, we have discovered a novel monoclinic phase of manganese hexaboride (MnB_6) with the space group $P2_1/m$. This new polymorph is energetically favorable over the previously known hexagonal $P6_3/m2$ structure at pressures below 58 GPa. Although metastable with respect to decomposition into MnB_4 and B, the $P2_1/m$ phase is demonstrated to be dynamically and mechanically stable at ambient pressure, as confirmed by the absence of imaginary phonon modes and the satisfaction of the Born stability criteria. Calculations of the elastic properties reveal that MnB_6 - $P2_1/m$ is a hard, brittle material with a high Vickers hardness of 33 GPa, which surpasses that of common industrial ceramics like tungsten carbide and silicon carbide. Its bulk modulus (273 GPa), shear modulus (220 GPa), and Young modulus (519 GPa) indicate superior resistance to elastic deformation. The compound exhibits significant elastic anisotropy, as visualized by the directional dependence of its moduli and hardness. These properties establish the new MnB_6 - $P2_1/m$ polymorph as a promising candidate for experimental synthesis and potential application as a hard material.

Keywords: borides, hardness, high pressure, elastic moduli, density functional theory

Introduction

Transition-metal borides have garnered substantial scientific attention due to their remarkable combination of properties, such as superconductivity, magnetism, exceptional hardness, and thermal stability at extreme temperatures [1–6]. The light atomic mass and high bond strength of boron enable the development of extensive covalent networks within transition-metal boride crystals [7]. Progress in computational and synthetic methods has recently enabled the identification and production of numerous borides proposed as superhard candidates, a characteristic attributed to their high valence electron density and strong covalent bonding [8,9]. Notable examples include OsB_2 [10], ReB_2 [2], CrB_2 [11], WB_4 [12], WB_5 [5,13],

Received 31.08.2025. Revised 02.09.2025. Accepted 02.09.2025. Available online 30.09.2025.

^{1*}the corresponding author

ZrB₁₂ [14], YB₆ [15], ScB₃ [16], ScB₆ [16], and FeB₄ [17]. The measured or predicted hardness of many of these borides exceeds 40 GPa, surpassing that of widely used industrial abrasives and cutting materials such as cemented tungsten carbide (WC, ~20 GPa) [18] and silicon carbide (moissanite, ~22 GPa) [19]. These promising characteristics continue to drive extensive research on transition-metal borides.

Manganese, a magnetic 3d transition metal possessing multiple valence electrons, reacts with boron, an element characterized by its electron deficiency, to produce stable boride compounds. These phases demonstrate a suite of characteristics typical of high-performance multifunctional materials, including exceptional thermal stability (high melting point), superior mechanical strength, and significant resistance to wear. To date, eight manganese–boron compounds are known: Mn₂B, MnB, Mn₃B₄, Mn₂B₃, MnB₂, MnB₃, MnB₄, and MnB₆. Among these manganese borides, MnB₆ is the most B-rich compound. According to the findings of Yuan et al. [20], the MnB₆ phase becomes thermodynamically stable at pressures exceeding 127 GPa. This phase, which adopts a *P6̄2m* crystal structure, remains stable up to at least 200 GPa. The crystal structure of MnB₆-*P6̄2m* is characterized by distinctive boron-nitride (BN)-like ribbons that extend along the c-axis. These ribbons are interconnected within the ab-plane via B–B bonds, creating a framework with open channels that house manganese atoms. This phase exhibits favorable mechanical characteristics, including a predicted Vickers hardness of 25 GPa and notable ductility. These properties are a direct consequence of its unique structural arrangement, which is enabled by boron's capacity for diverse and adaptable chemical bonding.

To discover new polymorphs of MnB₆ exhibiting promising mechanical properties, we conducted a systematic search for stable crystal structures using density functional theory calculations.

Methodology

All calculations were conducted using density functional theory as implemented in the VASP 5.4.4 software [21, 22]. The exchange–correlation interactions were incorporated through the generalized gradient approximation using the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) functional. The low-enthalpy structures of MnB₆ were identified through an evolutionary structure search utilizing the USPEX code [23–25]. These variable-composition predictions were conducted for systems containing up to 4 formula units per cell at pressures of 0, 50, 100, 150, and 200 GPa. An initial population of 100 structures was generated, from which the lowest-enthalpy 50% were selected to produce subsequent generations. The evolutionary operations were distributed as follows: 40% heredity, 20% atomic mutation, 10% lattice permutation, and 30% random generation. All structure predictions employed medium-accuracy parameters, including a 450 eV plane-wave energy cutoff, a Monkhorst–Pack k-mesh [26] with a spacing of $2\pi \times 0.07 \text{ \AA}^{-1}$, and Methfessel–Paxton electronic smearing [27] ($\sigma = 0.2 \text{ eV}$). Following the evolutionary search, the most favorable structures were refined using high-accuracy settings: a 700 eV energy cutoff, a denser k-mesh of $2\pi \times 0.03 \text{ \AA}^{-1}$, and reduced smearing ($\sigma = 0.1 \text{ eV}$). These selected phases were subjected to full geometry optimization via a conjugate gradient algorithm, with convergence thresholds set to $1.0 \times 10^{-7} \text{ eV}$ in energy, 0.01 GPa in stress, and 0.005 eV/Å in atomic forces at

several pressures. The phonon spectra were calculated using the Phonopy program [28] with $2 \times 2 \times 2$ supercell.

To evaluate key mechanical properties such as hardness and fracture toughness, the components of the static elastic stiffness tensor (C_{ij}) were determined from the linear stress-strain relationship $\sigma_i = C_{ij} \epsilon_j$. These C_{ij} values were subsequently used to calculate the bulk (B) and shear (G) moduli via the Voigt-Reuss-Hill averaging scheme [29, 30]. For crystalline systems with monoclinic symmetry, the bulk and shear moduli were computed using the following expressions:

$$\left\{ \begin{array}{l} B_V = \frac{1}{9} [C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23})] \\ B_R = \Omega \left[\frac{a(C_{11} + C_{22} - 2C_{12}) + b(2C_{12} - 2C_{11} - 2C_{23}) + c(C_{15} - 2C_{25}) + d(2C_{12} + 2C_{23} - C_{13} - 2C_{22}) + 2e(C_{25} - C_{15}) + f}{\Delta} \right]^{-1} \\ G_V = \frac{1}{15} [C_{11} + C_{22} + C_{33} + 3(C_{44} + C_{55} + C_{66}) - (C_{12} + C_{13} + C_{23})] \\ G_R = 15 \left\{ \frac{4 \left[\frac{a(C_{11} + C_{22} + C_{12}) + b(C_{11} - C_{12} - C_{23}) + c(C_{15} + C_{25}) + d(C_{22} - C_{12} - C_{23} - C_{13}) + e(C_{15} - C_{25}) + f}{\Delta} \right]}{3 \left(\frac{g}{\Omega} + \frac{C_{44} + C_{66}}{C_{44}C_{66} - C_{46}^2} \right)} \right\}^{-1} \\ \Delta = C_{13}(C_{12}C_{23} - C_{22}C_{13}) + C_{23}(C_{12}C_{13} - C_{23}C_{11}) + C_{33}(C_{11}C_{22} - C_{12}^2) \\ a = C_{33}C_{55} - C_{35}^2 \\ b = C_{23}C_{55} - C_{25}C_{35} \\ c = C_{13}C_{35} - C_{15}C_{33} \\ d = C_{13}C_{55} - C_{15}C_{35} \\ e = C_{13}C_{25} - C_{15}C_{23} \\ f = C_{11}(C_{22}C_{55} - C_{25}^2) - C_{12}(C_{12}C_{55} - C_{15}C_{25}) + C_{15}(C_{12}C_{25} - C_{15}C_{22}) + C_{25}(C_{23}C_{35} - C_{25}C_{33}) \\ g = C_{11}C_{22}C_{33} - C_{11}C_{23}^2 - C_{22}C_{13}^2 - C_{33}C_{12}^2 + 2C_{12}C_{13}C_{23} \\ \Omega = gC_{55} + 2[C_{15}C_{25}(C_{33}C_{12} - C_{13}C_{23}) + C_{15}C_{35}(C_{22}C_{13} - C_{12}C_{23}) + C_{25}C_{35}(C_{11}C_{23} - C_{12}C_{13})] - \\ - [C_{15}^2(C_{22}C_{33} - C_{23}^2) + C_{25}^2(C_{11}C_{33} - C_{13}^2) + C_{35}^2(C_{11}C_{22} - C_{12}^2)] \\ B = \frac{B_V + B_R}{2} \\ G = \frac{G_V + G_R}{2} \end{array} \right. \quad (2)$$

Using the obtained bulk and shear moduli, Young's modulus (E) and Poisson's ratio (ν) could be calculated as follows:

$$\begin{aligned} E &= \frac{9BG}{3B + G} \\ \nu &= \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \end{aligned} \quad (3)$$

To evaluate the Vickers hardness of the predicted MnB_6 , the empirical models developed by Chen [31] and Tian [32] were employed:

$$\begin{aligned} H_V^{\text{Chen}} &= 2 \cdot (k^2 \cdot G)^{0.585} - 3 \\ H_V^{\text{Tian}} &= 0.92 \cdot k^{1.137} \cdot G^{0.708} \end{aligned} \quad (4)$$

where $k = G/B$. In this study, the Vickers hardness (H_V) was determined by calculating the mean value derived from Equations (4):

$$H_V = \frac{H_V^{Chen} + H_V^{Tian}}{2} \quad (5)$$

Results and discussion

Based on our structure predictions, we identified two low-enthalpy phases of MnB_6 . At 100, 150, and 200 GPa, the most stable structure is the $P6m2$ phase previously predicted by Yuan et al. [20]. In contrast, at 0 and 50 GPa, we discovered a new, previously unreported phase. This new polymorph of MnB_6 crystallizes in the monoclinic $P2/m$ space group. There is one inequivalent Mn site. Mn(1) is bonded to four equivalent B(1), four equivalent B(2), and four equivalent B(3) atoms to form a mixture of distorted edge and face-sharing MnB_{12} cuboctahedra. All Mn(1)–B(1) bond lengths are 2.02 Å. All Mn(1)–B(2) bond lengths are 2.23 Å. All Mn(1)–B(3) bond lengths are 2.32 Å. There are three inequivalent B sites. In the first B site, B(1) is bonded in a 7-coordinate geometry to two equivalent Mn(1), one B(1), two equivalent B(2), and two equivalent B(3) atoms. The B(1)–B(1) bond length is 1.81 Å. Both B(1)–B(2) bond lengths are 1.78 Å. Both B(1)–B(3) bond lengths are 1.79 Å. In the second B site, B(2) is bonded in an 8-coordinate geometry to two equivalent Mn(1), one B(2), two equivalent B(1), and three equivalent B(3) atoms. The B(2)–B(2) bond length is 2.00 Å. There is a spread of B(2)–B(3) bond distances ranging from 1.77–1.92 Å. In the third B site, B(3) is bonded in an 8-coordinate geometry to two equivalent Mn(1), one B(3), two equivalent B(1), and three equivalent B(2) atoms. The B(3)–B(3) bond length is 1.85 Å. The structure can also be characterized as a channel-like open framework of B atoms in which Mn atoms are located. Visualization of the structures and their structural data are presented in Figure 1 and Table 1.

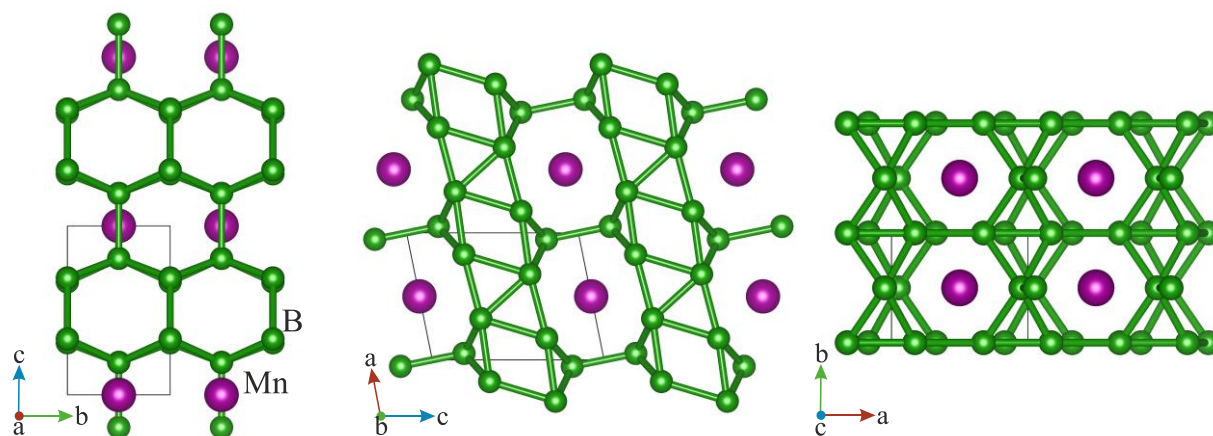


Figure 1. Crystal structure of the predicted MnB_6 - $P2/m$

Table 1. Structural data of predicted MnB_6 - $P2_1/m$ at 0 GPa

Space group	Lattice parameters (Å, degree)			Atom	Atomic coordinates		
					<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
$P2_1/m$ (#10)	$a = 3.618$	$b = 2.858$	$c = 4.802$	Mn(1)	0.5	0.5	0
	$\alpha = 90.00$	$\beta = 101.5$	$\gamma = 90.00$	B(1)	-0.0507	0.5	0.8076
				B(2)	0.1703	0	0.6916
				B(3)	0.6750	0	0.6686

Our enthalpy calculations demonstrate that the newly predicted MnB_6 - $P2_1/m$ phase is energetically favorable over the known $P\bar{6}m2$ structure below 58 GPa (Figure 2). Furthermore, spin-polarized calculations indicate that the ground state of this $P2_1/m$ phase is ferromagnetic. Considering the thermodynamic stability against decomposition ($\text{MnB}_6 \rightarrow \text{MnB}_4 + 2\text{B}$), we can see that the MnB_6 compound stabilizes above 128 GPa in the form of $P\bar{6}m2$ structure (Figure 2), which is in excellent agreement with work of Yuan et al. [20]. Although MnB_6 - $P2_1/m$ is inferior in energy to mixture $\text{MnB}_4 + 2\text{B}$, it can still be obtained metastably in an experiment if it is dynamically and mechanically stable in calculations.

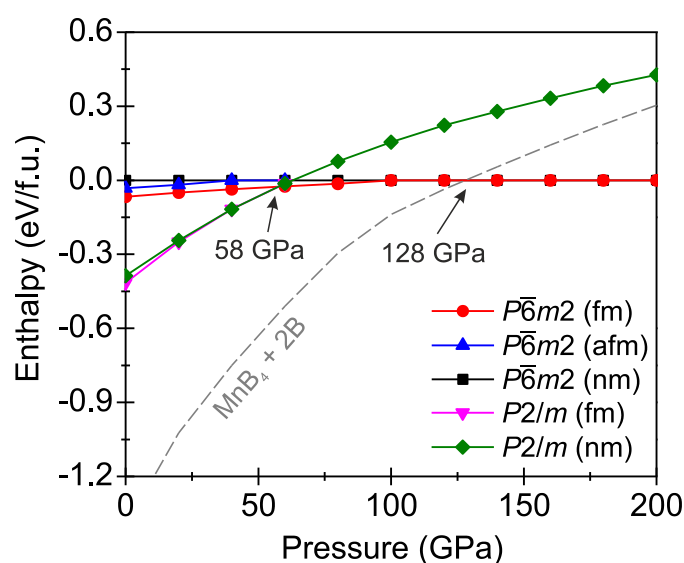


Figure 2. Relative enthalpies of MnB_6 polymorphs as a function of pressure.
The gray dashed line indicates the relative enthalpy of $\text{MnB}_4 + 2\text{B}$ mechanical mixture

To estimate the dynamic stability of MnB_6 - $P2_1/m$, its phonon spectrum at ambient pressure was calculated. The calculated phonon dispersion curves are presented in Figure 3. The absence of imaginary modes in the phonon spectrum is obvious that indicates the dynamic stability of this structure.

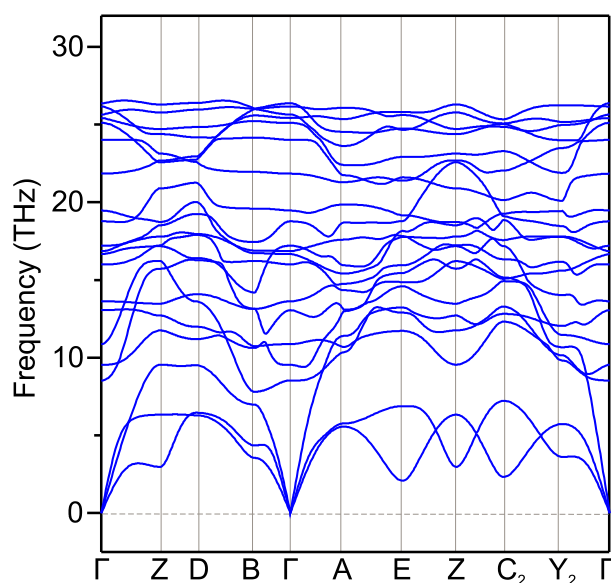


Figure 3. Calculated phonon dispersion curves of MnB₆-P2/m

To estimate a mechanical stability of MnB₆-P2/m, its second-order elastic stiffness tensor C was calculated using the strain-stress method. The calculated stiffness tensor C (in GPa) is given below:

$$C = \begin{bmatrix} 841 & 99 & 129 & 0 & 13 & 0 \\ 99 & 549 & 102 & 0 & -4 & 0 \\ 129 & 102 & 117.3 & 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 138 & 0 & 25 \\ 13 & -4 & 16 & 0 & 275 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 25 & 0 & 228 \end{bmatrix}$$

The elastic stiffness coefficients (C_{ij}) serve as critical indicators for evaluating the mechanical stability of crystalline phases. For monoclinic systems, the necessary and sufficient conditions for mechanical stability are expressed by the following constraints:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{ii} > 0 \quad (i = 1 - 6) \\ [C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23})] > 0 \\ (C_{44}C_{66} - C_{46}^2) > 0 \\ (C_{33}C_{55} - C_{35}^2) > 0 \\ (C_{22} + C_{33} - 2C_{23}) > 0 \\ [C_{22}(C_{33}C_{55} - C_{35}^2) + 2C_{23}C_{25}C_{35} - C_{23}^2C_{55} - C_{25}^2C_{33}] > 0 \\ \left[2[C_{15}C_{25}(C_{33}C_{12} - C_{13}C_{23}) + C_{15}C_{35}(C_{22}C_{13} - C_{12}C_{23}) + C_{25}C_{35}(C_{11}C_{23} - C_{12}C_{13}) -] \right. \\ \quad \left. - [C_{15}^2(C_{22}C_{33} - C_{23}^2) + C_{25}^2(C_{11}C_{33} - C_{13}^2) + C_{35}^2(C_{11}C_{22} - C_{12}^2)] \right. \\ \quad \left. + (C_{11}C_{22}C_{33} - C_{11}C_{23}^2 - C_{22}C_{13}^2 - C_{33}C_{12}^2 + 2C_{12}C_{13}C_{23})C_{55} \right] > 0 \end{array} \right.$$

The calculated C_{ij} values for $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ satisfy the Born criteria, confirming its mechanical stability.

Using the derived C_{ij} , key elastic parameters such as polycrystalline bulk modulus (B), shear modulus (G), Young modulus (E), and Poisson ratio (ν) were determined (Table 2). The calculated polycrystalline bulk modulus of $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ is $B = 273$ GPa, indicating its resistance to uniform compression is approximately 20% higher than that of silicon carbide ($\beta\text{-SiC}$, $B = 225$ GPa [33]) and slightly lower than that of $\text{MnB}_6\text{-}P6/m2$ ($B = 289$ GPa [20]). Furthermore, $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ exhibits superior resistance to non-hydrostatic deformation. Its shear modulus ($G = 220$ GPa) and Young modulus ($E = 519$ GPa) both exceed those of $\beta\text{-SiC}$ ($G = 192$ GPa, $E = 448$ GPa [33]) and almost equal to those of $\text{MnB}_6\text{-}P6/m2$ ($G = 213$ GPa, $E = 513$ GPa [20]). These results suggest the mechanical properties of $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ are superior to those of the widely used SiC, with significantly higher resistance to both shear and axial stresses. Furthermore, its rigidity is comparable to that of the $\text{MnB}_6\text{-}P6/m2$ polymorph.

Table 2. Calculated polycrystalline elastic moduli, Poisson and B/G ratio of predicted MnB_6 at ambient pressure

Bulk modulus (GPa)	273 GPa
Shear modulus (GPa)	220 GPa
Young modulus (GPa)	519 GPa
Poisson ratio	0.18
B/G	1.24
Vickers hardness (GPa)	33 GPa

The nature of a material, whether it is ductile or brittle, can be determined by its Poisson ratio (ν) and B/G ratio, with established critical values of 0.26 and 1.75, respectively. Values above these thresholds indicate ductility, while those below suggest brittleness. Our calculations for $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ (Table 2) yield values below these critical limits, unequivocally indicating that it exhibits brittle behavior.

While the polycrystalline elastic moduli describe the average elastic response of $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$, a complete mechanical characterization requires an analysis of its directional dependence, or elastic anisotropy. Although dimensionless anisotropy indices offer a preliminary assessment, a comprehensive understanding is best achieved through the three-dimensional visualization of direction-dependent properties. These surfaces quantitatively represent anisotropy by their deviation from spherical symmetry. Figure 4 presents 3D directional plots of the single-crystal elastic moduli and hardness for $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$. Pronounced deviations from spherical symmetry across all surfaces confirm significant elastic anisotropy. The degree of anisotropy varies considerably among the moduli. The bulk modulus exhibits strong directional dependence, varying from 206 GPa along [001] to 429 GPa along [100]. This substantial anisotropy ratio ($B[100]/B[001] \approx 2.1$) indicates exceptional orientation-dependent compressibility. In contrast, the shear modulus shows more moderate anisotropy, ranging from 175 GPa along [010] to 253 GPa along [100]. The Young modulus displays the highest degree of elastic anisotropy, with its

magnitude varying dramatically from 360 GPa to 798 GPa depending on the crystallographic direction. Poisson ratio varies from 0.233 to 0.131, demonstrating anisotropy slightly stronger than that of shear modulus.

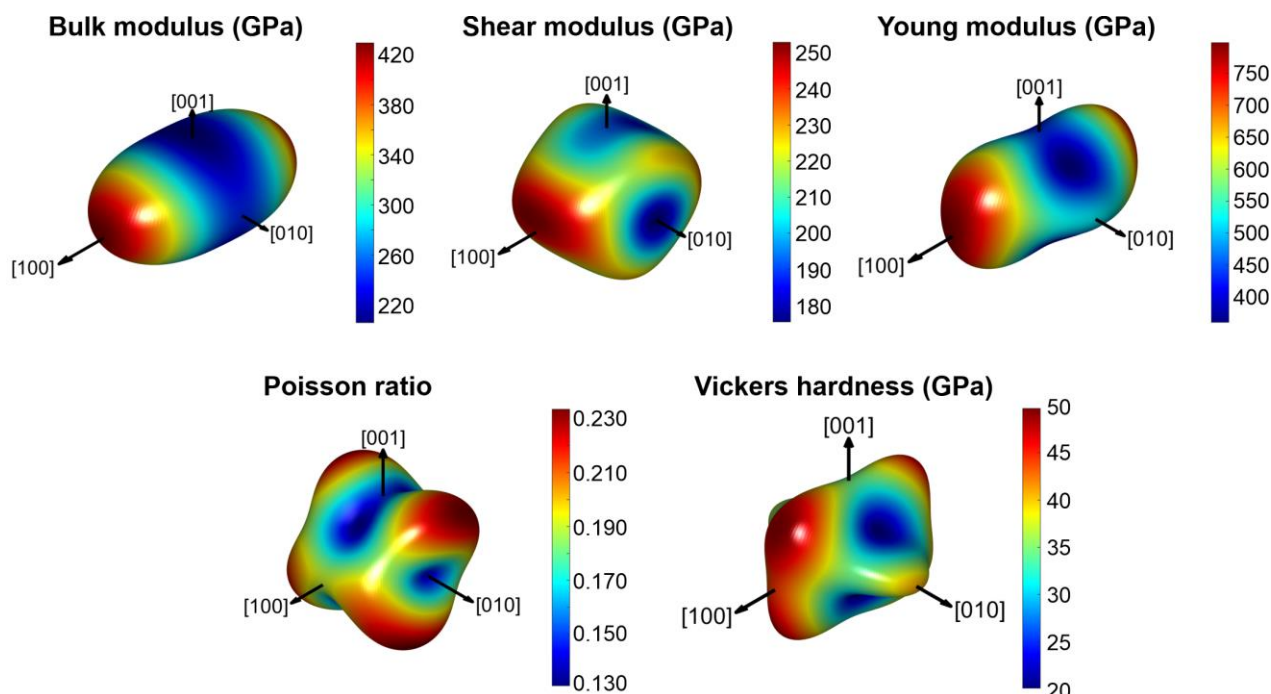


Figure 4. The directional dependence of the bulk modulus, shear modulus, Young modulus, Poisson ratio, and Vickers hardness of $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$

The Vickers hardness of $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ was calculated to determine whether it is classified as hard/superhard material or not. The result of 33 GPa exceeds the minimum threshold for hard materials ($\text{HV} > 20$ GPa) but remains below the criterion for superhard materials ($\text{HV} > 40$ GPa). Thus, $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ is classified as a hard material. The hardness of predicted $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ is higher than known hexagonal polymorph, which hardness equal to 25 GPa [20], and widely used WC (~ 20 GPa) [18] and SiC (~ 22 GPa) [19]. The hardness exhibits pronounced anisotropy, as shown in Figure 4, with values ranging from 20.1 GPa to 49.7 GPa—a 2.5-fold variation that highlights its strong directional dependence.

Conclusion

Through crystal structure prediction calculations, we identified a new low-enthalpy polymorph of MnB_6 , in addition to the known hexagonal phase. This novel phase, which adopts the monoclinic $P2/m$ space group, is energetically favorable over the $P6_3/m2$ structure below 58 GPa. Although the $P2/m$ polymorph is metastable with respect to the decomposition products across the studied pressure range, it remains a promising candidate for experimental synthesis. This is contingent upon it being dynamically and mechanically stable, as confirmed by our calculations, which would allow it to be obtained metastably. The estimated mechanical properties reveal that $\text{MnB}_6\text{-}P2/m$ has moderate elastic moduli, is brittle, and possesses a high

Vickers hardness of 33 GPa. This hardness surpasses that of widely used industrial materials like cemented tungsten carbide and silicon carbide, firmly classifying MnB_6 - $P2/m$ as a hard material.

Conflicts of interest

There are no conflicts to declare.

Authorship contribution statement

N. Sagatov – Investigation, Methodology, Analysis, Writing – original draft.

D. Sagatova – Investigation, Methodology, Analysis, Writing – original draft.

References

1. M. Cadeville, Propriétés magnétiques des diborures de manganèse et de chrome: MnB_2 et CrB_2 , *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 27, p. 667–670 (1966), DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(66\)90217-4](https://doi.org/10.1016/0022-3697(66)90217-4)
2. H.-Y. Chung, M.B. Weinberger, J.B. Levine, A. Kavner, J.-M. Yang, S.H. Tolbert, R.B. Kaner, Synthesis of ultra-incompressible superhard rhenium diboride at ambient pressure, *Science* 316, p. 436–439 (2007), DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1139322>
3. S. Carenco, D. Portehault, C. Boissière, N. Mezaïlles, C. Sanchez, Nanoscaled metal borides and phosphides: recent developments and perspectives, *Chemical reviews* 113, p. 7981–8065 (2013), DOI: <https://doi.org/10.1021/cr400020d>
4. Q. Li, D. Zhou, W. Zheng, Y. Ma, C. Chen, Anomalous stress response of ultrahard WBn compounds, *Physical Review Letters* 115, p. 185502 (2015), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.185502>
5. A.G. Kvashnin, H.A. Zakaryan, C. Zhao, Y. Duan, Y.A. Kvashnina, C. Xie, H. Dong, A.R. Oganov, New tungsten borides, their stability and outstanding mechanical properties, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 9, p. 3470–3477 (2018), DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.8b01262>
6. C. Zhao, Y. Duan, J. Gao, W. Liu, H. Dong, H. Dong, D. Zhang, A.R. Oganov, Unexpected stable phases of tungsten borides, *Physical Chemistry Chemical Physics* 20, p. 24665–24670 (2018), DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CP04222E>
7. T.P. Fehlner, Molecular models of solid state metal boride structures, *Journal of Solid State Chemistry* 154, p. 110–113 (2000), DOI: <https://doi.org/10.1006/jssc.2000.8820>
8. M.T. Yeung, R. Mohammadi, R.B. Kaner, Ultraincompressible, superhard materials, *Annual Review of Materials Research* 46, p. 465–485 (2016), DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070115-032148>
9. G. Akopov, L.E. Pangilinan, R. Mohammadi, R.B. Kaner, Perspective: Superhard metal borides: A look forward, *APL Materials* 6(7), p. 070901 (2018), DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5040763>
10. R.W. Cumberland, M.B. Weinberger, J.J. Gilman, S.M. Clark, S.H. Tolbert, R.B. Kaner, Osmium diboride, an ultra-incompressible, hard material, *Journal of the American Chemical Society* 127, p. 7264–7265 (2005), DOI: <https://doi.org/10.1021/ja043806y>
11. H. Niu, J. Wang, X.-Q. Chen, D. Li, Y. Li, P. Lazar, R. Podloucky, A.N. Kolmogorov, Structure, bonding, and possible superhardness of CrB_4 , *Physical Review B* 85, p. 144116 (2012), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.144116>

12. R. Mohammadi, A.T. Lech, M. Xie, B.E. Weaver, M.T. Yeung, S.H. Tolbert, R.B. Kaner, Tungsten tetraboride, an inexpensive superhard material, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108, p. 10958–10962 (2011), DOI: <https://doi.org/10.1073/pnas.1102636108>
13. A.G. Kvashnin, D.V. Rybkovskiy, V.P. Filonenko, V.I. Bugakov, I.P. Zibrov, V.V. Brazhkin, A.R. Oganov, A.A. Osipov, A.Y. Zakirov, WB5-x: Synthesis, properties, and crystal structure—new insights into the long-debated compound, *Advanced Science* 7, p. 2000775 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5c00183>
14. T. Ma, H. Li, X. Zheng, S. Wang, X. Wang, H. Zhao, S. Han, J. Liu, R. Zhang, P. Zhu, Ultrastrong boron frameworks in ZrB12: A highway for electron conducting, *Advanced Materials* 29, p. 1604003 (2017), DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.201604003>
15. L.-P. Ding, Y.H. Tiandong, P. Shao, Y. Tang, Z.-L. Zhao, H. Lu, Crystal structures, phase stabilities, electronic properties, and hardness of yttrium borides: new insight from first-principles calculations, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 12, p. 5423–5429 (2021), DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.1c01300>
16. K. Zhao, Q. Wang, W. Li, Q. Yang, H. Yu, F. Han, H. Liu, S. Zhang, Orthorhombic ScB3 and hexagonal ScB6 with high hardness, *Physical Review B* 105, p. 094104 (2022), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.094104>
17. H. Gou, N. Dubrovinskaia, E. Bykova, A.A. Tsirlin, D. Kasinathan, W. Schnelle, A. Richter, M. Merlini, M. Hanfland, A.M. Abakumov, Discovery of a superhard iron tetraboride superconductor, *Physical Review Letters* 111, p. 157002 (2013), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.157002>
18. P. Wang, R. Kumar, E.M. Sankaran, X. Qi, X. Zhang, D. Popov, A.L. Cornelius, B. Li, Y. Zhao, L. Wang, Vanadium diboride (VB2) synthesized at high pressure: elastic, mechanical, electronic, and magnetic properties and thermal stability, *Inorganic Chemistry* 57, p. 1096–1105 (2018), DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b02550>
19. J. Qian, L. Daemen, Y. Zhao, Hardness and fracture toughness of moissanite, *Diamond and Related Materials* 14, p. 1669–1672 (2005), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2005.06.007>
20. X. Yuan, M. Xu, C. Huang, Y. Liang, S. Lin, J. Hao, Y. Li, Pressure-stabilized MnB6 that exhibits high-temperature ferromagnetism and high ductility at ambient pressure, *Journal of Materials Chemistry C* 10 p. 4365–4371 (2022), DOI: <https://doi.org/10.1039/D2TC00508E>
21. G. Kresse, J. Furthmüller, Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set, *Computational Materials Science* 6(1), p. 15–50 (1996), DOI: [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
22. G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Physical Review B* 59(3), p. 1758 (1999), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
23. A.R. Oganov, C.W. Glass, Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications, *The Journal of Chemical Physics* 124, p. 244704 (2006), DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2210932>
24. A.R. Oganov, A.O. Lyakhov, M. Valle, How evolutionary crystal structure prediction works—and why, *Accounts of Chemical Research* 44, p. 227–237 (2011), DOI: <https://doi.org/10.1021/ar1001318>
25. A.O. Lyakhov, A.R. Oganov, H.T. Stokes, Q. Zhu, New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX, *Computer Physics Communications* 184, p. 1172–1182 (2013), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.12.009>

26. H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B* 13, p. 5188 (1976), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
27. M. Methfessel, A.T. Paxton, High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals, *Physical Review B* 40, p. 3616 (1989), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.3616>
28. A. Togo, I. Tanaka, First principles phonon calculations in materials science, *Scripta Materialia* 108, p. 1–5 (2015), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2015.07.021>
29. R. Hill, The elastic behaviour of a crystalline aggregate, *Proceedings of the Physical Society. Section A* 65, p. 349 (1952), DOI: <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>
30. R. Hill, Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11, p. 357–372 (1963), DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90036-X](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90036-X)
31. X.-Q. Chen, H. Niu, D. Li, Y. Li, Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses, *Intermetallics* 19, p. 1275–1281 (2011), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.03.026>
32. Y. Tian, B. Xu, Z. Zhao, Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals, *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials* 33, p. 93–106 (2012), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2012.02.021>
33. R.D. Carnahan, Elastic properties of silicon carbide, *Journal of the American Ceramic Society* 51(4), p. 223–224 (1968), DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1968.tb11877.x>

Н. Сағатов^{1,2}, Д. Сағатова^{1,3}

¹*В.С. Соболев ат. геология және минералогия институты РФА СТ, Новосибирск, Ресей Федерациясы*

²*Новосибирск мемлекеттік университеті, Новосибирск, Ресей Федерациясы.*

³*А.В. Николаев ат. бейорганикалық химия институты РФА СТ, Новосибирск, Ресей Федерациясы
(E-mail: n.e.sagatov@gmail.com)*

Жаңа марганец гексабориді: тұрақтылық және механикалық қасиеттер

Андатпа. *Ab initio* эволюциялық кристалдық құрылымды болжауды пайдалана отырып, біз $P2/m$ кеңістік тобымен марганец гексаборидінің (MnB_6) жаңа моноклиндік фазасын аштық. Бұл жаңа полиморф 58 ГПа төмен қысымда бұрын белгілі гексагональдық $R\bar{3}m2$ құрылымымен салыстырғанда энергетикалық жағынан қолайлы. $P2/m$ фазасы MnB_6 және В-ге ыдырауға қатысты метатұрақты болғанымен, оның қоршаған орта қысымында динамикалық және механикалық тұрақтылығы көрсетілген, бұл ойдан шығарылған фонон модтардың жоқтығымен және Борн тұрақтылық критерийлерінің қанағаттандырылуымен дәлелденеді. Серпімді есептеулер MnB_6 - $P2/m$ қатты, сынғыш материал екенін көрсетеді, жоғары Викерс қаттылығы 33 ГПа, ол вольфрам карбиді және кремний карбиді сияқты қарапайым өнеркәсіптік керамикадан жоғары. Көлемдік модуль (273 ГПа), ығысу модулі (220 ГПа) және Янг модулі (519 ГПа) серпімді деформацияға тамаша қарсылықты көрсетеді. Қосылыс айтарлықтай серпімді анизотропияны көрсетеді, бұл оның модульдері мен қаттылығының бағытталған тәуелділігімен дәлелденеді. Бұл қасиеттер жаңа MnB_6 - $P2/m$ полиморфты тәжірибелік синтез және қатты материал ретінде әлеуетті қолдану үшін перспективалы үміткер етеді.

Түйін сөздер: боридтер, қаттылық, жоғары қысым, серпімділік модульдері, тығыздық функционалдық теориясы

Н. Сагатов^{1,2}, Д. Сагатова^{1,3}

¹Институт геологии и минералогии им В.С. Соболева СО РАН, Новосибирск, Российская Федерация

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Российская Федерация

³Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Российская Федерация
(E-mail: n.e.sagatov@gmail.com)

Новый гексаборид марганца: стабильность и механические свойства

Аннотация. С помощью *ab initio* эволюционных предсказаний кристаллических структур мы обнаружили новую моноклинную фазу гексаборида марганца (MnB_6) с пространственной группой $P2/m$. Этот новый полиморф энергетически выгоден по сравнению с ранее известной гексагональной структурой $P6_3/m2$ при давлениях ниже 58 ГПа. Хотя фаза $P2/m$ метастабильна относительно распада на MnB_4 и В, продемонстрировано, что она динамически и механически стабильна при давлении окружающей среды, что подтверждается отсутствием мнимых фононных мод и удовлетворением критериям устойчивости Борна. Расчеты упругих свойств показывают, что MnB_6 - $P2/m$ является твердым, хрупким материалом с высокой твердостью по Виккерсу 33 ГПа, что превосходит твердость обычных промышленных керамик, таких, как карбид вольфрама и карбид кремния. Модуль объёмной упругости (273 ГПа), модуль сдвига (220 ГПа) и модуль Юнга (519 ГПа) указывают на превосходную устойчивость к упругой деформации. Соединение обладает значительной упругой анизотропией, что подтверждается направленной зависимостью его модулей и твёрдости. Эти свойства делают новый полиморф MnB_6 - $P2/m$ перспективным кандидатом для экспериментального синтеза и потенциального применения в качестве твёрдого материала.

Ключевые слова: бориды, твердость, высокое давление, модули упругости, теория функционала плотности

References

1. M. Cadeville, Propriétés magnétiques des diborures de manganèse et de chrome: MnB_2 et CrB_2 , Journal of Physics and Chemistry of Solids 27, p. 667–670 (1966), DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(66\)90217-4](https://doi.org/10.1016/0022-3697(66)90217-4)
2. H.-Y. Chung, M.B. Weinberger, J.B. Levine, A. Kavner, J.-M. Yang, S.H. Tolbert, R.B. Kaner, Synthesis of ultra-incompressible superhard rhenium diboride at ambient pressure, Science 316, p. 436–439 (2007), DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1139322>
3. S. Carenco, D. Portehault, C. Boissière, N. Mezailles, C. Sanchez, Nanoscaled metal borides and phosphides: recent developments and perspectives, Chemical reviews 113, p. 7981–8065 (2013), DOI: <https://doi.org/10.1021/cr400020d>
4. Q. Li, D. Zhou, W. Zheng, Y. Ma, C. Chen, Anomalous stress response of ultrahard WB_n compounds, Physical Review Letters 115, p. 185502 (2015), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.185502>

5. A.G. Kvashnin, H.A. Zakaryan, C. Zhao, Y. Duan, Y.A. Kvashnina, C. Xie, H. Dong, A.R. Oganov, New tungsten borides, their stability and outstanding mechanical properties, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 9, p. 3470–3477 (2018), DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.8b01262>
6. C. Zhao, Y. Duan, J. Gao, W. Liu, H. Dong, H. Dong, D. Zhang, A.R. Oganov, Unexpected stable phases of tungsten borides, *Physical Chemistry Chemical Physics* 20, p. 24665–24670 (2018), DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CP04222E>
7. T.P. Fehner, Molecular models of solid state metal boride structures, *Journal of Solid State Chemistry* 154, p. 110–113 (2000), DOI: <https://doi.org/10.1006/jssc.2000.8820>
8. M.T. Yeung, R. Mohammadi, R.B. Kaner, Ultraincompressible, superhard materials, *Annual Review of Materials Research* 46, p. 465–485 (2016), DOI: <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070115-032148>
9. G. Akopov, L.E. Pangilinan, R. Mohammadi, R.B. Kaner, Perspective: Superhard metal borides: A look forward, *APL Materials* 6(7), p. 070901 (2018), DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5040763>
10. R.W. Cumberland, M.B. Weinberger, J.J. Gilman, S.M. Clark, S.H. Tolbert, R.B. Kaner, Osmium diboride, an ultra-incompressible, hard material, *Journal of the American Chemical Society* 127, p. 7264–7265 (2005), DOI: <https://doi.org/10.1021/ja043806y>
11. H. Niu, J. Wang, X.-Q. Chen, D. Li, Y. Li, P. Lazar, R. Podloucky, A.N. Kolmogorov, Structure, bonding, and possible superhardness of CrB₄, *Physical Review B* 85, p. 144116 (2012), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.144116>
12. R. Mohammadi, A.T. Lech, M. Xie, B.E. Weaver, M.T. Yeung, S.H. Tolbert, R.B. Kaner, Tungsten tetraboride, an inexpensive superhard material, *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108, p. 10958–10962 (2011), DOI: <https://doi.org/10.1073/pnas.1102636108>
13. A.G. Kvashnin, D.V. Rybkovskiy, V.P. Filonenko, V.I. Bugakov, I.P. Zibrov, V.V. Brazhkin, A.R. Oganov, A.A. Osipov, A.Y. Zakirov, WB₅-x: Synthesis, properties, and crystal structure—new insights into the long-debated compound, *Advanced Science* 7, p. 2000775 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5c00183>
14. T. Ma, H. Li, X. Zheng, S. Wang, X. Wang, H. Zhao, S. Han, J. Liu, R. Zhang, P. Zhu, Ultrastrong boron frameworks in ZrB₁₂: A highway for electron conducting, *Advanced Materials* 29, p. 1604003 (2017), DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.201604003>
15. L.-P. Ding, Y.H. Tiandong, P. Shao, Y. Tang, Z.-L. Zhao, H. Lu, Crystal structures, phase stabilities, electronic properties, and hardness of yttrium borides: new insight from first-principles calculations, *The Journal of Physical Chemistry Letters* 12, p. 5423–5429 (2021), DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.1c01300>
16. K. Zhao, Q. Wang, W. Li, Q. Yang, H. Yu, F. Han, H. Liu, S. Zhang, Orthorhombic ScB₃ and hexagonal ScB₆ with high hardness, *Physical Review B* 105, p. 094104 (2022), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.094104>
17. H. Gou, N. Dubrovinskaia, E. Bykova, A.A. Tsirlin, D. Kasinathan, W. Schnelle, A. Richter, M. Merlini, M. Hanfland, A.M. Abakumov, Discovery of a superhard iron tetraboride superconductor, *Physical Review Letters* 111, p. 157002 (2013), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.157002>
18. P. Wang, R. Kumar, E.M. Sankaran, X. Qi, X. Zhang, D. Popov, A.L. Cornelius, B. Li, Y. Zhao, L. Wang, Vanadium diboride (VB₂) synthesized at high pressure: elastic, mechanical, electronic, and magnetic properties and thermal stability, *Inorganic Chemistry* 57, p. 1096–1105 (2018), DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b02550>

19. J. Qian, L. Daemen, Y. Zhao, Hardness and fracture toughness of moissanite, *Diamond and Related Materials* 14, p. 1669–1672 (2005), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2005.06.007>
20. X. Yuan, M. Xu, C. Huang, Y. Liang, S. Lin, J. Hao, Y. Li, Pressure-stabilized MnB₆ that exhibits high-temperature ferromagnetism and high ductility at ambient pressure, *Journal of Materials Chemistry C* 10 p. 4365–4371 (2022), DOI: <https://doi.org/10.1039/D2TC00508E>
21. G. Kresse, J. Furthmüller, Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set, *Computational Materials Science* 6(1), p. 15-50 (1996), DOI: [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
22. G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Physical Review B* 59(3), p. 1758 (1999), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
23. A.R. Oganov, C.W. Glass, Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: Principles and applications, *The Journal of Chemical Physics* 124, p. 244704 (2006), DOI: <https://doi.org/10.1063/1.2210932>
24. A.R. Oganov, A.O. Lyakhov, M. Valle, How evolutionary crystal structure prediction works—and why, *Accounts of Chemical Research* 44, p. 227–237 (2011), DOI: <https://doi.org/10.1021/ar1001318>
25. A.O. Lyakhov, A.R. Oganov, H.T. Stokes, Q. Zhu, New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX, *Computer Physics Communications* 184, p. 1172–1182 (2013), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.12.009>
26. H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B* 13, p. 5188 (1976), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
27. M. Methfessel, A.T. Paxton, High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals, *Physical Review B* 40, p. 3616 (1989), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.3616>
28. A. Togo, I. Tanaka, First principles phonon calculations in materials science, *Scripta Materialia* 108, p. 1–5 (2015), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2015.07.021>
29. R. Hill, The elastic behaviour of a crystalline aggregate, *Proceedings of the Physical Society. Section A* 65, p. 349 (1952), DOI: <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>
30. R. Hill, Elastic properties of reinforced solids: some theoretical principles, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 11, p. 357–372 (1963), DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(63\)90036-X](https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90036-X)
31. X.-Q. Chen, H. Niu, D. Li, Y. Li, Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses, *Intermetallics* 19, p. 1275–1281 (2011), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.03.026>
32. Y. Tian, B. Xu, Z. Zhao, Microscopic theory of hardness and design of novel superhard crystals, *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials* 33, p. 93–106 (2012), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2012.02.021>
33. R.D. Carnahan, Elastic properties of silicon carbide, *Journal of the American Ceramic Society* 51(4), p. 223-224 (1968), DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1968.tb11877.x>

Information about the authors:

Sagatov N. – corresponding author, candidate of physical and mathematical sciences, researcher of the Sobolev Institute of geology and mineralogy SB RAS, prospect akademika Koptyuga, 3, Novosibirsk, Russian Federation.

Sagatova D. – candidate of geological and mineralogical sciences, researcher of the Sobolev Institute of geology and mineralogy SB RAS, prospect akademika Koptyuga, 3, Novosibirsk, Russian Federation.

Сағатов Н. – хат-хабар авторы, физика-математика ғылымдарының кандидаты, РҒА СТ В.С. Соболев атындағы Геология және Минералогия институтының ғылыми қызметкері, академик Коптюг даңғылы, 3, Новосибирск, Ресей Федерациясы.

Сағатова Д. – геология-минералогия ғылымдарының кандидаты, РҒА СТ В.С. Соболев атындағы Геология және Минералогия институтының ғылыми қызметкері, академик Коптюг даңғылы, 3, Новосибирск, Ресей Федерациясы.

Сағатов Н. – автор для корреспонденции, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института геологии и минералогии им В.С. Соболева СО РАН, проспект академика Коптюга, 3, Новосибирск, Российская Федерация.

Сағатова Д. – кандидат геолого-минералогических наук, научный сотрудник Института геологии и минералогии им В.С. Соболева СО РАН, проспект академика Коптюга, 3, Новосибирск, Российская Федерация.



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/>).



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.

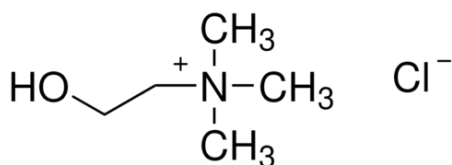
Есептеу әдістері, әсіресе тығыздық функционалдық теориясы есептеулері, терең эвтектикалық еріткіштер жүйелерінің құрылымдық, кинетикалық және электрлік аспектілерін молекулалық деңгейде зерттеудің тиімді құралы болып табылады [7]. Оңтайландырылған құрылымды анықтау, молекулалық электростатикалық потенциалды 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.

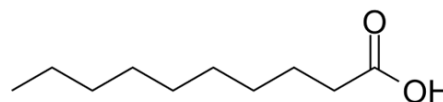
Бұл мақалада біз гидроний ионы жоқ және бар болған кезде холин хлорид және декан қышқылы терең эвтектикалық еріткіштің протон өткізгіштігімен байланысты құрылымдық және электрондық қасиеттерін түсіндіру мақсатында жүйелі тығыздық функционалдық теориясы негізіндегі зерттеу туралы хабарлаймыз. Терең эвтектикалық 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.

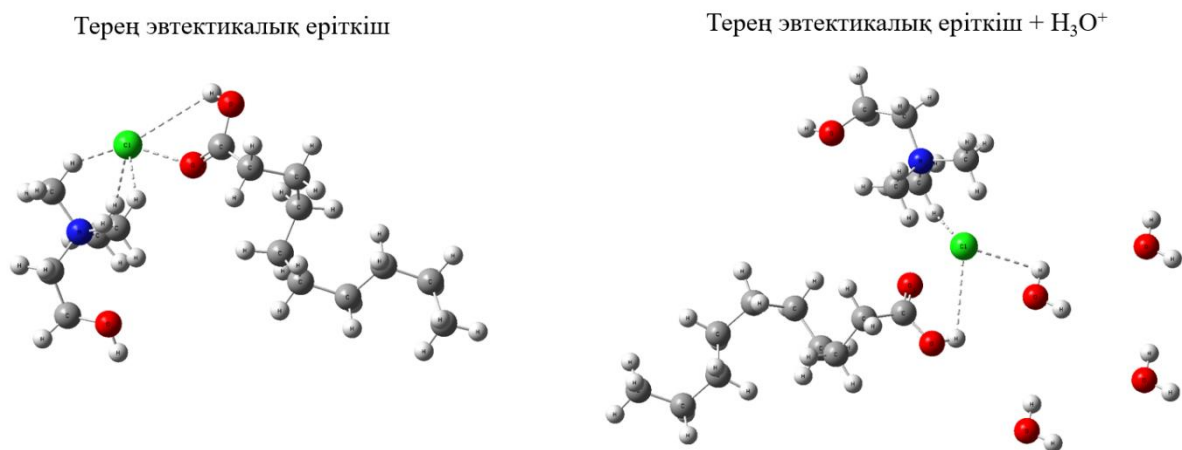
Холин хлоридінің (ChCl) және декан қышқылының (DA) молекулалық құрылымдары 1-суретте көрсетілгендей, бастапқыда олардың белгілі химиялық конфигурациялары арқылы жасалды. Барлық кванттық химия есептеулері теорияның B3LYP деңгейінде 6-311p)+G(қойылған) негізінде тығыздықтың функционалдық теориясы (DFT) 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

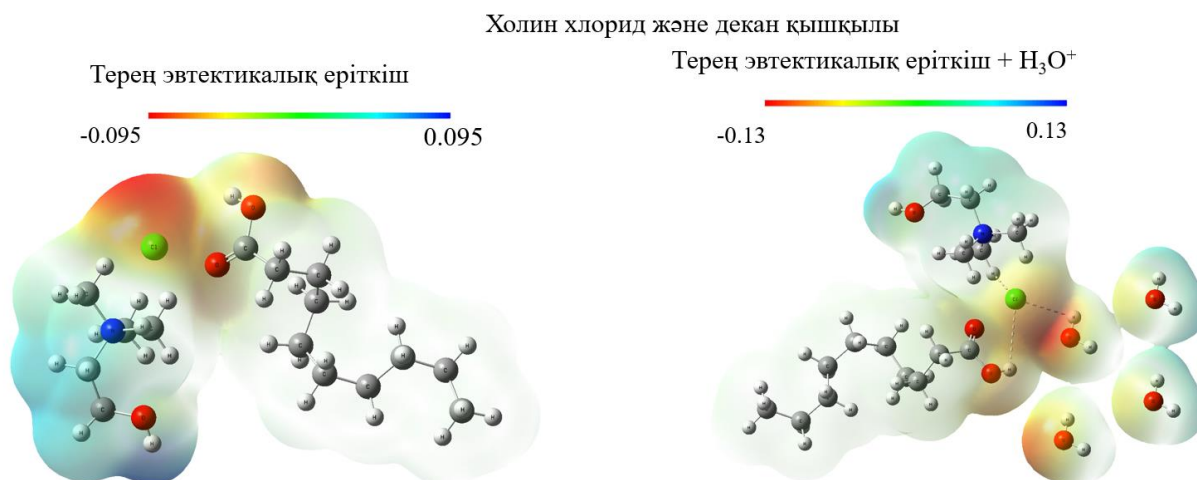


Сурет 2. Холин хлорид және декан қышқылының оптимизацияланған структурасы.
Түстердің сипаттамасы: ақ (сутегі); сұр (көміртегі); қызыл (оттегі); көк (азот); жасыл (хлор).

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.

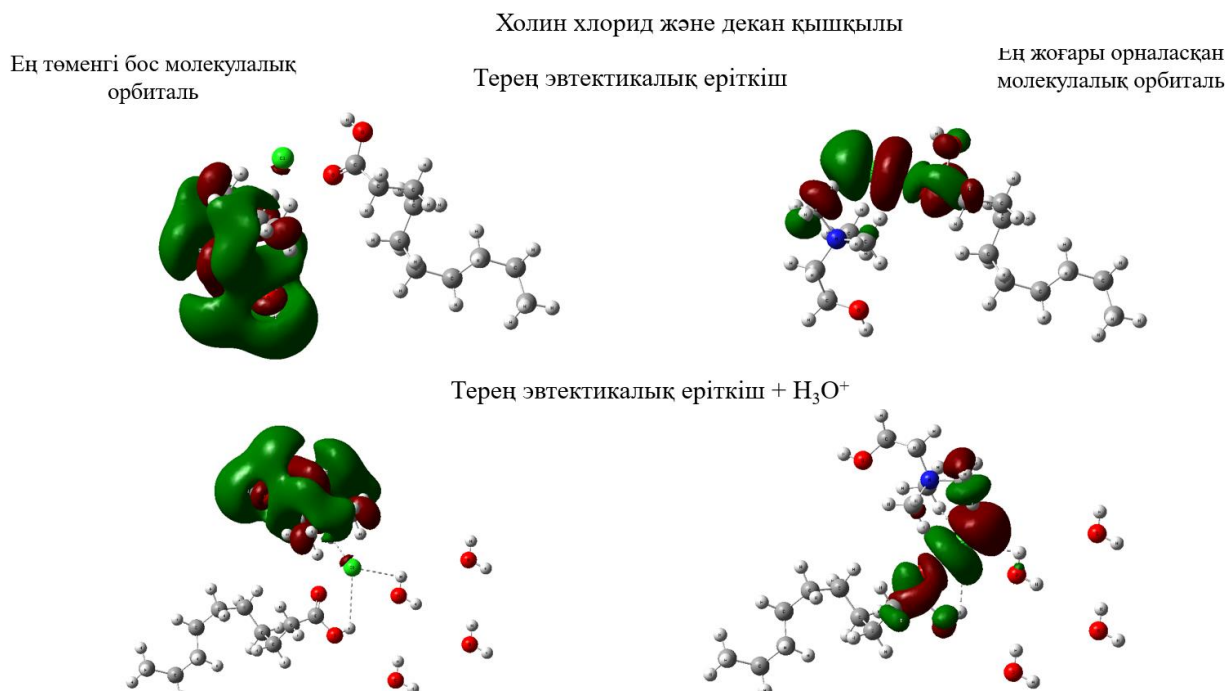
Гидрийсіз DES-те хлорид ионының ең күшті теріс потенциалы бар, бұл оның протон донорларымен сутегі байланыстарын құру қабілетін көрсететін терең қызыл аймақ (мәні

~-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 аквакомплексом 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 $\text{Na}_2\text{SO}_4\text{-V}$ metodom DFT [Investigation of elastic properties of $\text{Na}_2\text{SO}_4\text{-V}$ 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

Усен 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, Мұңайтпасова, 13, 010000, Астана, Казахстан

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

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

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

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

Абуова Ф. У. – PhD, ассоциированный профессор кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Мұңайтпасова, 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/>).



IRSTI 58.33.09

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-113-130>

Scientific article

Computational and experimental studies of processes of non-activation release of tritium from beryllium-containing materials of research nuclear reactors

T. Kulsartov^{1,2}, A. Temirzhanov^{1,3*}, Zh. Zaurbekova^{1,2}, A. Shaimerdenov¹, S. Askerbekov^{1,2}, P. Kharkin¹, O. Milts¹, D. Sairanbayev¹, I. Kenzhina^{1,2,3}, T. Zholdybayev¹

¹Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

²Institute of Experimental and Theoretical Physics, al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

³Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: alik-25.01.97@mail.ru)

Abstract. Beryllium reflectors in research reactors are known sources of tritium, raising safety concerns associated with its release. While substantial outgassing occurs at elevated temperatures (>700 °C) through diffusion, measurable release has also been observed at ~ 50 °C, which cannot be explained by this mechanism. A non-activation release process is therefore considered, in which tritium nuclei formed near the beryllium surface escape directly as energetic ions.

A computational model was developed to quantify this process. The stopping range of MeV tritium ions in solids is limited to several tens of micrometers, defining the effective near-surface region for release. Geometric analysis allowed deriving an expression for the number of tritium ions emitted from the surface during irradiation. To verify the model, lithium metatitanate (Li_2TiO_3) pebbles with natural and 96% ^6Li enrichment were irradiated in the WWR-K reactor at ~ 50 °C for 516 h. Samples were wrapped in 100 μm aluminum foils serving as tritium collectors, which were subsequently dissolved and analyzed by liquid scintillation spectrometry.

Calculated tritium yields were of the order of 10^{17} - 10^{18} atoms and showed good agreement with experiment. For natural Li_2TiO_3 , $3.35 \cdot 10^{17}$ atoms were predicted compared to $(2.0 \pm 0.4) \cdot 10^{17}$ measured, while for enriched Li_2TiO_3 , $2.14 \cdot 10^{18}$ versus $(1.1 \pm 0.2) \cdot 10^{18}$ were obtained. Lower experimental values are attributed to incomplete foil retention and model simplifications such as neglecting pebble self-shielding.

The results confirm the existence of non-activation tritium release from lithium-containing ceramics and demonstrate that the proposed model provides reliable estimates applicable to safety assessments of reactors employing beryllium components.

Keywords: lithium ceramics, neutron irradiation, tritium, helium, MCNP6.

Introduction

Radiation safety issues of nuclear devices are of crucial importance for minimizing risks to human health and the environment, ensuring stability and efficiency of the nuclear industry. One of the key concerns in this area is the assessment of radioactive materials release into the environment during the operation of nuclear systems, including low-power nuclear reactors with research purposes. In the Republic of Kazakhstan, extensive research has been carried out over the past decades in various fields of nuclear and fusion energy, including radioecology and material testing under reactor irradiation conditions [1-10].

This work presents a novel approach to studying non-activation tritium release from beryllium under neutron irradiation, an idea of that emerged from previous studies of the authors of this paper on accumulation and release of tritium from beryllium-based reflector components of nuclear reactors [11-12].

Under neutron irradiation conditions, tritium is generated in beryllium through a series of nuclear reactions. These include the formation of lithium-6 within beryllium structures, followed by neutron capture reactions that ultimately result in tritium production:



The resulting lithium interacts with thermal neutrons according to the following reaction:



The main processes influencing the rate of tritium release from beryllium are diffusion processes, which become significant at high temperatures (above 700 °C) [13,14]. However, a number of studies indicate the release of tritium at temperatures below 50 °C, which cannot be explained by diffusion. A possible mechanism for such tritium release may be the release of tritium directly from the near-surface region of beryllium units of a nuclear reactor.

A detailed consideration of this problem would make it possible to more accurately assess the tritium safety of nuclear reactors containing beryllium units. This would also allow obtaining a method for estimating the amount of tritium ions released from the surface of lithium-containing materials under reactor irradiation conditions.

The study aims to develop and verify a calculation method for estimating tritium flux released from beryllium reflectors without relying on diffusion models. It seeks to experimentally confirm the existence and magnitude of this release mechanism using lithium-containing samples. Ultimately, the work contributes to more accurate assessments of tritium safety in research reactors employing beryllium components.

This work is the first to propose and experimentally confirm a non-activation mechanism of tritium release from beryllium under neutron irradiation, where energetic tritium ions escape directly from the near-surface layer. A new computational method was developed to quantify

this effect, and its predictions were validated against reactor irradiation experiments with lithium ceramics.

Calculation method for assessing the tritium ions amount released from the near-surface layer of materials

It is known that under the influence of neutron irradiation beryllium undergoes the formation and accumulation of radiation-induced defects, as well as helium and tritium nuclei generated as a result of nuclear reactions with beryllium atoms.

The occurrence of defects in beryllium under neutron flux is associated with elastic scattering of neutrons with nuclei and nuclear reactions of the types $(n, 2n)$ and (n, α) [15-17].

For the present study, particular importance is attached to the reaction (n, α) , which takes place at neutron energy $E \geq 0.71$ MeV. A lithium-6 atom is formed as a result of reactions (1)-(3), which subsequently interacts with thermal neutrons, leading to the formation of tritium.

The tritium and helium ions with energies E_T and E_{He} (MeV), respectively, interact with the atoms of the material predominantly via inelastic collisions with electrons. Due to Coulomb interactions, energetic ions gradually lose their energy by ionizing or exciting atomic electrons along their trajectory. When the particle has lost all of its energy, it comes to rest. Owing to the relatively large mass of ions compared with that of electrons, individual scattering events lead only to small angular deviations, which statistically compensate each other over numerous collisions. Consequently, the trajectories of tritium and helium ions in the medium can be approximated as nearly rectilinear.

The ion path length λ (m) in the material may be estimated using the ionization loss formula (Bethe-Bloch equation) [18]:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi n Z^2 e^4}{mv^2} \cdot \left(\ln \frac{2mv^2}{I \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)} - \frac{v^2}{c^2} \right) \quad (4)$$

where m is the electron mass; c is the speed of light; v is the velocity of the particle; $\beta = v/c$; Z is the charge of a particle in units of the positron charge; n is the electron density of the medium; I is the average ionization potential of the atoms in the medium through which the particle passes.

To assess the ionization losses the LISE++ program is usually used, which allows prediction of the energy losses and beam purity of radioactive ions during their transport [19]. For each specific calculation, a program module is used in which the name of the isotope being slowed down, its energy, and the target parameters are set: its density and the stoichiometric composition of atoms.

To describe the emission of tritium and helium ions from the near-surface region of beryllium, a two-dimensional geometric model is employed (Figure 1).

Suppose a number of tritium-producing reactions occur at point A located at a distance x from the material surface. The particles formed are emitted isotropically from this point. The number of ions released from the material is determined by an isosceles triangle with a side of λ , and in the segment of the angle 2α all ions will leave the material. Their number of escaping ions, F , can be expressed as:

$$F = R \cdot \frac{\arccos \arccos(\alpha)}{\pi} = R \cdot \arccos(x/\lambda)/\pi \quad (5)$$

By integrating this expression over x from 0 to λ , it is easy to obtain expression for the rate N (mol/s) of ions release from the surface layer with an area of S (m²):

$$N = \frac{R \cdot S}{\pi} \int_0^\lambda (\arccos(x/\lambda)) dx = R \cdot S \cdot \lambda/\pi. \quad (6)$$

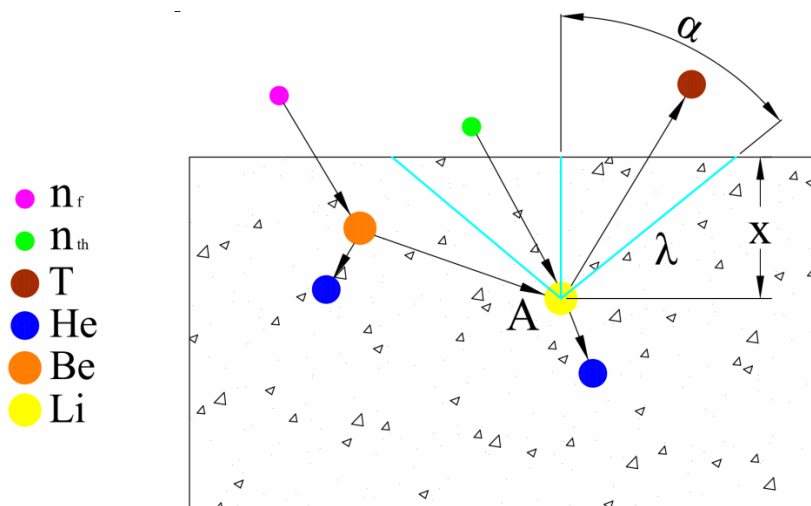


Figure 1. Two-dimensional geometry of the release of tritium and helium atoms from the near-surface layer of beryllium

Moving to integral values for estimating the amount of tritium ions released from the beryllium surface layer with an area of S during irradiation time t , the following expression is obtained:

$$N(t_{max}, S) = \frac{1}{\pi} \int_0^{t_{max}} \int_0^S R(S, t) \cdot \lambda dS dt \quad (7)$$

This methodology can also be applied to other irradiated materials containing lithium-6. To demonstrate the applicability of the developed approach, the release of tritium ions from the near-surface region of lithium ceramics was experimentally investigated in a dedicated reactor experiment, described below.

Reactor experiment on irradiation of lithium ceramics

In order to obtain samples of aluminum foils that captured tritium released in a non-activating manner two types of lithium ceramics (lithium metatitanate – LMT) pebbles with natural and 96% enrichment in Li6 were exposed to neutron irradiation. It was assumed that tritium ions would be absorbed by the aluminum foil in which the ceramics were wrapped. The

thickness of the foil was about 100 μm , which significantly exceeded the free path of tritium ions in aluminum.

The irradiation consisted in the following: sealed capsules (Figure 2a) with lithium ceramics samples wrapped in aluminum foils were loaded into an ampoule device, which was irradiated in the peripheral irradiation channel of the WWR-K research reactor (Figure 3) for 516 hours.

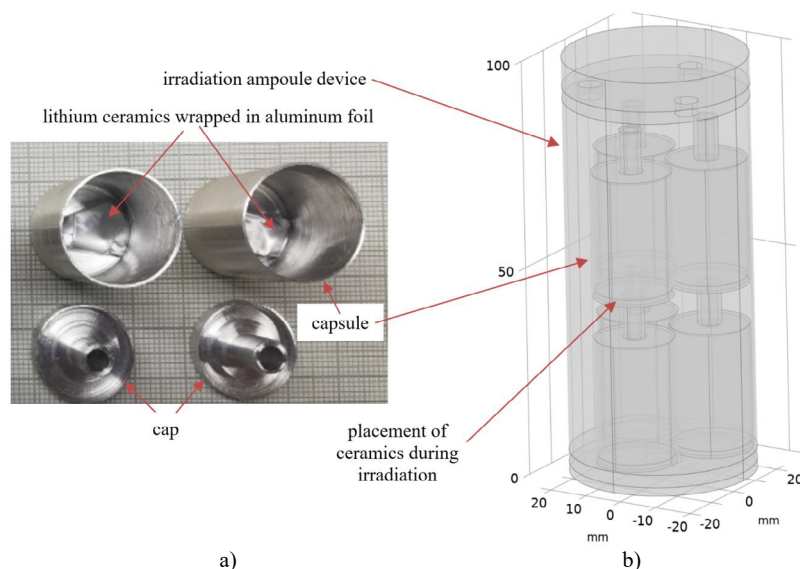


Figure 2. Photograph of capsules with lithium ceramic samples wrapped in foil (a) and irradiation diagram (b)

The capsule arrangement in the reactor ampoule device is shown in Figure 2b. Three capsules with LMT (with natural enrichment in Li^6), were installed in the lower part of the ampoule device. The rest three capsules with LMT (96% of Li^6) were installed in the upper part of the ampoule device. The capsules were filled with argon. During the experiments, the ampoule device and the capsules were cooled with water of the first coolant circuit of the WWR-K reactor. Average temperature of coolant did not exceed 50°C. The flow rate of the coolant through the capsule was equal to 0.5 m/s.

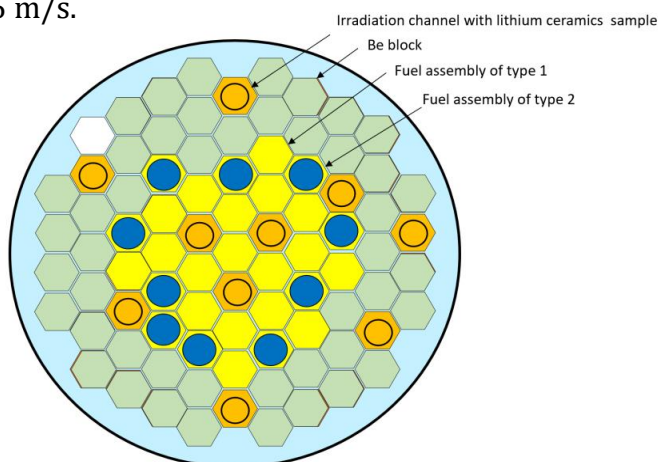


Figure 3. Configuration of the WWR-K reactor core

During irradiation experiment a diagram of the temperature change of the aluminum foil was obtained (Figure 4). As can be seen from graph, the foil's temperature in experiment was less than 50 °C. The temperature values shown on the graph correspond to the average values obtained from three independent temperature sensors measuring the coolant temperature. Since the irradiation capsule is cooled by the water of the reactor's primary circuit both from the outside and from the inside, the temperature inside the capsule is equivalent to the coolant temperature. Temperature fluctuations are associated with daily changes in the environment temperature, which affects the second cooling circuit of the reactor and, accordingly, decreases or increases heat exchange between the first and second circuits of the reactor.

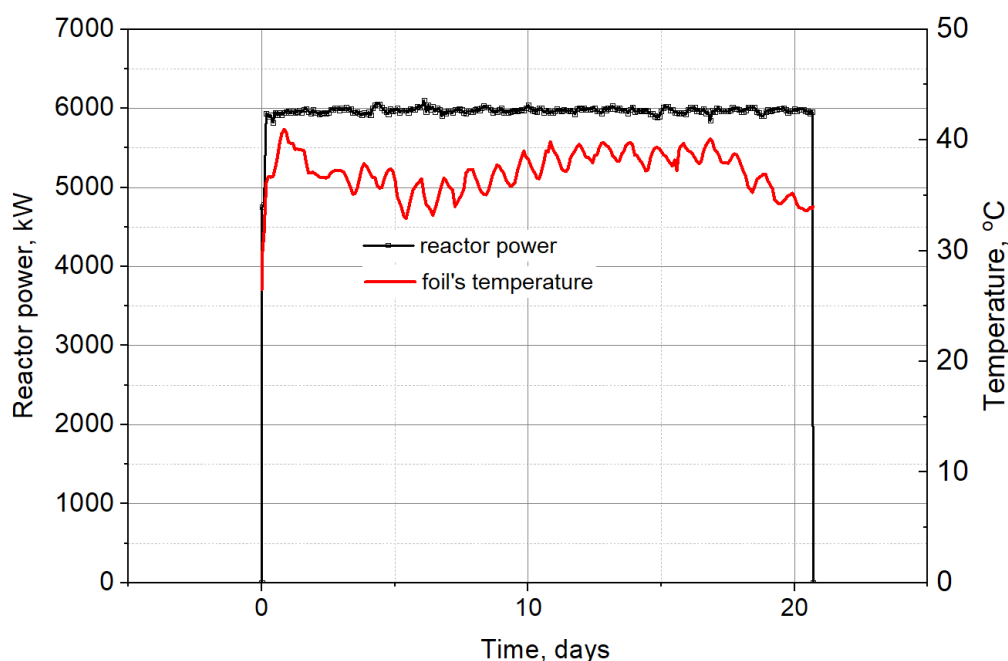


Figure 4. Diagram of the reactor experiment with lithium ceramic pebbles

Tritium amount determination in aluminum foil

After irradiation, the capsules were opened and aluminum foils were extracted. The foils were decomposed in an autoclave with 1 ml of concentrated HNO_3 and 0.5 ml of HF at 180 °C for 2.5 h. The cooled solution was neutralized with Na_2CO_3 to pH 8 and diluted to 50 ml with distilled water, followed by preliminary distillation [20]. From the second distillate fraction (≥ 20 ml), 1 ml was mixed with Ultima Gold LLT scintillation cocktail (1:19) and stored for 12 h before measurement. Tritium activity was determined by liquid scintillation beta spectrometry (TRICARB-3100TR) for 3 h in the 0-15 keV range with a detection efficiency of at least 60%.

The results for the amount of tritium released in non-activation way (obtained by calculation according to the above method) and the results of the experimentally determined amount of tritium in aluminum foils are given in Table 1.

Table 1. Amount of tritium released by non-activation way during irradiation of lithium ceramics (comparison of calculation and experimental results)

Type of samples wrapped in aluminum foil	Calculated value of the number of tritium atoms that entered the aluminum foil during irradiation	Experimental value of the number of tritium atoms in aluminum foil, determined by liquid scintillation beta spectrometry
Li_2TiO_3 (natural enrichment)	$3.35 \cdot 10^{17}$	$(2.0 \pm 0.4) \cdot 10^{17}$
Li_2TiO_3 (96% $\text{Li}6$)	$2.14 \cdot 10^{18}$	$(1.1 \pm 0.2) \cdot 10^{18}$

The comparison of calculated and experimental results demonstrates good agreement in terms of order of magnitude, with a clear proportionality between the tritium content and the degree of lithium-6 enrichment in the investigated ceramic samples.

At the same time, the experimentally measured number of tritium atoms in aluminum foils was consistently lower than the calculated estimates. This discrepancy is attributed to the incomplete retention of tritium in the foils: part of the released tritium likely penetrated only shallowly into the foil and subsequently escaped during post-irradiation handling and sample preparation. Another possible reason is the simplification adopted in the calculation procedure, where self-shielding effects of the lithium ceramic pebbles under irradiation were not considered. Specifically, formula (7) was applied to the total geometric surface area of the spherical samples, whereas in reality they formed a pebble bed with a mean pebble radius of 1 mm.

Overall, the results confirm that irradiation of lithium-containing ceramics leads to a measurable tritium release, attributable to its non-activation emission from the near-surface region of the material. The proposed computational approach provides estimates that are consistent with the experimental data within the expected accuracy.

Accounting for the discrepancy between experimental and calculated data due to the geometry of the irradiation experiment

Let us consider a configuration close to the experimental arrangement of lithium ceramic pebbles. The pebbles are sparsely arranged with a distance between them approximately equal to two of their diameters. With such an arrangement, the influence of geometry on the activation-free release of tritium becomes especially significant. In this scheme, the pebbles are arranged in one layer on a flat surface, and a sheet of aluminum foil wraps the pebble bed from above, below, and on the sides. Tritium ions formed during the reaction are emitted isotropically with an energy of about 2.73 MeV and a mean free path in lithium ceramics of about $\sim 30 \mu\text{m}$, depending on the density of the material.

For a triton to be released, it must be born in the ceramics within the range from the surface of the pebbles and have a trajectory direction that does not encounter obstacles to the foil.

In conditions of sparse packing, when there is a significant free space between the pebbles, the possibility of the tritons exiting not only in the vertical direction, but also to the sides, opens up, since the probability of a collision with a neighboring pebble is minimal.

In this case, vertical trajectories provide a contribution due to the fact that the tritons born in the upper hemisphere of the pebble and directed upward, as well as the tritons born in the lower hemisphere and directed downward, can freely reach the foil. Taking into account the isotropy of the emission and the uniform distribution of tritons by depth, the proportion of such vertical trajectories is estimated as

$$Q_1 \approx \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \approx 0.5,$$

where the first term corresponds to the number of tritons born in the upper hemisphere of the pebble and flying upward, and the second term - to the number of tritons born in the lower hemisphere of the pebble and flying downward.

For lateral trajectories in sparse packing conditions, a significant space between pebbles allows most tritons flying at angles from $\sim 30^\circ$ to $\sim 150^\circ$ relative to the vertical to reach the lateral foil without obstacles. The approximate fraction of such an exit can be estimated as $Q_2 \approx 0.25$. Considering that the angular share of lateral directions is approximately half (50%), but only newts born in the near-surface zone and directed strictly sideways will be able to exit, the total coefficient decreases to $\sim 25\%$. Thus, the total coefficient of triton exit into the foil with sparse pebble packing is calculated as the sum of the vertical and lateral components and is equal to ~ 0.75 .

This means that with a sparse configuration of pebble placement, the efficiency of tritium detection by aluminum foil reaches about 75% of the calculated value, assuming individual wrapping of each pebble. This is significantly higher than with dense packing, where the yield coefficient is limited to 25-55% depending on the bottom coverage. In this regard, when interpreting experimental data and constructing calculation models of non-activation tritium yield, it is necessary to take into account a correction factor reflecting the influence of the geometric configuration of the pebble bed and the availability of lateral trajectories for the release of tritons into the foil.

Calculation of the rate of non-activation tritium release from beryllium blocks of the WWR-K reactor

Based on the proposed method, the rates of tritium release from beryllium blocks of the WWR-K reactor were estimated during its operation at nominal power. The beryllium block in the reactor core is a monolithic hexagon 69.5 cm high. The density of the beryllium block is 1.894 g/cm³. Blocks are located around the fuel assemblies, forming a ring around the fuel part of the core. In Figure 5, the MCNP model of a horizontal section of the WWR-K reactor core is shown, indicating the cell numbers of the beryllium blocks. Since the heating of the coolant and samples during standard irradiation is not significant, the change in the temperature of the coolant and samples was not taken into account in the calculations.

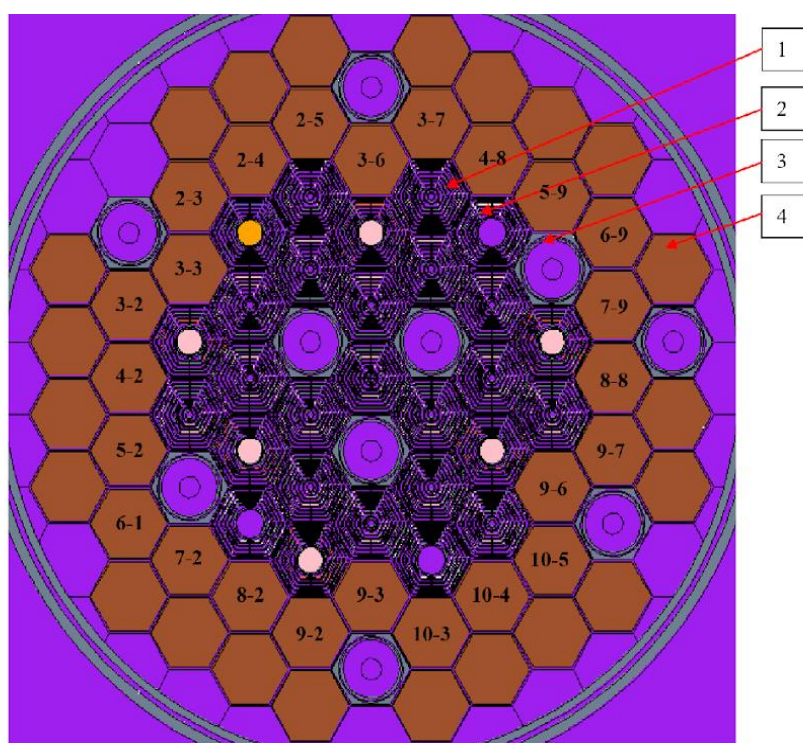


Figure 5. MCNP model of the WWR-K reactor core: 1) fuel assembly of type 1; 2) fuel assembly of type 2; 3) irradiation channel with a displacer; 4) beryllium block

During operation of the reactor at nominal power, some amount of beryllium almost immediately turns into Li^6 (according to the reactions (1) and (2)). The densities of beryllium and lithium atoms are described by the following equations:

$$\frac{dN_{\text{Be}}}{dt} = -N_{\text{Be}}\{\text{RR}\}_{\text{Be}}, \quad (8)$$

$$\frac{dN_{\text{Li}}}{dt} = N_{\text{Be}}\{\text{RR}\}_{\text{Be}} - N_{\text{Li}}\{\text{RR}\}_{\text{Li}}, \quad (9)$$

where, to simplify the notation, the dependence of the numerical density N on time is omitted. The indices Be and Li denote Be^9 and Li^6 , respectively. $\{\text{RR}\}$ denotes the rate of isotopic reactions: (n, H^3) for Li^6 and the reaction (n, α) for Be.

$\{\text{RR}\}$ is defined as:

$$\{\text{RR}\}_x = \int_0^{20} \varphi(E, t) \sigma_x(E) dE. \quad (10)$$

where x is the name of the isotope; $\varphi(E, t)$ is the neutron flux in the irradiation position; $\sigma_x(E)$ is the corresponding neutron-induced cross-section for isotope x . The energy interval (0-20 MeV) covers the entire range of neutron energies in the beryllium block.

To calculate the rate of $\text{Li}^6(n, \text{H}^3)$ reaction, a 1 mm area of the outer part of the beryllium block was selected along its entire height. The reaction rate in a unit volume ($1/(\text{cm}^3\text{s})$) of the beryllium block was determined as:

$$RR_V = N_{Li}(0) \cdot N_{Be0} \{RR\}_{Li}, \quad (11)$$

where N_{Be0} is the initial number of beryllium atoms per unit volume, (at/cm³); $N_{Li}(0)$ is the number of Li⁶ atoms formed in 1 s as a result of the Be(n,α) reaction, (at/cm³); $\{RR\}_{Li}$ is the rate of the Li⁶(n,H³) reaction per one Li6 atom. The initial number of beryllium atoms in the block $N_{Be0}=1.23 \cdot 10^{23}$ at/cm³.

The reaction rates $\{RR\}_x$ of Be(n,α) and Li⁶(n, H³) per one atom of Be and Li⁶, respectively, were calculated using the MCNP⁶ code and the ENDF/B-VII.1 neutron cross-section library [21]. The MCNP model was built according to the real size of the reactor core with fuel assemblies and structural components. The MCNP input file included 500 cycles consisting of 450 active and 50 inactive cycles with 200,000 histories per cycle. The reaction rate values were normalized to the calculated k_{eff} value and compared with the steady-state power level of the critical system in units of fission neutrons per unit time, which allows us to move from the reaction rate to the neutron flux density. For the WWR-K reactor, for which the nominal power is 6 MW, the scaling factor is:

$$6 \cdot 10^6 MW \cdot 3.467 \cdot 10^{10} \frac{\text{fission}}{s} \cdot 2.457 \frac{\text{neutron}}{\text{fission}} \cdot 0.92 = 4.70 \cdot 10^{17} \frac{\text{neutron}}{s},$$

where 0.92 is the fraction of thermal power due to neutrons.

Figure 6 shows the calculated values of Li⁶(n, H³), (1/(cm³s)) reaction rate in beryllium for the outer ring of blocks in the WWR-K reactor core. Calculations showed that the rate of tritium release into the cooling water from all beryllium blocks during reactor operation at nominal power is about ~10-14 mol/s. As can be seen, the tritium flux values determined by the proposed calculation method are quite noticeable and, in general, should be taken into account when operating research nuclear reactors containing beryllium elements in the core design.

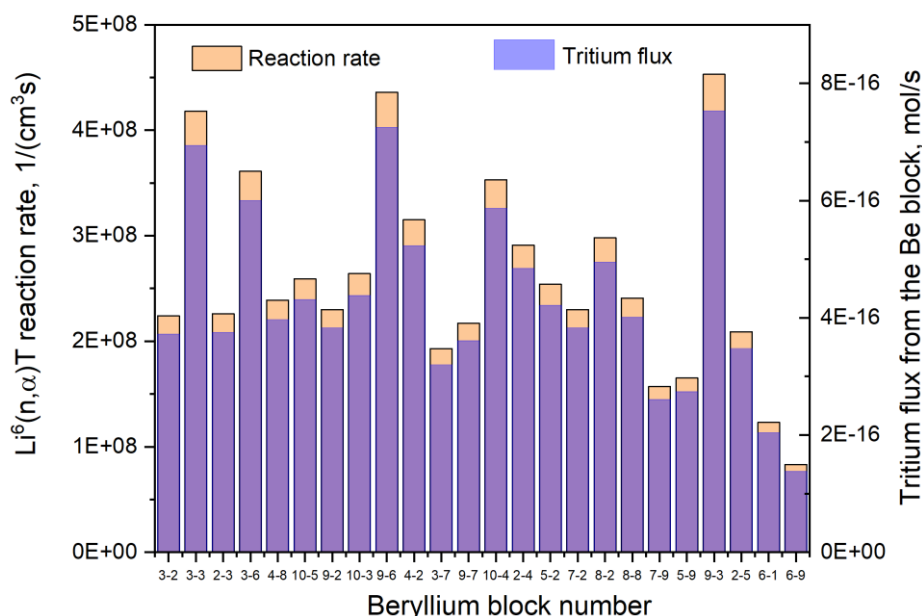


Figure 6. Li⁶(n,α)t reaction rates and tritium flux from the beryllium block of the WWR-K reactor

Conclusion

Thus, as a result of the studies of non-activation release of tritium from the surface layer of beryllium under neutron irradiation, a method for calculating the tritium flux from the surface was obtained, which was confirmed in the irradiation experiments with lithium ceramics.

The results of the calculated estimates and experimental values for the amount of tritium released from the lithium ceramic samples reasonably coincided (in order of magnitude). It was shown that the tritium flux from the samples is proportional to the degree of enrichment in lithium-6, and this proportionality is fairly well observed for various ceramic samples. The observed discrepancy between the calculated data and the experiment is due to the research methodology and a simplified calculation scheme that does not take into account the actual geometry of the experiment.

Further, according to the proposed methodology, calculations were made for the non-activation release of tritium from the beryllium rods of the WWR-K reactor. Calculations showed that the rate of tritium release into the cooling water from all beryllium blocks during reactor operation at nominal power is about $\sim 10\text{-}14$ mol/s.

The obtained results can be used for a qualitative assessment of the tritium safety of nuclear research reactors containing beryllium elements in the reactor core design.

Acknowledgments

The research has been funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan with Program number BR21881930.

The contribution of the authors

Kulsartov T.V. – formulated the main research concept, coordinated the design of the study, and supervised the overall scientific direction of the work. He also took part in the critical revision of the manuscript and the approval of the final version.

Temirzhanov A.A. – corresponding author, carried out data acquisition, processing, and preliminary analysis. He was responsible for organizing communication among the co-authors and ensuring the integrity of the data.

Zhanna Zaurbekova – performed experimental measurements and took part in processing and interpretation of the obtained results. Contributed to drafting selected sections of the article and critically reviewing the text.

Asset Shaimerdenov – provided methodological guidance, contributed to the design of the experimental setup, and ensured the correct interpretation of the results in the context of current research in the field.

Saulet Askerbekov – participated in the collection of experimental data, contributed to the optimization of measurement techniques, and assisted in refining the discussion section of the manuscript.

Pavel Kharkin – supervised laboratory resources and instrumentation, ensured the proper functioning of equipment during the experimental campaign, and contributed to the approval of the final version of the manuscript.

Olga Milts – carried out technical support of the experiments, participated in the calibration and control of measurement systems, and contributed to preparing figures and tables for the article.

Darkhan Sairanbayev – contributed to theoretical analysis and interpretation of the obtained spectra, took part in comparison with model calculations, and revised the discussion and conclusion sections.

Inesh Kenzhina – participated in the statistical analysis of the data, contributed to the validation of the results, and critically reviewed the manuscript for consistency and scientific soundness.

Timur Zholdybayev – provided scientific expertise in nuclear reaction mechanisms, contributed to the interpretation of the results within the framework of existing theoretical models, and revised the article with respect to its conceptual and methodological accuracy.

References

Krivitskiy, P.Ye., et al. Peculiarities of radioactive soil contamination in places of underground nuclear tests in the Semipalatinsk test site, *Journal of Environmental Radioactivity*, 253-254, 106991, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2022.106991>.

Kunduzbayeva, A.Ye., et al. Speciation of ¹³⁷Cs, ⁹⁰Sr, ²⁴¹Am, and ²³⁹⁺²⁴⁰Pu artificial radionuclides in soils at the Semipalatinsk test site, *Journal of Environmental Radioactivity* 249, 106867, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2022.106867>

Turchenko, D.V., et al. Identification of tritium-contaminated areas using a tritium survey on the snow cover, the case of Semipalatinsk test site, *Journal of Environmental Radioactivity* 278, 107487, (2024). <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2024.107487>

Larionova, Natalya, et al. Artificial radionuclides in the plant cover around nuclear fuel cycle facilities, *PLoS ONE* 19(7) 0306531, (2024). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0306531>.

Aktayev, Medet, et al. Characterization of geological and lithological features in the area proximal to tritium-contaminated groundwater at the Semipalatinsk test site, *PLoS ONE* 19(3), e0300971, (2024). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0300971>.

Ponkratov, Yuriy, et al. "Technique of reactor experiments of tin-lithium alloy interaction with hydrogen isotopes under neutron irradiation conditions, *Fusion Science and Technology* 81.4, 300-309 (2025). <https://doi.org/10.1080/15361055.2024.2388421>

Tazhibayeva, Irina, et al. Study of liquid tin-lithium alloy interaction with structural materials of fusion reactor at high temperatures, *Nuclear Materials and Energy* 30, 101152, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.nme.2022.101152>

Lyublinski, I.E., et al. Stationary Operated Lithium In-Vessel Elements of a Tokamak, *Physics of Atomic Nuclei* 84(7) 1-7, (2021). <https://doi.org/10.1134/S1063778821070085>

Tazhibayeva, I., et al. Study of properties of tungsten irradiated in hydrogen atmosphere, *Nuclear Fusion* 57(12), 126062, (2017). <https://doi.org/10.1088/1741-4326/aa7911>

Ponkratov, Yu., et al. Application of high energy tritium ions and α -particles formed in ⁶Li(n, α)T nuclear reaction to excite the luminescence of inert gas mixtures, *Fusion Science and Technology* 77(4), 327 – 332, (2021). <https://doi.org/10.1080/15361055.2021.1887714>

Kulsartov, T. V., et al. Tritium migration in the materials proposed for fusion reactors: Li₂TiO₃ and beryllium, *Journal of Nuclear Materials* 442(1-3), S740-S745, (2013). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.03.036>

Chekushina, L., et al. Properties of tritium/helium release from hot isostatic pressed beryllium of various trademarks, Journal of Nuclear Materials 452(1-3), 41–45(2014). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.04.031>

Chakin, V., et al. Tritium release and retention in beryllium and titanium beryllide after neutron irradiation up to damage doses of 23-38 dpa, Fusion Engineering and Design, 161, 111938, (2020). <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2020.1119>

Vitiš, A., et al. Tritium Release Characteristics of Neutron-Irradiated Reference Beryllium Pebbles for the Helium Cooled Pebble Bed (HCPB) Blanket, Fusion Science and Technology 60(3) 1143–1146, (2011). <https://doi.org/10.13182/fst11-a12617>

Marion, J. B.; et al. Elastic and Nonelastic Neutron Cross Sections for Beryllium, Physical Review 114(6), 1584–1589, (1959). <https://doi.org/10.1103/physrev.114.1584>

Stelson, P. H., & Campbell, E. C. Cross Section for the $\text{Be}^9(n,\alpha)\text{He}^6$ Reaction, Physical Review 106(6), 1252–1255, (1957). <https://doi.org/10.1103/physrev.106.1252>

Battat, M. E., & Ribe, F. L. Formation of He^6 by 14-Mev Neutron Bombardment of Li and Be, Physical Review 89(1), 80–83, (1953). <https://doi.org/10.1103/physrev.89.80>

Bethe, H. A., and J. Ashkin. Experimental Nuclear Physics, (SEGRÉ, E., Ed.) John Wiley and Sons, Inc., New York 1, 222, (1953).

Tarasov, O. B., and D. Bazin. LISE++: Exotic beam production with fragment separators and their design, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 376, 185–187, (2016).

Vagner, Irina, et al. Organically Bound Tritium Activity Level in Plants During Growing Season and Environmental Factor Influences, Fusion Science and Technology 80.3-4, 285–290, (2024).

D.A. Brown, et al., ENDF/B-VII.1 nuclear Data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay Data, Nucl. Data Sheets, 112, 2887–2996, (2011).

**Т. Кульсартов^{1,2}, Ә. Теміржанов^{1,3*}, Ж. Заурбекова^{1,2}, Ә. Шаймерденов¹, С. Әскербеков^{1,2},
П. Харкин¹, О. Мильц¹, Д. Сайранбаев¹, И. Кенжина^{1,2,3}, Т. Жолдыбаев¹**

¹Ядролық Физика Институты, Алматы, Қазақстан

²Эксперименталды және Теоретикалық Физика Институты, Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ,
Алматы, Қазақстан

³К.И.Сәтбаев атындағы ҚазҰТЗУ, Алматы, Қазақстан
(E-mail: alik-25.01.97@mail.ru)

Зерттеу ядролық реакторлардың құрамында бериллий бар материалдарынан тритийдің активтенбейтін бөліну процестерін эксперименттік зерттеулер және есептеу.

Андатпа. Зерттеу реакторларындағы бериллий рефлекторлары тритийдің белгілі көздерінің бірі болып табылады, бұл оның бөлінуіне байланысты қауіпсіздік мәселелерін туындатады. Тритийдің айтарлықтай бөлінуі әдетте жоғары температураларда (>700 °C) диффузия есебінен жүреді, алайда шамамен 50 °C температурада да өлшенетін мөлшердегі тритий тіркелген, бұл құбылысты диффузиялық механизммен түсіндіру мүмкін емес. Осыған байланысты белсендірусіз

бөліну процесі қарастырылады, мұнда бериллийдің беткі қабатында түзілген тритий ядролары материалдан тікелей жоғары энергиялы иондар түрінде шығады.

Бұл процесті сандық тұрғыдан бағалау үшін есептеу үлгісі жасалды. МэВ энергиялы тритий иондарының қатты денелердегі жүру ұзындығы бірнеше ондаған микрометрмен шектеледі, бұл олардың бөлінуінің тиімді беткі аймағын анықтайды. Геометриялық талдау сәулелену кезінде беттен бөлінетін тритий иондарының санын анықтауға мүмкіндік берді. Үлгіні тексеру үшін табиғи және ${}^6\text{Li}$ бойынша 96% байытылған литий метатитанаты (Li_2TiO_3) шариктері ВВР-К реакторында $\sim 50^\circ\text{C}$ температурада 516 сағат бойы сәулелендірілді. Үлгілер 100 мкм алюминий фольгасына оралды, ол тритий коллекторы ретінде қызмет етті. Сәулеленуден кейін фольгалар ерітіліп, тритий мөлшері сұйық сцинтилляциялық спектрометрия әдісімен анықталды.

Есептік тритий шығымы 1017–1018 атомдар шамасында болып, тәжірибелік нәтижелермен жақсы сәйкес келді. Табиғи құрамды Li_2TiO_3 үшін есеппен $3,35 \cdot 10^{17}$ атом болжанды, ал өлшенгені $(2,0 \pm 0,4) \cdot 10^{17}$ болды; ал ${}^6\text{Li}$ -мен байытылған Li_2TiO_3 үшін тиісінше $2,14 \cdot 10^{18}$ және $(1,1 \pm 0,2) \cdot 10^{18}$ атом алынды. Тәжірибелік мәндердің төмендеуі тритийдің фольгада толық ұсталып қалмауымен және үлгілеудегі қарапайымдандырулармен, атап айтқанда түйіршіктердің сәулелену кезіндегі өздігінен көлеңкеленуін есепке алмаумен түсіндіріледі.

Алынған нәтижелер литийқұрамды керамикалардан тритийдің белсендірісін бөлінуінің бар екенін растайды және ұсынылған үлгінің бериллий компоненттері бар реакторлардың радиациялық қауіпсіздігін бағалауға қолдануға болатын сенімді бағалар беретінін көрсетеді.

Түйін сөздер: литий керамикасы, нейтронды сәулелену, тритий, гелий, MCNP6.

Т. Кульсартов^{1,2}, А. Темиржанов^{1,3*}, Ж. Заурбекова^{1,2}, А. Шаймерденов¹, С. Аскербекөв^{1,2},
П. Харкин¹, О. Мильц¹, Д. Сайранбаев¹, И. Кенжина^{1,2,3}, Т. Жолдыбаев¹

¹Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

²Институт экспериментальной и теоретической физики, КазНУ им. аль-Фараби,
Алматы, Казахстан

³КазНИТУ им. К. Сатпаева, Алматы, Казахстан
(E-mail: alik-25.01.97@mail.ru)

Расчетно-экспериментальные исследования процессов без активационного выделения трития из бериллийсодержащих материалов исследовательских ядерных реакторов

Аннотация. Бериллиевые отражатели в исследовательских реакторах являются известными источниками трития, что вызывает опасения в связи с его возможным высвобождением. Хотя значительное газовыделение наблюдается при повышенных температурах ($>700^\circ\text{C}$) за счёт диффузии, измеримые количества трития фиксировались и при $\sim 50^\circ\text{C}$, что не может быть объяснено данным механизмом. В связи с этим рассматривается процесс безактивационного выделения, при котором ядра трития, образующиеся в приповерхностном слое бериллия, напрямую покидают материал в виде высокоэнергетических ионов.

Для количественной оценки этого процесса была разработана вычислительная модель. Длина пробега ионов трития с энергиями порядка МэВ в твёрдых телах ограничена несколькими

десятками микрометров, что определяет эффективную область приповерхностного выделения. Геометрический анализ позволил вывести выражение для числа ионов трития, покидающих поверхность в условиях облучения. Для проверки модели использовались образцы метатитаната лития (Li_2TiO_3) с естественным и 96% обогащением по ^6Li , облучённые в реакторе ВВР-К при температуре $\sim 50^\circ\text{C}$ в течение 516 часов. Образцы были обёрнуты алюминиевой фольгой толщиной 100 мкм, служившей коллектором трития, который затем определялся методом жидкостной сцинтилляционной спектрометрии после растворения фольг.

Расчётные выходы трития составили порядок 10^{17} - 10^{18} атомов и хорошо согласовались с экспериментальными данными. Для Li_2TiO_3 с природным изотопным составом было предсказано $3,35 \cdot 10^{17}$ атомов против $(2,0 \pm 0,4) \cdot 10^{17}$ измеренных, а для обогащённого по ^6Li Li_2TiO_3 – $2,14 \cdot 10^{18}$ против $(1,1 \pm 0,2) \cdot 10^{18}$. Заниженные экспериментальные значения объясняются неполным удержанием трития в фольге и упрощениями модели, в частности, отсутствием учёта самозащиты гранул при облучении.

Полученные результаты подтверждают существование безактивационного выделения трития из литийсодержащих керамик и демонстрируют, что предложенная модель обеспечивает достоверные оценки, применимые для анализа радиационной безопасности реакторов с бериллиевыми компонентами.

Ключевые слова: литиевая керамика, нейтронное облучение, тритий, гелий, MCNP6.

References

- Krivitskiy, P.Ye., et al. Peculiarities of radioactive soil contamination in places of underground nuclear tests in the Semipalatinsk test site, *Journal of Environmental Radioactivity*, 253-254, 106991, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2022.106991>.
- Kunduzbayeva, A.Ye., et al. Speciation of ^{137}Cs , ^{90}Sr , ^{241}Am , and $^{239+240}\text{Pu}$ artificial radionuclides in soils at the Semipalatinsk test site, *Journal of Environmental Radioactivity* 249, 106867, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2022.106867>
- Turchenko, D.V., et al. Identification of tritium-contaminated areas using a tritium survey on the snow cover, the case of Semipalatinsk test site, *Journal of Environmental Radioactivity* 278, 107487, (2024). <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2024.107487>
- Larionova, Natalya, et al. Artificial radionuclides in the plant cover around nuclear fuel cycle facilities, *PLoS ONE* 19(7) 0306531, (2024). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0306531>.
- Aktayev, Medet, et al. Characterization of geological and lithological features in the area proximal to tritium-contaminated groundwater at the Semipalatinsk test site, *PLoS ONE* 19(3), e0300971, (2024). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0300971>.
- Ponkratov, Yuriy, et al. "Technique of reactor experiments of tin-lithium alloy interaction with hydrogen isotopes under neutron irradiation conditions, *Fusion Science and Technology* 81.4, 300-309 (2025). <https://doi.org/10.1080/15361055.2024.2388421>
- Tazhibayeva, Irina, et al. Study of liquid tin-lithium alloy interaction with structural materials of fusion reactor at high temperatures, *Nuclear Materials and Energy* 30, 101152, (2022). <https://doi.org/10.1016/j.nme.2022.101152>
- Lyublinski, I.E., et al. Stationary Operated Lithium In-Vessel Elements of a Tokamak, *Physics of Atomic Nuclei* 84(7) 1-7, (2021). <https://doi.org/10.1134/S1063778821070085>

Tazhibayeva, I., et al. Study of properties of tungsten irradiated in hydrogen atmosphere, Nuclear Fusion 57(12), 126062, (2017). <https://doi.org/10.1088/1741-4326/aa7911>

Ponkratov, Yu., et al. Application of high energy tritium ions and α -particles formed in $6\text{Li}(n,\alpha)\text{T}$ nuclear reaction to excite the luminescence of inert gas mixtures, Fusion Science and Technology 77(4), 327 – 332, (2021). <https://doi.org/10.1080/15361055.2021.1887714>

Kulsartov, T. V., et al. Tritium migration in the materials proposed for fusion reactors: Li_2TiO_3 and beryllium, Journal of Nuclear Materials 442(1-3), S740-S745, (2013). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.03.036>

Chekushina, L., et al. Properties of tritium/helium release from hot isostatic pressed beryllium of various trademarks, Journal of Nuclear Materials 452(1-3), 41–45(2014). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.04.031>

Chakin, V., et al. Tritium release and retention in beryllium and titanium beryllide after neutron irradiation up to damage doses of 23-38 dpa, Fusion Engineering and Design, 161, 111938, (2020). <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2020.1119>

Vitiņš, A., et al. Tritium Release Characteristics of Neutron-Irradiated Reference Beryllium Pebbles for the Helium Cooled Pebble Bed (HCPB) Blanket, Fusion Science and Technology 60(3) 1143–1146, (2011). <https://doi.org/10.13182/fst11-a12617>

Marion, J. B.; et al. Elastic and Nonelastic Neutron Cross Sections for Beryllium, Physical Review 114(6), 1584–1589, (1959). <https://doi.org/10.1103/physrev.114.1584>

Stelson, P. H., & Campbell, E. C. Cross Section for the $\text{Be}^9(n,\alpha)\text{He}^6$ Reaction, Physical Review 106(6), 1252–1255, (1957). <https://doi.org/10.1103/physrev.106.1252>

Battat, M. E., & Ribe, F. L. Formation of He^6 by 14-Mev Neutron Bombardment of Li and Be, Physical Review 89(1), 80–83, (1953). <https://doi.org/10.1103/physrev.89.80>

Bethe, H. A., and J. Ashkin. Experimental Nuclear Physics, (SEGRÉ, E., Ed.) John Wiley and Sons, Inc., New York 1, 222, (1953).

Tarasov, O. B., and D. Bazin. LISE++: Exotic beam production with fragment separators and their design, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 376, 185-187, (2016).

Vagner, Irina, et al. Organically Bound Tritium Activity Level in Plants During Growing Season and Environmental Factor Influences, Fusion Science and Technology 80.3-4, 285-290, (2024).

D.A. Brown, et al., ENDF/B-VII.1 nuclear Data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay Data, Nucl. Data Sheets, 112, 2887–2996, (2011).

Information about the authors:

Kulsartov T.V. – first author, candidate of physical and mathematical science, leading researcher, Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Temirzhanov A.A. – corresponding author, Master of Technology, junior researcher at Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Zaurbekova Zh. – PhD, researcher at Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Shaimerdenov A. – PhD, head of laboratory, Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Askerbekov S. – PhD, senior researcher, Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Kharkin P. – head of laboratory, Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Milts O. – leading specialist, Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Sairanbayev D. – PhD, senior researcher, Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Kenzhina I. – PhD, associate professor, senior researcher, Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov str., 050032, Almaty, Kazakhstan

Zholdybayev T. – leading Researcher of RSE Institute of Nuclear Physics, PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor

Кульсарттов Т.В. – бірінші автор, физика-математика ғылымдарының кандидаты, Ядролық физика институтының жетекші ғылыми қызметкері, Ибрагимов к-сі, 1, 050032, Алматы, Қазақстан

Теміржанов Ә.Ә. – хатшы автор, технологиялық ғылымдар магистрі, РМК «Ядролық физика институты» ядролық процестер зертханасының кіші ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан.

Жанна Заурбекова Ж. – PhD, Ядролық физика институтының ғылыми қызметкері, 050032, Ибрагимов к-сі, 1, Алматы, Қазақстан

Шаймерденов Ә. – PhD, Ядролық физика институтының зертхана меңгерушісі, 050032, Ибрагимов к-сі, 1, Алматы, Қазақстан

Әскербеков С. – PhD, Ядролық физика институтының аға ғылыми қызметкері, 050032, Ибрагимов к-сі, 1, Алматы, Қазақстан

Харикин П. – Ядролық физика институтында зертхана меңгерушісі, 050032, Ибрагимов к-сі, 1, Алматы, Қазақстан

Митц О. – Ядролық физика институтының жетекші маманы, 050032, Ибрагимов к-сі, 1, Алматы қ., Қазақстан

Сайранбаев Д. – PhD, Ядролық физика институтының аға ғылыми қызметкері, 050032, Ибрагимов к-сі, 1, Алматы, Қазақстан

Кенжина И. – PhD, Ядролық физика институтының аға ғылыми қызметкері, 050032, Ибрагимов к-сі, 1, Алматы, Қазақстан

Жолдыбаев Т. – РМК Ядролық физика институтының жетекші ғылыми қызметкері, физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор

Кульсарттов Т.В. – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Темиржанов А.А. – автор-корреспондент, магистр технических наук, младший научный сотрудник Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Заурбекова Ж. – PhD, научный сотрудник Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Шаймерденов А. – PhD, заведующий лабораторией Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Аскербек С. – PhD, старший научный сотрудник Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Харькин П. – заведующий лабораторией Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Мильц О. – ведущий специалист Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Сайранбаев Д. – PhD, старший научный сотрудник Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Кенжина И. – PhD, ассоциированный профессор, старший научный сотрудник Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Жолдыбаев Т. – кандидат физико-математических наук, ассоциированный профессор, ведущий научный сотрудник Института ядерной физики, ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан



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/>).



МРНТИ 29.19.03

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-131-142>

Научная статья

Оптические и люминесцентные свойства монокристаллов YAG:Ce, облученных ионами Xe^{132} с энергией 231 МэВ

Г. Турсумбаева^{1*}, Г. Баубекова¹, Ж. Карипбаев¹, Р. Асылбаев², А. Кисабекова²,
А.Т. Акилбеков¹

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

²Высшая школа естествознания, Университет Маргулан, Павлодар, Казахстан

(E-mail: gptursumbayeva@gmail.com)

Аннотация. В работе изучено влияние облучения ионами ксенона (230 МэВ) на оптическое и люминесцентные свойства кристаллов $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$ (YAG:Ce). Облучение индуцирует дефекты Френкеля (F, F⁺), антиузловые нарушения способствуют подавлению эмиссии ионов Ce^{3+} из-за усиления нерадиационных механизмов и перехода Ce^{3+} в Ce^{4+} . Установлено, что повышение флюенса приводит к снижению интенсивности свечения Ce^{3+} , что связано с образованием дефектов решетки, включая кислородные вакансии и антиструктурные дефекты. Также наблюдаются изменения валентного состояния церия ($\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$). Облучение ионами Xe^{132} (E=230 МэВ) при флюенсах от 1011 до 1014 ион/см² вызывает появление дефектов Френкеля (F, F⁺) и антиузловых нарушений, что ослабляет эмиссию Ce^{3+} за счет активации нерадиационных процессов и перезарядки $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$. В спектрах возбуждения фиксируется подавление экситонных пиков и сдвиг порога возбуждения, обусловленные ростом структурного беспорядка в кристаллической решетке. Эти результаты подчеркивают значение изучения радиационных эффектов для оптимизации свойств YAG:Ce в практических приложениях. Полученные данные раскрывают механизмы радиационно-индуцированных изменений в YAG:Ce, что важно для его использования в радиационно-устойчивых сцинтилляционных детекторах.
Ключевые слова: иттрий-алюминиевый гранат, быстрые тяжелые ионы, люминесцентные свойства, спектры люминесценции и возбуждения, радиационные дефекты.

Введение

Монокристаллы YAG:Ce находят широкое применение благодаря своим уникальным оптическим и люминесцентным свойствам, включая высокий квантовый выход, термическую и радиационную стойкость, а также широкий спектр излучения в видимой

Поступила 02.09.2025. После доработки 07.09.2025. Принята к печати 07.09.2025. Доступна онлайн 30.09.2025.

^{1*}автор для корреспонденции

области. Эти характеристики делают данный материал незаменимым для целого ряда высокотехнологичных приложений [1].

Одной из ключевых областей применения YAG:Ce является его использование в качестве люминофора в современных белых светодиодах (LED), которые играют важнейшую роль в энергосберегающем освещении и дисплейных технологиях. Высокая эффективность преобразования синего света в широкий спектр видимого излучения обеспечивает яркое и стабильное свечение, что делает YAG:Ce стандартом для индустрии светодиодов [2-4].

Кроме того, YAG:Ce широко используется в качестве сцинтилляционного материала в медицинской диагностике (например, позитронно-эмиссионной томографии) и системах радиационного мониторинга. Его высокая световая отдача и устойчивость к радиационным повреждениям обеспечивают надежную регистрацию рентгеновского и гамма-излучения, что имеет важное значение как для здравоохранения, так и для ядерной безопасности. Стабильность и радиационная стойкость YAG:Ce делают его перспективным материалом для применения в условиях экстремальных воздействий, таких, как космическое пространство и высокоэнергетическая физика. В этих областях изучение радиационно-индуцированных изменений в структуре и свойствах материала является важным шагом для разработки компонентов, способных эффективно функционировать в экстремальных средах [5-10].

Таким образом, исследование радиационных процессов в YAG:Ce имеет как фундаментальное, так и прикладное значение, позволяя не только понять механизмы дефектообразования.

Методы и материалы

В рамках данной работы изучались монокристаллы YAG:Ce, выращенные по методу Чохральского. Концентрация легирующей примеси Ce^{3+} в образцах составляла 0,5 процентных атомных долей. Для исследований использовались образцы, приобретенные у компании Alineason, размером $5 \times 5 \times 0,5 \text{ мм}^3$.

Монокристаллы YAG:Ce подвергались облучению высокоэнергетическими ионами ксенона ^{132}Xe с энергией 230 МэВ в диапазоне флюенсов от 10^{11} до 10^{14} ион/см². Облучение проводилось на циклотроне DC-60, расположенном в г. Астане (Казахстан).

Измерение спектров оптического поглощения образцов проводилось на двухлучевом спектрофотометре – T8DCS.

Измерение спектров фотolumинесценции (ФЛ) и возбуждения для образцов YAG:Ce не облученного и предварительно облученных ионами ^{132}Xe до флюенсов: 10^{11} - 10^{14} были измерены на универсальном спектрофлуориметре CM2203 Солар. Диапазон длин волн от 220 до 920 нм.

Результаты и Обсуждение

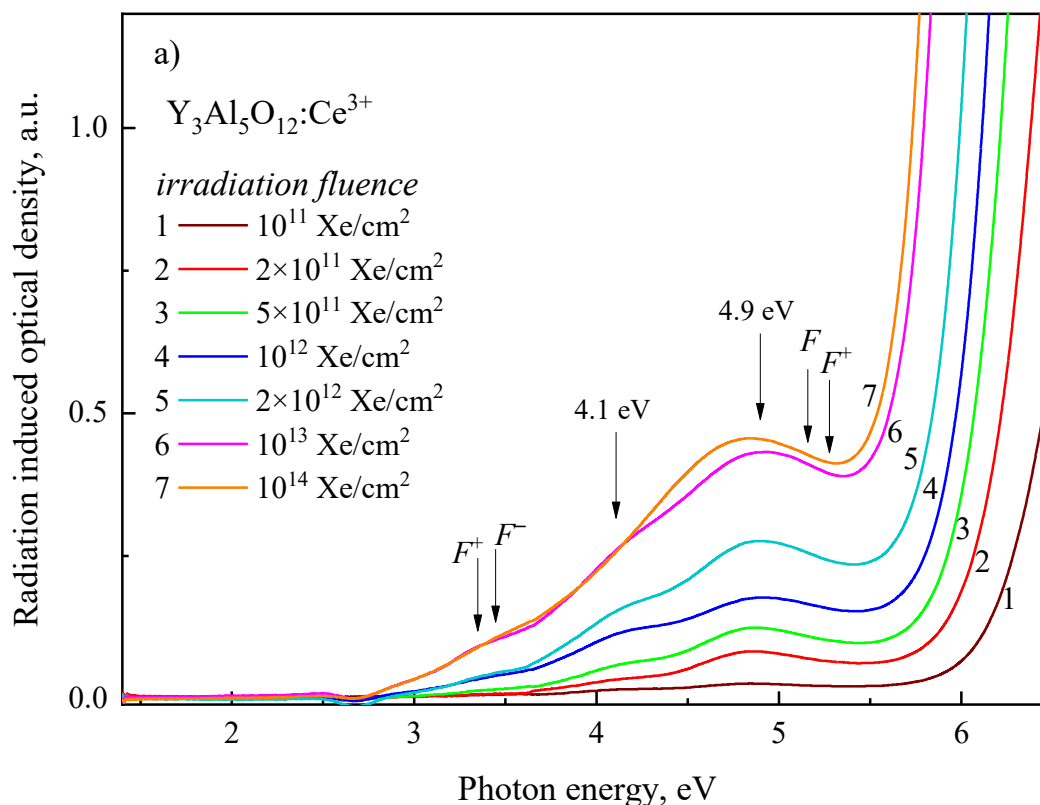
На рисунке 1а представлены спектры радиационно-индуцированного оптического поглощения монокристаллов YAG:Ce, облученных ионами Xe^{132} в интервале флюенсов

10^{11} - 10^{14} ион/см². Общий характер спектров демонстрирует рост радиационно-индуцированного оптического поглощения с увеличением дозы облучения. Радиационные дефекты как в чистых YAG, так и легированных проявляются в виде кислородных вакансий как нейтральных, так и заряженных. Кислородная вакансия, захватившая два электрона называется F⁻ центром (поглощение около 6.35), кислородная вакансия с одним захваченным электроном называется F⁺-центром (поглощение около 5.27 и 3.35 эВ) [11].

В матрице YAG ионы Ce³⁺ замещают ионы Y³⁺ в позициях D₂ симметрии, в результате 5d возбужденное состояние Ce³⁺ расщепляется на 5 подуровней. Согласно литературным данным [12] полосы около 5.46, 3.65, и 2.70 эВ соответствуют переходам 4f¹ → 5d¹ в Ce³⁺ (рисунок 1б, кривая 4).

Из разностных (рисунок 1б) спектров РИОА можно выделить несколько заметных доминантных полос поглощения при 3.35, 4.1 и 4.9 эВ. Поглощение около 3.35 эВ, очевидно, связано с F⁺ центрами, тогда как полосы при 4.1 и 4.9 эВ, согласно [13], могут быть связаны с поглощением F⁺ центров около YAl³⁺ антисайт дефектов и Fe²⁺ центров, соответственно. На максимальном флюенсе можно заметить смещение полосы 4.9 эВ. Образование F⁻ центров маловероятно, т.к. их термическая стабильность низка. Данные центры нестабильны уже при температуре 175 К и при комнатной температуре этих центров не существует [14].

На рисунке 1с представлены кривые зависимости радиационно-индуцированного оптического поглощения для разных значений энергии фотона от флюенса облучения. Как мы можем видеть, с ростом флюенса облучения все указанные полосы имеют заметный рост.



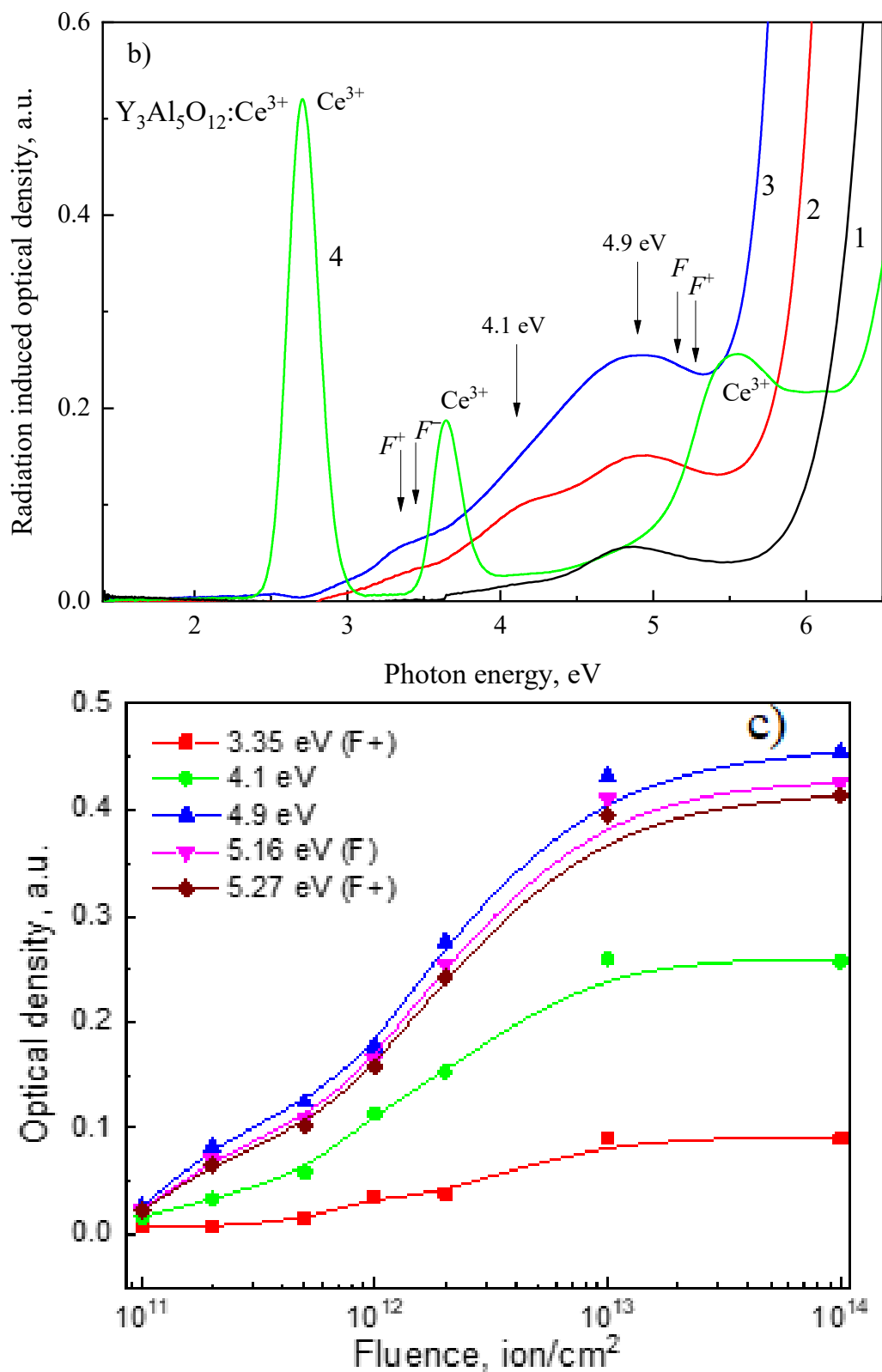
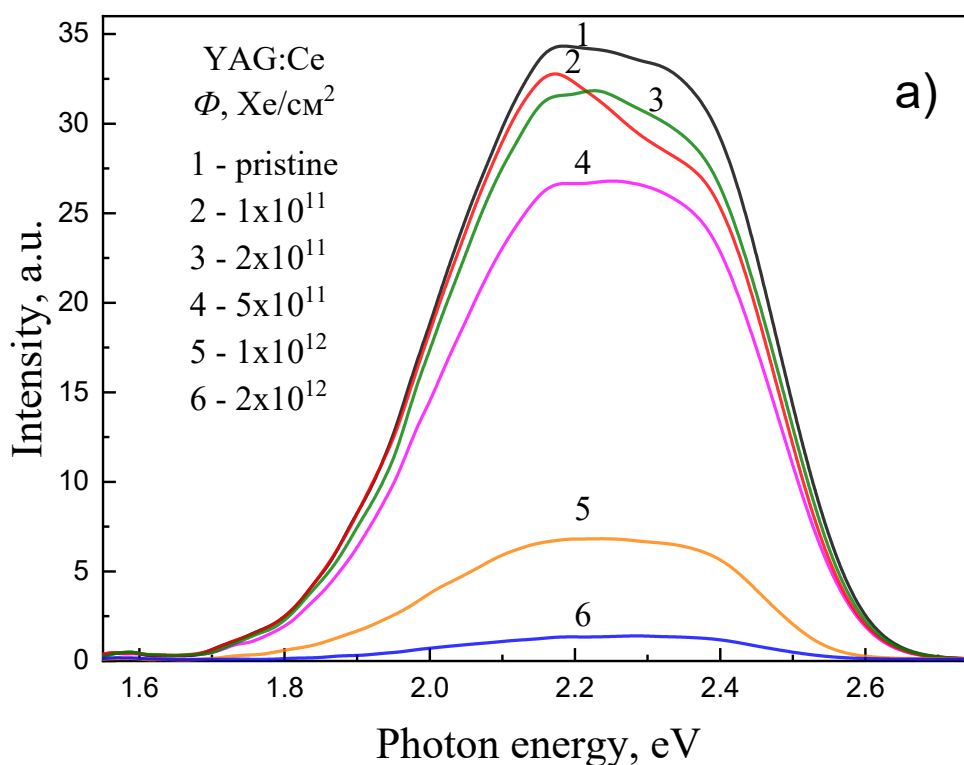


Рисунок 1. а) Спектры RIOA монокристаллов YAG:Ce, облученных ионами ксенона с энергией 230 МэВ, до различных флюенсов ионов; б) Разность спектров оптического

поглощения между облучением до соответствующих флюенсов: ($10^{11} \rightarrow 2 \times 10^{11}$) $\text{Xe}/\text{см}^2$ (кривая 1), ($10^{11} \rightarrow 10^{12}$) $\text{Xe}/\text{см}^2$ (кривая 2), ($10^{12} \rightarrow 10^{13}$) $\text{Xe}/\text{см}^2$ (кривая 3) и оптическое поглощение, связанное с ионами Ce (кривая 4); с) Зависимости радиационно-индуцированного оптического поглощения для разных значений энергии фотона от флюенса облучения

На рисунке 2 представлены спектры фотолюминесценции монокристаллов YAG:Ce, подвергнутых облучению ионами ^{132}Xe в интервале флюенсов от 10^{11} до 10^{12} $\text{Xe}/\text{см}^2$. Спектры получены при возбуждении фотонами с энергией фотона $\approx 3,65$ эВ, а эмиссия регистрировалась в диапазоне 1,55-2,75 эВ. Спектры были измерены в одинаковых условиях по интенсивности для наглядного сравнения. Во всех случаях максимум люминесценции наблюдается в области около 1,8-2,5 эВ, что соответствует переходу $5d \rightarrow 4f$ ионов Ce^{3+} , характерному для кристаллов YAG. Фотолюминесцентные исследования кристаллов YAG:Ce после облучения ионами ксенона показали существенное снижение световыхыхода с увеличением флюенса.



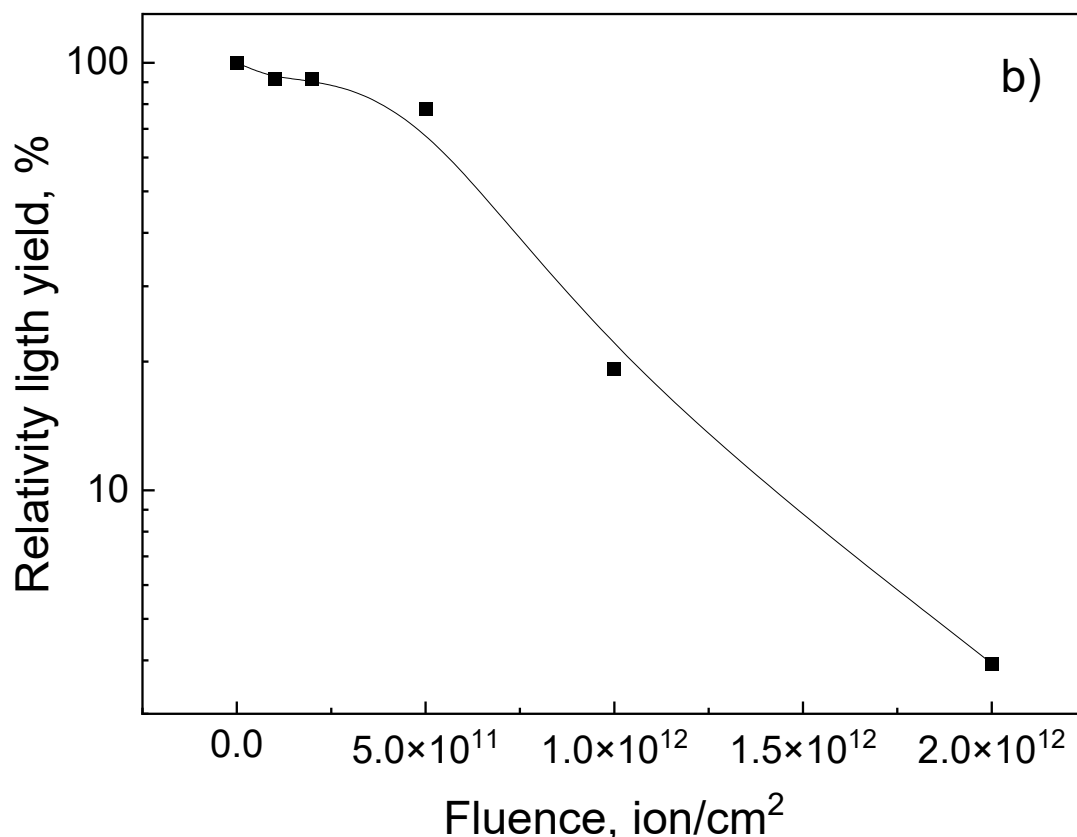


Рисунок 2. а) Спектр фотолюминесценции монокристаллов YAG:Ce, подвергнутых облучению ионами ^{132}Xe в интервале флюенсов: $10^{11}\text{Xe}/\text{см}^2$, $2 \times 10^{11}\text{Xe}/\text{см}^2$, $5 \times 10^{11}\text{Xe}/\text{см}^2$, $10^{12}\text{Xe}/\text{см}^2$, $2 \times 10^{12}\text{Xe}/\text{см}^2$; б) Сравнение изменения световыходы фотолюминесценции в зависимости от флюенса облучения

Интенсивность люминесценции оценивалась интегралом под спектрами, при этом необлученный образец принят за 100 %. На низких дозах до $\sim 5 \times 10^{11} \text{Xe}/\text{см}^2$ наблюдается лишь незначительное падение световыхода, что указывает на начальную стадию формирования радиационно-индуцированных дефектов без существенной деградации активных центров Ce^{3+} . Однако при дальнейшем увеличении флюенса до $10^{12} \text{Xe}/\text{см}^2$ световыход резко снижается, что связано с накоплением плотных областей аморфизации, перекрывающих зоны рекомбинации и увеличивающих вероятность безызлучательных процессов релаксации. При максимальном флюенсе $2 \times 10^{12} \text{Xe}/\text{см}^2$ световыход люминесценции падает почти 2%, что свидетельствует о деградации кристаллической матрицы и люминесценции Ce^{3+} -центров. Полученные результаты демонстрируют прямую зависимость световыхода от плотности ионных треков и подтверждают доминирование радиационных дефектов как основных центров тушения люминесценции в YAG:Ce при ионном облучении. Полученные данные указывают на существование порогового значения флюенса, превышение которого вызывает существенную деградацию фотолюминесцентных свойств YAG:Ce.

На рисунке 3 представлены спектры фотолюминесцентного возбуждения кристаллов YAG:Ce, облученных тяжелыми ионами ^{132}Xe с энергией 230 МэВ в диапазоне флюенсов от 10^{11} до 10^{12} Xe/cm^2 . Для сравнения также приведен спектр необлученного образца (черная кривая). Во всех спектрах отчетливо наблюдается основной люминесцентный пик в диапазоне 2,4-2,6 эВ, соответствующий разрешенному переходу $5d \rightarrow 4f$ ионов Ce^{3+} . Этот переход отвечает за характерное желтое свечение YAG:Ce и является основным индикатором состояния люминесцентных центров. С увеличением флюенса ионного облучения наблюдается выраженное снижение при максимальном флюенсе 10^{12} ион/ cm^2 , что свидетельствует о значительной деградации оптических свойств. Это связано с накоплением радиоционно-индуцированных дефектов в кристаллической решетке, таких, как вакансии, антисайт-дефекты и межузельные атомы, которые действуют как эффективные центры гашения. Вторичный пик в области 3,2-3,4 эВ, который может быть обусловлен переходами на дефектные уровни или возбужденными состояниями Ce^{3+} , также демонстрирует снижение интенсивности с ростом флюенса.

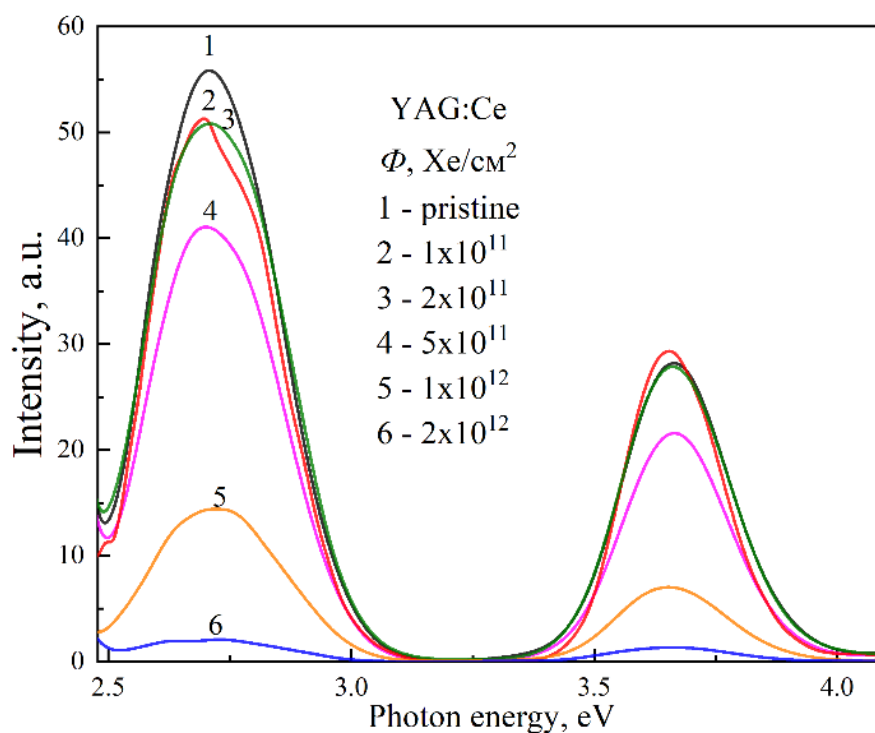


Рисунок 3. Спектры фотолюминесцентного возбуждения кристаллов YAG:Ce, измеренные при фиксированной длине волны эмиссии 550 нм (энергия 2,25 эВ), в диапазоне флюенсов: $10^{11} \text{Xe}/\text{cm}^2$, $2 \times 10^{11} \text{Xe}/\text{cm}^2$, $5 \times 10^{11} \text{Xe}/\text{cm}^2$, $10^{12} \text{Xe}/\text{cm}^2$, $2 \times 10^{12} \text{Xe}/\text{cm}^2$

При рассмотрении YAG:Ce как материала для оптоэлектронных или сцинтилляционных приложений необходимо учитывать его чувствительность к радиационным воздействиям, особенно при использовании в условиях жесткой радиационной среды (например, в космосе, ускорителях, ядерной медицине и т.д.).

Заключение

Проявления образования точечных дефектов решётки (центры F и F⁺, антиузловые дефекты Y_{Al}³⁺), а также процессов перезарядки примесных ионов (в частности, Ce³⁺ → Ce⁴⁺) были рассмотрены на основе спектров оптического поглощения кристаллов YAG, облучённых высокоэнергетичными ионами Хе при различных флюенсах. В силу относительно небольшой абсолютной концентрации дефектов Френкеля, индуцированных ионным облучением, требуется более детальный анализ их характеристик.

Облучение кристаллов YAG:Ce ионами Хе приводит к снижению интенсивности люминесценции с ростом флюенса. Особенно сильное подавление наблюдается при флюенсах $\geq 10^{12}$ ион/см², что связано с накоплением радиационных дефектов. Это указывает на чувствительность материала к высокоэнергетическому воздействию и важность учета порогового значения флюенса при практическом применении.

Благодарность

Данное исследование выполнено в рамках грантового проекта №AP19574768 «Экспериментальное и теоретическое исследование радиационной стойкости функциональных керамических и кристаллических материалов для космических применений и ядерной энергетики».

Вклад авторов

Турсумбаева Г. – написание текста и списка литературы, обработка экспериментальных данных.

Баубекова Г. – руководство по исследованию, утверждение окончательного варианта статьи для публикации.

Асылбаев Р. – внес вклад в концепцию статьи.

Карипбаев Ж. – проведение эксперимента, подготовка экспериментального оборудования, организация и контроль сбора данных во время всего эксперимента.

Кисабекова А., Акилбеков А.Т. – внесли вклад в оформление статьи.

Список литературы

Z. Song, et al, After-glow, luminescent thermal quenching, and energy band structure of Ce-doped yttrium aluminum-gallium garnets, Journal of Luminescence 192, p. 1278-1287 (2017), DOI:<https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2017.09.008>

V. Țucureanu and D.Munteanu, Enhanced optical properties of YAG:Ce yellow phosphor by modification with gold nanoparticles, Ceramics International 45. (6), p.7641-7648 (2019). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.01.061>

Y.X. Pan, et al, Correlation between structure variation and luminescence red shift in YAG: Ce, Journal of Alloys and Compounds 488(2), p.638-642 (2009). DOI:<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2009.04.082>

Y.C. Lin, Dynamic Local Structural Symmetries and Luminescence Properties of the Yellow Emitting Phosphor Ce³⁺-Doped Y₃Al₅O₁₂, MS thesis Chalmers Tekniska Hogskola (Sweden), p. 6-8 (2016).

- M.T. Lucchini, et al, Radiation tolerance of LuAG:Ce and YAG:Ce crystals under high levels of gamma- and proton-irradiation, IEEE Transactions on Nuclear Science 63 (2), p. 586-590 (2016). DOI:10.1109/TNS.2015.2493347
- M. Korzhik, Ce doped garnet structure crystalline scintillation materials for HEP instrumentation, Journal of Instrumentation 15 (08), p. C08001 (2020). DOI: 10.1088/1748-0221/15/08/C08001
- V. Dormenev, et al, Radiation tolerant YAG:Ce scintillation crystals grown under reducing Ar+CO atmosphere, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 1015, p. 165764 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2021.165764>
- A. Vaddigiri, et al, Ionizing radiation effects in single-crystal and polycrystalline YAG, IEEE transactions on nuclear science 53(6), p. 3882-3888 (2006). DOI:10.1109/TNS.2006.885951
- G.S. Was, et al, Emulation of reactor irradiation damage using ion beams, Scripta Materialia 88, p.33-36 (2014). DOI:<https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2014.06.003>
- G.S. Was, Challenges to the use of ion irradiation for emulating reactor irradiation, Journal of Materials Research 30(9), p.1158-1182 (2015). DOI: <https://doi.org/10.1557/jmr.2015.73>
- Sh. Payziyev, et al, Luminescence sensitization properties of Ce: Nd: YAG materials for solar pumped lasers, Optics Communications 499, p.127283 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2021.127283>
- Y. Guo, et al, Growth and optical properties of the Nd, Ce: YAG laser crystal, Journal of Luminescence 236, p.118134 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2021.118134>
- Y. Dong, et al, Color centers and charge state change in Ce:YAG crystals grown by temperature gradient techniques, Journal of crystal growth 286 (2), p. 476-480 (2006). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2005.09.029>
- J. Bok, P. Horodyský and V. Krzyžánek, Effect of oxidation annealing on optical properties of YAG:Ce single crystals, Optical Materials 46, p.591-595 (2015). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.05.035>

Г. Турсумбаева^{1*}, Г. Баубекова¹, Р. Асылбаев², Ж. Карипбаев¹, А. Кисабекова², А.Т. Акилбеков¹

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²Ә. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, Павлодар, Қазақстан
(E-mail: gptursumbayeva@gmail.com)

Энергиясы 231 МэВ Xe^{132} иондарымен сәулеленген YAG:Ce монокристалдарының оптикалық және люминесценциялық қасиеттері

Аңдатпа. Зерттеу барысында ксенониондарының Xe^{132} (230 МэВ) $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$ (YAG:Ce) кристалдарының оптикалық және люминесценттік қасиеттеріне әсерін талдау жүргізілді. Сәулелендіру Френкель ақауларын (F , F^+), антиузельдік бұзылыстарды индуцирлейді және Ce^{3+} иондарының эмиссиясын бәсеңдетуге алып келеді, сондай-ақ, бұл құбылыс сәулеленусіз релаксация механизмдерінің күшеюімен және $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$ тотығуымен байланысты. Флюенстің артуы Ce^{3+} иондарының жарықтану қарқындылығының төмендеуіне әкелетіні анықталды, бұл тор ақауларының, соның ішінде оттектік вакансиялар мен антиқұрылымдық бұзылыстардың

түзілуімен байланысты. Сондай-ақ церийдің валенттік күйінің өзгерістері ($\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$) байқалды. Алынған деректер YAG:Ce кристалдарындағы радиациялық-индуцирленген өзгерістер механизмдерін ашып көрсетеді және де бұл оның радиацияға төзімді сцинтилляциялық детекторларда қолданылуы үшін маңызды. Xe^{132} иондарымен ($E=230$ МэВ) 10^{11} - 10^{14} ион/см² флюенстерінде сәулелендіру Френкель ақауларын (F, F^+) және антиузельдік бұзылыстарын тудырып, Ce^{3+} эмиссиясын сәулеленусіз процестердің күшеюі және $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$ қайта зарядталуы есебінен әлсіретеді. Қозу спектрлерінде экситондық жолақтардың бәсеңдеуі және қозу табалдырығының ығысуы тіркелді, бұл кристалл торындағы құрылымдық ретсіздіктің өсуімен байланысты. Бұл нәтижелер YAG:Ce қасиеттерін оңтайландыру мақсатында радиациялық әсерлерді зерттеудің маңыздылығын көрсетеді.

Түйін сөздер: иттрий-алюминий гранаты, жылдам ауыр иондар, люминесценттік қасиеттері, люминесценция және қоздыру спектрлері, радиациялық ақаулар.

G. Tursumbayeva¹, G. Baubekova¹, R. Asylbaev², Zh. Karipbayev¹, A. Kissabekova², A. Akilbekov¹

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²A. Margulan Pavlodar Pedagogical University, Pavlodar, Kazakhstan

(E-mail: gptursumbayeva@gmail.com)

Optical and luminescent properties of YAG:Ce single crystals irradiated with 231 MeV Xe^{132} ions

Abstract. The study examined the impact of irradiation with Xe^{132} ions (230 MeV) on the optical and luminescent properties of $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}$ (YAG:Ce) crystals. Irradiation induces Frenkel defects (F, F^+) and anti-site disorders, leading to the suppression of Ce^{3+} ion emission due to enhanced non-radiative mechanisms and the transition of Ce^{3+} to Ce^{4+} . It was found that increasing fluence reduces the intensity of Ce^{3+} luminescence, linked to the formation of lattice defects, including oxygen vacancies and anti-structural disorders. Changes in the valence state of cerium ($\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$) were also observed. The obtained data reveal the mechanisms of radiation-induced changes in YAG:Ce, which is crucial for its application in radiation-resistant scintillation detectors. Irradiation with Xe^{132} ions (230 MeV) at fluences from 10^{11} to 10^{14} ions/cm² triggers the formation of Frenkel defects (F, F^+) and anti-site disorders, weakening Ce^{3+} emission through the activation of non-radiative processes and the recharging of $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$. In excitation spectra, the suppression of exciton peaks and a shift in the excitation threshold are noted, attributed to increased structural disorder in the crystal lattice. These findings underscore the importance of studying radiation effects to optimize YAG:Ce properties for practical applications.

Keywords: Yttrium Aluminum Garnet, swift heavy ions, luminescent properties, luminescence and excitation spectra, radiation defects.

References

Z. Song, et al, After-glow, luminescent thermal quenching, and energy band structure of Ce-doped yttrium aluminum-gallium garnets, Journal of Luminescence 192, p. 1278-1287 (2017), DOI:<https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2017.09.008>

V. Țucureanu and D.Munteanu, Enhanced optical properties of YAG:Ce yellow phosphor by modification with gold nanoparticles, *Ceramics International* 45. (6), p.7641-7648 (2019). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.01.061>

Y.X. Pan, et al, Correlation between structure variation and luminescence red shift in YAG: Ce, *Journal of Alloys and Compounds* 488(2), p.638-642 (2009). DOI:<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2009.04.082>

Y.C. Lin, Dynamic Local Structural Symmetries and Luminescence Properties of the Yellow Emitting Phosphor Ce^{3+} -Doped $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$, MS thesis Chalmers Tekniska Hogskola (Sweden), p. 6-8 (2016).

M.T. Lucchini, et al, Radiation tolerance of LuAG:Ce and YAG:Ce crystals under high levels of gamma- and proton-irradiation, *IEEE Transactions on Nuclear Science* 63 (2), p. 586-590 (2016). DOI:10.1109/TNS.2015.2493347

M. Korzhik, Ce doped garnet structure crystalline scintillation materials for HEP instrumentation, *Journal of Instrumentation* 15 (08), p. C08001 (2020). DOI: 10.1088/1748-0221/15/08/C08001

V. Dormenev, et al, Radiation tolerant YAG:Ce scintillation crystals grown under reducing Ar+CO atmosphere, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 1015, p. 165764 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nima.2021.165764>

A. Vaddigiri, et al, Ionizing radiation effects in single-crystal and polycrystalline YAG, *IEEE transactions on nuclear science* 53(6), p. 3882-3888 (2006). DOI:10.1109/TNS.2006.885951

G.S. Was, et al, Emulation of reactor irradiation damage using ion beams, *Scripta Materialia* 88, p.33-36 (2014). DOI:<https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2014.06.003>

G.S. Was, Challenges to the use of ion irradiation for emulating reactor irradiation, *Journal of Materials Research* 30(9), p.1158-1182 (2015). DOI: <https://doi.org/10.1557/jmr.2015.73>

Sh. Payziyev, et al, Luminescence sensitization properties of Ce: Nd: YAG materials for solar pumped lasers, *Optics Communications* 499, p.127283 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2021.127283>

Y. Guo, et al, Growth and optical properties of the Nd, Ce: YAG laser crystal, *Journal of Luminescence* 236, p.118134 (2021). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2021.118134>

Y. Dong, et al, Color centers and charge state change in Ce:YAG crystals grown by temperature gradient techniques, *Journal of crystal growth* 286 (2), p. 476-480 (2006). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2005.09.029>

J. Bok, P. Horodyský and V. Krzyžánek, Effect of oxidation annealing on optical properties of YAG:Ce single crystals, *Optical Materials* 46, p.591-595 (2015). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.05.035>

Сведения об авторах:

Турсумбаева Г. – докторант 3-го курса по специальности «8D05323-Техническая физика», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Астана, 010000, Казахстан.

Баубекова Г. – PhD, и.о.доцента кафедры «Техническая физика», Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Кажымукана, 13, 010000, Астана, Казахстан.

Асылбаев Р. – PhD, доцент, Высшая школа естествознания, Университет Маргулана, ул.Торайгырова, 58, Павлодар, 140000, Казахстан.

Карипбаев Ж. – PhD, ассоциированный профессор кафедры «Техническая физика», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Казымукана 13, 010000, Астана, Казахстан.

Кисабекова А. – ассоциированный профессор, Высшая школа естествознания, Университет Маргулана, ул.Торайгырова, 58, Павлодар, 140000, Казахстан.

Акилбеков А.Т. – профессор кафедры «Техническая физика», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Казымукана, 13, Астана, 010000, Казахстан.

Турсумбаева Г. – «техникалық физика» кафедрасының 3-ші курс докторанты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қажымұқан, 13, 010000, Қазақстан.

Баубекова Г. – PhD, «техникалық физика» кафедрасының доцент міндетін атқарушы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қажымұқан 13, 010000, Қазақстан.

Асылбаев Р. – PhD, Марғұлан университеті, Жаратылыстану жоғары мектебінің доценті, Павлодар, Торайғырова, 58, 140000, Қазақстан

Карипбаев Ж. – «техникалық физика» кафедрасының қауымдастырылған профессоры, PhD, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қажымұқан 13, 010000, Қазақстан.

Кисабекова А. – PhD, Марғұлан университеті, Жаратылыстану жоғары мектебінің қауымдастырылған профессоры, Павлодар, Торайғырова, 58, 140000, Қазақстан

Акилбеков А.Т. – «техникалық физика» кафедрасының профессоры, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қажымұқан 13, 010000, Қазақстан.

Tursumbayeva G. – PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, 010000, Kazakhstan.

Baubekova G. – PhD, Acting Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, 010000, Kazakhstan.

Asylbaev R. – PhD, Assistant Professor of the Higher School of Natural Sciences, Margulan University, Pavlodar, 140000, Kazakhstan.

Karipbayev Zh. – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, 010000, Kazakhstan.

Kissabekova A. – PhD, Associate Professor Higher School of Natural Sciences, Margulan University, Pavlodar, 140000, Kazakhstan.

Akilbekov A.T. – Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, 010000, 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/>).



IRSTI 29.15.19, 29.03.47

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-143-154>

Article

Charged particle spectrometer for the investigation of nuclear reactions induced by fast neutrons

I.A. Chuprakov^{1,2*}, Yu.M. Gledenov², E. Sansarbayar^{2,3}, A.K. Bekbayev^{1,2,4},
B. Mukhametuly^{1,2,4}, E.S. Korshikov⁴, N.T. Temerbulatova^{1,2}

¹Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

²Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

³National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia

⁴Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: nitro-chupa@mail.ru)

Abstract. A spectrometer for detecting charged particles has been developed, designed for high-precision research in nuclear physics and applied tasks. The instrument is based on a two-section ionization chamber with a Frisch grid, providing high detection efficiency, nearly isotropic solid angle ($\sim 4\pi$), and minimal background noise levels, which is critically important for reliable determination of small reaction cross-sections. The relevance of this development is driven by growing interest in studying neutron-induced reactions related to nuclear energy development, radiation protection, and fundamental research into nuclear structure, as well as the lack of modern spectrometers capable of working with both solid and gaseous targets without loss of efficiency. The device is effectively used in systematic studies of charged particle emission reactions induced by fast neutrons on light and medium-mass nuclei. It enables obtaining energy distributions of reaction products, total and differential cross-sections, as well as angular distributions of charged particles. A key advantage of the spectrometer is its ability to work with both solid and gaseous samples, significantly expanding its application scope in scientific research.

Keywords: charged particle spectrometer, fast neutrons, alpha particle spectra, detector, nuclear reactions.

Introduction

Neutron-induced nuclear reactions play a key role in the release of nuclear energy and are described by nuclear data such as total and differential cross sections. Comprehensive, systematic and accurate nuclear data serve as a bridge between fundamental research [1-3] and engineering applications, being of great importance for nuclear engineering, applications of nuclear technologies [4], nuclear astrophysics [5-7] and other fields. In nuclear energy, α -particles from (n, α) reactions, accumulating as helium bubbles, cause damage such as embrittlement and swelling of structural materials [8]. In nuclear astrophysics, (n, α) reaction cross sections are typically used in calculations of element evolution processes in the Universe.

Received 30.06.2025. Revised 02.09.2025. Accepted 02.09.2025. Available online 30.09.2025.

*the corresponding author

Previous measurements of these reactions in the MeV-range of neutron energies were performed mainly using activation methods. This method, although simpler in practice, is feasible only in specific cases when residual nuclei produced by charged particle emission are unstable [9-11]. The key research challenges are due to, first, the probability of the studied processes because of small reaction cross sections and limited sample quantity (in the case of isotopically enriched materials), and second, the complex background characteristic of neutron sources in this energy range. As a result, standard detector methods are either inapplicable or do not provide a comprehensive analysis of the processes. Moreover, such measurements do not allow obtaining energy spectra and angular distributions of emitted charged particles.

To expand our research to (n,p) reactions, we have constructed a new double ionization chamber. The new spectrometer can withstand higher working gas pressure, has the capability to study reactions on both solid and gaseous targets, which allows expanding the range of studied nuclei. Furthermore, the volume of the new spectrometer is smaller, and this has reduced the amount of required working gas. The developed detector and measurement methodology, in our view, are optimally suited for investigating (n, α) and (n,p) reactions with neutrons in the MeV range and allow obtaining both energy spectra and angular distributions of reaction products.

The methodology

The detection system was based on a ionization chamber with a common cathode design, offering a large solid angle and high detection efficiency for charged particles, as shown in Fig.1. Adjusting the gas pressure was essential to optimize the stopping of different particles: alpha particles, which have shorter ranges, were best detected at low pressures, while tritons, with longer ranges, required higher pressures. This allows the working gas pressure to be selected and adjusted for each measurement to reduce background reactions. Another big advantage of this detector is its low sensitivity to gamma background.

Figure 1 (a) shows the internal structure of the spectrometer. The detector consists of a cylindrical stainless steel chamber with a diameter of 29.2 cm and a height of 28.2 cm, comprising two parallel sections with a common cathode. The anodes are made of two aluminum plates with a thickness of 0.1-0.2 mm. The detector grids consist of parallel gold-plated tungsten wires with a diameter of 0.1 mm and a pitch of 2 mm, soldered onto rectangular frames made of copper-clad fiberglass laminate. The chamber design allows for adjustable spacing between the grids and electrodes over a wide range.

The external view of the cathode is shown in Figure 1 (b). The cathode, shared by both sections, is equipped with a rotating sample holder disk mounted between two aluminum plates with 48 mm diameter apertures. The design features five positions on the disk, each accommodating two samples in a "back-to-back" configuration, enabling the simultaneous loading of up to ten samples for various purposes: α -sources for energy calibration, test samples, background measurement samples, ^{238}U samples for absolute neutron flux determination, and others. The rotation mechanism allows for sample changes during experiments without opening the chamber, ensuring identical conditions for primary, background, and calibration measurements.

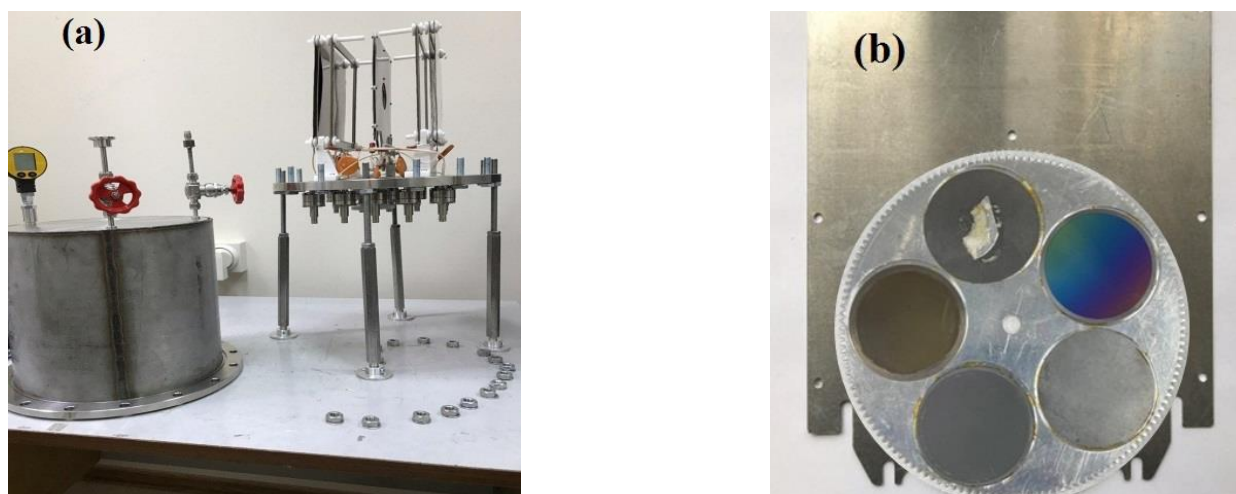


Figure 1. (a) Internal structure of the spectrometer, (b) internal structure of the cathode

Selection of Working Gas

When selecting the composition of the working gas mixture, the following fundamental physical processes affecting the accuracy of measuring energy lost by charged particles in the gas were considered: ion recombination and electron capture by molecules of the primary gas and impurities. Special requirements for the gas mixture are also determined by the operating conditions in a fast neutron field. The considerable cross-sections of (n,p) and (n, α) reactions for the chamber filling gases lead to background nuclear reactions. These reactions occurring with nuclei of the gas mixture components produce additional α -particles, which complicates the extraction of the useful signal from the nuclear reactions under study on the sample.

Noble gases (Ar, Kr, etc.) are typically used as working gases in ionization chambers [12-13]. To improve detector characteristics, mixtures containing small additives of CO₂, methane, and others are employed. However, in our case, methane-containing mixtures are rarely used due to the background caused by recoil protons, despite their high drift velocity. The Ar+CO₂ mixture is also not always suitable due to the presence of oxygen in carbon dioxide, which has a large (n, α) reaction cross-section at neutron energies above 3 MeV. Therefore, it is relevant to identify new effective mixture gases that would expand measurement capabilities.

Signal registration and analysis system of the alpha spectrometer

Signals from the alpha spectrometer are first amplified and then digitized using a PIXIE-16 digitizer. The electronics block diagram is shown in Figure 2. Two signals from the anodes and one from the common cathode of the ionization chamber (IC) are fed through charge-sensitive preamplifiers and fast amplifiers to four inputs of the digitizer. A fifth input is used to connect a neutron counter for neutron flux measurements.

The input signals are digitized by a 14-bit 250 MHz ADC (and an 11-bit 200 MHz ADC). Each event can be stored in memory. The PIXIE-16 supports spectroscopy in both independent and coincidence modes for pulses across different input channels.

Signals from the EJ-309 scintillation detector are fed into an 8-channel 12-bit 500 MHz digitizer (CAEN DT5730S), which serves as a neutron flux monitor and enables the separation of neutron and gamma-ray spectra.

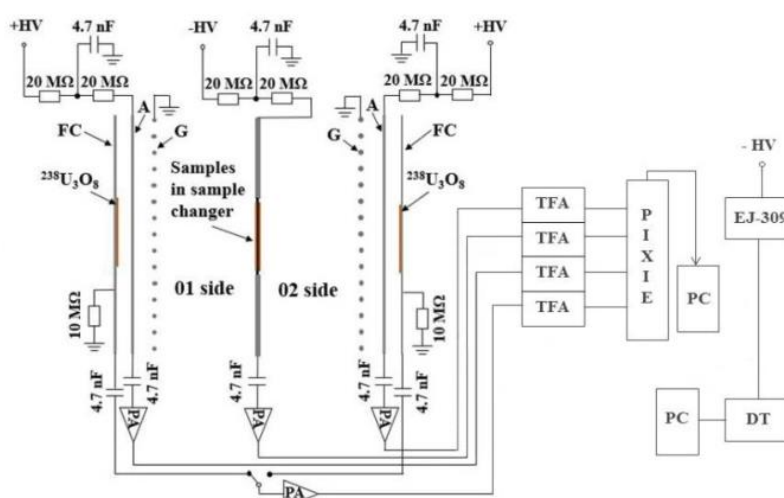


Figure 2. Schematic diagram of α -spectrometer with electronics:

FC – cathode of additional IC section with ^{238}U ; PA- charge-sensitive preamplifier;
A, G, C – anode, grid, cathode; CTU – trigger control; SA, TFA – fast amplifiers ORTEC 474;
PIXIE- digitizer PIXIE-16; DT – digitizer CAEN DT5730S; PC- personal computer

Application of α -spectrometer in the study of (n,α) reactions

The experimental setup shown in Figure 3 provided two configuration options: (a) for solid samples [14] (placed on the detector cathode) and (b) for gaseous samples with a collimator installed between the neutron source and the detection system. In measurements on solid samples, the collimator helps reduce background on the detector components, but the neutron flux also decreases due to the geometry. In the case of measurements on gas samples, the collimator helps define the irradiated volume of gas, which subsequently aids in data processing. Neutron flux monitoring was performed by a ^3He detector positioned along the beam axis, while system calibration was carried out using a reference ^{238}U target mounted on the rotating cathode disk. Fast quasi-monoenergetic neutrons were produced via the $\text{D}(\text{d},\text{n})$ nuclear reaction using a gas target, achieving a neutron flux of approximately 10^5 neutrons per second.

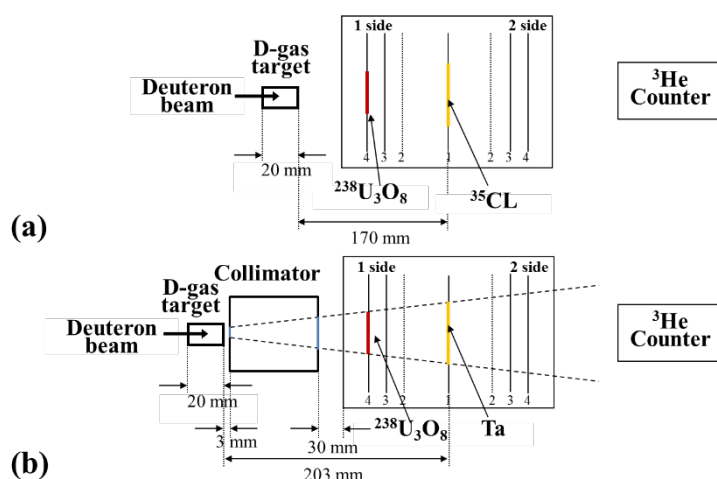


Figure 3. Schematic diagram of the experimental equipment setup, (a) for measurements on solid samples, (b) for measurements on gas samples with a collimator

Discussion

Measurements of (n, α) reaction

As an example, let's consider the study of the $^{35}\text{Cl}(n, \alpha)^{32}\text{P}$ reaction using neutrons with energy $E_n = 5.0 \pm 0.26$ MeV. Also, studies of (n, α) on various nuclei using this detector are presented in the works [14-17]. The experiments were conducted with a Kr + 5% CH₄ gas mixture at 0.65 atm pressure. The rotating cathode disk contained: a ^{35}Cl target (707 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ thickness, 99.4% enrichment), an α -source for calibration, a tantalum substrate for background measurement, and a reference ^{238}U target (99.999% enrichment) for absolute neutron flux determination. The measurement results and their analysis are presented in Figures 4 and 5, showing α -particle spectra and corresponding distributions.

This methodology provided precise measurements of nuclear reaction parameters at fixed neutron energy with background control and equipment calibration. The rotating cathode with different samples allowed sequential recording of useful signals and background components under identical conditions. The obtained two-dimensional spectra can be used to determine the total cross section of the $^{35}\text{Cl}(n, \alpha)^{32}\text{P}$ reaction [14].

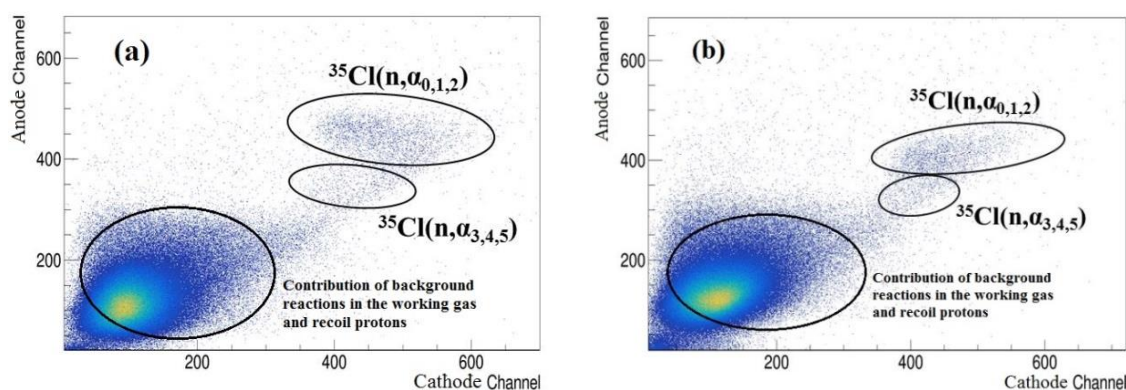


Figure 4. Experimental cathode-anode α -particle spectra from the $^{35}\text{Cl}(n, \alpha)^{32}\text{P}$ reaction at $E_n = 5.0$ MeV: (a) forward-direction spectrum, (b) backward-direction spectrum. Both spectra include corrections for background reaction contributions

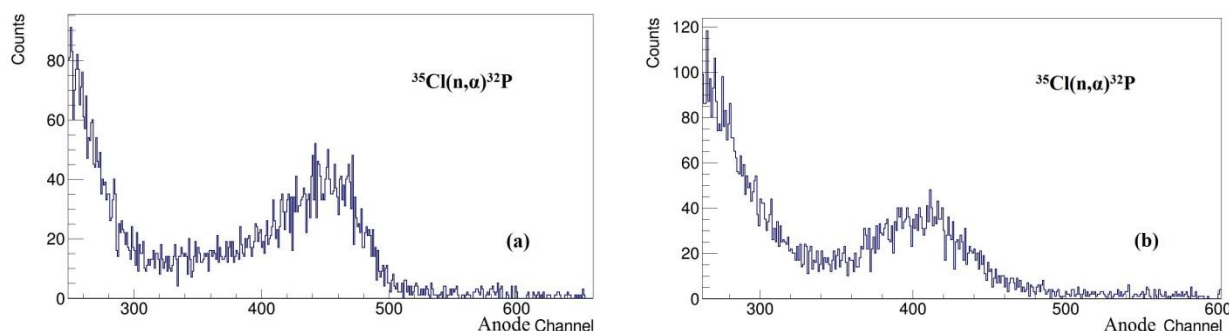


Figure 5. Anodic spectrum of α -particles from the reaction $^{35}\text{Cl}(n, \alpha)^{32}\text{P}$ at $E_n = 5.0$ MeV, forward direction (a), backward direction (b), with the contribution of background reactions

Fission chamber

A key feature of this spectrometer is its capability for precision measurement of fast neutron flux using an integrated fission chamber. To implement this function, a highly enriched ^{238}U sample (99.999% enrichment) was mounted on the guard electrode of one spectrometer section, while the space between the anode and guard electrode was utilized as the detection chamber. The neutron flux was measured separately for each energy. The combination of the fission chamber and ^3He counter provided exceptional measurement reliability and accuracy, which is crucial for precision experiments with fast neutrons. The obtained neutron flux data were subsequently used for cross-section analysis of the studied nuclear reactions [14-17].

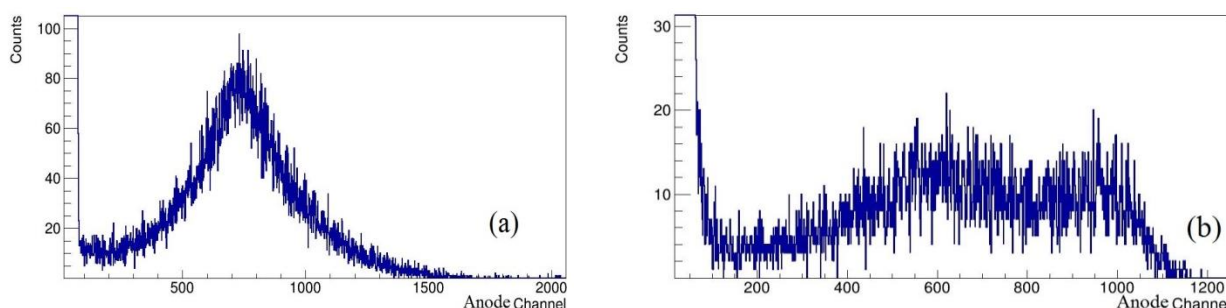


Figure 6. Spectra of fission fragments at $E_n=5$ MeV. (a) from the fission chamber; (b) from the spectrometer cathode

The uncertainty in the measured cross sections for the (n, α) reaction arises from multiple sources. The most significant contribution stems from the determination of the number of detected alpha particles, tritons. This includes both statistical errors and uncertainties related to background subtraction, as well as event selection criteria such as energy thresholds and valid-event-area cuts.

Table 3. Principal sources of uncertainty and their estimated magnitudes

Source of Uncertainty	Relative Error (%)
$^{238}\text{U}(n,f)$ reference cross section	0.7
Determination of number of fission events	3.0
Alpha/triton event statistics	3.0–5.0
Background subtraction and neutron flux normalization	3.0
Atom number of ^{238}U in the $^{238}\text{U}_3\text{O}_8$ sample	2.0
Atom number of sample	2.0
Total combined uncertainty	7.5–9.8

Measurement of (n, α) reactions on gas samples

In this experiment, instead of a solid target, the working gas mixture Ar+1%CO was used as the target material. For measurements with gas samples, the experimental setup shown in Figure 3 (b) consists of four main components: a neutron source, a steel collimator with

an internal copper cone, a spectrometer, and a ^3He counter [1]. A steel collimator positioned between the neutron source and the spectrometer serves to collimate the neutron beam and limit the irradiation area of the working gas within the spectrometer. Also, the study of (n,α) on a gas sample using this detector is presented in the paper [18].

The detector's active reaction volume is defined by the collimated neutron beam path, as illustrated in Figure 3 (b). Neutron fluxes were determined using the $^{238}\text{U}(n,f)$ reaction. The (n,α) events were identified through anode spectra measured by the spectrometer. Figure 7 presents both 2D and 1D projections of the obtained spectra. As evident from the figures, the spectrometer and electronics system effectively discriminates background reactions.

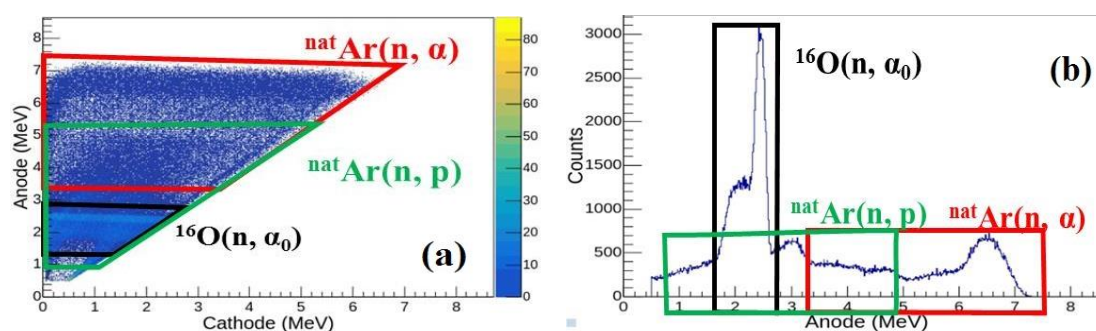


Figure 7. Two-dimensional spectrum of alpha particles (a) at $E_n=5$ MeV and one-dimensional spectrum (b)

Conclusion

The two-section ionization chamber spectrometer is a modern and highly efficient tool for studying nuclear reactions, particularly (n,α) reactions. An important advantage of this configuration is the ability to quickly change targets without the need to break the vacuum or alter operating parameters. This allows optimal use of beam time and economical consumption of expensive working gases (Kr , Xe , CF_4). Particularly noteworthy is the built-in fission chamber based on highly enriched ^{238}U , which provides precise measurement of neutron flux. The combination of this chamber with a ^3He counter enables exceptional measurement accuracy. Together with a modern event registration system, this detector makes it possible to obtain α -particle spectra corresponding to transitions to various energy levels of the daughter nucleus, as well as detailed information about angular distributions of nuclear reaction products. Experiments conducted with various targets (including gas samples) demonstrate the broad research capabilities of the setup. The results obtained make a significant contribution to understanding the mechanisms of nuclear reactions and can be used to verify theoretical models. Thanks to its characteristics, this spectrometer is a valuable tool for conducting research aimed at developing new nuclear technologies and improving the safety of existing ones. In particular, the data obtained can be used to improve nuclear reactor models and develop more effective radiation protection methods.

Acknowledgement, conflict of interests

The work was carried out within the framework of the project (grant No. BR21881930) with the support of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan. The authors declare that they have no conflict of interest.

The contribution of the authors

Chuprakov I.A. – significant contribution to the concept and design of the work; analysis and interpretation of the results, as well as writing the main text of the scientific article;

Gledenov Yu.M. – research management, approval of the final version of the article for publication;

Enkhbold S. – analysis and interpretation of the results, writing the text;

Bekbaev A.K. – theoretical calculations and analysis of the results;

Mukhametuly B. – participation in the experiment, performing data collection tasks, their preliminary processing and analysis;

Korshikov E.S. – conducting the experiment, preparing the experimental equipment and starting the data collection system, organizing and monitoring data collection during the entire experiment.

Temerbulatova N.T. – preparation and manufacturing of the test samples.

References

1. V.N. Levkovsky, The (n, p) and (n, α) cross sections at 14–15 MeV, *Yad. Fiz.* 18(4), p.705(1973)
2. G. Khuukhenkhuu, Yu. M. Gledenov, M. V. Sedysheva et al., Systematical analysis of (n, α) reaction cross sections for 6–20 MeV neutrons, *Phys. Part. Nuclei Lett.* 11, p.749-755(2014), DOI: <https://doi.org/10.1134/S1547477114060053>
3. D. J. Buss and R. K. Smither, Level Structure of ^{148}Sm and ^{150}Sm from Average Resonance Neutron Capture, *Phys. Rev. C* 2, p.1513(1970), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.2.1513>
4. U. Kannan, Perspectives on nuclear data for advanced reactor design and analysis, *Life Cycle Reliab Saf. Eng.* 9, p.135-146(2020), DOI: <https://doi.org/10.1007/s41872-020-00120-5>
5. R. Reifarh et al., Neutron reactions in astrophysics, *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 41, p.053101(2014), DOI: 10.1088/0954-3899/41/5/053101
6. R. R. Winters et al., A test for s-process nucleosynthesis, *Astrophys. J.*, 300, p.41-55(1986)
7. F. Käppeler, R. Gallino, S. Bisterzo et al., The process: Nuclear physics, stellar models, and observations, *Rev. Mod. Phys.* 83(1), p.157(2011) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.157>
8. M. B. Chadwick, E. Dupont, E. Bauge et al., The CIELO Collaboration: Neutron Reactions on ^1H , ^{16}O , ^{56}Fe , ^{235}U , and ^{239}Pu , *Nuclear Data Sheets*, 118, p.1-25(2014), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nds.2014.04.002>
9. V. Semkova, E. Bauge, A. J. M. Plompen, and D. L. Smith, Neutron activation cross sections for zirconium isotopes, *Nucl. Phys. A*, 832, p.149-169 (2010), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2009.10.133>
10. M. I. Majah, A. Chiadli, S. Sudár, and S. M. Qaim, Cross sections of (n, p) , (n, α) and $(n, 2n)$ reactions on some isotopes of zirconium in the neutron energy range of 10–12 MeV and integral tests of differential cross section data using a 14 MeV $d(\text{Be})$ neutron spectrum, *Appl. Radiat. Isot.*, 54, p.655(2001), DOI: [https://doi.org/10.1016/S0969-8043\(00\)00299-2](https://doi.org/10.1016/S0969-8043(00)00299-2)
11. A. A. Filatenkov, S. V. Chuvaev, V. N. Aksenov and V. A. Jakovlev, Report No. INDC(CCP)-402, Vienna, 1997, [https://www.nds.iaea.org/exfor/servlet/X4sShowPubl?File=R,INDC\(CCP\)-402,1997](https://www.nds.iaea.org/exfor/servlet/X4sShowPubl?File=R,INDC(CCP)-402,1997).

12. C.Budtz-Jørgensen H.-H.Knitter Ch.Straede, F.-J. Hambsch and R.Vogt. A Twin Ionization Chamber for Fission Fragment Detection, Nucl. Instr. Meth., 258(2), p.209-220(1987).
13. M.Florek, Yu.M.Gledenov, M. Sedysheva, Sh.Zeinalov, G. Khukhenkhuu et al., The $^{36}\text{Ar}(n,\alpha^0)$ Cross Sections Measurements in the Neutron Energy Region 4.5 - 6.4 MeV, In book: "Neutron Spectroscopy, Nuclear Structure, Related Topics", p.225(1999)
14. E. Sansarbayer, Yu. M. Gledenov, I. Chuprakov, G. Khuukhenkhuu et al., Cross sections for the $^{35}\text{Cl}(n, \alpha)^{32}\text{P}$ reaction in the 3.3–5.3 MeV neutron energy region, Phys. Rev. C, 104, p.044620(2021), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.104.044620>
15. Guohui Zhang, E. Sansarbayer, Yu. M. Gledenov, G. Khuukhenkhuu, et al., Cross sections of the $^{91}\text{Zr}(n, \alpha)^{88}\text{Sr}$ reaction in the 3.9–5.3 MeV neutron energy region, Physical Review C 106, p.064602(2022), DOI: 10.1103/PhysRevC.106.064602
16. Jie Liu, Zengqi Cui, Yiwei Hu, Haofan Bai, Yi Yang, et al., $^{63}\text{Cu}(n, \alpha)^{60}\text{Co}$ cross sections in the MeV region, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys., 50, p.045106(2023), DOI: 10.1088/1361-6471/acb960
17. I. Chuprakov, E. Sansarbayer, Guohui Zhang, Yu.M. Gledenov et al., Cross sections of the $^{148}\text{Sm}(n,\alpha)^{145}\text{Nd}$ reaction in the 4.8–5.3 MeV neutron energy range, Chinese Physics C, 49, p. 074007(2025), DOI: 10.1088/1674-1137/add09a
18. Yiwei Hu, Yu. M. Gledenov, Zengqi Cui, Jie Liu, Haofan Bai et al., Cross section measurement for the $^{14}\text{N}(n,\alpha^0,1)^{11}\text{B}$ reactions in the 4.5–11.5 MeV neutron energy region, Eur. Phys. J. A, 60, p.51(2024), DOI: <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-024-01268-9>

И.А. Чупраков^{1,2*}, Ю.М. Гледенов², Э. Сансарбаяр^{2,3}, А.К. Бекбаев^{1,2,4},

Б. Мұхаметұлы^{1,2,4}, Е.С. Коршиков⁴, Н.Т. Темербулатова^{1,2}

¹РГП Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан

²Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей

³Монголия ұлттық университеті, Ұлан-Батор, Моңғолия

⁴әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

(E-mail: nitro-chupa@mail.ru)

Жылдам нейтрондар тудыратын ядролық реакцияларды зерттеуге арналған зарядталған бөлшектер спектрометрі

Аңдатпа. Зарядты бөлшектерді тіркеуге арналған спектрометр ядролық физикада және қолданбалы мәселелерде жоғары дәлдікпен зерттеу жүргізу үшін әзірленді. Құрылғының негізінде Фриш торлы екі секциялы иондалу камерасы жатыр, ол жоғары тіркеу тиімділігін, іс жүзінде изотропты кеңістік бұрышын ($\sim 4\pi$) және фондық шулардың ең төменгі деңгейін қамтамасыз етеді, бұл реакциялардың кішігірім қималарын сенімді анықтау үшін өте маңызды. Дамудың өзектілігі ядролық энергетиканың, сәулеленуден қорғау жүйелерінің және ядролар құрылымын зерттеудің негізгі мәселелерінің дамуына байланысты нейтрон-индуцирленген реакцияларды зерттеуге деген қызығушылықтың артуымен, сонымен қатар қатты және газ тәрізді нысандармен тиімділікті жоғалтпай жұмыс істей алатын заманауи спектрометрлердің болмауымен түсіндіріледі. Құрал жеңіл және орташа массалардың ядроларында жылдам нейтрондар әсерінен туындайтын зарядты бөлшектердің ұшып шығу реакцияларын жүйелі зерттеуде тиімді қолданылады. Оның көмегімен реакция өнімдерінің энергетикалық таралуын, толық және дифференциалды қималарды, сонымен қатар зарядты бөлшектердің бұрыштық

таралуын алуға болады. Спектрометрдің маңызды артықшылығы – қатты және газ тәрізді үлгілермен жұмыс істей алуы, бұл ғылыми зерттеулерде оның қолданыс аясын айтарлықтай кеңейтеді.

Түйін сөздер: зарядталған бөлшектер спектрометрі жылдам нейтрондар, альфа бөлшектерінің спектрлері, детектор, нейтрондармен ядролық реакциялар.

**И.А. Чупраков^{1,2*}, Ю.М. Гledenov², Э. Сансарбаяр^{2,3}, А.К. Бекбаев^{1,2,4},
Б. Мухаметулы^{1,2,4}, Е.С. Коршиков⁴, Н.Т. Темербулатова^{1,2}**

¹Институт ядерной физики, г. Алматы, Казахстан

²Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия

³Национальный университет Монголии, г. Улан-Батор, Монголия

⁴Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан

(E-mail: nitro-chupa@mail.ru)

Спектрометр заряженных частиц для исследования ядерных реакций, вызванных быстрыми нейтронами

Аннотация. Разработан спектрометр для регистрации заряженных частиц, предназначенный для высокоточных исследований в ядерной физике и прикладных задачах. В основе прибора лежит двухсекционная ионизационная камера с сеткой Фриша, обеспечивающая высокую эффективность регистрации, практически изотропный телесный угол (~4π) и минимальный уровень фоновых помех, что критически важно для надежного определения малых сечений реакций. Актуальность разработки обусловлена растущим интересом к изучению нейтрон-индуцированных реакций в связи с развитием ядерной энергетики, радиационной защиты и фундаментальных исследований структуры ядер, а также отсутствием современных спектрометров, способных работать как с твердыми, так и с газообразными мишенями без потери эффективности. Прибор эффективно применяется в систематических исследованиях реакций с вылетом заряженных частиц, индуцированных быстрыми нейтронами, на ядрах легких и средних масс. С его помощью можно получать энергетические распределения продуктов реакций, полные и дифференциальные сечения, а также угловые распределения заряженных частиц. Важным преимуществом спектрометра является возможность работы как с твердыми, так и с газообразными образцами, что значительно расширяет область его применения в научных исследованиях.

Ключевые слова: спектрометр заряженных частиц, быстрые нейтроны, спектры альфа частиц, детектор, ядерные реакции.

References

1. V. N. Levkovsky, The (n, p) and (n, α) cross sections at 14–15 MeV, *Yad. Fiz.* 18(4), p.705(1973)
2. G. Khuukhenkhuu, Yu. M. Gledenov, M. V. Sedysheva et al., Systematical analysis of (n, α) reaction cross sections for 6–20 MeV neutrons, *Phys. Part. Nuclei Lett.* 11, p.749-755(2014), DOI: <https://doi.org/10.1134/S1547477114060053>
3. D. J. Buss and R. K. Smither, Level Structure of 148 Sm and 150Sm from Average Resonance Neutron Capture, *Phys. Rev. C* 2, p.1513(1970), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.2.1513>
4. U. Kannan, Perspectives on nuclear data for advanced reactor design and analysis, *Life Cycle Reliab Saf. Eng.* 9, p.135-146(2020), DOI: <https://doi.org/10.1007/s41872-020-00120-5>

5. R. Reifarh et al., Neutron reactions in astrophysics, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 41, p.053101(2014), DOI: 10.1088/0954-3899/41/5/053101
6. R. R. Winters et al., A test for s-process nucleosynthesis, Astrophys. J., 300, p.41-55(1986)
7. F. Käppeler, R. Gallino, S. Bisterzo et al., The process: Nuclear physics, stellar models, and observations, Rev. Mod. Phys. 83(1), p.157(2011) DOI: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.157>
8. M. B. Chadwick, E. Dupont, E. Bauge et al., The CIELO Collaboration: Neutron Reactions on ^1H , ^{16}O , ^{56}Fe , ^{235}U , and ^{239}Pu , Nuclear Data Sheets, 118, p.1-25(2014), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nds.2014.04.002>
9. V. Semkova, E. Bauge, A. J. M. Plompen, and D. L. Smith, Neutron activation cross sections for zirconium isotopes, Nucl. Phys. A, 832, p.149-169 (2010), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2009.10.133>
10. M. I. Majah, A. Chiadli, S. Sudár, and S. M. Qaim, Cross sections of (n,p), (n, α) and (n,2n) reactions on some isotopes of zirconium in the neutron energy range of 10–12 MeV and integral tests of differential cross section data using a 14 MeV d(Be) neutron spectrum, Appl. Radiat. Isot., 54, p.655(2001), DOI: [https://doi.org/10.1016/S0969-8043\(00\)00299-2](https://doi.org/10.1016/S0969-8043(00)00299-2)
11. A. A. Filatenkov, S. V. Chuvaev, V. N. Aksenov and V. A. Jakovlev, Report No. INDC(CCP)-402, Vienna, 1997, [https://www.nds.iaea.org/exfor/servlet/X4sShowPubl?File=R,INDC\(CCP\)-402,1997](https://www.nds.iaea.org/exfor/servlet/X4sShowPubl?File=R,INDC(CCP)-402,1997).
12. C. Budtz-Jørgensen H.-H. Knitter Ch. Straede, F.-J. Hamsch and R. Vogt. A Twin Ionization Chamber for Fission Fragment Detection, Nucl. Instr. Meth., 258(2), p.209-220(1987).
13. M. Florek, Yu. M. Gledenov, M. Sedysheva, Sh. Zeinalov, G. Khukhenkhuu et al., The ^{36}Ar (n, α) Cross Sections Measurements in the Neutron Energy Region 4.5 - 6.4 MeV, In book: "Neutron Spectroscopy, Nuclear Structure, Related Topics", p.225(1999)
14. E. Sansarbayer, Yu. M. Gledenov, I. Chuprakov, G. Khuukhenkhuu et al., Cross sections for the $^{35}\text{Cl}(n, \alpha)^{32}\text{P}$ reaction in the 3.3–5.3 MeV neutron energy region, Phys. Rev. C, 104, p.044620(2021), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.104.044620>
15. Guohui Zhang, E. Sansarbayer, Yu. M. Gledenov, G. Khuukhenkhuu, et al., Cross sections of the $^{91}\text{Zr}(n, \alpha)^{88}\text{Sr}$ reaction in the 3.9–5.3 MeV neutron energy region, Physical Review C 106, p.064602(2022), DOI: 10.1103/PhysRevC.106.064602
16. Jie Liu, Zengqi Cui, Yiwei Hu, Haofan Bai, Yi Yang, et al., $^{63}\text{Cu}(n, \alpha)^{60}\text{Co}$ cross sections in the MeV region, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys., 50, p.045106(2023), DOI: 10.1088/1361-6471/acb960
17. I. Chuprakov, E. Sansarbayer, Guohui Zhang, Yu. M. Gledenov et al., Cross sections of the $^{148}\text{Sm}(n, \alpha)^{145}\text{Nd}$ reaction in the 4.8–5.3 MeV neutron energy range, Chinese Physics C, 49, p.074007(2025), DOI: 10.1088/1674-1137/add09a
18. Yiwei Hu, Yu. M. Gledenov, Zengqi Cui, Jie Liu, Haofan Bai et al., Cross section measurement for the $^{14}\text{N}(n, \alpha, 0)^{11}\text{B}$ reactions in the 4.5–11.5 MeV neutron energy region, Eur. Phys. J. A, 60, p.51(2024), DOI: <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-024-01268-9>

Information about the authors:

Chuprakov I. – corresponding author, PhD, Senior Researcher, Institute of Nuclear Physics, Ibragimov str., 1, 050032, Almaty, Kazakhstan.

Gledenov Yu. M. – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher, Joint Institute for Nuclear Research, 141980, Dubna, Russia.

Enkbold S. – candidate of Physical and Mathematical Sciences, Researcher, Joint Institute for Nuclear Research, 141980 Dubna, Russia.

Bekbaev A.K. – PhD, Deputy Chief Engineer of the BBP-K Complex, Institute of Nuclear Physics, st. Ibragimova, 1, 050032, Almaty, Kazakhstan.

Mukhametuly B. – PhD, Senior Researcher, Institute of Nuclear Physics, Ibragimova st., 1, 050032, Almaty, Kazakhstan.

Korshikov E.S. – PhD, Leading Researcher, Al-Farabi Kazakh National University, Al-Farabi Avenue, 71, 050038, Almaty, Kazakhstan.

Temerbulatova N.T. – Junior Researcher, Joint Institute for Nuclear Research, 141980, Dubna, Russia

Чупраков И.А. – автор для корреспонденции, PhD, старший научный сотрудник РГП «Институт ядерной физики», ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Гledenov Ю.М. – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна Россия

Энхболд С. – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна Россия

Бекбаев А.К. – PhD, заместитель главного инженера комплекса ВВР-К, РГП «Институт ядерной физики», ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Мухаметулы Б. – PhD, старший научный сотрудник, РГП «Институт ядерной физики», ул. Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан

Коршиков Е.С. – PhD, ведущий научный сотрудник, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, проспект аль-Фараби, 71, 050038, Алматы, Казахстан

Темербулатова Н.Т. – младший научный сотрудник, Объединенный институт ядерных исследований, 141980, Дубна Россия

Чупраков И.А. – хат-хабар авторы, PhD, "ядролық физика институты" РМК аға ғылыми қызметкері, Ибрагимов көшесі, 1, 050032, Алматы, Қазақстан

Гledenov Ю.М. – физика-математика ғылымдарының докторы, жетекші ғылыми қызметкер, Біріккен ядролық зерттеулер институты, 141980, Дубна, Ресей

Энхболд С. – физика-математика ғылымдарының кандидаты, ғылыми қызметкер, Біріккен ядролық зерттеулер институты, 141980 Дубна, Ресей

Бекбаев А.К. – PhD, ВВР-К кешені бас инженерінің орынбасары, "ядролық физика институты" РМК, Ибрагимов көшесі, 1, 050032, Алматы, Қазақстан

Мұхаметұлы Б. – PhD, аға ғылыми қызметкер, "ядролық физика институты" РМК, Ибрагимов көшесі, 1, 050032, Алматы, Қазақстан

Коршиков Е.С. – PhD, жетекші ғылыми қызметкер, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Әл-Фараби даңғылы, 71, 050038, Алматы, Қазақстан.

Темербулатова Н.Т. – кіші ғылыми қызметкер, Біріккен ядролық зерттеулер институты, 141980, Дубна, Ресей



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/>).



ХҒТАР 29.17.41
Ғылыми мақала

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-155-168>

Ауқымды классикалық жүйелердегі флуктуациялар

Т.Б. Қоштыбаев¹, А.М. Татенов¹, М.Е. Алиева^{*2}, К.К. Жантлеуов²

¹Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

²Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

(E-mail: moldir-2008@mail.ru)

Аңдатпа. Термостатпен тепе-теңдікте тұрған Гиббстік ансамбльдегі көп бөлшекті жүйедегі флуктуациялар статистикалық тұрғыда сипатталған. Нақтырақ айтқанда, Гиббстің каноникалық үлестірімі арқылы кездейсоқ жылу алмасулар кезіндегі энергия флуктуациясы, бөлшектер саны флуктуациясының дисперсиясы мен кездейсоқ энергия квадратының орташа мәні есептелді. Осы нәтижелердің негізінде бір атомды идеал газ энергиясының салыстырмалы флуктуациясының өрнегі алынды. Кез-келген физикалық шаманың флуктуациясын есептеу үшін энтропия өзгерісін осы шама арқылы өрнектеу жеткілікті. Осы термодинамикалық принципті, энтропия мен тепе-теңділік емес күйлердің ықтималдылықтары арасындағы байланыстарды қолданып термодинамикалық шама флуктуациясының дисперсиясын, тепе-теңсіздік күй ықтималдылығының тығыздығын есептейтін өрнектер шығарылып көрсетілді. Бұл нәтижелер бір атомды идеал газдың температурасының, көлемі мен тығыздығының флуктуация дисперсиясы мен салыстырмалы флуктуацияларын есептеу үшін пайдаланылды. Энергияның флуктуациясы есептелді және белгілі бір ортадағы микроскоптық дененің күйін сипаттайтын механикалық шамалардың да флуктуацияларын есептеуге мүмкіндік беретін жағдайлар қарастырылды. Атап айтқанда, тепе-теңділік жағдайдағы сұйықтағы (немесе газдағы) тыныштыта тұрған дененің орта молекулаларының соққылауы салдарынан флуктуациялық күйге өтуі қарастырылып, дененің флуктуациялық жылдамдығының дисперсиясы есептеп шығарылды. Алынған нәтижелерге талдаулар мен қорытындылар жасалып, флуктуациялардың наножүйелердегі және плазмадағы қолданылыстары жайында ақпараттар берілді.

Түйін сөздер: флуктуация, тепе-теңділік күй, термодинамикалық параметрлер, дисперсия, энергия, температура, көлем.

Жіберілді 07.09.2025. Өзгертілді 18.09.2025. Қабылданды 23.09.2025. Онлайн қол жетімді 30.09.2025.

^{1*}хат-хабар авторы

Кіріспе

Тақырыпты таңдаудың негіздемесі. Термодинамикалық тепе-теңдікте тұрған макро-жүйеге қатысты термодинамикалық, статистикалық шамалардың мәндері өздерінің орташа мәндерімен жоғары дәлдікте бірдей болатыны белгілі. Алайда, орташа мәннен ауытқу (флуктуация) орын алса, онда ауытқу ықтималдылығын және оның таралу аумағын анықтау қажет болады. Мысалы, бірізгіде термодинамикалық және механикалық мағынадағы энергия, көлем секілді шамалар үшін флуктуация ұғымы үйреншікті жағдай. Ұсынылып отырған мақалада флуктуациялардың ықтималдылық шегі мен ауқымы көрсетіліп, тұйық және квазитұйық жүйелердегі флуктуациялардың теориялық негіздемесі келтіріледі. Осылармен бірге, біртекті ортадағы термодинамикалық шамалардың, мысалы энергияның, көлемнің, температураның, бөлшектер санының, тығыздық пен ішкі энергияның флуктуациялары есептеледі. Біртекті ортадағы макродеңенің флуктуациялық күйге өту жағдайлары да қарастырылатын болады. *Тақырыптың немесе қойылған мәселенің өзектілігі* – ауқымды классикалық жүйелердегі тепе-теңсіздік күйлердің ерекшелігіне қатысты теориялық есептеулердің толастамай, құбылысты жан-жақты ашуға деген ізденістердің әлі де жалғасып жатқандығында болып отыр. Термодинамикадағы флуктуациялардың басты себебі-бөлшектердің жылулық қозғалыстары, яғни әрбір бөлшектің жеке-дара тербелістерінің бейберекет сипатта таралуы бүкіл жүйедегі ауқымды макроскопиялық өзгерістерге алып келеді. Термодинамикадағы шамалардың орташа мәні деп олардың уақыт немесе ансамбль бойынша орташалануын айтамыз. Жүйені сипаттайтын температура, қысым және тығыздық секілді параметрлердің мәндері орташаланған мәндерден ауытқи бастайды. Температураның флуктуациясы–газдың кішігірім бөлігінде кинетикалық энергиялары жоғары немесе төмен бөлшектердің аз немесе көп болуынан бөліктің температурасының орташаланған мәннен өзгеше болуы. Ал қысымның флуктуациясы қарастырылып отырған газ бөлігіндегі бөлшектердің жылдамдықтары әртүрлі мәнді қабылдауы салдарынан орын алады. Жүйенің әртүрлі аймағанда бөлшектер санының бірдей болмауы тығыздық флуктуациясына әкеледі. Осы тектес флуктуациялар мардымсыз болғанымен, олар кішігірім көлем мен төменгі температурадағы жүйелердің макроскоптық қасиеттерінің елеулі өзгерістерге ұшырауына себепші бола алады. Термодинамикалық тепе-теңдік жағдайда тұрған жүйе үшін мардымсыз флуктуациялар қауіпті емес. Ал тепе-теңсіздік жүйедегі флуктуациялар макроскоптық және диссипативтік қасиеттерге елеулі ықпалын тигізеді анық. Фазалық өтулер (ауысулар) кезінде параметрлік флуктуациялар едәуір күшейеді [1,2].

Флуктуациялар теориясының негізін қалаушылар – Альберт Эйнштейн мен Мариан Смолуховскийдің броундық қозғалыс пен флуктуациялар теориясына қатысты еңбектерінде термодинамиканың екінші бастамасының статистикалық түсіндірмесі және бастаманың қолданылу шекарасы жайында баяндалған. Сонымен бірге, бұл еңбектерде флуктуация ұғымы, оны есептеу тәсілдері және олардың негізгі деген термодинамикалық параметрлермен байланысы қарастырылған. Флуктуациялардың болуы – заттың атомдық құрылымы мен жылулық қозғалыстардың хаустылығының дәлелі, ал бұл түсініктер статистикалық физиканың негізгі принциптеріне жатады. А. Эйнштейн мен М. Смолуховский және олардан басқа да ғалымдардың еңбектерінен кейін

физика ғылымында үстемдік құрып келген детерминистік динамика заңдылықтарына түзетулер енгізіліп, құбылыстар мен процестер физикалық статистиканың ықтималдылық концепцияларына негізделген заңдар бойынша түсіндіріле бастады. Мысалы, ауа тығыздығының флуктуациялық өзгерісінен аспан көк түсті болып көрінеді. Асқын қаныққан ерітінділердегі жаңа фазалық күйлердің пайда болуы, өлшеуіш құралдардың сезгіштік шегі, радиобайланыстағы кедергілердің болу себептері флуктуация теориясымен түсіндіріледі. Қазіргі заманғы зерттеушілердің жасап жатқан еңбектерінде [4-8] әртүрлі жүйелер мен күйлердің флуктуация әсерінен қасиеттерінің өзгеруіне қатысты тұжырымдамалар жасалған.

Әдіснама

Термостатпен тепе-теңдікте тұрған жүйелер *Гиббстің каноникалық үлестірім* заңына бағынады, яғни жүйелердің температурасы, бөлшектер саны және сыртқы параметрлер бекітілген (өзгермейтін) мәнде болады да, энергия мен кейбір шамалар тепе-теңділік мәндерінің маңында тербеліп тұрады. Флуктуациялары каноникалық үлестірім бойынша шешуге келмейтін күрделі есептерге (мәселелерге) кез-келген физикалық шаманың флуктуация ықтималдығын жүйенің өлшеуге болатын (өлшенетін) термодинамикалық шамалары арқылы өрнектеу тәсілі қолданылады. Бұл тәсіл бойынша, флуктуациялар жүйенің ықтималдылығы жоғары күйлерден ықтималдылығы төмен күйлерге өтуі кезінде байқалады, бұл жағдай термодинамика тілінде жүйенің энтропиясы көп күйден энтропиясы аз күйге өтуі болып табылады. Осыған сәйкес, Эйнштейн күйлердің ықтималдылығын энтропияның өзгерісі арқылы есептеуді Больцман формуласы арқылы жүргізуді ұсынған болатын.

Флуктуацияларды есептеуге (сипаттауға) арналған математикалық тәсілдер әртүрлі жүйелер мен процесстер кезінде орташа мәннен кездейсоқ ауытқуларға статистикалық және ықтималдылық тұрғысынан талдау жасауға негізделген. Бұл тәсілдер ауытқудың шамасына, табиғатына сандық баға беріп қана қоймай, олардың келесі кезеңдердегі жағдайларын да болжап бере алады. *Статистикалық талдау әдісі* мынадай ретпен жүргізіледі: дисперсия және стандарттық ауытқу; ауытқу коэффициенті; корреляциялық талдау; ықтималдылықтардың үлестірім функциясы [3]. *Спектрлік талдау әдісінде* флуктуациялар жиіліктері әртүрлі синусойдалы толқындар жиынына жіктеледі де қандай жиілік флуктуацияға көбірек үлес қосатындығы анықталады. *Фракталды талдау әдісі* флуктуациялардың ауқымын анықтайды. Кездейсоқ процестерді модельдеу үшін көбіне *Монте-Карло тәсілі* қолданылады. Мақалада жүргізілетін есептеулер кезінде келтірілген тәсілдермен қатар теориялық физиканы математикалық аппаратын құрайтын басқа да тәсілдер қолданылатын болады.

Нәтижелер мен Талқылау

Жоғарыда атап өтілгендей, термостатпен тепе-теңділікте тұрған бөлшектен құралғае жүйеге статистикалық тұрғыда сипаттама жасау барысында американдық физик Гиббс (Josiah Willard Gibbs; 1839-1903) ұсынған ансамбльдегі бір жүйеден екінші бір жүйеге

өткен кезде энергия (E) әртүрлі кездейсоқ мәндер бойынша анықталап отырады (энергия флуктуациясы). Бұл жағдай энергияға арналған үлестірім функциясының ені шектеулі екендігін білдіреді және оның салыстырмалы шамасы төмендегідей:

$$\frac{E}{\langle E \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (1)$$

Гиббстің каноникалық үлестірімі арқылы энергия флуктуациясын дәл есептеп шығаруға болады. Ол үшін флуктуация дисперсиясын анықтап алуымыз қажет:

$$\langle (\delta E)^2 \rangle = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - U^2 \quad (2)$$

Мұндағы $U = \langle E \rangle$ – ішкі энергия:

$$U = \frac{1}{N!} \int E \lambda(E) \omega(E) dE \quad (3)$$

Бұл өрнектегі $\lambda(E)$ – статистикалық үлестірім функциясы; $\omega(E)$ – энергиялары E және $E+1$ екі гипербеттер арасындағы фазалық кеңістіктің көлемі. (3)-ке Гиббстің каноникалық үлестірімін әкеліп қойып [4], $\lambda(E)$ -ге арналған нормалау (шектеу) шартын қолдансақ, онда орташа энергия үшін төмендегі ықшамды ғана өрнекті аламыз:

$$\langle E \rangle = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V \quad (4)$$

Мұндағы F – жүйенің еркін энергиясы, ал V – жүйе үшін сыртқы параметр болып табылатын көлем. (4)-те $\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = -S$ болғандықтан (S – жүйенің энтропиясы):

$$\langle E \rangle = F + TS \quad (5)$$

(4) және (5) өрнектеріндегі шамалар бойынша жүйе жайлы мынадай жағдайдалардан хабардар бола аламыз: энтропия жүйенің ретсіздік өлшемі болғандықтан, ол арқылы жұмыс ретінде қолдана алмайтын қажетсіз энергия дәрежесін анықтай аламыз. Энтропия неғұрлым жоғарылаған сайын жүйедегі ретсіздіктің сипаты да соғұрлым жоғары. Олай болса, жүйенің пайдалы жұмысқа қажетті энергияға деген мүмкіндігі аз бола береді деген сөз. Сонымен бірге, Гиббс үлестірімі жағдайында жүйенің барлық ықтимал күйлері төменгі еркін энергия мен энтальпияны, керісінше жоғары дәрежелі энтропияны иемденеді.

Дәл жоғарыда келтірілген әдіспен кездейсоқ энергия квадратының орташа мәнін есептеуге болады және оның нәтижесі төмендегі қатынаспен өрнектелген:

$$\langle E^2 \rangle = U^2 + \theta^2 \left(\frac{\partial U}{\partial \theta} \right)_V \quad (6)$$

$\theta = kT$, $\left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = C_V$ (тұрақты көлем жағдайындағы жылу сиымдылық) теңдіктерін ескеріп, ең соңында мынадай нәтижеге қол жеткіземіз:

$$\langle (\delta E)^2 \rangle = C_V (kT)^2 \quad (7)$$

Осы формуланы шығару барысында көлем тұрақты болғандықтан энергия флуктуациясы жүйенің термостатпен кездейсоқ жылу алмасуы нәтижесінде орын алады деген ұйғарым жасалған болатын [5,6]. Біратомды идеал газ жағдайына $U = \frac{3}{2} NkT$ және $C_V = \frac{3}{2} Nk$ теңдіктері сәйкес келетінін ескере отырып энергияның салыстырмалы флуктуациясы бөлшектер саны арасындағы тәуелділік (1)-шартпен дәл келетін төмендегі өрнекті шығарып алу қиын емес:

$$\sqrt{\frac{\langle (\delta E)^2 \rangle}{U}} = \sqrt{\frac{2}{3N}} \quad (8)$$

Дәл осындай жолдармен N бөлшектің флуктуациясының дисперсиясын Гиббстің үлкен каноникалық үлестірімі арқылы есептеп шығаруға болады. Анықтама бойынша

$$\langle N^2 \rangle = \int N^2 \exp \left\{ \frac{\omega + \mu N - H}{kT} \right\} \frac{d\Gamma dN}{N!} \quad (9)$$

Параметр бойынша дифференциалдауды орындап, төмендегі

$$d\Gamma = \frac{dV_{2f}}{(2\pi\hbar)^f}, \quad \left(\frac{\partial \omega}{\partial \mu} \right)_{T,V} = -\langle N \rangle, \quad (10)$$

қатынастарды ескеретін болсақ, нәтижеде флуктуация дисперсиясының төмендегідей өрнегіне қол жеткізетін боламыз:

$$\langle (\delta N)^2 \rangle = \frac{kT}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial \langle N \rangle} \right)_{T,V}} \quad (11)$$

Дифференциалдау амалдары бөлшектердің орташа саны бойынша жүргізіледі, бұл дегеніміз бөлшектер санының орта мәннен салыстырмалы орашаланған ауытқу шамасы энрегияның салыстырмалы флуктуациясы секілді өрнекпен анықталады дегенді білдіреді, яғни

$$\sqrt{\frac{\langle (\delta N)^2 \rangle}{\langle N \rangle}} = \frac{1}{\sqrt{\langle N \rangle}} \quad (12)$$

Басқа да термодинамикалық шамалардың флуктуацияларын есептеу статистикалық үлестірімді термостаттағы жүйеге лайықтап қолдану қажет болады. Алайда, бұл тәсілден де қолайлы тағы бір жол бар, ол– энтропия мен тепе-теңділік емес күйлердің ықтималдылықтары арасындағы байланыс (Больцман принципі). Тұйық жүйенің қандай да бір бөлігінің тепе-теңділік жағдайдан ауытқу ықтималдылығы $\Omega = \exp \left(\frac{S}{k} \right)$ энтропиясымен анықталады. Тепе-теңсіз күй ықтималдылығы тығыздығының (ρ) тепе-теңділік күй ықтималдылығы тығыздығына (ρ_0) қатынасы [7]

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \exp \left\{ \frac{S - S_0}{k} \right\} \quad (13)$$

бұл өрнектен мына жағдайды байқауға болады: энтропиясы мен термодинамикалық параметрлері тепе-теңділік мәннен мардымсыз ғана өзгешелікте болатын күйлердің тепе-теңділік жағдайдан ауытқу ықтималдылықтары жоғары болады. Тепе-теңділік жағдайдан ауытқу қандай да бір термодинамикалық β параметріне байланысты болса (ол температура, көлем, қысым және т.б. болуы мүмкін), онда осы тепе-теңсіздік күй ықтималдылығының тығыздығы

$$\rho(\beta) = C \exp \left\{ \frac{S(\beta) - S(\beta_0)}{k} \right\} \quad (14)$$

Бұл қатынаста C – тұрақты, ал β_0 – тепе-теңділік мән. Жоғарыда айтылғандай, тепе-теңділіктен флуктуациялық ауытқу өте аз шама болғандықтан, яғни $|\beta - \beta_0| = x \ll \beta_0$, энтропияны $\beta = \beta_0$ нүктесі маңында Тейлор қатарына жіктеуге болады:

$$S(\beta) = S(\beta_0) + \left(\frac{\partial S}{\partial \beta} \right)_0 x + \left(\frac{\partial^2 S}{\partial \beta^2} \right)_0 x^2 + \dots + \quad (15)$$

Тепе-теңділік жағдайда энтропия максималды мәнде болғандықтан мынадай белгілеу жасап алғанымыз дұрыс:

$$\frac{1}{k} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial \beta^2} \right)_0 = -\alpha, \quad \alpha > 0 \quad (16)$$

Олай болса, тепе-теңсіздік күй ықтималдылығының тығыздығы термодинамикалық шамалардың тепе-теңділік мәндерден кездейсоқ мардымсыз ауытқуларының (x) функциясы болады екен:

$$\rho(x) = c \exp \left\{ -\frac{x^2}{2\langle x^2 \rangle} \right\} \quad (17)$$

Мұнда $\langle x^2 \rangle$ – термодинамикалық шамалар флуктуацияларының дисперсиясы:

$$\langle x^2 \rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp \left\{ -\frac{\alpha x^2}{2} \right\} dx = \frac{1}{\alpha} \quad (18)$$

Осы келтірілген теориялық тұжырымдамалар мен формулалар бойынша басқа да термодинамикалық шамалардың флуктуациясының дисперсиясына арналған өрнектерді алуға болады [8, 9]. Ескере кететін бір жағдай, температура мен көлем флуктуациялары өзара тәуелсіз, яғни $\langle \Delta T \Delta V \rangle = 0$:

$$\langle (\Delta T)^2 \rangle = \frac{kT^2}{C_V}, \quad \langle (\Delta V)^2 \rangle = -\frac{kT}{\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T} \quad (19)$$

Ал, бұл шамалардың бір атомды идеал газ жағдайындағы салыстырмалы флуктуациялары үшін төмендегі қатынастар орындалады:

$$\frac{\sqrt{\langle (\Delta T)^2 \rangle}}{T} = \sqrt{\frac{2}{3N}}, \quad \frac{\sqrt{\langle (\Delta V)^2 \rangle}}{V} = \sqrt{\frac{1}{N}} \quad (20)$$

Тығыздықтың салыстырмалы флуктуациясына арналған өрнекті алу үшін $\rho V = m$ теңдігінен алынған тығыздық пен көлемнің өзгерістері арасындағы $\frac{\Delta \rho}{\rho} = -\frac{\Delta V}{V}$ байланысты квадраттап, содан соң орташалау керек. Нәтижеде алатынымыз:

$$\frac{\langle (\Delta \rho)^2 \rangle}{\rho^2} = \frac{\langle (\Delta V)^2 \rangle}{V^2} = \frac{kT}{V^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial V} \right)_T} \quad (21)$$

Тығыздық арқылы газдың диэлектрлік өтімділігі мен сыну көрсеткіші анықталатыны белгілі [10-13]. Критикалық күйге жақындаған кезде тығыздық флуктуациясы арта бастайды, сәйкесінші сыну көрсеткішінің флуктуациясы да көбейеді. Бұл өз кезегінде газдың жарықты шашыратуын күшейтеді.

Жоғарыда келтірілген температура мен көлем флуктуациялары дисперсиясына арналған өрнектерді пайдаланып ішкі энергия флуктуациясын есептеп шығарайық. Ол үшін алдымен бірінші дифференциалға арналған формуланы негізге ала отырып төмендегі теңдікті жазамыз:

$$\Delta U = \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T \Delta V + \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V \Delta T = \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] \Delta V + C_V \Delta T \quad (22)$$

Осы өрнектің екі жағын да квадраттап, сонан соң орташалаған соң мынадай нәтижеге қол жеткіземіз:

$$\langle (\Delta U)^2 \rangle = -kT \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right]^2 \Delta V + C_V kT^2 \quad (23)$$

Жүйенің тепе-теңді күйден флуктуациялық күйге өтуін зерттеге қолайлы болып табылатын осы қарастырылған тәсіл арқылы термодинамикалық параметрлердің флуктуацияларын бағалаумен бірге белгілі бір ортадағы макродененің күйін сипаттайтын механикалық шамалардың да флуктуацияларын есептеуге болады [14-16]. Айталық, тепе-теңділік жағдайдағы сұйық немесе газда массасы M дене тыныштықта тұрған болсын. Орта молекулаларының соққылауы нәтижесінде дененің массалар центрі бейберекет қозғалыстар жасауға мәжбүр болады. Дененің осы флуктуациялық күйі массалар центрі жылдамдығының кездейсоқ v мәні арқылы сипатталатын болады. Денені қозғалыссыз тепе-теңділік күйден флуктуациялық күйге өткізу үшін атқарылатын ең аз жұмыстың мөлшері кинетикалық энергияның өзгерісіне тең: $A = \frac{Mv^2}{2}$. Осы арқылы флуктуациялық күй ықтималдылығының тығыздығын анықтауға болады:

$$\rho = \exp \left\{ -\frac{A}{kT} \right\} \quad (24)$$

Мұндағы T – тепе-теңділік жағдайдағы ортаның температурасы. Алынған теңдікті қалыпты үлестіріммен салыстыра отырып дененің флуктуациялық жылдамдығының дисперсиясына арналған өрнекті жазуға болады:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{kT}{M} \quad (25)$$

Сонымен бірге, бұл қатынас броундық қозғалысты да сипаттауға қауқарлы.

Қорытынды

Мақаладағы негізгі ой (идея) көп бөлшекті жүйедегі флуктуацияларды статистикалық тұрғыда сипаттау болатын және ол өз нәтижесіне (межесіне) жетті деуге болады. Гиббстің каноникалық үлестірімі бойынша кездейсоқ жылу алмасулардың салдарынан орын алатын энергия, бөлшектер саны флуктуациялары мен олардың дисперсиясы және кездейсоқ энергия квадратының орташа мәні есептелді. Осы есептеулерді бір атомды идеал газға қолдана отырып газ энергиясының салыстырмалы флуктуациясына арналған формуласы алынды. Энтропия мен тепе-теңділік емес күйлердің ықтималдылықтары арасындағы байланыстарды басшылыққа алатын әдіс бойынша термодинамикалық шама флуктуациясының дисперсиясына арналған өрнек пен тепе-теңсіздік күй ықтималдылығы тығыздығын есептейтін формулаға қол жеткізілді. Сол арқылы тепе-теңсіздік күй ықтималдылығының тығыздығы термодинамикалық шамалардың тепе-теңділік мәндерден кездейсоқ мардымсыз ауытқуларының функциясы екендігі дәлелденді. Аталған өрнектер мен формулаларды қолдана отырып бір атомды идеал газ жағдайы үшін температура, көлем және тығыздық флуктуацияларының дисперсиясы мен осы шамалардың салыстырмалы флуктуацияларына арналған өрнектері шығарылып көрсетілді. Солар арқылы ішкі энергияның флуктуациясын есептеуге де мүмкіндік туды. Термодинамикалық параметрлердің флуктуацияларымен бірге белгілі бір ортадағы макроскоптық дененің күйін сипаттайтын механикалық шамалардың да флуктуацияларын есептеуге болатын жағдай ретінде тепе-теңділіктегі сұйықтағы (немесе газдағы) тыныштықта тұрған дененің орта молекулаларының соққылауы салдарынан флуктуациялық күйге өтуі қарастырылып, флуктуациялық күй ықтималдылығының тығыздығы мен дененің флуктуациялық жылдамдығының дисперсиясы есептеп шығарылды.

Флуктуациялардың түрлі ғылым және өнеркәсіп салаларында қолданысына қысқаша тоқталып өтейік. 10^{23} бөлшек қамтылған макрожүйелерде флуктуацияның салыстырмалы амплитудасы көп бөлшек заңына сәйкес мардымсыз аз, ал наномасштаб жағдайында параметрлердің салыстырмалы флуктуациясы жоғары дәрежелі көрсеткіштермен өлшенеді. Әсіресе, заманауи нанотехнологиялық деңгейдегі флуктуацияларды зерттеудің маңызы зор. Наножүйелердегі флуктуациялардың екі жақтылы табиғаты бар: жылулық және кванттық. Графенді транзисторлар секілді наноэлектрондық қондырғыларда өткізгіштік флуктуациясының маңыздылығы жоғары. Наномеханикалық жүйелердегі кездейсоқ тербелістер жүйені құрылымдық қайта құруларға және оның функционалдылық сипаттамаларының өзгерісіне әкеледі. Наножүйелердегі флуктуацияларды зерттеудің өзектілігі мына жағдайларға байланысты: электроника мен сенсорлар үшін орнықты наноқондырғылар жасау; функционалды элементтерді шағындау; басқарылатын флуктуацияларды жаңа технологияларға қолдану.

Плазмалық флуктуациялар плазманың диагностикасында қолданылады, дәлірек айтқанда: токтар мен магнит өрістерінің сипаттамаларын анықтауда; плазмалық ортаның пішіні мен орнын белгілеуде; плазманың газдыгинетикалық қысымын

бағалауда. Аталған тәсілдердің көмегімен токамактар мен разрядтардағы магнит өрістері арқылы жоғары температуралы плазманы ұстап тұру шарасы іске асырылады. Бұлар электромагниттік датчиктер көмегімен магнит өрісін өлшеу және оның өзгерістерін тіркеуге негізделген.

Авторлардың қосқан үлесі.

Т.Б. Қоштыбаев – мақала теориялық және математикалық физика саласына қатысты болғандықтан оның тақырыбына сәйкес келетін идеялар мен ұсыныстарды жасап, мақаланың жазылу жоспарын жасаушы. Сонымен бірге, мақала мәтініндегі бірқатар есептеулерді орындап, өрнек немесе формула түріндегі нәтижелерді алған. Атап айтқанда, энергия флуктуациясы, бөлшектер саны флуктуациясының дисперсиясы мен кездейсоқ энергия квадратының орташа мәнін; бір атомды идеал газ энергиясының салыстырмалы флуктуациясына арналған және термодинамикалық шама флуктуациясының дисперсиясына арналған жалпыламалық өрнекті, тепе-теңсіздік күй ықтималдылығы тығыздығын есептейтін формула. Мақаланың талапқа сай рәсімделуіне де атсалысқан. Тақырыпқа сай қазіргі заманғы зерттеулерді саралап, әдебиеттер тізімін жасауға үлес қосқан. Ілеспе хатты әзірлеп, редакцияға жолдауды іске асырды.

А.М. Татенов – мақаланың аңдастпасын үш тілде жасаушы және қорытынды бөлімдегі флуктуацияның наножүйелер мен плазмадағы қолданысын орындаушы. Осылармен бірге, пайдаланылған әдебиеттер тізіміндегі дереккөздердегі тақырыптың ауқымын белгілеуші. Есептеу амалдарындағы нәтижелердің дұрыстығын қайта тексеруден өткізді. Тәжірибелі ғалым-ұстаз ретінде мақаланың өн бойындағы процестерге кеңес беруші.

М.Е. Алиева – бір атомды идеал газ жағдайы үшін температура, көлем және тығыздық флуктуацияларының дисперсиясы мен осы шамалардың салыстырмалы флуктуацияларына арналған өрнектері шығарып көрсетті. Сонымен бірге, энергияның флуктуациясын есептеді. Мақаланың талапқа сай рәсімделуіне де атсалысқан, аңдатпаның орыс және ағылшын мәтіндерін жазды, әдебиеттер тізімінің ағылшын нұсқасын жасады және мақаланы сайт арқылы редакцияға жолдады.

К.К. Жантлеуов – мақаладағы барлық математикалық есептеулерді тексеріп шықты және жүйенің тепе-теңді күйден флуктуациялық күйге өтуін сипаттайтын тәсіл арқылы термодинамикалық параметрлердің флуктуацияларымен бірге белгілі бір ортадағы макроскоптық дененің күйін сипаттайтын механикалық шамалардың да флуктуацияларын есептеуге болатын жағдайлардың математикалық негіздемесін жасады. Әдебиеттер тізімін жасақтауға атсалысты.

Әдебиеттер тізімі

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика. Статистическая физика (Физматлит, Москва, 2010), с. 616
2. В.Л. Матухин, Е.В. Шмидт, Основы статистической физики (Казан. гос. ун-т, Казань, 2018), с. 84
3. А. В. Кузнецов, Термодинамика (Изд во Урал. ун та, Екатеринбург, 2023), с. 196

4. Г. А. Мартынов, Фазовые переходы и флуктуации в классической статистической механике, Теплофизика высоких температур. №4, с. 627-630 (2017), DOI: <https://doi.org/10.7868/S0040364417040123>
5. В.А. Грачев, Термодинамическая характеристика взаимодействия фаз при плавке чугуна в условиях температурных флуктуаций, Известия высших учебных заведений. Черная Металлургия. № 60 (5), с. 391-397 (2017), DOI: <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2017-5-391-397>
6. Е.В. Фоминов, В.Е. Гвинджилия, А.А. Марченко, К.Г. Шучев, Влияние периодических флуктуаций параметров режимов резания на температуру передней поверхности токарного резца, Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don). Машиностроение и машиноведение. № 25 (1), с. 32-42 (2025), DOI: <https://doi.org/10.23947/2687-1653-2025-1-32-42>
7. А.Н. Павлов, О.Н. Павлова, А.А. Короновский, Модифицированный метод флуктуационного анализа нестационарных процессов, Письма в журнал технической физики, №6, с. 47-50 (2020), DOI: <https://doi.org/10.21883/PJTF.2020.06.49166.18136>
8. И. И. Наркевич, Е. В. Фарафонтова, Статистическое исследование флуктуации поля плотности в сферических молекулярных наночастицах, Труды БГТУ. Серия физико-математические науки и информатика, № 2 (284), с. 25-30 (2024), DOI: <https://doi.org/10.52065/2520-6141-2024-284-4>
9. I. I. Narkevich, E. V. Farafontova, Two-level statistical description of structure of homogeneous macroscopic system and spherical crystalline nanoparticles, Nanoscience and Technology: International Journal 10 (4), p. 365-376 (2019), DOI: <https://doi.org/10.52065/2520-6141-2021-248-2-41-46>
10. Г. М. Батанов, В. Д. Борзосекков, А. К. Горшенин, К. А. Сарксян, В. Д. Степахин, Н. К. Харчев, Изменение статистических характеристик турбулентных флуктуаций плотности плазмы при транспортном переходе в стеллараторе Л-2М, Физика плазмы, № 7, с. 599-612 (2022), DOI: <https://doi.org/10.31857/S0367292122100092>
11. G. M. Batanov, V. D. Borzosekov, N. K. Kharchev, A. A. Letunov, D. V. Malakhov, K. A. Sarksyian, D. G. Vasilkov, Spatiotemporal evolution of turbulent plasma density fluctuations and of their kurtosis value during modulated ECRH at the L-2M stellarator, 46th EPS Conference on Plasma Physics, 8-12 July, 2019, Milan, Italy, proceedings, P2.1095. DOI: <http://ocs.ciemat.es/EPS2019PAP/pdf/P2.1095.pdf>
12. Л. И. Буров, А. С. Горбачевич, П. М. Лобацевич, Влияние различных источников флуктуаций на статистические характеристики выходного излучения поверхностно излучающих полупроводниковых лазеров, Журнал Белорусского государственного университета. Физика, № 3, с. 12-21 (2019), DOI: <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-12-21>
13. B. Park, A. Pitňa, J. Šafránková, et al. Change of spectral properties of magnetic field fluctuations across different types of interplanetary shocks, The Astrophysical Journal Letters 954 (2), (2023), DOI: <https://doi.org/10.3847/2041-8213>
14. A. Pitňa, J. Šafránková, Z. Němeček, et al. Turbulence upstream and downstream of interplanetary shocks, Frontiers in Physics Vol. 8, no. 626768 (2021), DOI: <https://doi.org/10.3389/fphy.2020.626768>
15. V. P. Koshcheev, D. A. Morgun, T. A. Panina, Y. N. Shtanov, Influence of Quantum Fluctuations on the Stochastic Dynamics of the Channeling Effect of Relativistic Electrons and Positrons, Journal of Surface Investigation. X-ray Synchrotron and Neutron Techniques 6 (1), p. 168-171 (2021), DOI: <https://doi.org/10.33581/2525-2243-2021-3-13-11>
16. A. V. Kolesnichenko, B. N. Chetverushkin, Kinetic derivation of a quasihydrodynamic system of equations on the base of nonextensive statistics, Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling 28 (6), p. 547-576 (2022), DOI: <https://doi.org/10.1515/rnam-2013-0031>

Т.Б. Коштыбаев¹, А.М. Татенов¹, М.Е. Алиева^{*2}, К.К. Жантлеуов²

¹Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан

²Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан
(E-mail: moldir-2008@mail.ru)

Флуктуации в больших классических системах

Аннотация. На основе статистических закономерностей описаны флуктуации в много-частичной системе Гиббсовского ансамбля, находящейся в тепловом равновесии с термостатом. В частности, были рассчитаны на основе канонических распределений Гиббса флуктуация энергии в случайных тепловых обменах, дисперсия флуктуаций числа частиц и среднее значение квадрата случайной энергии. В соответствии с результатами этих расчетов также была получена формула для относительных флуктуаций энергии одноатомного идеального газа. Для расчета флуктуаций любой физической величины необходимо выразить изменение энтропии через эту величину. На основе этого широко используемого термодинамического принципа и с учетом взаимосвязи вероятностей энтропий и неравновесных состояний была выведена обобщенная формула для дисперсии флуктуации термодинамической величины, а также формула для расчета плотности вероятности неравновесного состояния. С помощью полученной формулы было выявлено, что плотность вероятности неравновесного состояния есть функция малых случайных отклонений термодинамических величин от их равновесных значений. С использованием полученных результатов были выведены выражения для дисперсий флуктуаций температуры, объема и плотности для одноатомного идеального газа, а также для относительных флуктуаций этих величин. Кроме того, была вычислена флуктуация внутренней энергии. Используя метод, рассматривающий переход системы из равновесного состояния в флуктуационное, наряду с флуктуациями термодинамических параметров были представлены критерий, с помощью которых можно вычислить флуктуаций механических величин, описывающих состояние макроскопического тела в определенной среде. В частности, рассматривается переход покоящегося тела в флуктуационное состояние в результате ударов молекул жидкости (или газа) и были вычислены плотность вероятности флуктуационного состояния и дисперсия флуктуационной скорости тела. Результаты были проанализированы и сделаны выводы, а также предоставлена информация о применениях флуктуаций в наносистемах и плазме.

Ключевые слова: флуктуация, равновесное состояние, термодинамические параметры, дисперсия, энергия, температура, объем.

T.B. Koshtybayev¹, A.M. Tatenov¹, M.E. Aliyeva^{*2}, K.K. Zhantleuov²

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

²Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan
(E-mail: moldir-2008@mail.ru)

Fluctuations in large classical systems

Abstract. Based on statistical regularities, this paper describes fluctuations in a multi-particle system of the Gibbs ensemble that is in thermal equilibrium with a thermostat. In particular, using Gibbs'

canonical distributions, we calculate energy fluctuations during random thermal exchanges, the variance of particle number fluctuations, and the mean square of random energy. According to the results of these calculations, a formula for the relative energy fluctuations of a monoatomic ideal gas was also obtained. To calculate the fluctuations of any physical quantity, it is necessary to express the entropy variation in terms of that quantity. Based on this widely used thermodynamic principle, and taking into account the relationship between entropy probabilities and non-equilibrium states, a generalized formula for the variance of thermodynamic quantity fluctuations was derived, along with a formula for calculating the probability density of a non-equilibrium state. Using the resulting formula, it was shown that the probability density of a non-equilibrium state is a function of small random deviations of thermodynamic quantities from their equilibrium values. Based on these results, expressions were derived for the variances of temperature, volume, and density fluctuations in a monoatomic ideal gas, as well as for the relative fluctuations of these quantities. Additionally, internal energy fluctuation was calculated. Using a method that considers the transition of a system from an equilibrium state to a fluctuating one, along with thermodynamic parameter fluctuations, a criterion was presented that enables the calculation of fluctuations in mechanical quantities that describe the state of a macroscopic body in a given medium. In particular, the transition of a resting body to a fluctuating state due to molecular impacts from a fluid (or gas) was considered, and the probability density and variance of the fluctuating velocity of the body were calculated. The results were analyzed and conclusions were drawn, and information on the applications of fluctuations in nanosystems and plasmas was provided.

Keywords: fluctuation, equilibrium state, thermodynamic parameters, variance, energy, temperature, volume.

References

1. L.D. Landau, E.M. Lifshic, Teoreticheskaja fizika. Statisticheskaja fizika [Theoretical physics. Statistical physics] (Fizmatlit, Moscow, 2010), p. 616 [in Russian].
2. V. L. Matuhin, E. V. Shmidt, Osnovy statisticheskoy fiziki [Fundamentals of Statistical Physics] (Kazan State University, Kazan, 2018), p. 84 [in Russian].
3. A.V. Kuznetsov, Termodinamika [Thermodynamics] (Ural Publishing House. University of Yekaterinburg, 2023), p. 196 [in Russian].
4. G.A. Martynov, Fazovye perehody i fluktuacii v klassicheskoy statisticheskoy mehanike [Phase transitions and fluctuations in classical statistical mechanics], Teplofizika vysokih temperatur [High temperature thermophysics] №4, p. 627-630 (2017), DOI: <https://doi.org/10.7868/S0040364417040123> [in Russian]
5. V.A. Grachev, Termodinamicheskaja harakteristika vzaimodejstvija faz pri plavke chuguna v uslovijah temperaturnyh fluktuacij [Thermodynamic characteristics of phase interaction during melting of cast iron under conditions of temperature fluctuations], Izvestija vysshih uchebnyh zavedenij. Chernaja Metallurgija [News of higher educational institutions. Ferrous Metallurgy] № 60 (5), p. 391-397 (2017), DOI: <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2017-5-391-397> [in Russian]
6. E.B. Fominov, V. E. Gvindzhilija, A. A. Marchenko, K. G. Shuchev, Vlijanie periodicheskikh fluktuacij parametrov rezhimov rezanija na temperaturu perednej poverhnosti tokarnogo rezca [The effect of periodic fluctuations in the parameters of cutting modes on the temperature of the front surface of the turning tool], Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don). Mashinostroenie i mashinovedenie

[Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don). Mechanical engineering and machine science] № 25 (1), p. 32-42 (2025),

DOI: <https://doi.org/10.23947/2687-1653-2025-25-1-32-42> [in Russian]

7. A. N. Pavlov, O. N. Pavlova, A. A. Koronovskij, Modificirovannyj metod fluktuacionnogo analiza nestacionarnykh processov [A modified method of fluctuation analysis of unsteady processes], Pis'ma v zhurnal tekhnicheskoy fiziki [Letters to the Journal of Technical Physics], №6, p. 47-50 (2020),

DOI: <https://doi.org/10.21883/PJTF.2020.06.49166.18136> [in Russian]

8. I. I. Narkevich, E. V. Farafontova, Statisticheskoe issledovanie fluktuatsii polja plotnosti v sfericheskikh molekuljarnykh nanochastichah [Statistical study of density field fluctuations in spherical molecular nanoparticles], Trudy BGTU. Seriya fiziko-matematicheskie nauki i informatika [Proceedings of BSTU. Series of physical and mathematical sciences and computer science], № 2 (284), p. 25-30 (2024),

DOI: <https://doi.org/10.52065/2520-6141-2024-284-4> [in Russian]

9. I. I. Narkevich, E. V. Farafontova, Two-level statistical description of structure of homogeneous macroscopic system and spherical crystalline nanoparticles, Nanoscience and Technology: International Journal 10 (4), p. 365-376 (2019),

DOI: <https://doi.org/10.52065/2520-6141-2021-248-2-41-46>

10. G. M. Batanov, V. D. Borzosekov, A. K. Gorshenin, K. A. Sarksjan, V. D. Stepahin, N. K. Harchev, Izmenenie statisticheskikh harakteristik turbulentnykh fluktuatsij plotnosti plazmy pri transportnom perehode v stellaratore L-2M [Changes in the statistical characteristics of turbulent plasma density fluctuations during a transport transition in the L-2M stellarator], Fizika plazmy [Plasma Physics], № 7, p. 599-612 (2022), DOI: <https://doi.org/10.31857/S0367292122100092> [in Russian]

11. G. M. Batanov, V. D. Borzosekov, N. K. Kharchev, A. A. Letunov, D. V. Malakhov, K. A. Sarksyanyan, D. G. Vasilkov, Spatiotemporal evolution of turbulent plasma density fluctuations and of their kurtosis value during modulated ECRH at the L-2M stellarator, 46th EPS Conference on Plasma Physics, 8-12 July, 2019, Milan, Italy, proceedings, P2.1095. DOI: <http://ocs.ciemat.es/EPS2019PAP/pdf/P2.1095.pdf>

12. L. I. Burov, A. S. Gorbacevich, P. M. Lobacevich, Vliyanie razlichnykh istochnikov fluktuatsij na statisticheskie harakteristiki vyhodnogo izlucheniya poverhnostno izluchajushhih poluprovodnikovyykh lazerov [The effect of various sources of fluctuations on the statistical characteristics of the output radiation of surface-emitting semiconductor lasers], Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Fizika [Journal of the Belarusian State University. Physics], № 3, p. 12-21 (2019),

DOI: <https://doi.org/10.33581/2520-2243-2019-3-12-21> [in Russian]

13. B. Park, A. Pitňa, J. Šafránková, et al. Change of spectral properties of magnetic field fluctuations across different types of interplanetary shocks, The Astrophysical Journal Letters 954 (2), (2023), DOI: <https://doi.org/10.3847/2041-8213>

14. A. Pitňa, J. Šafránková, Z. Němeček, et al. Turbulence upstream and downstream of interplanetary shocks, Frontiers in Physics Vol. 8, no. 626768 (2021), DOI: <https://doi.org/10.3389/fphy.2020.626768>

15. V. P. Koshcheev, D. A. Morgun, T. A. Panina, Y. N. Shtanov, Influence of Quantum Fluctuations on the Stochastic Dynamics of the Channeling Effect of Relativistic Electrons and Positrons, Journal of Surface Investigation. X-ray Synchrotron and Neutron Techniques 6 (1), p. 168-171 (2021),

DOI: <https://doi.org/10.33581/2525-2243-2021-3-13-11>

16. A. V. Kolesnichenko, B. N. Chetverushkin, Kinetic derivation of a quasihydrodynamic system of equations on the base of nonextensive statistics, Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling 28 (6), p. 547-576 (2022), DOI: <https://doi.org/10.1515/rnam-2013-0031>

Авторлар туралы мәліметтер:

Қоштыбаев Т.Б. – физика–математика ғылымдарының кандидаты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының профессоры м.а., Әйтеке би көшесі, 99, 050000, Алматы, Қазақстан

Алиева М.Е. – хат-хабар авторы, жаратылыстану ғылымдарының магистрі, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті физика кафедрасының аға оқытушысы, Достық даңғылы, 13, 050000, Алматы, Қазақстан

Татенов А.М. – физика–математика ғылымдарының кандидаты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының профессоры м.а., Әйтеке би көшесі, 99, 050000, Алматы, Қазақстан

Жантлеуов К.К. – физика–математика ғылымдарының кандидаты, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті математика кафедрасының доценті м.а., Достық даңғылы, 13, 050000, Алматы, Қазақстан

Koshtybayev T.B. – Candidate of physical and mathematical sciences, Acting Professor, Department of Physics, Kazakh National Women's Pedagogical University, Aiteke bi street, 99, 050000, Almaty, Kazakhstan

Tatenov A.M. – Candidate of physical and mathematical sciences, Acting Professor, Department of Physics, Kazakh National Women's Pedagogical University, Aiteke bi street, 99, 050000, Almaty, Kazakhstan

Aliyeva M.E. – corresponding author, Master of sciences, Senior lecturer, Department of Physics, Abai Kazakh National Pedagogical University, Dostyk Ave., 13, 050000, Almaty, Kazakhstan

Zhantleuov K.K. – Candidate of physical and mathematical sciences, Acting Associate Professor of the Department of Mathematics and Mathematical Modeling, Abai Kazakh National Pedagogical University, Dostyk Ave., 13, 050000, Almaty, Kazakhstan

Коштыбаев Т.Б. – кандидат физико–математических наук, и.о. профессора кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, ул. Айтеке би, 99, 050000, Алматы, Казахстан

Алиева М.Е. – автор для корреспонденции, магистр естественных наук, старший преподаватель кафедры физики Казахского национального педагогического университета имени Абая, пр. Достык, 13, 050000, Алматы, Казахстан

Татенов А.М. – кандидат физико–математических наук, и.о. профессора кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, ул. Айтеке би, 99, 050000, Алматы, Казахстан

Жантлеуов К.К. – кандидат физико–математических наук, и.о. доцента кафедры математики Казахского национального педагогического университета имени Абая, пр. Достык, 13, 050000, Алматы, Казахстан



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/>).



XFTAP 29.17.41

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-152-3-169-187>

Ғылыми мақала

Моделирование дефектных состояний и роли 4f-электронов в $Gd_3Ga_5O_{12}$ методами DFT

Ж.Т. Карипбаев¹, З. Умар², Г.М. Аралбаева*¹, А. Бақытқызы¹, А.М. Жунусбеков¹,
К.К. Кумарбеков¹, А.И. Попов^{1,4}

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

²Таджикский государственный педагогический университет имени С. Айни, Душанбе, Таджикистан

³Центр инновационного развития науки и новых технологий, Национальная академия наук Таджикистана, Душанбе, Таджикистан

⁴Институт физики твердого тела, Латвийский университет, Рига, Латвия

(E-mail: aralbayevagulnara@gmail.com)

Аннотация. Гадолиний-галлиевый гранат ($Gd_3Ga_5O_{12}$, GGG) представляет собой важный синтетический кристалл с широкой областью применения в лазерных системах, магнитооптике и радиационно-стойкой электронике. Фундаментальное понимание его электронной структуры и дефектных состояний необходимо для оптимизации оптических и функциональных свойств. Целью настоящей работы является исследование влияния различных видов дефектов и роли 4f-электронов иона Gd^{3+} на формирование зонной структуры и оптического отклика GGG в рамках современного теоретического метода – теории функционала плотности (ТФП, DFT). Квантово-механические расчёты выполнены с помощью программы VASP с использованием различных обменно-корреляционных функционалов: GGA-PBE, SCAN, mBJ и гибридного HSE06. Сравнительный анализ показал, что учёт 4f-электронов Gd^{3+} при моделировании оказывает значительное влияние на электронную структуру GGG: их включение приводит к формированию локализованных уровней как в валентной зоне, так и в зоне проводимости. Установлено, что заряженные вакансии $[GGG]Vo^{2+}$ смещают уровень Ферми, не создавая дефектных уровней, тогда как нейтральные вакансии $[GGG]Vo0$ формируют локализованные состояния внутри запрещённой зоны, что снижает прозрачность и ухудшает оптические характеристики кристалла.

Полученные результаты имеют фундаментальное и прикладное значение. С научной точки зрения, они уточняют роль сильно коррелированных 4f-электронов в гранатах и механизм влияния кислородных дефектов. С практической – дают основу для прогнозирования радиационной стойкости и разработки оптических материалов нового поколения. Настоящая работа вносит вклад в развитие физики дефектных состояний и теоретическое моделирование функциональных кристаллов.

Ключевые слова: гадолиний-галлиевый гранат, DFT, 4f-электроны, зонная структура, кислородные вакансии, плотность состояний, оптические свойства

Поступила 11.09.2025. После доработки 22.09.2025. Принята к печати 23.09.2025. Доступно онлайн 30.09.2025.

^{1*}автор для корреспонденции

Введение

Гадолиний-галлиевый гранат ($Gd_3Ga_5O_{12}$, GGG) является одним из наиболее востребованных синтетических кристаллов, который находит широкое применение в лазерной физике, оптоэлектронике, магнитооптике и радиационно-стойкой электронике. Он широко применяется в лазерных системах, микроволновой электронике, магнитооптических устройствах, а также служит подложкой для эпитаксиального роста тонких пленок, таких как иттрий-железный гранат (YIG) и другие функциональные материалы [1, 2]. Кроме того, кристаллы GGG и YAG ($Y_3Al_5O_{12}$) представляют значительный интерес в качестве детекторных материалов, используемых в ядерных исследованиях и медицинских технологиях [3-6]. Исследование их кристаллической и электронной структуры, а также свойств дефектов является важным шагом для оптимизации эксплуатационных характеристик и разработки новых оптоэлектронных технологий на основе GGG. Можно отметить, что наличие сильно коррелированных 4f-электронов в структуре GGG обуславливает его уникальные свойства.

Подробный анализ научной литературы показывает, что, несмотря на активные исследования в последнее время, вопросы, связанные с корректным описанием влияния 4f-электронов и дефектных состояний на электронную структуру и оптические характеристики GGG, остаются нерешенными. Известно, что теоретические исследования на основе теории функционала плотности (ТФП/DFT) подтверждают экспериментальные данные и дополняют их за счёт получения параметров, недоступных для прямого измерения в эксперименте. Расчёты показывают, что GGG является широкозонным диэлектриком с шириной запрещённой зоны $E_g \approx 5,66 \pm 0,01$ эВ [8], что объясняет высокую прозрачность этого материала в диапазоне длин волн 0,4-7,0 мкм. С другой стороны, известны что моделирование в рамках стандартного функционала LDA (Local density approximation – приближение локальной плотности) сильно недооценивает значение E_g (3,02 эВ) по сравнению с экспериментальным значением (5,66 эВ), что является следствием известной проблемы ТПФ при описании широкозонных полупроводников и диэлектриков. Для решения проблем, связанных с расчётом ширины запрещённой зоны, в современных теоретических исследованиях используются различные функционалы, такие как GGA-PBE, PBEsol, mBJ (модифицированный потенциал Бекке-Джонсона), SCAN, гибридные функционалы (HSE06), а также расчёты с учетом поправки Хаббарда (GGA+U), позволяющие учесть сильную корреляцию d- и f-электронов в системе [9].

Особое значение при эксплуатации GGG в условиях интенсивных радиационных полей имеет моделирование кислородных и катион-анионные антисайтные дефекты и связанных с ними F- и F⁺-центров. Именно локальная динамика F- и F⁺-центров во многом определяет деградацию оптических свойств в условиях экстремальных радиационных нагрузок, поэтому их моделирование имеет критически важное значение для разработки радиационно-стойких материалов. С этой точки зрения, актуальность настоящей темы исследования состоит в следующем. Во-первых, интенсивное развитие лазерных технологий и создание новых типов твердотельных генераторов требуют материалов с прогнозируемыми и контролируруемыми оптическими параметрами.

Во-вторых, использование GGG в качестве подложек для эпитаксиального роста и в элементах интегральной оптики обуславливает необходимость понимания дефектной природы подобных кристаллов. В-третьих, возросший интерес к радиационно-стойким материалам в связи с развитием космических технологий делает особенно важным изучение того, как кислородные вакансии и связанные с ними дефекты влияют на стабильность и прозрачность GGG. Существующие экспериментальные исследования, хотя и внесли значительный вклад в понимание свойств гранатов, но существуют следующие недостатки с наших взглядов. Во-первых, локальные состояния 4f-электронов Gd^{3+} слабо поддаются прямому экспериментальному наблюдению, что приводит к неоднозначным трактовкам полученных данных. Во-вторых, контроль и количественное определение дефектов, таких как кислородные вакансии и катион-анионные антисайты, представляют собой сложную задачу, в свою очередь требующую привлечения теоретических методов моделирования. В связи с этим, имеет очень важную роль вычислительные подходы, в первую очередь методов на основе теории функционала плотности (DFT), которые в том числе позволяют моделировать электронную структуру с учётом локализации 4f-электронов и влияния различных дефектов.

Объектом исследования в данной работе является оксид гадолиний-галлиевый гранат, а предмет исследования – электронная структура и дефектные состояния в структуре GGG.

Цель исследования заключается в теоретическом моделировании влияния 4f-электронов и дефектов на электронную структуру и оптические свойства GGG.

Для достижения поставленной цели, в рамках настоящей работы выполняются следующие шаги:

- Провести квантово-механические расчёты геометрической и электронной структуры GGG для каждого исследуемого объекта в отдельности;
- Сравнить плотности электронных состояний с учётом и без учёта 4f-электронов иона Gd^{3+} для выявления их вклада в формирование зонной структуры;
- Исследовать влияние заряженных и нейтральных F- и F⁺-центров дефектов на положение уровня Ферми и возможное появление локализованных уровней в запрещённой зоне;
- Установить взаимосвязь между дефектными состояниями и изменением оптических свойств GGG.

Методологической основой работы является теория функционала плотности (DFT), реализованная в пакет-программе VASP, который в последние годы стал широко используемым инструментом в области теоретического материаловедения. Гипотеза исследования заключается в том, что именно учёт локализованных 4f-электронов и моделирование с учетом дефектов являются ключевыми условиями для адекватного описания экспериментально наблюдаемых оптических свойств GGG. Ожидается, что нейтральные вакансии будут формировать дефектные уровни в запрещённой зоне, снижая прозрачность кристалла, тогда как заряженные вакансии приведут к смещению уровня Ферми без значительного ухудшения оптических характеристик.

Теоретическая значимость работы состоит в уточнении механизмов формирования зонной структуры и роли дефектных состояний в электронной структуре GGG, что

вносит вклад в развитие фундаментальной физики кристаллов с f-сильно коррелированными электронами. Практическая значимость заключается в создании основы для прогнозирования и улучшения характеристик кристаллов, используемых в лазерных и магнитооптических устройствах, а также в перспективных радиационно-стойких системах.

Таким образом, данная работа направлена на восполнение пробела в понимании электронной структуры GGG и её изменения под действием дефектов, что имеет как научную, так и прикладную ценность.

Методология

Квантово-механические расчёты из первых принципов были выполнены с использованием пакет-программы VASP [10], основанного на теории функционала плотности (DFT) и методе проекционных присоединённых волн (PAW) [11].

Оптимизация геометрической структуры «чистого» GGG проводилась с использованием GGA-PBE [12] и SCAN [13] функционалов. Электронная структура рассчитывалась с применением GGA-PBE, mBJ, SCAN и гибридного функционала Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06), SCAN – оптимизированный файл структуры использовались при mBJ и HSE06 расчетов электронной структуры. Энергия отсечки плоской волны была выбрана равной 520 эВ. Оптимизация позиций атомов была выполнена методом сопряженных градиентов с критерием сходимости 0,01 эВ/А, а условием сходимости для самосогласованных расчетов был инвариант полной энергии системы с точностью 10^{-6} эВ. Зоны Бриллюэна были построены с использованием сеток Монкхорста-Пака [14-16], включая сетки $2 \times 2 \times 2$ k-точек с центром в точке Гамма, для кубических элементарных ячеек GGG.

Для получения более точных результатов, особое внимание было уделено влиянию 4f-электронов на электронную структуру GGG. В расчетах применялись два типа стандартных PAW-потенциалов: в первый случай, выбрали в качестве валентных электронов $5p^6 5d^1 6s^2$ электроны, т.е. без включения 4f-электронов атома Gd^{3+} , во второй случай, PAW-потенциал включает $4f^7 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$ электронов в качестве валентных электронов. Такой подход позволяет выявить различия в плотности электронных состояний GGG.

С учетом того, что электронная конфигурация иона Gd^{3+} в структуре GGG включает сильно коррелированные как 4f-, так и 5d-электроны, моделирование проводилось в рамках метода DFT с учетом поправки Хаббарда (GGA+U). Были рассмотрены две модели. В первой модели использовался PAW-потенциал, в котором 4f-электроны не включены в число валентных (то есть находятся в острове). В этом случае поправка Хаббарда U применялась к 5d-орбиталям атома Gd^{3+} . Во второй модели в котором применялся PAW-потенциал с 4f-электроны в валентную зону, поправка Хаббарда U использовалась для 4f-орбиталей. Такой подход успешно применялся ранее для изучения электронных и магнитных свойств соединений типа XF_3 [17]. Значения параметра U были выбраны произвольно, а также с учетом рекомендации [17], для первого подхода (GGA+U для

5d-орбиталей) $U = 2$ эВ, а для второго подхода (GGA+U для 4f-орбиталей) $U = 5,7$ эВ. Моделирование кислородных вакансий проводилось для двух случаев: заряженных $[Vo]^{2+}$ и нейтральных $[Vo]^0$ дефектов в рамках метода GGA-PBE.

Таким образом, методология исследования сочетает в себе оптимизацию кристаллической структуры, расчёт электронной плотности состояний и зонной структуры с учётом и без учёта 4f-электронов, а также моделирование кислородных дефектов в разных зарядовых состояниях, что обеспечивает комплексное описание электронных и оптических свойств гадолиний-галлиевого граната.

Результаты и Обсуждение

Как выше отметили, объектом исследования данной работы является кристалл гадолиний-галлиевого граната (GGG), кристаллизующийся в кубической сингонии (пространственная группа Ia-3d, №230) и относящийся к структурному типу граната. Его элементарная ячейка содержит 160 атомов, что эквивалентно восьми формульным единицам GGG. Кристаллическая структура GGG характеризуется следующим распределением катионов: ионы Gd^{3+} занимают додекаэдрические позиции 24c (координационное число 8), а ионы Ga^{3+} распределены между октаэдрическими позициями 16a (КЧ = 6) и тетраэдрическими позициями 24d (КЧ = 4). Анионы кислорода, расположенные в позициях 96h, формируют трёхмерный каркас, соединяющий катионные подрешётки. Каждый атом кислорода координирован одним катионом Gd^{3+} и двумя катионами Ga^{3+} , что обуславливает формирование жёсткой и сложной оксидной структуры [7]. Визуализация элементарной ячейки GGG представлена на рис. 1.

Поскольку известно, что стандартное приближение локальной плотности (LDA) часто совпадает с экспериментальными геометрическими данными, с этой точки зрения геометрическая оптимизация GGG были проведены с использованием более совершенные функционалы: GGA-PBE и SCAN.

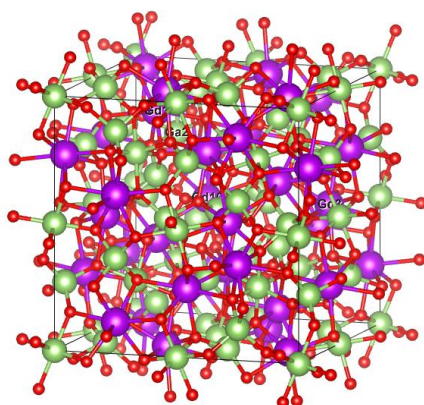


Рисунок 1. Кристаллическая структура GGG

Параметры решётки и длины связей Gd-O и Ga-O, оптимизированные с помощью функционалов GGA-PBE и SCAN, приведены в таблице 1. Расчётное значение длины

додекаэдрической связи Gd-O, полученное методом GGA-PBE, на 14,8% превышает длину октаэдрической связи Ga-O и на 21.2% – длину тетраэдрической связи Ga-O. Оптимизированный параметр решётки для GGA-PBE оказался на 0,91% больше экспериментального значения, в то время как для SCAN он на 0,32% меньше. В таблице 1 также представлены рассчитанные методом GGA-PBE параметры решётки и длины связей Gd-O и Ga-O для структур с дефектными по кислороду состояниями.

Экспериментальные данные, полученные методами рентгеновской и нейтронной дифракции, дают значение постоянной решётки $a = 12.383 \text{ \AA}$ и выявляют анизотропию в геометрии координационных полиэдров. Для додекаэдра GdO_8 наблюдаются два набора длин связей Gd-O: $2.38 \text{ \AA}$ и $2.52 \text{ \AA}$. Октаэдры GaO_6 характеризуются длиной связи $2.03 \text{ \AA}$, а в тетраэдрах GaO_4 длина связи Ga-O сокращается до $\sim 1.87 \text{ \AA}$. Ключевую роль в исследовании сыграла нейтронография, позволившая точно определить позиции лёгких атомов кислорода и изучить магнитную структуру кристалла.

Таблица 1. Сравнение рассчитанных и экспериментальных параметров решетки и длин межионных связей чистого GGG и GGG с дефектными состояниями [0]

Система	Параметр решетки и длина связи, $\text{\AA}$	Расчитанные		Эксп.
		GGA	SCAN	
$\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$	a	12.482	12.329	12.383
	Gd-O	2.377 2.478	2.449 2.355	2.38 2.52
	Ga-O x6	2.024	1.994	2.03
	Ga-O x4	1.873	1.849	1.87
$[\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}]\text{Vo}^{2+}$	a	12.509, 12.537, 12.515		
	Gd-O	2.472, 2.378, 2.381		
	Ga-O x6	2.024 2.031 2.027		
	Ga-O x4	1.892 1.891 1.892 1.892		
	a	12.565 12.593 12.574		
	Gd-O	2.391, 2.530, 2.371		

$[Gd_3Ga_5O_{12}]Vo^0$	Ga-O x6	2.036 2.042 2.052		
	Ga-O x4	1.902 1.903 1.903 1.899		

В Таблице 2 представлены результаты вычисления ширины запрещенной зоны GGG, полученные в рамках различных обменно-корреляционных функционалов. Проведенное вычисления демонстрирует сильную зависимость предсказанного значения ширины щели от выбранного метода расчета. Согласно нашим результатам: GGA-PBE дает сильно заниженное значение – примерно 3.8 эВ, что является известным систематическим недостатком этого функционала, SCAN существенно улучшает результат, повышая расчетное значение до ~4.6 эВ. Метод mBJ (модифицированный потенциал Беке-Джонсона) предсказывает значение, наиболее близкое к экспериментальным данным – ~6.0 эВ. Гибридный функционал HSE06 в данном случае дает результат (~4.53 эВ), сопоставимый с meta-GGA функционалом SCAN, что хуже ожиданий от гибридных подходов в данном случае. Сравнение с экспериментальными данными показывает, что наиболее адекватное описание обеспечивает функционал mBJ. В то же время, стандартный GGA-PBE сильно недооценивает ширину запрещенной зоны, а результаты HSE06 и SCAN занимают промежуточное положение, но все еще занижают экспериментальное значение. Эти результаты согласуются с существующей литературой, где отмечалось, что для корректного описания электронных свойств диэлектриков и широкозонных полупроводников необходимы более сложные подходы, такие как модифицированные потенциалы (mBJ) или гибридные функционалы, которые позволяют значительно улучшить согласие значения ширины запрещенной зоны с экспериментом по сравнению со стандартными методами LDA и GGA. Надо отметить, что в рамках настоящей работы, ширина запрещенной зоны вычислены только для первого модели, т. е. с PAW – потенциал с отсутствием f-валентных электронов.

Таблица 2. Сравнение рассчитанных и экспериментальной ширины запрещенной зоны GGG. Все значения указаны в эВ.

Системы	Вычисления				Эксп.
	GGA	SCAN	mBJ	HSE06	
$Gd_3Ga_5O_{12}$	3.764	4.561	5.986	4.531	5.66 [8]

На рис. 2 представлены графики парциальной плотности электронных состояний кристаллического GGG. Парциальная плотности электронных состояний для атома Gd приведена для двух случаев: с учётом и без учёта 4f-электронов (рис. 2а и 2б, соответственно). Анализ парциальных плотностей состояний показывает, что

валентная зона в основном формируется 2p-орбиталями кислорода (O), в то время как значительный вклад в зону проводимости вносят s-состояния галлия (Ga) и d-состояния гадолиния (Gd). Также в зоне проводимости присутствует незначительный вклад от p- и d-состояний атома Ga и s-состояний атома Gd, что свидетельствует о гибридизации между их орбиталями. С оптической точки зрения такая структура зон означает, что фундаментальный оптический переход при поглощении света представляет собой перенос заряда от O 2p- к Ga/Gd 5d-состояниям (что соответствует широкой полосе межзонного поглощения). Узкие 4f-уровни Gd, однако, не участвуют в этом переходе напрямую, поскольку подуровень $4f^7$ является заполненным, а прямые оптические переходы на нём электрически дипольно-запрещены. Тем не менее, эти уровни могут проявляться в виде внутрицентровых f-f переходов, характерных для редкоземельных ионов, и оказывает косвенное влияние на оптические свойства. Таким образом, анализ парциальной плотности электронных состояний позволяет чётко распределить роли каждой элементов в формирование общей плотности состояний: кислород определяет валентную зону, галлий и гадолиний – зону проводимости, а также имеют незначительный вклад в формирование валентной зоне. Наличие гадолиния в структуре GGA добавляет локализованные 4f-состояния, корректный учёт которых необходим для адекватного описания электронной структуры.

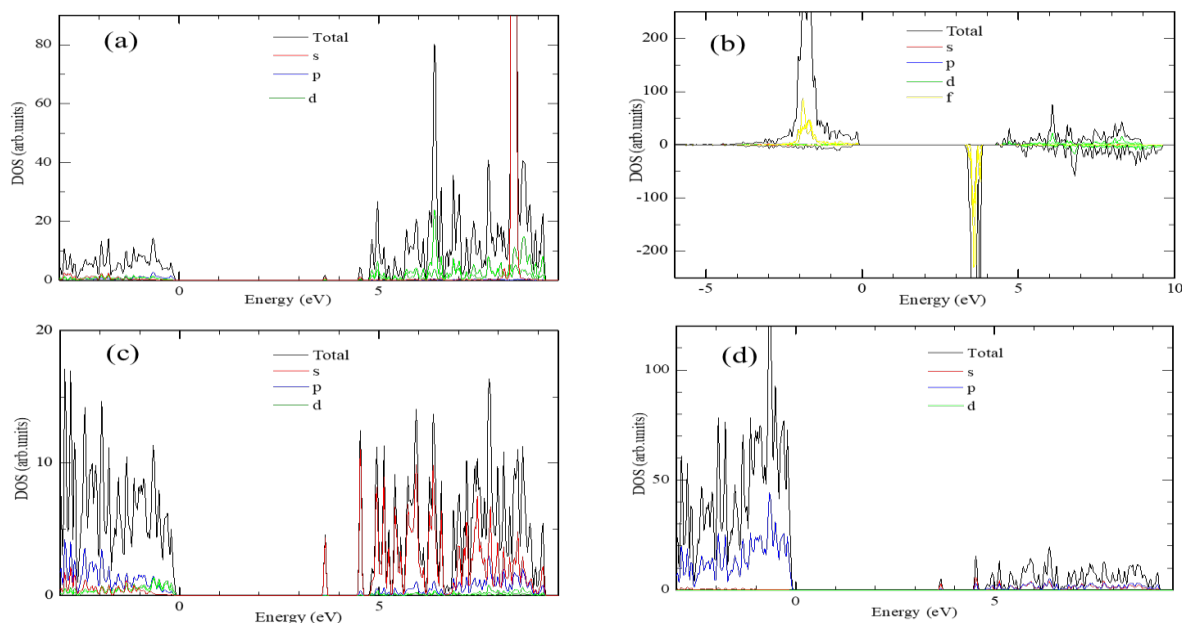


Рисунок 2. Парциальная плотность состояний (PDOS) GGG, рассчитанная в рамках метода GGA-PBE: (a) Gd, (b) Gd с учетом f-электроны, (c) Ga и (d) O

На рис. 3 представлены графики полной плотности электронных состояний (ППС) кристалла GGG, рассчитанные в рамках функционалов GGA-PBE (a) и SCAN (b) для PAW-потенциала, не включающего f-электроны. Видно, что общая картина ППС, полученная обоими методами (GGA-PBE и SCAN), качественно сохраняется: вклад атомов в зону

проводимости и валентную зону остаётся практически неизменным. Основные изменения наблюдаются лишь в области ширины запрещённой зоны. В связи с этим, учитывая, что отличия проявляются преимущественно в величине запрещённой зоны, мы сочли возможным не приводить полные графики ППС, рассчитанные с использованием функционалов mBJ, HSE06 и GGA+U, а ограничиться представлением соответствующих численных значений в таблице 2.

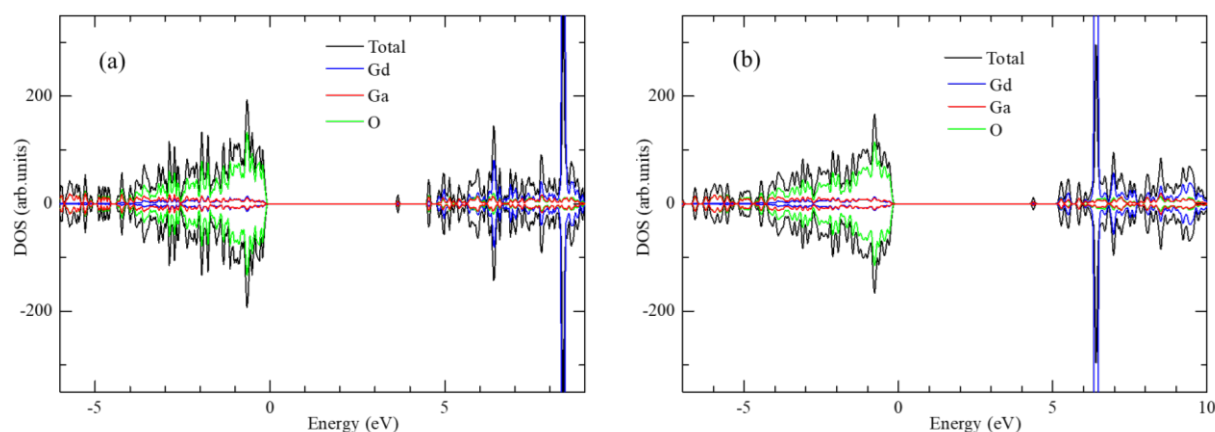


Рисунок 3. Общая плотность состояний (TDOS) GGG, рассчитанная в рамках метода (a) GGA-PBE и (b) SCAN методов

Полная и парциальная плотности состояний (DOS и PDOS) взаимно дополняют друг друга в понимании электронного строения GGG. Полная DOS (рис. 3, 4) показывает суммарное распределение электронных состояний по энергиям, в то время как PDOS (рис. 2) раскрывает вклад каждого химического элемента и их отдельных орбиталей. Для стехиометрического GGG характерно, что верх валентной зоны формируется в основном 2p-орбиталями кислорода, тогда как дно зоны проводимости образовано состояниями катионов – прежде всего d- и s-орбиталями ионов Ga^{3+} и Gd^{3+} . На рис. 4 для наглядного сравнения представлены рассчитанные методом GGA кривые полной плотности электронных состояний GGG для моделей с учётом и без учёта f-электронов гадолиния. На спектре DOS с учётом 4f-электронов чётко видны узкие пики, соответствующие состояниям со спином вверх и спином вниз, которые отделены от основного континуума зон. В расчётах GGA пик 4f-состояний со спин-вниз расположен вблизи границы запрещённой зоны или внутри неё, в то время как пик 4f-состояний со спин-вверх находится внутри валентной зоны.

Видно, что учет 4f-электронов иона Gd^{3+} оказывает существенное влияние на распределение плотности состояний (DOS) кристалла GGG. В составе GGG гадолиний имеет семь 4f-электронов (ион Gd^{3+} с электронной конфигурацией $[Xe]4f^7$), которые в расчётах в рамках функционала GGA-PBE (без учёта параметра U) проявляются в виде узких локализованных состояний. При включении f-орбиталей в расчёт эти 4f-состояния Gd^{3+} явно проявляются в валентной зоне, формируя острые пики на спектре DOS вблизи

её верхней границы. Подобные локализованные уровни снижают эффективную ширину запрещённой зоны. Например, в расчёте по схеме GGA появление наполовину заполненной 4f-зоны Gd^{3+} приводит к её сужению. Напротив, при исключении f-электронов из расчёта (то есть когда оболочка $4f^7$ рассматривается как часть остовных состояний иона Gd^{3+} и не участвует в валентных взаимодействиях) электронная структура существенно упрощается: основные валентные состояния формируются 5p-, 5d- и 6s-орбиталями Gd^{3+} . В этом случае на спектре полной DOS отсутствуют узкие 4f-пики, а минимальная энергия зоны проводимости определяется состояниями 5d-орбиталей Ga и Gd, расположенных выше по энергии. В результате вычисляемое значение ширины запрещённой зоны оказывается завышенным.

Иными словами, исключение 4f-электронов позволяет моделировать GGG как гранат с непересекающимися зонами, аналогичный $Y_3Ga_5O_{12}$ (YGG), не содержащему внутренних f-уровней гадолиния. Таким образом, включение f-электронов Gd^{3+} без применения специальных поправок (типа +U) приводит к сужению теоретической ширины запрещённой зоны и появлению в DOS локализованных уровней, в то время как их исключение искусственно расширяет запрещённую зону, полностью устраняя влияние узких f-полос. В реальном кристалле 4f-уровни Gd^{3+} , будучи сильно локализованными, располагаются в области запрещённой зоны или вблизи её границ и слабо гибридизуются с широкими зонными состояниями кристаллической решётки.

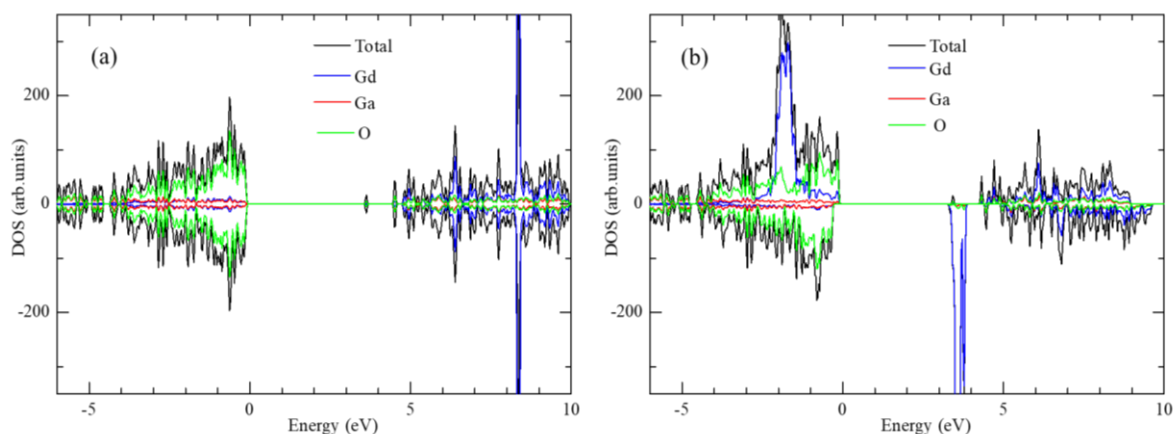


Рисунок 4. Полная плотность состояний (DOS) GGG без учёта (a) и с учёта (b) f-электронов атома Gd^{3+} в рамках GGA-PBE расчётов

Однако особенности электронной структуры GGG в значительной степени определяются присутствием локализованных 4f-электронов ионов Gd^{3+} и возможных дефектов. При этом в рамках стандартных DFT-аппроксимаций (LDA/GGA) возникают трудности с описанием сильно коррелированных d- и f-электронов. Поэтому для моделирования таких систем обычно применяют метод GGA+U, позволяющий учесть электронные корреляции. Как было отмечено выше в разделе методологии, поправка Хаббарда U применялась в наших расчётах в двух вариантах. В первой модели, где 4f-электроны ионов Gd^{3+} не рассматривались как валентные, параметр U применялся

к 5d-электронам Gd^{3+} . Во второй модели параметр U учитывался непосредственно для 4f-электронов ионов Gd^{3+} . На рис. 5 представлены картины полной плотности состояний (ППС) GGG, рассчитанные в рамках метода GGA+U. Спектры плотности состояний с учётом параметра Хаббарда -U для первой модели (рис. 5a) остаются практически неизменными по сравнению с ППС, полученной в рамках GGA (рис. 4a). Однако наблюдается сильное влияние параметра U в расчётах с учётом 4f-электронов ионов Gd^{3+} (рис. 5(b)): 4f-пики существенно меняют своё положение. Спин-поляризованный пик с направлением спин-вверх смещается в нижнюю часть валентной зоны, а пик с направлением спин-вниз смещается в верхнюю часть зоны проводимости, занимая положение в её середине.

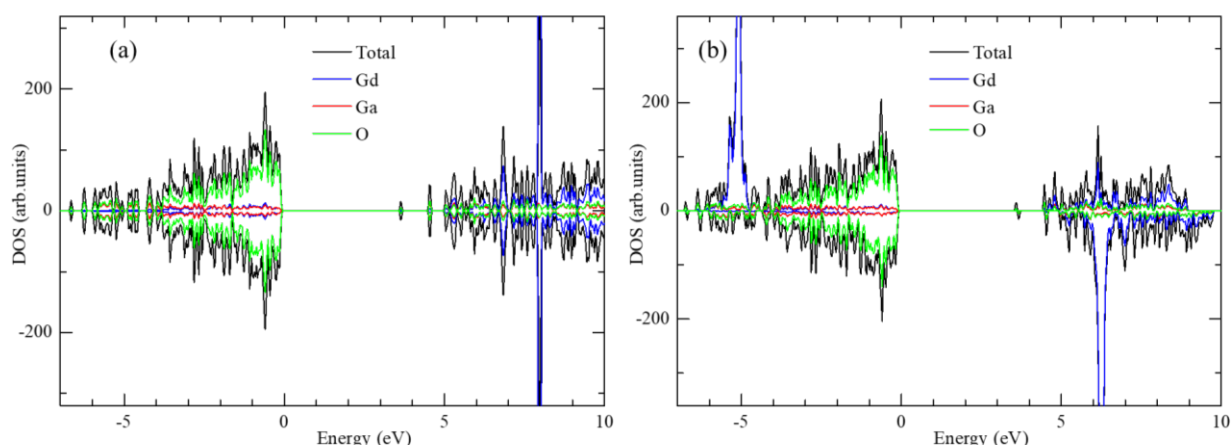


Рисунок 5. Полная плотность состояний (DOS) GGG в рамках GGA+U расчетов.

**(a) без учёта f-электронов, параметр U равно 2 эВ для d-электронов иона Gd^{3+} и с учётом
(b) f-электронов иона Gd^{3+} параметр U равно 6 эВ для 4f-электронов**

Влияние кислородные вакансии на электронную структуру GGG, что представлены на рис. 6 для $[GGG]Vo^{2+}$ и на рис. 7. для $[GGG]Vo_0$. Удаление иона O^{2-} из кристаллической решётки создаёт дефект, способный существовать в различных зарядовых состояниях. В частности, сравниваются случаи $[GGG]Vo^{2+}$ и $[GGG]Vo^0$, соответствующие разным сценариям компенсации двух электронов, отсутствующих после удаления кислородного иона. В состоянии $[GGG]Vo^{2+}$ (двойной положительный заряд дефекта) предполагается, что оба электрона, ранее связанные с удалённым атомом кислорода, покинули область дефекта – либо перешли в зону проводимости, либо были компенсированы положительным фоном. Такая заряженная вакансия (аналог F^{2+} -центра) не содержит связанных электронов и выступает в качестве донорного дефекта. В рассчитанной плотности состояний (DOS) для $[GGG]Vo^{2+}$ не появляется заполненных состояний внутри запрещённой зоны – её ширина по-прежнему определяется расстоянием от максимума валентной зоны до дна зоны проводимости. Однако сама зона проводимости может оказаться частично заполненной due to donated electrons.

При наличии дефекта $[GGG]Vo^{2+}$ полная плотность состояний практически совпадает с DOS чистого GGG в области валентной зоны, однако вблизи дна зоны проводимости

появляются новые незанятые уровни, ассоциированные с вакансией. Эти уровни могут располагаться несколько ниже нижней границы зоны проводимости чистого кристалла. С оптической точки зрения такой дефект создаёт потенциально разрешённые переходы из валентной зоны на уровень вакансии, что эффективно сокращает оптическую ширину запрещённой зоны. Однако, поскольку в состоянии $[GGG]Vo^{2+}$ сам дефект не содержит электронов, прямая абсорбция за счёт F^{2+} -центра отсутствует до тех пор, пока фотон не вызовет переход электрона из валентной зоны на этот уровень. В целом, влияние $[GGG]Vo^{2+}$ на оптические свойства проявляется слабо – основной эффект сводится к незначительному снижению прозрачности в коротковолновой УФ-области и появлению слабоинтенсивных примесных полос поглощения.

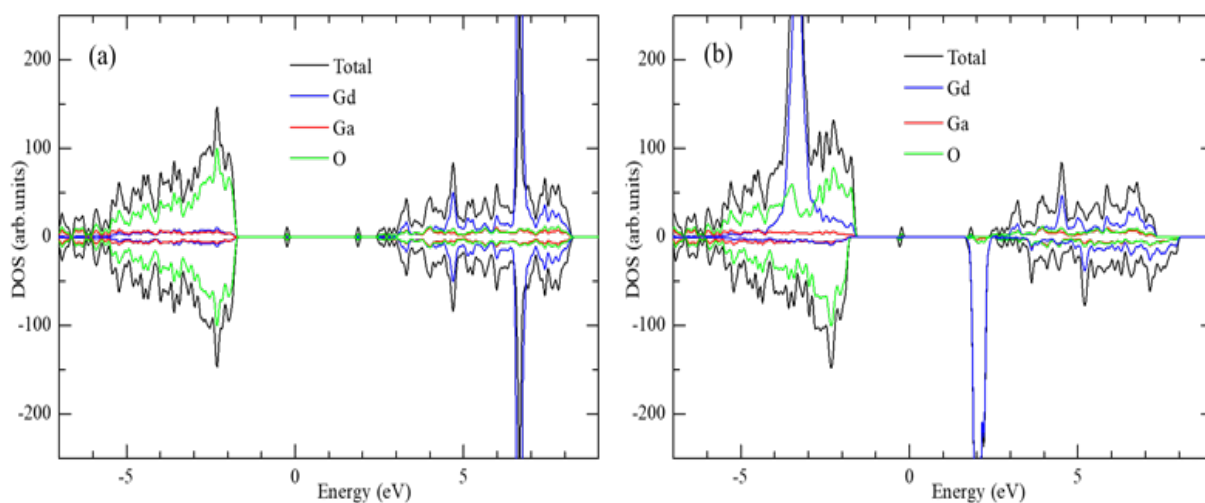


Рисунок 6. Полная плотность состояний (DOS) GGG с кислородными вакансиями $[GGG]Vo^{2+}$, рассчитанная в рамках метода GGA-PBE: (a) без учёта и (b) с учёта f-электронов иона Gd^{3+}

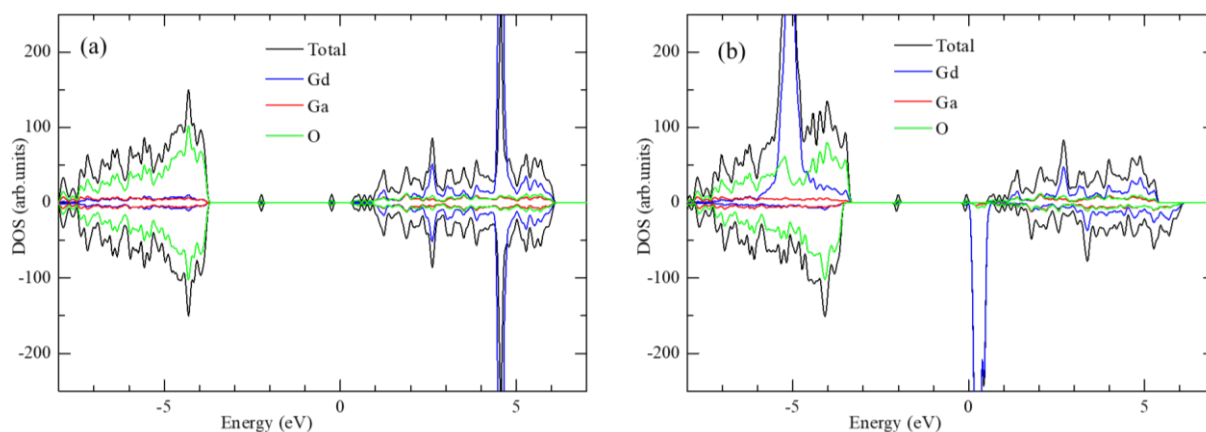


Рисунок 7. Полная плотность состояний (DOS) GGG с кислородными вакансиями $[GGG]Vo_0$, рассчитанная в рамках метода GGA-PBE: (a) без учёта и (b) с учётом f-электронов иона Gd^{2+}

Важно отметить, что учёт f-электронов Gd при наличии дефекта тоже вносит нюансы. Когда в расчётах $[GGG]Vo^0$ учитываются 4f-орбитали Gd^{3+} , возникает возможность частичной локализации дефектных электронов на ближайших Gd^{3+} (например, переход Gd^{3+} в Gd^{2+} с заполнением дополнительного 4f-уровня). В полном DOS такой перенос заряда может слегка изменять положение и форму дефектного пика. Если же f-электроны искусственно исключены, модель не позволяет электрону дефекта занять 4f-оболочку Gd, и он остаётся распределённым в основном по окрестным Ga-орбиталям или в полости вакансии. Согласно рис. 6 и 7, разница между случаями с и без f-электронов проявляется в деталях: при учёте 4f уровни дефекта могут быть несколько более локализованы и смещены, тогда как без 4f они ближе напоминают проводимостные состояния Ga.

В целом проведённые расчёты показали, что гадолиний-галлиевый гранат является широкозонным диэлектриком с преобладающим ионно-ковалентным характером связей. Основные электронные переходы связаны с переносом заряда $O-2p \rightarrow Ga/Gd-5d$, а присутствие 4f-уровней гадолиния определяет специфику спектральных свойств. Правильное включение 4f-электронов в расчёт дефектных структур даёт более реалистичную картину перераспределения плотности: это важно для понимания, как вакансии может захватывать электрон на Gd или оставлять его в полости. В контексте оптических свойств разница может означать разные энергоположения F-центровых полос: с учётом f-электронов они могут сместиться, отражая взаимодействие дефектного электрона с 4f-оболочкой Gd. Кислородные вакансии существенно влияют на электронную структуру, создавая новые уровни в запрещённой зоне и снижая прозрачность материала, что необходимо учитывать при практическом использовании GGG в лазерной и радиационно-стойкой оптике.

Заключение

В данной работе выполнено детальное моделирование электронной структуры гадолиний-галлиевого граната (GGG) методом теории функционала плотности (DFT) с использованием функционалов GGA-PBE, SCAN, mBJ и HSE06. Проведённый анализ показал, что учёт 4f-электронов атома Gd существенно влияет на распределение плотности состояний: включение этих электронов приводит к появлению локализованных уровней у края валентной зоны и снижает рассчитанную ширину запрещённой зоны, в то время как их исключение упрощает электронный спектр, увеличивает ширину щели, но снижает точность описания локализованных состояний.

Исследование влияния кислородных вакансий показало их значительное воздействие на электронные и оптические свойства GGG. Заряженные вакансии $[GGG]Vo^{2+}$ не формируют заполненных уровней в запрещённой зоне и лишь смещают уровень Ферми в сторону зоны проводимости, тогда как нейтральные вакансии $[GGG]Vo^0$ создают локализованные состояния внутри запрещённой зоны и уменьшают её, что приводит к снижению прозрачности кристалла.

Таким образом, полученные результаты подтверждают ключевую роль 4f-электронов Gd^{3+} и дефектов кислорода в формировании электронной структуры и оптических характеристик GGG. Работа вносит вклад в понимание корреляционных эффектов и влияния вакансий кислорода в редкоземельных гранатах и открывает возможности

для дальнейших исследований по точному моделированию оптических свойств и дефектной химии подобных материалов. Заряженные дефекты $[GGG]Vo^{2+}$ не формируют заполненных уровней в запрещенной зоне и лишь смещают уровень Ферми к зоне проводимости, тогда как нейтральные вакансии $[GGG]Vo^0$ создают локализованные состояния внутри запрещенной зоны и уменьшают её.

Благодарность

Данное исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19680626)

Вклад авторов

Ж.Т. Карипбаев – разработка концепции исследования, постановка целей и задач работы, контроль выполнения всех этапов моделирования и анализа результатов, участие в написании введения и заключения.

З. Умар – сбор и систематизация литературных источников, подготовка материалов для методологии, критический пересмотр текста статьи.

Г.М. Аралбаева – анализ литературных источников, написание разделов «Введение», «Результаты и обсуждение», «Заключение», интерпретация полученных данных.

А.Б. Бақытқызы – подготовка графиков, схем и рисунков, оформление таблиц, участие в анализе результатов моделирования.

А.М. Жунусбеков – выполнение расчетов, обработка данных DFT, проверка корректности расчетных параметров.

К.К. Кумарбеков – анализ электронных структур и плотности состояний, обсуждение влияния 4f-электронов и дефектов, подготовка раздела «Результаты и обсуждение».

А.И. Попов – участие в интерпретации данных, подготовка и редактирование текста статьи, утверждение окончательной версии статьи, обеспечение достоверности всех частей работы.

Список литературы

1. D.F. O'Kane, R.J. Kennedy, D.M. DeMeo, W.S. Eames, Electrical properties of gadolinium gallium garnet, J. Electrochem. Soc. 120, 1272–1278 (1973).
2. O.A. Petrenko, C. Ritter, M. Yethiraj, D. McK. Paul, Spin-liquid behavior of the gadolinium gallium garnet, Physica B 241–243, 727–729 (1998), [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(97\)00705-9](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(97)00705-9)
3. A.M. Zhunusbekov, Z.T. Karipbayev, A. Tulegenova, K.K. Kumarbekov, E.E. Nurmoldin, M.M. Baizhumanov, A. Kotlov, A.I. Popov, Comparative VUV Synchrotron Excitation Study of YAG:Eu and YAG:Cr Ceramics, Crystals 14, 897 (2024).
4. Z.T. Karipbayev, V.M. Lisitsyn, M.G. Golkovski, Z.S. Zhilgildinov, A.I. Popov, A.M. Zhunusbekov, E. Polisadova, A. Tulegenova, D.A. Mussakhanov, G. Alpyssova et al., Electron Beam-Assisted Synthesis of YAG:Ce Ceramics, Materials 16, 4102 (2023).
5. K.K. Kumarbekov, Z.S. Zhilgildinov, Z.T. Karipbayev, A.M. Zhunusbekov, E.E. Nurmoldin, M.G. Brik, Y. Suchikova, M. Kemere, A.I. Popov, M.T. Kassymzhanov, A novel method of preparation of $Y_3Al_5O_{12}:Cr^{3+}$ ceramics and its structural and optical characterization, Optical Materials 159, 116535 (2025).

6. G.M. Aralbayeva, I. Manika, Z. Karipbayev, Y. Suchikova, S. Kovachov, D. Sugak, A.I. Popov, Micromechanical properties of $Gd_3Ga_5O_{12}$ crystals irradiated with swift heavy ions, *Journal of Nano- and Electronic Physics* 15(5), 05020 (2023).
7. P.P. Deen, O. Florea, E. Lhotel, H. Jacobsen, Updating the phase diagram of the archetypal frustrated magnet $Gd_3Ga_5O_{12}$, *Phys. Rev. B* 91(1), 014419 (2015), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.014419>
8. K. Ghimire, H.F. Haneef, R.W. Collins, N. Podraza, Optical properties of single-crystal $Gd_3Ga_5O_{12}$ from the infrared to ultraviolet, *Physica Status Solidi B* 252(10), 2191–2198 (2015).
9. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C.G. Van de Walle, First-principles calculations for point defects in solids, *Rev. Mod. Phys.* 86(1), 253–305 (2014).
10. P.E. Blöchl, Projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B* 50(24), 17953–17979 (1994), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
11. L. Wang, T. Maxisch, G. Ceder, Oxidation energies of transition metal oxides within the GGA+U framework, *Phys. Rev. B* 73(19), 195107 (2006), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.195107>
12. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77(18), 3865–3868 (1996), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
13. J. Sun, A. Ruzsinszky, J.P. Perdew, Strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional, *Phys. Rev. Lett.* 115(3), 036402 (2015), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.036402>
14. H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B* 13(12), 5188–5192 (1976), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
15. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C.G. Van de Walle, First-principles calculations for point defects in solids, *Rev. Mod. Phys.* 86(1), 253–305 (2014), <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>
16. Z. Umar, O. Khyzhun, T. Yamamoto, P. Brągiel, Optical and electronic properties of novel oxide materials, *Optical Materials* 149, 115057 (2024), <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.115057>
17. R. M. Burganova, Z. Umar, O. V. Nedopekin, I. V. Chepkasov, I. I. Piyanzina. Complex investigation of XF_3 (X = Gd, Tb, Dy, Ho and Er) fluorides under pressure: An ab-initio perspective. *Computational Materials Science*, V. 246, (2025), 113428, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113428>
18. F.Z. Jarý, J. P. Boháček, Z. Umar, M Piasecki, et al. A fast GGAG: Ce (Mg) single crystal scintillator: LDFZM growth, characterization and electronic band structure calculation. *Materials Advances* 6 (2), (2025), pp. 777-787, DOI: 10.1039/D4MA00976B

Ж.Т. Карипбаев¹, З. Умар^{2,3}, Г.М.Аралбаева^{*1},

А. Бақытқызы¹, А.М. Жунусбеков¹, К.К. Кумарбеков¹, А.И. Попов^{1,4}

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²Тәжікстан мемлекеттік педагогикалық университеті им. С. Айни, Душанбе, Тәжікстан

³Ғылым мен жаңа технологияларды инновациялық дамыту орталығы, Тәжікстан Ұлттық ғылым академиясы, Душанбе, Тәжікстан

⁴Латвия университетінің Қатты дененің физикасы институты, Рига, Латвия

(E-mail: aralbayevagulnara@gmail.com)

Gd₃Ga₅O₁₂-дағы дефект жағдайларын және 4f-электрондардың рөлін әдістермен модельдеу

Аңдатпа. Гадолиний галлий гранатасы (Gd₃Ga₅O₁₂, GGG) лазерлік жүйелерде, магниттік-оптикада және радиациямен шыңдалған электроникада қолданудың кең ауқымы бар маңызды синтетикалық кристалл болып табылады. Оның оптикалық және функционалдық қасиеттерін оңтайландыру үшін оның электрондық құрылымы мен ақаулық күйлерін түбегейлі түсіну қажет. Бұл жұмыстың мақсаты заманауи теориялық әдіс – тығыздық функционалдық теориясының (ТҚТ) көмегімен Gd³⁺ ионының 4f электрондарының жолақ құрылымы мен GGG оптикалық реакциясының қалыптасуына әртүрлі ақау түрлерінің әсерін және рөлін зерттеу. Кванттық-механикалық есептеулер VASP бағдарламасы мен әртүрлі алмасу-корреляциялық функцияларды қолдану арқылы орындалды: GGA-PBE, SCAN, mBJ және гибриді HSE06. Салыстырмалы талдау Gd³⁺ 4f электрондарын модельдеуге қосу GGG электрондық құрылымына айтарлықтай әсер ететінін анықтады: олардың қосылуы валенттілік және өткізгіштік жолақтарында локализацияланған деңгейлердің пайда болуына әкеледі. Зарядталған [GGG]Vo²⁺ бос орындары ақаулық деңгейлерін жасамай-ақ Ферми деңгейін ауыстыратыны анықталды, ал бейтарап [GGG]Vo0 бос орындар диапозондағы локализацияланған күйлерді құрайды, бұл мөлдірлікті төмендетеді және кристалдың оптикалық қасиеттерін нашарлатады.

Бұл нәтижелердің іргелі және қолданбалы маңызы бар. Ғылыми тұрғыдан олар гранаттардағы күшті корреляцияланған 4f электрондарының рөлін және оттегі ақауларының оларға әсер ету механизмін түсіндіреді. Практикалық тұрғыдан алғанда, олар радиацияның қаттылығын болжауға және келесі ұрпақтың оптикалық материалдарын әзірлеуге негіз береді. Бұл жұмыс ақаулық күйлер физикасын дамытуға және функционалдық кристалдардың теориялық модельдеуіне ықпал етеді.

Түйін сөздер: гадолиний-галлий гранаты, DFT, 4f-электрондар, зоналық құрылым, оттекті вакансийлар, тығыздық, оптикалық қасиеттер

Z.T. Karipbayev¹, Z. Umar^{2,3}, G.M. Aralbayeva^{1*}, A. Bakytzyzy¹, A.M. Zhunusbekov¹,
K.K. Kumarbekov¹, A.I. Popov^{1, 4}

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²S. Aini Tajik State Pedagogical University, Dushanbe, Tajikistan

³Center for Innovative Development of Science and New Technologies,
National Academy of Sciences of Tajikistan, Dushanbe, Tajikistan

⁴Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Latvia
(E-mail: aralbayevagulnara@gmail.com)

Modeling defect states and the role of 4F electrons in $Gd_3Ga_5O_{12}$ using DFT methods

Abstract. Gadolinium gallium garnet ($Gd_3Ga_5O_{12}$, GGG) is an important synthetic crystal with a wide range of applications in laser systems, magneto-optics, and radiation-hardened electronics. A fundamental understanding of its electronic structure and defect states is necessary for optimizing its optical and functional properties. The aim of this work is to investigate the influence of various defect types and the role of 4f electrons of the Gd^{3+} ion on the formation of the band structure and optical response of GGG using a modern theoretical method-density functional theory (DFT). Quantum-mechanical calculations were performed using the VASP program and various exchange-correlation functionals: GGA-PBE, SCAN, mBJ, and the hybrid HSE06. A comparative analysis revealed that including the 4f electrons of Gd^{3+} in the modeling significantly affects the electronic structure of GGG: their inclusion leads to the formation of localized levels in both the valence and conduction bands. It was found that charged $[GGG]Vo^{2+}$ vacancies shift the Fermi level without creating defect levels, while neutral $[GGG]Vo^0$ vacancies form localized states within the band gap, which reduces transparency and degrades the optical properties of the crystal.

These results are of fundamental and applied significance. From a scientific perspective, they clarify the role of strongly correlated 4f electrons in garnets and the mechanism by which oxygen defects influence them. From a practical perspective, they provide a basis for predicting radiation hardness and developing next-generation optical materials. This work contributes to the development of the physics of defect states and the theoretical modeling of functional crystals.

Keywords: gadolinium gallium garnet, DFT, 4f electrons, band structure, oxygen vacancies, density of states, optical properties

References

1. D.F. O'Kane, R.J. Kennedy, D.M. DeMeo, W.S. Eames, Electrical properties of gadolinium gallium garnet, J. Electrochem. Soc. 120, 1272–1278 (1973).
2. O.A. Petrenko, C. Ritter, M. Yethiraj, D. McK. Paul, Spin-liquid behavior of the gadolinium gallium garnet, Physica B 241–243, 727–729 (1998), [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(97\)00705-9](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(97)00705-9)
3. A.M. Zhunusbekov, Z.T. Karipbayev, A. Tolegenova, K.K. Kumarbekov, E.E. Nurmoldin, M.M. Baizhumanov, A. Kotlov, A.I. Popov, Comparative VUV Synchrotron Excitation Study of YAG:Eu and YAG:Cr Ceramics, Crystals 14, 897 (2024).
4. Z.T. Karipbayev, V.M. Lisitsyn, M.G. Golkovski, Z.S. Zhilgildinov, A.I. Popov, A.M. Zhunusbekov, E. Polisadova, A. Tulegenova, D.A. Mussakhanov, G. Alpysova et al., Electron Beam-Assisted Synthesis of YAG:Ce Ceramics, Materials 16, 4102 (2023).
5. K.K. Kumarbekov, Z.S. Zhilgildinov, Z.T. Karipbayev, A.M. Zhunusbekov, E.E. Nurmoldin, M.G. Brik, Y. Suchikova, M. Kemere, A.I. Popov, M.T. Kassymzhanov, A novel method of preparation of $Y_3Al_5O_{12}:Cr^{3+}$ ceramics and its structural and optical characterization, Optical Materials 159, 116535 (2025).

6. G.M. Aralbayeva, I. Manika, Z. Karipbayev, Y. Suchikova, S. Kovachov, D. Sugak, A.I. Popov, Micromechanical properties of $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ crystals irradiated with swift heavy ions, *Journal of Nano- and Electronic Physics* 15(5), 05020 (2023).
7. P.P. Deen, O. Florea, E. Lhotel, H. Jacobsen, Updating the phase diagram of the archetypal frustrated magnet $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$, *Phys. Rev. B* 91(1), 014419 (2015), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.014419>
8. K. Ghimire, H.F. Haneef, R.W. Collins, N. Podraza, Optical properties of single-crystal $\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$ from the infrared to ultraviolet, *Physica Status Solidi B* 252(10), 2191–2198 (2015).
9. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C.G. Van de Walle, First-principles calculations for point defects in solids, *Rev. Mod. Phys.* 86(1), 253–305 (2014).
10. P.E. Blöchl, Projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B* 50(24), 17953–17979 (1994), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
11. L. Wang, T. Maxisch, G. Ceder, Oxidation energies of transition metal oxides within the GGA+U framework, *Phys. Rev. B* 73(19), 195107 (2006), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.195107>
12. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Phys. Rev. Lett.* 77(18), 3865–3868 (1996), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
13. J. Sun, A. Ruzsinszky, J.P. Perdew, Strongly constrained and appropriately normed semilocal density functional, *Phys. Rev. Lett.* 115(3), 036402 (2015), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.036402>
14. H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B* 13(12), 5188–5192 (1976), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
15. C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti, C.G. Van de Walle, First-principles calculations for point defects in solids, *Rev. Mod. Phys.* 86(1), 253–305 (2014), <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>
16. Z. Umar, O. Khyzhun, T. Yamamoto, P. Brągiel, Optical and electronic properties of novel oxide materials, *Optical Materials* 149, 115057 (2024), <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.115057>
17. R. M. Burganova, Z. Umar, O. V. Nedopekin, I. V. Chepkasov, I. I. Piyanzina. Complex investigation of XF_3 (X = Gd, Tb, Dy, Ho and Er) fluorides under pressure: An ab-initio perspective, *Computational Materials Science*, V. 246, (2025), 113428, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113428>
18. F.Z. Jarý, J. P. Boháček, Z. Umar, M. Piasecki, et al. A fast GGAG: Ce (Mg) single crystal scintillator: LDFZM growth, characterization and electronic band structure calculation, *Materials Advances* 6 (2), (2025), pp. 777-787, DOI: 10.1039/D4MA00976B

Сведения об авторах:

Карипбаев Жакып – PhD, ассоциированный профессор, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Умар Зафар – Кандидат физико-математических наук, Таджикский государственный педагогический университет им. С. Айни, Душанбе

Аралбаева Гульнара – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Бақытқызы Айзат – Научный сотрудник, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Жунусбеков Амангелди – Кандидат физико-математических наук, PhD, ассоциированный профессор, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Кумарбеков Куат – PhD, научный сотрудник, Институт физико-технических наук, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

Попов Анатолий – Доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт физики твёрдого тела, Латвийский университет, Рига, Латвия

Karipbayev Zhakyp – PhD, Associate professor, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Umar Zafari – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, S. Aini Tajik State Pedagogical University, Dushanbe

Aralbayeva Gulnara – corresponding author, PhD, Associate professor, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Bakytқызы Aizat – Research Scientist, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Zhunosbekov Amangeldy – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate professor, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Kumarbekov Kuat – PhD, Research Scientist, Institute of Physical and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

Popov Anatoli I. – Doctor of Physics, Senior Researcher, Institute of Solid State Physics, University of Latvia, Riga, Latvia

Карипбаев Жакып – PhD, қауымдастырылған профессор, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Умар Зафари – Физика-математика ғылымдарының кандидаты, С. Айни атындағы Тәжік мемлекеттік педагогикалық университеті, Душанбе

Аралбаева Гүлнара – хат-хабар авторы, PhD, қауымдастырылған профессор, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Бақытқызы Айзат – Ғылыми қызметкер, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Жунусбеков Амангелді – Физика-математика ғылымдарының кандидаты, қауымдастырылған профессор, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Құмарбеков Куат – PhD, ғылыми қызметкер, Физикалық және техникалық ғылымдар институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

Попов Анатолий – Физика ғылымдарының докторы, аға ғылыми қызметкер, Қатты денелер физикасы институты, Латвия университеті, Рига, Латвия



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/>).

Бас редакторы: К.Ш. Жумадилов
Компьютерде беттеген: Д. Нурушева

Авторларға арналған нұсқаулықтар,
жарияланым этикасы журнал сайтында берілген: <http://bulphysast.enu.kz>

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.
Физика. Астрономия сериясы.
№3(152)/2025 – Астана: ЕҰУ. – 188 б.
Шартты б.т. – 11,75. Таралымы – сұраныс бойынша
Басуға қол қойылды: 30.09.2025 ж.
Ашық қолданыстағы электронды нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz>

Мазмұнына типография жауап бермейді

Редакция мекен-жайы: 010008, Қазақстан Республикасы Астана қ., Сәтбаев көшесі, 2.
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті Тел.: +7(71-72) 70-95-00 (ішкі 31-410)
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды.