

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**

**№1(154)/ 2026**

**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, 2026

Astana, 2026

**Бас редакторы:**

**Жумадилов Жумадилов Касым Шаймарданович**, PhD, профессор,  
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті (Астана, Қазақстан)

Бас редактордың орынбасары: **Абуова Фатима Усеиновна**, PhD, доцент, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті (Астана, Қазақстан)

Жауапты хатшы: **Баграмова Асель Айдосовна**, PhD, оқытушы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті (Астана, Қазақстан)

**Редакция алқасы:**

<b>Цыба П.Ю.</b>	PhD, қауымдастырылған профессор, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
<b>Ержанов Қ.Қ.</b>	PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
<b>Козловский А.Л.</b>	PhD, Ядролық физика институты, Астана, Қазақстан
<b>Морзабаев А.К.</b>	ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
<b>Усеинов А.Б.</b>	PhD, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ, Астана, Қазақстан
<b>Джансейтов Д.М.</b>	PhD, Ядролық физика институты, Астана, Қазақстан
<b>Шункеев К.Ш.</b>	ф.-м.ғ.д., Қ.Жұбанов ат. АӨУ, Ақтөбе, Қазақстан
<b>Исадыков А.Н.</b>	PhD, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей
<b>Шарафуллин И.Ф.</b>	ф.-м.ғ.д., Башқұрт мемлекеттік университеті, Уфа, Ресей
<b>Луцник А.Ч.</b>	ф.-м.ғ.д., Тарту университеті, Тарту, Эстония
<b>Попов А.И.</b>	ф.-м.ғ.д., Латвия университеті, Рига, Латвия
<b>Hoshi Masaharu</b>	PhD, Хиросима Университеті, Хиросима, Жапония
<b>Toyota Shin</b>	PhD, Окаяма Ғылым Университеті, Окаяма, Жапония
<b>Erturk Sefa</b>	PhD, Нийде Университеті, Нийде, Түркия
<b>Килин Д.</b>	PhD, Солтүстік Дакота мемлекеттік университеті, Фарго, АҚШ
<b>Oikonomou Vasileios</b>	PhD, профессор, Салоники Аристотель университеті, Салоники, Греция
<b>Shahalam Mohammad</b>	PhD, профессор, Интеграл университеті, Лакнау, Үндістан

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>

**Chief Editor K. Zhumadilov,**  
**Zhumadilov Kassym Shaimardanovich, PhD, Professor,**  
*L.N.Gumilyov Eurasian National University (Astana, Kazakhstan)*

*Deputy Editor-in-Chief:* **Abuova Fatima Usenovna, PhD, Associate Professor, L.N.Gumilyov Eurasian National University (Astana, Kazakhstan)**

*Executive Secretary:* **Bagramova Assel Aidosovna, PhD, teacher, L.N.Gumilyov Eurasian National University (Astana, Kazakhstan)**

**Editorial board:**

<b>Tsyba P.Yu.</b>	PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
<b>K. Yerzhanov</b>	PhD, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
<b>A. Qainarbai</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
<b>A. Kozlovskiy</b>	PhD, Institute of Nuclear Physics», Astana, Kazakhstan
<b>A. Morzabaev</b>	Candidate of Phys.-Math. Sciences, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
<b>A. Useinov</b>	PhD, L.N. Gumilyov ENU, Astana, Kazakhstan
<b>D. Janseytov</b>	PhD, Institute of Nuclear Physics, Astana, Kazakhstan
<b>K. Shunkeyev</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, K. ZHubanov University, Aktobe, Kazakhstan
<b>A. Issadykov</b>	PhD, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
<b>I. Sharafullin</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, Bashkir State University, Ufa, Russia
<b>A. Lushchik</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences, University of Tartu, Tartu, Estonia
<b>A. Popov</b>	Doctor of Phys.-Math. Sciences., University of Latvia, Riga, Latvia
<b>M. Hoshi</b>	PhD, Hiroshima University, Hiroshima, Japan
<b>Sh. Toyoda</b>	PhD, Okayama University of Science, Okayama, Japan
<b>S. Erturk</b>	PhD, Niğde Ömer Halisdemir University, Niğde, Türkiye
<b>Dmitri Kilin</b>	PhD, North Dakota State University, Fargo, USA
<b>Oikonomou Vasileios</b>	PhD, professor, Thessaloniki Aristotle University, Thessaloniki, Greece
<b>Shahalam Mohammad</b>	PhD, Professor, Integral University, Lucknow, India

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 Касым Шаймарданович**, PhD, профессор,  
Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева (Астана, Казахстан)

*Зам. главного редактора:* **Абуова Фатима Усеновна**, PhD, доцент Международной кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева (Астана, Казахстан)

*Ответственный секретарь:* **Баграмова Асель Айдосовна**, PhD, преподаватель, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева (Астана, Казахстан)

**Редакционная коллегия:**

<b>Цыба П.Ю.</b>	PhD, ассоциированный профессор, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
<b>Ержанов К.К.</b>	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
<b>Кайнарбай А.Ж.</b>	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
<b>Козловский А.Л.</b>	PhD, РГП «Институт ядерной физики», Астана, Казахстан
<b>Морзабаев А.К.</b>	к.ф.-м.н., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
<b>Усеинов А.Б.</b>	PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
<b>Джансейтов Д.М.</b>	PhD, РГП «Институт ядерной физики», Астана, Казахстан
<b>Шункеев К.Ш.</b>	д.ф.-м.н., Актюбинский региональный государственный университет имени К. Жубанова, Актобе, Казахстан
<b>Исадыков А.Н.</b>	PhD, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия
<b>Шарафуллин И.Ф.</b>	д.ф.-м.н., Башкирский государственный университет, Уфа, Россия
<b>Лущик А.Ч.</b>	д.ф.-м.н., Тартуский университет, Тарту, Эстония
<b>Попов А.И.</b>	д.ф.-м.н., Латвийский университет, Рига, Латвия
<b>Hoshi Masaharu</b>	PhD, Университет Хиросимы, Хиросима, Япония
<b>Toyoda Shin</b>	PhD, Университет Науки Окаямы, Окаяма, Япония
<b>Erturk Sefa</b>	PhD, Университет Нийде, Нийде, Турция
<b>Килин Д.</b>	PhD, Государственный университет Северной Дакоты, Фарго, США
<b>Oikonomou Vasileios</b>	PhD, профессор, Университет Аристотеля в Салониках, Салоники, Греция
<b>Shahalam Mohammad</b>	PhD, профессор, Интеграл университет, Лакнау, Индия

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](mailto: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>

© Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева

МАЗМҰНЫ / CONTENTS / СОДЕРЖАНИЕ

*Астрономия сериясы – Astronomy series – серия Астрономия*

<b>Мохд Шахалам.</b> Тұрақты нүкте талдауы және тік экспоненциал потенциалы.....	
<b>Mohd Shahalam.</b> Fixed point analysis with steep exponential potential .....	
<b>Мохд Шахалам.</b> Анализ стационарных точек для крутого экспоненциального потенциала.....	7
<b>А.А. Жадыранова, Ү.Қ. Исмаил, У.М. Сноу, В.Н. Жумабекова, Н.К. Жусупова.</b> Минималды емес $f(R,T)$ гравитациясында баяулау параметрін дивергенциясыз параметрлеу және энергия шарттары.....	
<b>A.A. Zhadyranova, U.K. Ismail, W.M. Snow, V.N. Zhumabekova, N.K. Zhusupova.</b> Energy conditions in non-minimal $f(R, T)$ gravity with a divergence-free parameterization of the deceleration parameter .....	
<b>А.А. Жадыранова, У.К. Исмаил, У.М. Сноу, В.Н. Жумабекова, Н.К. Жусупова</b> Бездивергентная параметризация параметра замедления и энергетические условия в неминимальной $f(R, T)$ гравитации.....	18
<i>Физика сериясы – Physics series – серия Физика</i>	
<b>Лоренцо Федерико Паллардо, Сукерас Василис.</b> $E_{lab} = 275\text{MeV}$ энергиядағы $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$ реакцияға шолу.....	
<b>Lorenzo Federico Pappalardo, Soukeras Vasilis.</b> An overview of the $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$ at $E_{lab} = 275\text{MeV}$ ....	
<b>Лоренцо Федерико Паллардо, Сукерас Василис.</b> Обзор реакции $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$ при энергии $E_{lab} = 275\text{MeV}$ .....	37
<b>Г.Б. Байман, Г.М. Баубекова, Д.Т. Пазылова.</b> Төмен температуралы Стирлинг қозғалтқышының моделін жобалау және эксперименттік зерттеу .....	
<b>G.B. Vaiman, G.M. Baubekova, D.T. Pazylova</b> Design and experimental study of a low-temperature Stirling engine model.....	
<b>Г.Б. Байман, Г.М. Баубекова, Д.Т. Пазылова</b> Проектирование и экспериментальное исследование модели низкотемпературного двигателя Стирлинга.....	47
<b>А.С. Ошманова, В.Ф. Грищенко.</b> Ғарыш кеңістігі факторларының әсері жағдайында ғарыш аппараттарының борттық басқару кешендерінің істен шығуын талдау .....	
<b>A.S. Oshmanova, V.F. Grishchenko.</b> Failure Analysis of Spacecraft Onboard Control Complexes under the Influence of Space Environment Factors .....	
<b>А.С. Ошманова, В.Ф. Грищенко.</b> Анализ отказов бортовых комплексов управления космических аппаратов в условиях воздействия факторов космического пространства .....	64
<b>Р. Елшибеков, Ш.Г. Гиниятова, Ш. Хаметов, Г.А. Баймбетова</b> Композиттік керамикасындағы реактивті фазалық түрленулердің беріктік пен жылулық сипаттамалардың өзгеруіндегі рөлі.....	
<b>R. Elshibekov, Sh.G. Giniyatova, Sh. Khametov, G.A. Baimbetova</b> The role of reactive phase transformations in composite ceramics in changing strength and thermal characteristics.....	
<b>Р. Елшибеков, Ш.Г. Гиниятова, Ш. Хаметов, Г.А. Баймбетова</b> Роль реакционных фазовых трансформаций в композитных керамиках в изменении прочностных и теплофизических характеристик.....	84

<b>Г.Б. Калиекперова, Р.И. Шакирзянов, Д.И. Тишкевич, А.Ж. Жақсылық</b> (1-x)Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> – xZnO нанокөміпозиттеріндегі фазалық құрамның өзгеруінің коррозия механиздерінің тежелуіне әсерін зерттеу.....	
<b>К.В. Калиекперова, Р.И. Шакирзянов, Д.И. Тишкевич, А.Ж. Жақсылық</b> Study of the influence of phase composition variation in (1-x)Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> – xZnO nanocomposites on the inhibition of corrosion mechanisms.....	
<b>К.Б. Калиекперова, Р.И. Шакирзянов, Д.И. Тишкевич, А.Ж. Жақсылық</b> Изучение влияния вариации фазового состава в (1-x)Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> – xZnO нанокөміпозитах на сдерживание механизмов коррозионного воздействия.....	104
<b>Т.Б. Қоштыбаев, А.К. Ершина, А.М. Татенов, А.Т. Жавлиева, М.Е. Алиева</b> Ашық кванттық жүйелердің динамикасын Ли топтары мен алгебралары арқылы зерттеу....	
<b>Т.В. Koshlybayev, A.K. Yershina, A.M. Tatenov, A.T. Zhavliyeva, M.E. Aliyeva</b> Study of the dynamics of open quantum systems using Lie groups and algebras .....	
<b>Т.Б. Қоштыбаев, А.К. Ершина, А.М. Татенов, А.Т. Жавлиева, М.Е. Алиева</b> Исследование динамики открытых квантовых систем с использованием групп и алгебр Ли	124
<b>Қ. Нәлібай, Н. Амангелді</b> Литий боргидрид (LiBH <sub>4</sub> ) нейтрон-гамма сәулеленуден қорғайтын экрандау үшін перспективті материал.....	
<b>К. Nalibay, N. Amangeldi</b> Lithium borohydride (LiBH <sub>4</sub> ) as a promising material for neutron–gamma radiation shielding.....	
<b>Қ. Нәлібай, Н. Амангелді</b> Боргидрид лития (LiBH <sub>4</sub> ) как перспективный материал для нейтронно-гамма радиационного экранирования.....	137
<b>С.Ж. Көшкінбаев, А.К. Сейтханова, Н.К. Смайлов, Қ.М. Ысырайыл, А.Е. Қуттыбаева</b> Ғарыштық құрылымдарды мониторингтеуде FBG сенсорларын қолдану.....	
<b>S.Zh. Koshkinbayev, A.K. Seytkhanova, N.K. Smailov, K.M. Yssyraiyl, A.E. Kuttybayeva</b> Application of FBG Sensors in monitoring of space structures.....	
<b>С.Ж. Көшкінбаев, А.К. Сейтханова, Н.К. Смайлов, Қ.М. Ысырайыл, А.Е. Қуттыбаева</b> Применение FBG-сенсоров в мониторинге космических конструкций.....	154
<b>Абылай Тәңірберген, Ернар Шыныбеков, Алмагүл Ментбаева, Бақтияр Солтабаев</b> Жоғары өнімді газ сенсорлары үшін ZnO нанотаяқшаларын бақыланатын гидротермиялық синтездеу.....	
<b>Abylay Tangirbergen, Yernar Shynybekov, Almagul Mentabyeva, Baktiyar Soltabayev</b> Controlled hydrothermal synthesis of ZnO nanorods for high-performance gas sensors.....	
<b>Абылай Тәңірберген, Ернар Шыныбеков, Алмагүл Ментбаева, Бақтияр Солтабаев</b> Контролируемый гидротермальный синтез наностержней ZnO для высокоэффективных газовых сенсоров.....	170
<b>У.Ж. Толеген, Ф.У. Абуова, Ж.Е. Закиева, Г.Ә. Каптагай, Е.Б. Үсен, А.У. Абуова, А.А.Қырықбаева</b> Бөлме температурасындағы BaTiO <sub>3</sub> оптикалық қасиеттері: DFT-модельдеу.....	
<b>U.Zh. Tolegen, F.U. Abuova, Zh.Ye. Zakiyeva, G.A. Kaptagay, Ye.B. Usen, A.U. Abuova, A.A. Qyrykbaeva.</b> Optical properties of BaTiO <sub>3</sub> at room temperature: DFT Modeling.....	
<b>У.Ж. Толеген, Ф.У. Абуова, Ж.Е. Закиева, Г.А. Каптагай, Е.Б. Үсен, А.У. Абуова, А.А. Қырықбаева.</b> Расчёт оптических характеристик BaTiO <sub>3</sub> при комнатной температуре в рамках теории функционала плотности.....	182
<b>Г. Әлімбекова, С.М. Кенесбаев, Г.Т. Тугелбаева, Э.О. Қуткелдиева, Ә.М. Сандыбаева, Д.А. Оңдақанов.</b> Қозғалыс және өріс теңдеулерін энергияның сақталу заңынан шығарып алу туралы.....	
<b>G. Alimbekova, S.M. Kenesbayev, G.T. Tugelbaeva, E.O. Kutkeldiyeva, A.M. Sandybayeva, D.A. Ongdakanov.</b> On the derivation of the equations of motion and field from the law of conservation of energy.....	
<b>Г. Алимбекова, С.М. Кенесбаев, Г.Т. Тугелбаева, Э.О. Қуткелдиева, А.М. Сандыбаева, Д.А. Ондақанов.</b> О выводе уравнений движения и поля из закона сохранения энергии.....	199



IRSTI: 41.29.15, 41.29.25  
Scientific article

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-7-17>

## Initial Conditions of Inflaton Field at the Quantum Bounce

Mohd Shahalam\*<sup>●</sup>

*Department of Physics, Integral University, Lucknow, India (E-mail: mohdshahamu@gmail.com)*

*(E-mail: \*mohdshahamu@gmail.com, mk04567432@gmail.com)*

**Abstract.** In this paper, we explore the pre-inflationary evolution of the universe driven by a logarithmic potential in the context of Loop Quantum Cosmology. Our analysis focuses on identifying the physically admissible initial conditions for the inflaton field that result in a successful phase of slow-roll inflation. We also evaluate the corresponding number of e-folds and examine their consistency with current observational bounds. When the kinetic energy of the inflaton dominates at the initial stage, the cosmic evolution prior to reheating naturally separates into three successive phases: the bouncing phase, the transition phase, and the slow-roll inflationary phase. Throughout the bouncing phase, the dynamics of the scale factor are largely insensitive to both the chosen initial conditions and the detailed structure of the inflationary potential. In this regime, the evolution admits an explicit analytical solution, providing a clear and model-independent description of the background behavior before the onset of inflation. In this model, the quantum bounce is governed entirely by kinetic energy, since potential energy-dominated initial conditions cannot be realized over the full range of inflaton field.

**Keywords:** Big Bang Singularity, Quantum Bounce, Inflation, Loop Quantum Cosmology.

### Introduction

The theory of cosmic inflation is a cornerstone of modern cosmology, providing a compelling explanation for several fundamental puzzles associated with the early universe. First proposed in the early 1980s by Alan Guth and others, inflation refers to a brief epoch of cosmic acceleration, nearly exponential expansion that occurred roughly between  $10^{-36}$  and  $10^{-32}$  seconds after the Big Bang. During this phase, the dynamics were driven by a high-energy scalar field known as the inflaton, whose potential energy temporarily dominated the total energy density of the universe, causing rapid expansion. Before the onset of inflation, regions that are now widely separated were causally connected, allowing them to achieve thermal equilibrium. The subsequent accelerated expansion stretched these regions far

Received 21.02.2026. Revised 25.02.2026. Accepted 25.02.2026. Available online 30.03.2026.

\*the corresponding author

beyond each other's horizons, thereby explaining the remarkable isotropy of the cosmic microwave background (CMB). In this way, inflation successfully resolves the horizon and flatness problems of the standard cosmological model. Moreover, quantum fluctuations of the inflaton field provide the seeds for primordial density perturbations, which later evolved into the large-scale structure of the universe [1,2]. Over the years, a wide variety of inflationary models have been developed and confronted with observational data. In single-field inflation, the quadratic potential has been strongly disfavored relative to Starobinsky model, as indicated by the 2018 results of the Planck Collaboration [3]. In this paper, we numerically investigate the dynamics of the loop inflation using the corresponding background equations.

Despite its successes, inflation within the framework of classical General Relativity (GR) inevitably encounters the Big Bang singularity, where physical quantities such as curvature and energy density diverge [4,5]. Consequently, inflationary spacetimes remain geodesically incomplete in the past. An appealing resolution to this problem is provided by Loop Quantum Cosmology (LQC), in which the classical singularity is replaced by a non-singular quantum bounce [6-8]. LQC is derived from Loop Quantum Gravity (LQG), a background-independent approach to quantizing spacetime. In LQG, geometry is fundamentally discrete and described in terms of spin networks, implying that space itself has an underlying lattice-like structure at the Planck scale. When these principles are applied to homogeneous and isotropic cosmological settings, the resulting quantum corrections modify the classical Friedmann equations at high densities. As a consequence, instead of diverging to infinity, the energy density reaches a maximum finite value, leading to a quantum bounce that connects a contracting phase to the present expanding universe. This resolution of the initial singularity addresses one of the most profound shortcomings of classical cosmology. Furthermore, LQC makes distinctive predictions for the early-universe dynamics at high curvature scales, which may be tested through precise measurements of the CMB and primordial gravitational waves. Remarkably, it has been shown that the post-bounce evolution in LQC naturally gives rise to a phase of slow-roll inflation for a broad range of initial conditions [9-17]. To investigate the pre-inflationary dynamics and cosmological perturbations, two principal approaches are commonly employed: the dressed metric approach and the deformed algebra approach. However, when attention is restricted to the background evolution of the universe, both frameworks yield the same set of dynamical equations. Consequently, the results presented in this paper are applicable to either approach. A similar analysis can also be extended to other inflationary models. Nevertheless, the main conclusions derived here are expected to remain valid in other models as well, at least in cases where the early evolution of the universe is dominated by the kinetic energy of the inflaton field.

### **Loop Quantum Cosmology and the Quantum Bounce**

In standard cosmology, the Big Bang is typically associated with a spacetime singularity—a state at which the energy density and curvature diverge, causing the classical equations of GR to lose their validity. Loop Quantum Cosmology introduces quantum geometric corrections to the Einstein field equations of General Relativity, thereby altering the high-energy behavior of the universe. As a consequence, the Friedmann equations are modified to incorporate these quantum effects [18,19].

$$H^2 = \frac{8\pi G}{3} \rho \left(1 - \frac{\rho}{\rho_c}\right) \quad (1)$$

The correction term  $\rho \left(1 - \frac{\rho}{\rho_c}\right)$  encodes the quantum geometric effects that become dominant at high energy densities. This modification prevents the divergence of physical quantities by ensuring that the energy density never exceeds the critical value  $\rho_c$  [20,21]. As  $\rho$  approaches  $\rho_c$ , the expansion rate gradually decreases and eventually vanishes, resulting in a non-singular quantum bounce instead of a classical singularity. Consequently, the universe transitions smoothly from a contracting phase to an expanding one. The modified Friedmann equation in LQC therefore establishes a consistent connection between classical cosmological dynamics and the underlying quantum description of spacetime. The Klein-Gordon equation remains the same as in GR.

$$\ddot{\phi} + 3H\dot{\phi} + \frac{dV(\phi)}{d\phi} = 0. \quad (2)$$

From Eq. (1), it follows that the Hubble parameter (H) vanishes when the energy density reaches the critical value  $\rho=\rho_c$ . This condition signals the occurrence of the quantum bounce. In the following, we investigate both the bouncing phase and the subsequent slow-roll inflation for the potential of the form given below.

The flatness of an inflationary potential is generally modified by radiative corrections. At one-loop order, these corrections typically appear in the form of a logarithmic term,  $\ln(\phi/\mu)$ , where  $\mu$  denotes the renormalization scale. Even if one begins with an exactly flat potential, the inclusion of quantum effects leads to the emergence of a logarithmic potential. Investigating such potentials, therefore, provides a straightforward framework for understanding under what conditions quantum corrections spoil the flatness of the potential and the mechanism by which this occurs. Let us now consider the slow-roll analysis of loop inflation. The corresponding potential is given by

$$V(\phi) = V_0 \left(1 + \alpha \ln \frac{\phi}{m_{Pl}}\right) \quad (3)$$

where  $\alpha$  is a dimensionless parameter that can take either positive or negative values. In this work, we shall use  $\alpha=1$  and  $V_0=1.12436 \cdot 10^{-12} m_{Pl}^4$ , see Appendix of Ref. [16]. At the bounce, we have

$$\begin{aligned} \rho &= \rho_c \\ \frac{1}{2} \dot{\phi}^2(t_B) + V(\phi(t_B)) &= \rho_c \\ \alpha(t_B) &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

This implies that

$$\dot{\phi}(t_B) = \pm \sqrt{2(\rho_c - V(\phi(t_B)))} \quad (5)$$

$$a(t_B) = 1$$

Here after, we shall read  $\phi(t_B)$ ,  $\dot{\phi}(t_B)$  and  $a(t_B)$  as  $\phi_B$ ,  $\dot{\phi}_B$  and  $a_B$  in the article. We introduce the key parameters that will be employed throughout the analysis.

**(i) Equation of State:** The equation of state (EoS) parameter for the scalar field is defined as

$$w(\phi) = \frac{\dot{\phi}^2/2 - V(\phi)}{\dot{\phi}^2/2 + V(\phi)} \simeq -1, \text{ in the slow-roll phase} \quad (6)$$

To classify the nature of the initial conditions at the bounce, we evaluate  $w(\phi)$  at  $\phi = \phi_B$ . Accordingly, we consider two types of initial conditions:

- **Kinetic Energy Dominated (KED):**  $w(\phi_B) > 0$
- **Potential Energy Dominated (PED):**  $w(\phi_B) < 0$

At the quantum bounce, the scale factor is fixed to  $a_B = 1$ . However, the value of  $w(\phi_B)$  distinguishes the two scenarios: it is positive for KED initial conditions and negative for PED initial conditions.

**(ii) Slow-Roll Parameter:** The Hubble slow-roll parameter  $\epsilon_H$  is defined as

$$\epsilon_H = -\frac{\dot{H}}{H^2} \ll 1, \text{ in the slow-roll phase} \quad (7)$$

**(iii) Number of e-Folds:** The number of e-folds generated during inflation is given by

$$N_{\text{inf}} = \text{Log} (a_{\text{end}}/a_i) \quad (8)$$

This quantity measures the total amount of accelerated expansion during inflation.

**(iv) Analytical Scale Factor in the Bouncing Regime:** In the vicinity of the bounce, the analytical form of the scale factor is given by

$$a(t) = a_B \left( 1 + \delta \frac{t^2}{t_{\text{pl}}^2} \right)^{1/6} \quad (9)$$

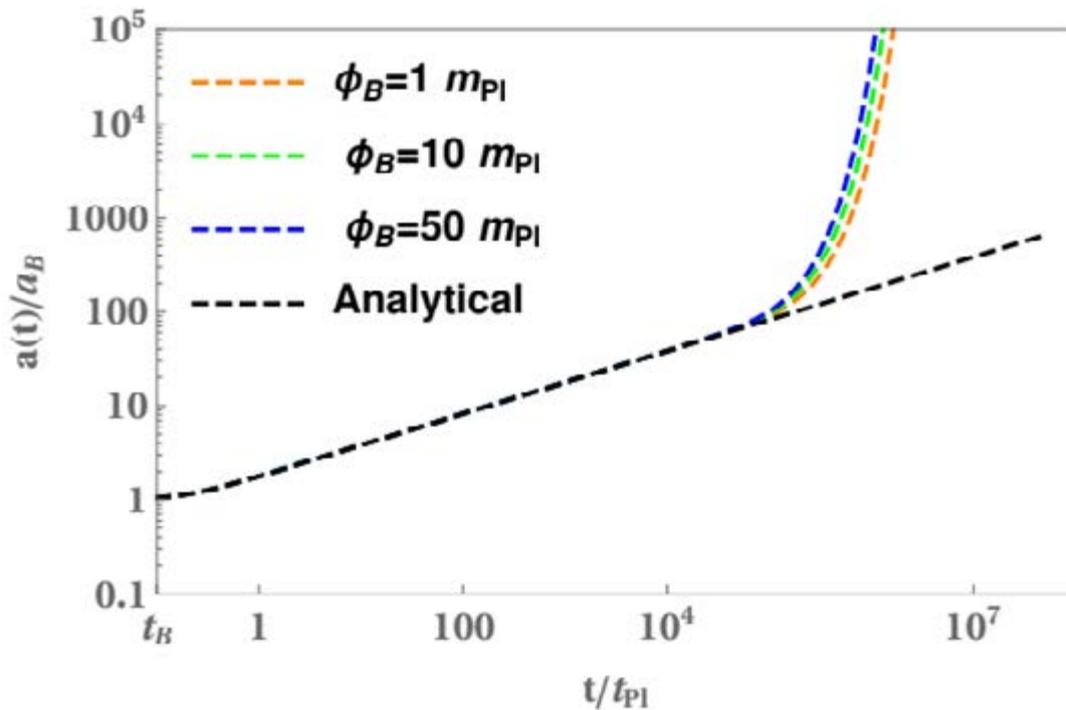
where  $a_B = a(t_B)$ ,  $\delta$  is a dimensionless parameter, and  $t_{\text{pl}}$  denotes the Planck time. We numerically solve the modified Friedmann equation (1) and the Klein–Gordon equation (2) together with the chosen potential (3). At the bounce, we examine only positive inflaton velocity (PIV)  $\dot{\phi}_B > 0$ . However, one can also perform similar analysis for negative inflaton

velocity (NIV).  $\dot{\phi}_B < 0$  The initial scalar field configurations are categorized into KED and PED cases. Let us analyze the case of PIV for both KED and PED initial conditions. The numerical evolution of the scale factor  $a(t)$ , the EoS parameter  $w(\phi)$ , and the slow-roll parameter  $\epsilon_H$  for various values of  $\phi_B$  are illustrated in Fig. 1. First, we investigate the KED initial conditions of inflaton field. In the bouncing regime, the evolution of  $a(t)$  is largely independent of the specific choice of  $\phi_B$  and closely follows the analytical solution (7). During

the slow-roll phase, the scale factor exhibits exponential growth. The numerical evolution can be clearly divided into three stages:

1. **Bouncing phase:**  $w(\phi) \approx +1$
2. **Transition phase:**  $w(\phi)$  evolves from  $+1$  to  $-1$
3. **Slow-roll phase:**  $w(\phi) \approx -1$

Furthermore, we compute the number of e-folds  $N_{\text{inf}}$  for different values of  $\phi_B$ , and the results are summarized in Table 1. According to the 2018 results of the Planck Collaboration, a successful inflationary scenario requires at least 60 e-folds. This observational constraint places bounds on the allowed range of the initial field value  $\phi_B$ . The values of the number of e-folds  $N_{\text{inf}}$  are summarized in Table 1. It is evident that  $N_{\text{inf}}$  increases with increasing initial field value  $\phi_B$ . Similar trends have been reported in previous studies. We now turn to the PED initial conditions; in this case, the initial conditions at the bounce are governed solely by kinetic energy, since PED initial conditions do not arise at any stage of the bouncing phase. Similar conclusions were reported for the T-model in Ref. [16]. Hence, the PED initial conditions of inflaton field cannot be imposed across the entire range of  $\phi_B$ .



**Figure 1.** The figure illustrates the evolution of  $a(t)$  for different KED initial conditions at the bounce. The analytical solution for  $a(t)$  is also shown to enable a direct comparison with the numerical results. In this scenario, the evolution of  $a(t)$  exhibits universal behavior.

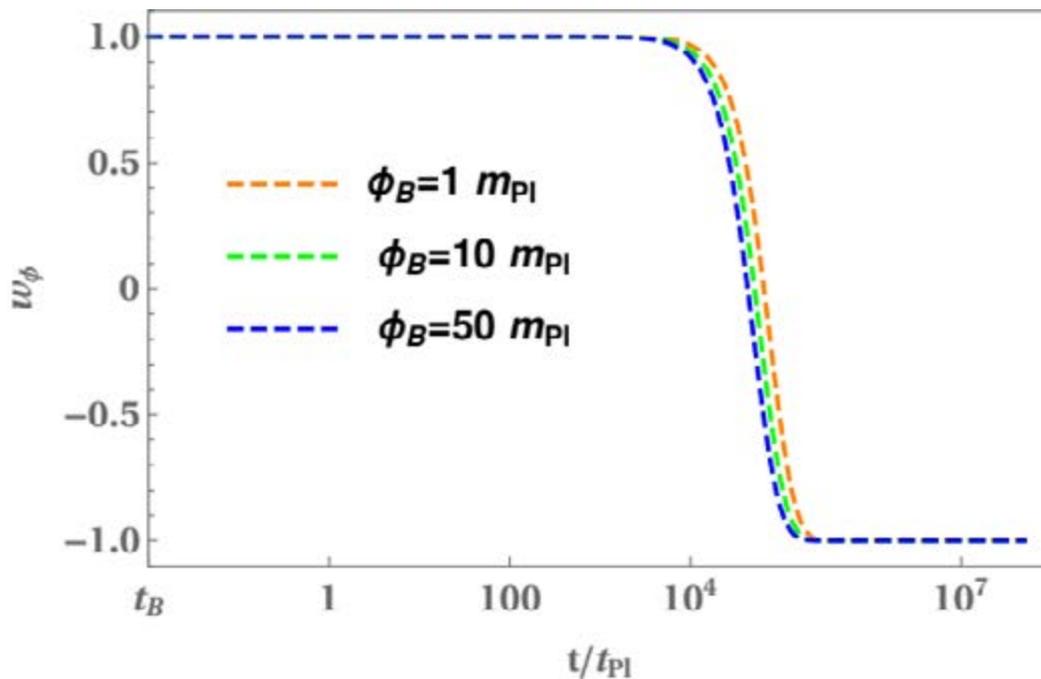


Figure 2. The figure exhibits the evolution of  $w(\phi)$  for various KED initial conditions at the bounce. We observe that the evolution of the universe can be divided into three distinct phases: the bouncing phase, the transition phase, and the slow-roll phase.

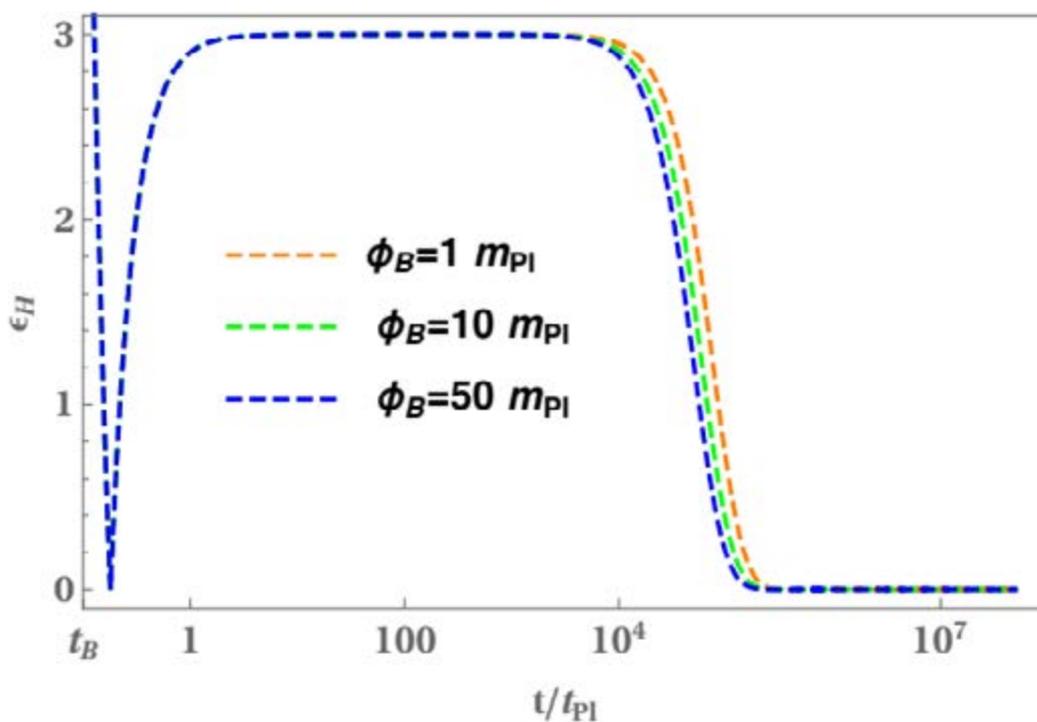


Figure 3. This figure represents the evolution of  $\epsilon_H$  for different KED initial conditions at the bounce.

**Table 1. Inflationary parameters for the potential (3) with  $\phi_B > 0$ .**

$\phi_B/m_{\text{Pl}}$	Inflation	$t/t_{\text{Pl}}$	$\epsilon_H$	$w(\phi)$	$N_{\text{inf}}$
0.5	Start	91045.7	0.92	-1/3	45.55
	Slow-roll	376311	0.00014	-1	
	End	$1.0747 \cdot 10^7$	0.28	-1/3	
1.0	Start	82205.7	1.0	-1/3	60.13
	Slow-roll	381749	0.000018	-1	
	End	$5.8796 \cdot 10^7$	0.33	-1/3	
2.0	Start	79532.6	1.0	-1/3	62.23
	Slow-roll	386300	0.00019	-1	
	End	$1.0362 \cdot 10^7$	0.22	-1/3	

### Conclusions

In this work, we have investigated the pre-inflationary dynamics associated with the potential introduced in Eq. (3) within the framework of LQC. Our analysis shows that, for KED initial conditions of the inflaton field at the bounce, the cosmic evolution naturally divides into three well-defined stages: the bouncing phase, the transition phase, and the slow-roll inflationary phase. During the bouncing regime, the scale factor  $a(t)$  displays a universal behavior that remains largely insensitive to a broad range of initial values of  $\phi_B$ , as well as to the detailed form of the inflationary potential. This universality is a distinctive feature of LQC when the kinetic energy dominates at the bounce. The numerical solutions for  $a(t)$  are found to be in excellent agreement with the analytical expression provided in Eq. (7), as demonstrated in Fig. 1. In this phase, the EoS parameter satisfies  $w(\phi) \approx +1$ , confirming that the dynamics are indeed governed by the kinetic term of the inflaton field. As the evolution proceeds, the universe enters a brief transition phase characterized by a rapid change in the EoS parameter from  $+1$  to  $-1$ . This intermediate stage is considerably shorter in duration compared with both the bouncing and the subsequent slow-roll phases. Despite its short timescale, it plays a crucial role in connecting the kinetic energy-dominated bounce to the inflationary attractor solution. Following the transition, the universe moves into an accelerating regime. At the beginning of this stage, the slow-roll parameter is relatively large, reflecting the residual effects of the preceding dynamics. However, it quickly decreases and approaches a value close to zero, indicating that the system is settling into the slow-roll inflationary phase. This behavior is clearly illustrated in Figures 2 and 3. The total number of e-folds  $N_{\text{inf}}$  generated during the slow-roll period has been computed for various initial conditions and is summarized in Table 1. The results confirm that a sufficient number of e-folds can be achieved for a suitable range of  $\phi_B$ , consistent with observational requirements. We also examined the scenario corresponding to PED initial conditions. Interestingly, even in this case, the dynamics at the bounce are effectively controlled by the kinetic energy of the inflaton. In other words, PED conditions do not genuinely arise during the bouncing phase, as the kinetic term inevitably dominates the energy density at that stage. Similar findings were reported for the T-model

in Ref. [16]. Consequently, PED initial conditions for the inflaton field cannot be consistently implemented across the entire range of  $\phi_B$ , reinforcing the robustness of the KED bounce in this framework.

### Acknowledgment

Mohd Shahalam acknowledges Integral University, Lucknow for financial support through Integral Research Fellowship (IRF) and Seed Money Grant 2024-2025 (Project Sanction No.: IUL/ICEIR/SMP/2024-04), respectively.

### Conflict of interests

There is no conflict of interests.

### The contribution of the author.

**Mohd Shahalam** – The entire paper is executed by a single author.

### References

1. A. H. Guth, Inflationary universe: A possible solution to the horizon and flatness problems, *Phys. Rev. D* 23, 347 (1981). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.23.347>
2. K. Sato, First-order phase transition of a vacuum and the expansion of the Universe, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 195, 467 (1981). <https://doi.org/10.1093/mnras/195.3.467>
3. Planck Collaboration, Planck 2018 results. X. Constraints on inflation, *A&A* 641, A10 (2020), arXiv:1807.06211 [astro-ph]. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201833887>
4. A. Borde and A. Vilenkin, Eternal inflation and the initial singularity, *Phys. Rev. Lett.* 72, 3305 (1994). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.3305>
5. A. Borde, A. H. Guth, and A. Vilenkin, Inflationary spacetimes are incomplete in past directions, *Phys. Rev. Lett.* 90, 151301 (2003). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.151301>
6. A. Ashtekar and P. Singh, Loop quantum cosmology: A status report, *Class. Quantum Grav.* 28, 213001 (2011). <https://doi.org/10.1088/0264-9381/28/21/213001>
7. A. Ashtekar and A. Barrau, Loop quantum cosmology: From pre-inflationary dynamics to observations, *Class. Quantum Grav.* 32, 234001 (2015). <https://doi.org/10.1088/0264-9381/32/23/234001>
8. J. Yang, Y. Ding, and Y. Ma, Alternative quantization of the Hamiltonian in loop quantum cosmology, *Phys. Lett. B* 682, 1 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2009.10.049>
9. A. Ashtekar and D. Sloan, Loop quantum cosmology and slow roll inflation, *Phys. Lett. B* 694, 108 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2010.09.058>
10. P. Singh, K. Vandersloot, and G. V. Vereshchagin, Non-singular bouncing universes in loop quantum cosmology, *Phys. Rev. D* 74, 043510 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.74.043510>
11. J. Mielczarek et al., Inflation in loop quantum cosmology: Dynamics and spectrum of gravitational waves, *Phys. Rev. D* 81, 104049 (2010). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.81.104049>
12. B. Bonga and B. Gupta, Inflation with the Starobinsky potential in loop quantum cosmology, *Gen. Relativ. Gravit.* 48, 1 (2016). <https://doi.org/10.1007/s10714-016-2049-4>
13. T. Zhu et al., Pre-inflationary universe in loop quantum cosmology, *Phys. Rev. D* 96, 083520 (2017). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.96.083520>

14. M. Shahalam, M. Sharma, Q. Wu and A. Wang, Pre-inflationary dynamics in loop quantum cosmology: Power-law potentials, Phys. Rev. D 96 (2017) 123533, arXiv:1710.09845. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.96.123533>
15. M. Sharma, M. Shahalam, Q. Wu and A. Wang, Preinflationary dynamics in loop quantum cosmology: Monodromy potential, J. Cosmol. Astropart. Phys. 1811 (2018). <https://doi.org/10.1088/1475-7516/2018/11/003>
16. M. Shahalam, M. Sami and A. Wang, Preinflationary dynamics of  $\alpha$ -attractor in loop quantum cosmology, Phys. Rev. D 98 (2018) 043524. arXiv: 1806.05815, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.98.043524>
17. M. Shahalam, M. Al Ajmi, R. Myrzakulov, A. Wang, Revisiting pre-inflationary universe of family of  $\alpha$ -attractor in loop quantum cosmology, Class. Quantum Grav. 37 (2020) 195026, arXiv: 1912.00616. <https://doi.org/10.1088/1361-6382/aba486>
18. P. Singh, Loop cosmological dynamics and dualities with Randall-Sundrum braneworlds, Phys. Rev. D 73, 063508 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.73.063508>
19. A. Ashtekar, T. Pawłowski, and P. Singh, Quantum nature of the big bang: Improved dynamics, Phys. Rev. D 74, 084003 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.74.084003>
20. K. A. Meissner, Black-hole entropy in loop quantum gravity, Class. Quantum Grav. 21, 5245 (2004), <https://doi.org/10.1088/0264-9381/21/22/010>
21. M. Domagala and J. Lewandowski, Black-hole entropy from quantum geometry, Class. Quantum Grav. 21, 5233 (2004). <https://doi.org/10.1088/0264-9381/21/22/009>

**Мохд Шаһалам**

*Физика кафедрасы, Интеграл университет, Лакхнау, Үндістан  
(E-mail: mohdshahamu@gmail.com)*

**Кванттық секіру кезіндегі инфляциялық өрістің бастапқы шарттары**

**Аңдатпа.** Бұл мақалада циклдік кванттық космология контексінде логарифмдік потенциалмен басқарылатын әлемнің инфляцияға дейінгі эволюциясын зерттейміз. Біздің талдауымыз баяу домалау инфляциясының сәтті фазасына әкелетін үрлеу өрісі үшін физикалық тұрғыдан рұқсат етілген бастапқы жағдайларды анықтауға бағытталған. Сондай-ақ тиісті электронды қатпарлар санын бағалаймыз және олардың ағымдағы бақылау шекараларымен сәйкестігін тексереміз. Инфляцияның кинетикалық энергиясы бастапқы кезеңде басым болған кезде, қайта қыздыруға дейінгі ғарыштық эволюция үш кезеңнен тұрады: секіру фазасы, өтпелі фаза және баяу домалау инфляция фазасы. Секіру фазасы бойы масштаб факторының динамикасы таңдалған бастапқы жағдайларға да, инфляциялық потенциалдың егжей-тегжейлі құрылымына да сезімтал емес. Бұл режимде эволюция инфляция басталғанға дейінгі фондық динамика анық және модельге тәуелсіз сипаттамасын ұсына отырып, айқын аналитикалық шешімге ие. Бұл модельде кванттық секіру толығымен кинетикалық энергиямен басқарылады, себебі потенциалдық энергия басым бастапқы жағдайлар инфляциялық өрістің толық диапазонында жүзеге аспайды.

**Түйін сөздер:** үлкен жарылыс сингулярлығы, кванттық секіру, инфляция, циклдік кванттық космология

**Мохд Шахалам**

*Кафедра физики, Интегральный университет, Лакхнау, Индия  
(E-mail: mohdshahamu@gmail.com)*

### **Начальные условия поля инфлатона при квантовом отскоке**

**Аннотация.** В данной работе мы исследуем преинфляционную эволюцию Вселенной, обусловленную логарифмическим потенциалом, в контексте петлевой квантовой космологии. Наш анализ сосредоточен на определении физически допустимых начальных условий для поля инфлатона, которые приводят к успешной фазе медленной инфляции. Мы также оцениваем соответствующее число е-складок и изучаем их согласованность с текущими наблюдательными ограничениями. Когда кинетическая энергия инфлатона доминирует на начальном этапе, космическая эволюция до перенагрева естественным образом разделяется на три последовательные фазы: фазу отскока, переходную фазу и фазу медленной инфляции. На протяжении всей фазы отскока динамика масштабного фактора в значительной степени нечувствительна как к выбранным начальным условиям, так и к детальной структуре инфляционного потенциала. В этом режиме эволюция допускает явное аналитическое решение, обеспечивающее четкое и независимое от модели описание фонового поведения до начала инфляции. В этой модели квантовый отскок полностью определяется кинетической энергией, поскольку начальные условия, в которых доминирует потенциальная энергия, не могут быть реализованы во всем диапазоне поля инфлатона.

**Ключевые слова:** сингулярность Большого взрыва, квантовый отскок, инфляция, петлевая квантовая космология

### **References**

1. A. H. Guth, Inflationary universe: A possible solution to the horizon and flatness problems, *Phys. Rev. D* 23, 347 (1981). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.23.347>
2. K. Sato, First-order phase transition of a vacuum and the expansion of the Universe, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 195, 467 (1981). <https://doi.org/10.1093/mnras/195.3.467>
3. Planck Collaboration, Planck 2018 results. X. Constraints on inflation, *A&A* 641, A10 (2020), arXiv:1807.06211 [astro-ph]. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/201833887>
4. A. Borde and A. Vilenkin, Eternal inflation and the initial singularity, *Phys. Rev. Lett.* 72, 3305 (1994). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.3305>
5. A. Borde, A. H. Guth, and A. Vilenkin, Inflationary spacetimes are incomplete in past directions, *Phys. Rev. Lett.* 90, 151301 (2003). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.151301>
6. A. Ashtekar and P. Singh, Loop quantum cosmology: A status report, *Class. Quantum Grav.* 28, 213001 (2011). <https://doi.org/10.1088/0264-9381/28/21/213001>
7. A. Ashtekar and A. Barrau, Loop quantum cosmology: From pre-inflationary dynamics to observations, *Class. Quantum Grav.* 32, 234001 (2015). <https://doi.org/10.1088/0264-9381/32/23/234001>
8. J. Yang, Y. Ding, and Y. Ma, Alternative quantization of the Hamiltonian in loop quantum cosmology, *Phys. Lett. B* 682, 1 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2009.10.049>
9. A. Ashtekar and D. Sloan, Loop quantum cosmology and slow roll inflation, *Phys. Lett. B* 694, 108 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2010.09.058>

10. P. Singh, K. Vandersloot, and G. V. Vereshchagin, Non-singular bouncing universes in loop quantum cosmology, *Phys. Rev. D* 74, 043510 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.74.043510>
11. J. Mielczarek et al., Inflation in loop quantum cosmology: Dynamics and spectrum of gravitational waves, *Phys. Rev. D* 81, 104049 (2010). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.81.104049>
12. B. Bonga and B. Gupt, Inflation with the Starobinsky potential in loop quantum cosmology, *Gen. Relativ. Gravit.* 48, 1 (2016). <https://doi.org/10.1007/s10714-016-2049-4>
13. T. Zhu et al., Pre-inflationary universe in loop quantum cosmology, *Phys. Rev. D* 96, 083520 (2017). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.96.083520>
14. M. Shahalam, M. Sharma, Q. Wu and A. Wang, Pre-inflationary dynamics in loop quantum cosmology: Power-law potentials, *Phys. Rev. D* 96 (2017) 123533, arXiv:1710.09845. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.96.123533>
15. M. Sharma, M. Shahalam, Q. Wu and A. Wang, Preinflationary dynamics in loop quantum cosmology: Monodromy potential, *J. Cosmol. Astropart. Phys.* 1811 (2018). <https://doi.org/10.1088/1475-7516/2018/11/003>
16. M. Shahalam, M. Sami and A. Wang, Preinflationary dynamics of  $\alpha$ -attractor in loop quantum cosmology, *Phys. Rev. D* 98 (2018) 043524. arXiv: 1806.05815, <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.98.043524>
17. M. Shahalam, M. Al Ajmi, R. Myrzakulov, A. Wang, Revisiting pre-inflationary universe of family of  $\alpha$ -attractor in loop quantum cosmology, *Class. Quantum Grav.* 37 (2020) 195026, arXiv: 1912.00616. <https://doi.org/10.1088/1361-6382/aba486>
18. P. Singh, Loop cosmological dynamics and dualities with Randall-Sundrum braneworlds, *Phys. Rev. D* 73, 063508 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.73.063508>
19. A. Ashtekar, T. Pawłowski, and P. Singh, Quantum nature of the big bang: Improved dynamics, *Phys. Rev. D* 74, 084003 (2006). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.74.084003>
20. K. A. Meissner, Black-hole entropy in loop quantum gravity, *Class. Quantum Grav.* 21, 5245 (2004), <https://doi.org/10.1088/0264-9381/21/22/010>
21. M. Domagala and J. Lewandowski, Black-hole entropy from quantum geometry, *Class. Quantum Grav.* 21, 5233 (2004). <https://doi.org/10.1088/0264-9381/21/22/009>

#### Information about the author:

**Mohd Shahalam** – the corresponding author, Ph.D., Professor, Department of Physics, Integral University, Lucknow 226026, India

**Мохд Шахалам** – хат-хабар авторы, Ph.D., Физика кафедрасының профессоры, Интеграл университеті, 226026, Лакхнау, Үндістан.

**Мохд Шахалам** – автор для корреспонденции, PhD, профессор кафедры физики Интегрального университета, Лакхнау 226026, Индия.



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



IRSTI 41.29.25

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-18-36>

Scientific article

## Минималды емес $f(R, T)$ гравитациясында баяулау параметрін дивергенциясыз параметрлеу және энергия шарттары

А.А. Жадыранова<sup>1</sup>, Ү.Қ. Исмаил\*<sup>1</sup>, У.М. Сноу<sup>2</sup>, В.Н. Жумабекова<sup>3</sup>, Н.К. Жусупова<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup>Индиана университеті, Блумингтон, Блумингтон, Америка Құрама Штаттары

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

(E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com, umitismail848@gmail.com, wsnow@iu.edu, zh.venera@mail.ru, zhnaz88@gmail.com)

**Андатпа.** Бұл жұмыста материя-геометрияның минималды емес байланысы бар  $f(R, T)$  гравитациясының ең қарапайым сызықтық моделінде  $f(R, T) = R + 2\lambda T$  баяулау параметрінің дивергенциясыз параметрленуін зерттейміз, мұнда  $R$  – Риччи скаляры,  $T$  - энергия-импульс тензорының ізі,  $\lambda$  - байланыс параметрі. Аталған параметрлену арқылы Хаббл параметрін қызыл ығысумен  $H(z)$  түрінде шығарып, оны модификацияланған Фридман теңдеулеріне енгіземіз. Модель параметрлері ОНД (cosmic chronometers) және Pantheon суперновалар жинақтамасының деректерімен шектеліп, қазіргі мәндер үшін  $H_0$ ,  $q_0$  және эволюциялық компонент  $q_1$  сандық түрде бағаланады, нәтижелер Ғаламның баяулаудан үдеуге бірқалыпты өтетінін көрсетеді. Сонымен қатар, әртүрлі  $\lambda$  мәндерінде энергия тығыздығы  $\rho$  мен толық күй теңдеуі параметрінің  $\omega$  уақыт бойынша өзгерісі талданып,  $\Lambda$ CDM моделінен ауытқулар және  $\lambda$  параметрінің ғаламдық динамиканы қалыптастырудағы рөлі айқындалады. Энергия шарттарын тексеру нәтижесінде NEC және DEC шарттары эволюция бойы орындалатыны, ал SEC шарты кеш уақыттарда бұзылатыны анықталады, бұл бақылаулық үдеумен үйлеседі. Жалпы алғанда, дивергенциясыз параметрлену  $f(R, T)$  гравитациясы шеңберінде кеш уақыттағы космостық үдеуді түсіндіруге әрі бақылаулық және теориялық шектеулерді сақтауға мүмкіндік береді. Зерттеу нәтижелері стандартты  $\Lambda$ CDM моделімен салыстырмалы талдау жүргізуге және  $\lambda$  параметріне бақылаулық шектеулер қоюға негіз болады.

**Түйін сөздер:** Дивергенциясыз баяулау параметрі,  $f(R, T)$  гравитациясы, минималды емес байланыс, космостық үдеу, энергия шарттары, күй теңдеуі,  $\Lambda$ CDM.

### Introduction

Қазіргі бақылаулық космология бойынша Ғаламның кеңеюі кеш уақыттарда үдей түсетіні сенімді түрде анықталған. Бұл қорытынды ең алдымен Ia типті аса жаңа жұлдыздардың (SNe Ia) қашықтық-қызыл ығысу байланысынан алынған нәтижелермен Жіберілді 3.02.2026. Өзгертілді 19.02.2026. Қабылданды 19.02.2026. Онлайн қол жетімді 30.03.2026

дәлелденді [1,2]. Стандартты  $\Lambda$ CDM моделінде үдеу құбылысы космологиялық тұрақты немесе вакуумдық энергия арқылы түсіндіріледі. Дегенмен, мұндай түсіндірудің теориялық қиындықтары мен ашық сұрақтары балама тәсілдерді қарастыруға ынталандырады.

Балама бағыттардың маңызды класы – модификацияланған гравитация теориялары. Бұл тәсілде кеш уақыттағы үдеуді жаңа күңгірт энергия компонентін енгізбей-ақ, гравитациялық әсердің үлкен масштабтарда өзгеруі арқылы сипаттауға болады. Осындай теориялардың ішінде  $f(R)$ ,  $f(T)$ , скаляр-тензорлық модельдер және олардың әртүрлі жалпыламалары кеңінен зерттелген. Алайда параметрлік еркіндігі көп модельдерде физикалық интерпретация күрделеніп, бақылаулық деректермен сәйкестігін нақты бағалау қиын болуы мүмкін. Сондықтан қарапайым әрі бақылаулық тұрғыдан тексеруге ыңғайлы, бірақ сонымен бірге жаңа физикалық эффектілер беретін модельдерге ерекше назар аударылады.

Осы тұрғыда  $f(R,T)$  гравитациясы қызықты мүмкіндіктер береді, мұнда гравитациялық әсер кеңістік-уақыт қисықтығын сипаттайтын Риччи скаляры  $R$ -ге ғана емес, материяның энергия-импульс тензорының ізі  $T$ -ға да тәуелді болады [3,4]. Нәтижесінде материя мен геометрия арасында минималды емес байланыс пайда болып, космологиялық теңдеулерде тиімді қосымша мүшелер түзіледі. Бұл мүшелер Ғалам динамикасына, соның ішінде үдеу фазасының басталуына әсер етуі мүмкін. Сонымен қатар  $T$ -ға тәуелділік енгізілген кезде материя қасиеттері кеңею динамикасына тікелей әсер етеді, яғни модельдің эволюциясы материя күйіне сезімтал бола бастайды. Бұл ерекшелік бір жағынан үдеуді сипаттаудың қосымша механизмдерін ұсынса, екінші жағынан теорияның физикалық келісімділігі тұрғысынан қосымша талдауды талап етеді. Атап айтқанда,  $f(R,T)$  теориясында энергия-импульс тензорының ковариантты сақталу заңы жалпы жағдайда өзгеруі мүмкін, бұл космологиялық сұйықтықтың эволюциялық теңдеуіне қосымша мүшелердің пайда болуына әкеледі. Сондықтан нақты есептеулер жүргізгенде материяның енгізілу тәсілі, күй теңдеуі және қолданылатын қосымша шарттар айқын көрсетілуі маңызды. Бұл жұмыста модельді физикалық тұрғыдан интерпретациялауға қолайлы шеңберде қарастырып, кеңею тарихын кинематикалық әдіс арқылы сипаттауды мақсат етеміз.

Бұл жұмыста  $f(R,T)$  теориясының ең қарапайым сызықтық түрі қарастырылады:  $f(R,T)=R+2\lambda T$ , мұнда  $\lambda$  – материя-геометрия байланысын сипаттайтын параметр. Соңғы жылдары мұндай модель кеш уақыттағы үдеуді сипаттаудың және энергия шарттарын талдау тұрғысынан белсенді зерттелуде [5–7]. Ғалам кеңеюін кинематикалық түрде сипаттаудың ыңғайлы жолы ретінде баяулау параметрінің дивергенциясыз параметрленуі алынып, одан Хаббл параметрінің  $H(z)$  түріндегі тәуелділігі аналитикалық түрде шығарылады. Алынған  $H(z)$  модификацияланған Фридман теңдеулеріне енгізіліп, энергия тығыздығы  $\rho(z)$ , қысым  $p(z)$  және тиімді күй теңдеуі параметрі  $\omega(z)$  эволюциясы талданады. Мұндай схема параметрлердің физикалық рөлін айқын көрсетуге, әрі алынған нәтижелерді стандартты  $\Lambda$ CDM сценарийімен салыстыруға мүмкіндік береді.

Сонымен қатар алынған шешімдердің физикалық үйлесімділігін бағалау үшін классикалық энергия шарттары NEC, WEC, SEC, DEC қарастырылып,  $\lambda$  параметрінің

олардың орындалуына әсері талданады. Энергия шарттарының орындалу аймақтарын анықтау модельдің физикалық жарамды параметрлік облыстарын бөліп көрсетуге және кеңею динамикасының үдеу, баяулау режимдерін дұрыс интерпретациялауға негіз береді. Осылайша, жұмыс  $f(R, T)$  гравитациясы аясында дивергенциясыз кинематикалық тәсілдің мүмкіндігін көрсетіп, модель параметрлерінің космологиялық динамикаға ықпалын жүйелі түрде зерттейді және алынған нәтижелерді  $\Lambda$ CDM болжамдарымен салыстыруға алғышарт жасайды.

Бұл жұмыста «дивергенциясыз баяулау параметрі» деп  $q(z)$  баяулау параметрінің таңдалған параметрленуі қарастырылатын қызыл ығысу аралығында шекті болып, ешбір нүктеде шексіздікке кетпейтінін айтамыз. Бұл шарт  $q(z)$ -пен байланысты  $H(z)$  сияқты космологиялық функциялардың физикалық мағынасы бар регуляр эволюциясын қамтамасыз етеді.

### Әдіснама

Бұл жұмыста материя мен геометрия арасындағы минималды емес байланысы бар  $f(R, T)$  модификацияланған гравитация қарастырылады. Мұндай тәсілдің негізгі идеясы – гравитациялық әсер тек қана қисықтық скаляры  $R$ -ға тәуелді емес, сонымен бірге материяны сипаттайтын энергия – импульс тензорының ізі  $T$ -ға да тәуелді болады. Нәтижесінде өріс теңдеулерінде қосымша тиімді мүшелер пайда болып, олар космологиялық эволюцияға әсер етеді. Әсіресе  $T$ -ға тәуелділік материя-геометрия байланысын күшейтіп, стандартты жалпы салыстырмалылықпен салыстырғанда жаңа параметрлік еркіндік береді [3].

Есептеулерді ықшамдау үшін табиғи бірліктер жүйесін қолданамыз. Бұл жағдайда барлық шамалар бір жүйеге келтіріліп, теңдеулердің құрылымы айқын көрінеді. Әдіснаманың жалпы қадамы келесідей: әсер функционалын жазу, метрика бойынша вариациялау арқылы өріс теңдеулерін алу, материя бөлігінен энергия-импульс тензорын анықтау және оның ізі  $T$ -ны енгізу, кейінгі бөлімдерде осы теңдеулерді таңдаулы космологиялық метрикаға бейімдеп, алынған нәтижелерден баяулау параметрлері мен энергия шарттарын талдау.

$f(R, T)$  теориясын таңдаудың тағы бір мотивациясы – материя сипаттамаларының геометрияға тікелей кері байланыс беруі. Космологияда бұл байланыс әсіресе идеал сұйық түріндегі материя үшін маңызды, өйткені  $T$  шамасы  $\rho$  және  $p$  арқылы өрнектеліп, эволюциялық теңдеулерге жаңа түзетулер енгізеді. Осы түзетулердің салдары ретінде тиімді тығыздық пен тиімді қысым ұғымдары пайда болып, олар кеңею динамикасын стандартты Фридман теңдеулеріне ұқсас түрде жазуға мүмкіндік береді. Сондықтан әрі қарай өріс теңдеулерін алғаннан кейін оларды тиімді сұйықтық формализмі арқылы талдап, баяулау режимі мен энергия шарттарының орындалуын осы тиімді шамалар арқылы бағалаймыз.

Жалпы түрде  $f(R, T)$  функциясының нақты түрін таңдау модельдің физикалық қасиеттерін анықтайды: параметрлердің таңдалуы үдемелі кеңеюдің мүмкіндігіне, баяулау параметрлерінің эволюциясына және энергия шарттарының орындалу аймақтарына әсер етеді. Бұл жұмыстағы тәсілдің ерекшелігі - параметрлік еркіндікті

тек шешім бар деген критериймен емес, сонымен қатар физикалық консистенттілікпен, мысалы, кейінгі бөлімдерде енгізілетін дивергенциясыз шарт пен энергия шарттарын, байланыстыра отырып шектеу. Осылайша таңдалған модельдің нәтижелері бақылаулық космологияға жақын және интерпретацияға қолайлы болуына мән береміз. Осыны ескере отырып,  $f(R, T)$  теориясының әсері келесі түрде жазылады:

$$S = \frac{1}{2} \int f(R, T) \sqrt{-g} d^4x + \int L_m \sqrt{-g} d^4x. \quad (1)$$

(1) өрнектегі бірінші интеграл гравитациялық секторды, ал екінші интеграл материя секторын сипаттайды. Мұнда  $8\pi G = c = 1$  қолдандық және  $g = \det(g_{\mu\nu})$  - метриканың анықтаушысы, ал  $L_m$  - материя лагранжианы.  $f(R, T)$  функциясы қисықтық скаляры  $R$  және энергия-импульс тензорының ізі  $T$  арқылы анықталады, әрі қарай есептеулерде  $f_R = \frac{\partial f}{\partial R}$  және  $f_T = \frac{\partial f}{\partial T}$  сияқты туындылар маңызды рөл атқарады.

Материя көзінің гравитациялық өріске қалай әсер ететінін алу үшін әсердің материя бөлігін метрикаға қатысты вариациялап, энергия-импульс тензоры анықталады. Нақты айтқанда,  $T_{\mu\nu}$  материя лагранжианының  $g^{\mu\nu}$  бойынша функционалдық туындысы арқылы беріледі, сондықтан келесі анықтамаға келеміз

$$T_{\mu\nu} = - \frac{2}{\sqrt{-g}} \frac{\delta(\sqrt{-g} L_m)}{\delta g^{\mu\nu}}, \quad (2)$$

$$T = g^{\mu\nu} T_{\mu\nu}. \quad (3)$$

Геометриялық жақтан негізгі шама - Риччи скаляры  $R$  келесідей табылады

$$R = g^{\mu\nu} R_{\mu\nu}. \quad (4)$$

Геометриялық шамаларды нақты есептеу үшін алдымен кеңістік-уақыттың метрикасын таңдаймыз. Космологиялық принципке сәйкес Ғаламды Фридман – Леметр – Робертсон-Уокер (FLRW) метрикасы жақсы сипаттайды. Бұл жұмыста қарапайымдылық үшін кеңістігі жазық жағдайы қарастырамыз, себебі бақылаулық деректер кеңістіктің қисықтығы нөлге жуық екенін көрсетеді және бұл таңдау есептеулерді айтарлықтай ықшамдайды. Осылайша, метрика уақыт бойынша өзгертін бір ғана масштабтық фактормен  $a(t)$  анықталады.

$$dS^2 = -dt^2 + a^2(t)(dx^2 + dy^2 + dz^2), \quad (5)$$

мұнда  $a(t)$  - масштабтық фактор. Осыдан метрика компоненттері келесідей болады. Мұндағы  $a(t)$  кеңеюдің уақыт бойынша эволюциясын сипаттайды. Практикалық тұрғыдан  $a(t)$  арқылы Хаббл параметрі  $H = \frac{\dot{a}}{a}$  және оның туындылары енгізіліп, кейін Риччи тензоры мен Риччи скаляры ықшам түрде есептеледі. (5) метрика диагональ түрінде болғандықтан, метрика компоненттері тікелей оқылады және диагональдан тыс мүшелер нөлге тең болады.

$$g_{00} = -1, g_{11} = a^2(t), g_{22} = a^2(t), g_{33} = a^2(t). \quad (6)$$

Диагональды метрика компоненттері белгілі болған соң, байланыс коэффициенттерін есептейміз. Олар  $g_{\mu\nu}$  және оның туындылары арқылы анықталады және Риччи тензорына өтудің негізгі аралық қадамы болып табылады. FLRW метрикасы үшін нөлден өзгеше Кристоффель символдары тек уақыт бойынша туындыларға тәуелді болады, яғни олар  $a(t)$  және  $\dot{a}(t)$  арқылы өрнектеледі. Осыны пайдаланып, Риччи тензорын стандартты анықтама бойынша жазып, одан әрі (4) формула арқылы Риччи скалярын табамыз

$$R_{\mu\nu} = \partial_\lambda \Gamma_{\mu\nu}^\lambda - \partial_\nu \Gamma_{\mu\lambda}^\lambda + \Gamma_{\mu\nu}^\lambda \Gamma_{\lambda\sigma}^\sigma - \Gamma_{\mu\lambda}^\sigma \Gamma_{\nu\sigma}^\lambda. \quad (7)$$

Изотропияға байланысты кеңістіктік диагональ компоненттер бірдей типтес болады. Нәтижесінде келесі стандартты өрнектерді аламыз  $R_{00} = -3\frac{\ddot{a}}{a}$ ,  $R_{11} = a\ddot{a} + 2a\dot{a}^2$ ,  $R_{22} = a\ddot{a} + 2a\dot{a}^2$ ,  $R_{33} = a\ddot{a} + 2a\dot{a}^2$ . Енді Риччи скаляры анықтамасы бойынша

$$R = g^{\mu\nu} R_{\mu\nu} = g^{00}R_{00} + g^{11}R_{11} + g^{22}R_{22} + g^{33}R_{33}. \quad (8)$$

Кері метриканы қолдана отырып, және  $R_{00}$ ,  $R_{11}$ ,  $R_{22}$ ,  $R_{33}$  мәндерін пайдаланып келесіні табамыз

$$R = 6\left(\frac{\ddot{a}}{a} + \frac{\dot{a}^2}{a^2}\right). \quad (9)$$

Хаббл параметрін  $H = \frac{\dot{a}}{a}$  деп енгізсек, әрі қарай  $H = \frac{\dot{a}}{a} - H^2$  екенін пайдалансақ

$$R = 6(H + 2H^2). \quad (10)$$

Осылайша, жазық FLRW геометриясы үшін Риччи скаляры  $R$  Хаббл параметрі арқылы (10) түріне келеді.

Әрі қарай  $f(R, T)$  теориясына көшу үшін материяның қандай түрде енгізілетінін және  $T$  шамасының физикалық мағынасын нақтылап алу қажет. Себебі бұл теорияда

геометриялық бөлік қисықтық арқылы ғана емес, материяның сипаттамалары арқылы да өріс теңдеулеріне тікелей ықпал етеді, яғни материя тек көз ретінде емес, сонымен қатар динамиканы түрлендіретін қосымша фактор ретінде қарастырылады. Осы тұрғыда  $T$  шамасы материяның тығыздығы мен қысымына тәуелді болатын интегралды сипаттама болып табылады және ол әр түрлі космологиялық кезеңдерде әрқалай мән алып, модельдің эволюциясына түрліше әсер етуі мүмкін. Сондықтан  $T$ -ға тәуелділік енгізілгенде стандартты космологиядағы кейбір нәтижелердің, мысалы, баяулау, үдеу шарттары, тиімді күй теңдеуі, энергия шарттарының орындалуы, өзгеруі немесе қайта интерпретациялануы ықтимал. Бұл жұмыста материяны классикалық космологияда жиі қолданылатын идеал сұйық ретінде қарастырамыз, мұндай тәсіл модельді физикалық тұрғыдан түсіндіруге ыңғайлы, сондай-ақ алынатын теңдеулерді бақылаулық сипаттамалармен салыстыруға мүмкіндік береді. Сонымен қатар  $f(R,T)$  теориясында материя – геометрия байланысы күшейген жағдайда энергия-импульс тензорының сақталу заңының өзгеруі мүмкін екені белгілі, сондықтан  $T$ -ның нақты енгізілуі әрі кейінгі бөлімдердегі дивергенциясыз шарт пен энергия шарттарын талдаудың негізгі алғышарты болып табылады. Осы себептерді ескере отырып, әрі аналитикалық есептеулерді күрделендірмей модельдің басты ерекшеліктерін көрсету үшін,  $f(R,T)$  функциясының ең қарапайым және әдебиеттерде кең қолданылатын сызықтық түрін таңдаймыз. Мұндай таңдау параметрлердің физикалық рөлін анық көруге, жалпы салыстырмалылыққа өтуді бақылауға және материя ізі арқылы геометрияға енгізілетін түзетулердің космологиялық динамикаға ықпалын жүйелі түрде талдауға мүмкіндік береді. Атап айтқанда, параметр мәніне қарай Ғаламның кеңею сценарийі, үдеу режимінің басталуы және энергия шарттарының орындалу аймақтары сандық тұрғыдан өзгеруі мүмкін.

Осы жұмыста  $f(R,T)$  гравитациясының әдебиетте кең қолданылатын және есептеулерді күрделендірмей материя-геометрия байланысының әсерін айқын көрсетуге мүмкіндік беретін сызықтық түрі қарастырылады, сондықтан  $f(R,T)$  келесідей жазылады

$$f(R, T) = R + 2\lambda T, \quad (11)$$

мұндағы  $\lambda$  - материя-геометрия байланысының күшін сипаттайтын параметр.  $\lambda = 0$  болғанда модель жалпы салыстырмалылыққа жуықтайды, ал  $\lambda \neq 0$  кезінде материяның ізі арқылы геометрияға қосымша әсер пайда болады. Бұл параметрдің мәні өзгерген сайын Ғалам динамикасы да, мысалы, үдеу кезеңінің басталуы немесе энергия шарттарының орындалуы, сандық тұрғыдан әртүрлі болуы мүмкін.

Космологияда материяны ең қарапайым түрде идеал сұйықтық ретінде модельдеу кең тараған. Бұл жағдайда энергия-импульс тензоры

$$T_{\mu\nu} = (\rho + p)u_{\mu}u_{\nu} + pg_{\mu\nu}, \quad (12)$$

мұнда  $\rho$  - энергия тығыздығы,  $p$  - изотроп қысым, ал  $u_\mu$  - сұйықтықтың төрт-жылдамдығы. Енді  $T$ -ның  $\rho$  және  $p$  арқылы өрнектелуін қарастыратын болсақ, (12)-ні (3)-ке қоя отырып келесі өрнекті аламыз

$$T = g^{\mu\nu}[(\rho + p)u_\mu u_\nu + p g_{\mu\nu}] = (\rho + p)g^{\mu\nu}u_\mu u_\nu + p g^{\mu\nu}g_{\mu\nu}, \quad (13)$$

$$T = (\rho + p)(-1) + p \cdot 4 = -\rho - p + 4p = -\rho + 3p. \quad (14)$$

Осылайша,  $T$  ізінің таңбасы мен мәні тікелей  $\rho$  және  $p$  арқылы анықталады. Бұл нәтиже  $f(R, T) = R + 2\lambda T$  моделінде өте маңызды, өйткені теориядағы қосымша мүшелер дәл осы  $T$  арқылы өріс теңдеулеріне кіреді және  $\lambda$  параметрімен бірге космологиялық эволюцияны өзгертеді [14,15]. Бұл жұмыста теориялық модельден алынатын функциялар Wolfram Mathematica ортасында сандық түрде есептеліп, қызыл ығысу  $z$  бойынша графиктер түрінде көрсетіледі. Есептеулер барысында  $H(z)$  және  $q(z)$  тәуелділіктері негізінде кейінгі бөлімдерде қарастырылатын космологиялық шамалардың эволюциясы талданады.

### Нәтижелер мен талқылау

Бұл бөлімде дивергенциясыз баяулау параметрлерін қолдана отырып,  $f(R, T)$  моделі үшін Ғаламның кеңею тарихын  $a(z)$  және  $H(z)$  функциялары арқылы сипаттаймыз [16–23]. Алынған теңдеулер негізінде алдымен негізгі кинематикалық шамалардың эволюциясын талдап, кейін  $f(R, T) = R + 2\lambda T$  сызықтық моделі жағдайында энергия тығыздығы  $\rho(z)$ , қысым  $p(z)$  және күй теңдеуі параметрі  $\omega(z)$  функцияларын есептейміз. Сонымен қатар  $\lambda$  параметрінің өзгеруі кеңею динамикасына және тиімді сипаттамалардың мінезіне қалай әсер ететінін сандық түрде көрсетіп, нәтижелерді графиктер арқылы салыстырамыз. Осылайша, модель параметрлерінің физикалық мағынасын ашып, алынған нәтижелерді стандартты космологиялық сценарийлермен салыстыруға мүмкіндік береміз.

#### Кеңею тарихын сипаттайтын негізгі функциялар

Кеңею тарихын сипаттауда ең қолайлы шамалардың бірі – баяулау параметрі  $q(z)$ . Ол Ғаламның кеңеюі үдеумен жүріп жатыр ма, әлде баяулап жатыр ма деген сұраққа тікелей жауап береді және кеңею динамикасының жалпы бағытын көрсетеді. Бақылаулық талдауларда  $q(z)$  үшін қарапайым параметрленулер кеңінен қолданылады, себебі олар аз ғана параметр арқылы кең қызыл ығысу аралығындағы эволюцияны сипаттауға мүмкіндік береді және есептеулер кезінде артық еркіндікке жол бермейді [24–26]. Таңдаған параметрлену қазіргі кезеңдегі мәнді бөлек айқындап, қызыл ығысу артқандағы өзгерісін жеке параметр арқылы реттейді, сондықтан нәтижелердің физикалық интерпретациясы жеңілдейді. Сонымен қатар бұл тәсіл кеңеюдің режим ауысуын, яғни баяулау кезеңінен үдеу кезеңіне өту тәрізді бір функция арқылы көрсетуге мүмкіндік береді және әрі қарай  $H(z)$ ,  $a(z)$  сияқты негізгі сипаттамаларды қалпына келтіру үшін бастапқы негіз болады. Осыған сәйкес  $q(z)$  төмендегідей беріледі

$$q(z) = q_0 + q_1 \frac{z(1+z)}{1+z^2}. \quad (15)$$

Параметрлеудің (15) түрі бірнеше талапты бір мезгілде қанағаттандыру үшін таңдалды: біріншіден, ол қазіргі кезеңдегі мәнді тікелей береді, яғни  $q(0) = q_0$ , екіншіден,  $z \rightarrow \infty$  кезінде  $q(z) \rightarrow q_0 + q_1$  шегіне өтеді, сондықтан ерте Ғаламдағы асимптоталық режим екі параметрмен сипатталады; үшіншіден, бөлгіш  $1 + z^2 > 0$  болғандықтан физикалық аймақта ( $-1 \leq z < \infty$ ) полюстер жоқ, яғни  $q(z)$  шекті және үздіксіз болып,  $H(z)$ ,  $\rho(z)$ ,  $p(z)$  есептеулерінде жасанды сингулярлықтардың пайда болуын болдырмайды. Сонымен қатар  $z \approx 0$  аймағында  $q(z) = q_0 + q_1 z + O(z^2)$  жуықтауы орындалып, төмен қызыл ығысу деректерімен салыстыруға ыңғайлы. Бұл форма (16) теңдеуін аналитикалық интегралдауға мүмкіндік беріп, кейінгі энергия шарттарын талдауды жеңілдетеді. Осы параметрлену  $z$  аймағының кең диапазонында орнықты жұмыс істейді және баяулаудан үдеуге өтуді бірқалыпты сипаттауға мүмкіндік береді. FRW космологиясында баяулау параметрі

$q = -1 - \frac{H}{H^2}$  түрінде анықталады. Егер параметрлеу дұрыс таңдалмаса,  $q(z)$  кейбір  $z$  мәндерінде шексіздікке ұмтылып, нәтижесінде  $H(z)$  және одан туындайтын тиімді шамаларда жасанды сингулярлықтар пайда болуы мүмкін. Сондықтан (15) параметрлену «дивергенциясыз» деп аталады, ол  $q(z)$ -тің зерттелетін диапазонда шекті әрі үздіксіз болуын қамтамасыз етіп, бақылаулық салыстыру мен энергия шарттарын талдауды математикалық артефактыларсыз жүргізуге мүмкіндік береді.  $q(z)$  белгілі болғанда Хаббл параметрі келесі байланыстан табылады

$$\frac{d \ln H}{dz} = \frac{1+q(z)}{1+z}, \quad (16)$$

ал интегралдау нәтижесінде

$$H(z) = H_0(1+z)^{(1+q_0)}(1+z^2)^{\frac{q_1}{2}}, \quad (17)$$

өрнегін алдық. Есептеулерде бір үйлесімді параметрлер жиынын қолдандық ( $H_0, q_0, q_1$ ) = (66.44, -0.55, 0.78).

Таңдалған параметрлену (15) кинематикалық тұрғыдан  $q(z)$  және  $H(z)$  эволюциясын тұтас диапазонда сипаттауға мүмкіндік береді. Атап айтқанда, қазіргі мән  $q(0) = q_0$  үдемелі кеңею режимін көрсетсе, ал  $z \rightarrow \infty$  шегінде  $q(z) \rightarrow q_0 + q_1$  тұрақты шекке ұмтылады, яғни ерте кезеңдерде баяулау режимі орнығады ( $q_0 + q_1 > 0$ ). Үдеуден баяулауға өту нүктесі  $q(z_t) = 0$  шартымен анықталады; берілген параметрлер үшін өтпелі қызыл ығысу  $q(z_t)=0$  шамамен  $z_t \approx 0.60$  болады, бұл Ғаламның динамикасы үдеуден баяулауға немесе керісінше өтетін кезеңді сандық түрде сипаттайды. Сонымен қатар, (17) теңдеуі арқылы алынған  $H(z)$  функциясы полюссіз және шекті болып, кейін  $\rho(z)$ ,  $p(z)$  және энергия шарттарын талдауда жасанды сингулярлықтардың пайда болуына жол бермейді. Осы себепті (15)

параметрленуі сандық есептеулер үшін орнықты және салыстырмалы талдау жүргізуге ыңғайлы негіз береді.

### *Энергия тығыздығы мен қысымның эволюциясы*

Бұл бөлімде (11) сызықтық  $f(R,T)$  моделін пайдаланып, энергия тығыздығы  $\rho(z)$  мен қысым  $p(z)$  функцияларының қызыл ығысуға байланысты өзгерісін талдаймыз. Бұл шамалар кеңею динамикасының физикалық интерпретациясын беретін негізгі сипаттамалар болып табылады:  $\rho(z)$  Ғаламдағы энергияның тиімді деңгейін, ал  $p(z)$  кеңеюдің үдеуіне немесе баяулауына әсер ететін қысымдық үлесті сипаттайды. Сондықтан  $\rho(z)$  және  $p(z)$  эволюциясын анықтау арқылы таңдалған модельдің стандартты космологиялық сценарийлермен сәйкестігін, сондай-ақ параметрлердің физикалық мағынасын нақты бағалауға болады. Байланыс параметрінің әсерін салыстыру үшін  $\lambda = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5$  мәндерін қарастырамыз.  $\lambda$  мәні өзгерген сайын материя–геометрия байланысының күші де өзгереді, соның нәтижесінде  $\rho(z)$  мен  $p(z)$  қисықтарының пішіні және олардың эволюциялық қарқыны сандық тұрғыдан әртүрлі болуы мүмкін. Бұл айырмашылықтар кеңею режимінің қалай қалыптасатынын және энергия шарттарының орындалу аймақтарын түсіндіруде маңызды рөл атқарады. Есептеулерді ықшам жүргізу үшін Хаббл параметрінің уақыт бойынша туындысын баяулау параметрі арқылы өрнектейміз. Бұл тәсілдің артықшылығы -  $H$ -тің динамикасын бір ғана кинематикалық функциямен байланыстырып, әрі қарай алынған теңдеулерді  $z$  айнымалысы арқылы жүйелі түрде интегралдауға мүмкіндік береді. Осыған сәйкес келесі қатынас қолданылады

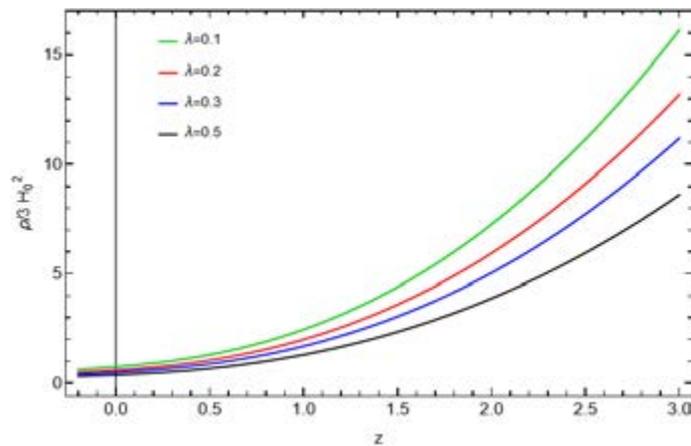
$$\dot{H} = -(1 + q)H^2. \quad (18)$$

Осы модель үшін энергия тығыздығы  $\rho$  және қысым  $p$  шамалары  $H$  және  $\dot{H}$  арқылы төмендегідей өрнектеледі

$$\rho(z) = \frac{(3+6\lambda)}{(1+3\lambda)^2 - \lambda^2} H^2 - \frac{2\lambda}{(1+3\lambda)^2 - \lambda^2} \dot{H}, \quad (19)$$

$$p(z) = -\frac{(3+6\lambda)}{(1+3\lambda)^2 - \lambda^2} H^2 - \frac{2(1+3\lambda)}{(1+3\lambda)^2 - \lambda^2} \dot{H}. \quad (20)$$

Мұнда  $H(z)$  (17) формула арқылы, ал  $\dot{H}(z)$  (18) формула арқылы тікелей есептеледі. Сурет 1-  $\rho(z)$  және  $p(z)$  тәуелділіктері  $\lambda$ -ның әртүрлі мәндері үшін көрсетілген. Графиктерден  $z$  артқан сайын энергия тығыздығы  $\rho(z)$  өсетінін көреміз, бұл ерте кезеңдерде тығыздықтың жоғары болуына сәйкес келеді. Ал кеш уақыттарда қысым  $p(z)$  теріс мәндер аймағында қалып, үдемелі кеңею режиміне тән тиімді динамиканы көрсетеді. Бұл материя – геометрия байланысының Ғалам эволюциясына сандық тұрғыдан ықпал ететінін айқындайды.



Сурет 1 – Өлшемсіз энергия тығыздығы  $\rho/(3H_0^2)$  - нің  $z$  - ке тәуелділігі

### Күй теңдеуі параметрі

Күй теңдеуі параметрі  $\omega(z)$  энергия тығыздығы мен қысым арасындағы байланысты сипаттай отырып, модельдегі тиімді космологиялық сұйықтықтың қасиетін анықтайды. Бұл шама кеңею динамикасының табиғатын түсіндіруде аса маңызды, өйткені дәл  $\omega(z)$  арқылы модельдің қандай режимге жақын екенін сапалық түрде бағалауға болады:  $\omega(z)$  белгілі бір аралықта тұрақты немесе баяу өзгерсе, онда сол кезеңдегі физикалық режим айқын көрінеді. Сонымен қатар  $\omega(z)$ -тің қызыл ығысуға тәуелді эволюциясы кеңеюдің үдеулі немесе баяулайтын кезеңге өтуін сипаттайтын негізгі көрсеткіштердің бірі болып табылады, өйткені қысым мен тығыздықтың арақатынасы кеңею үдеуіне тікелей әсер етеді.

Бұл жұмыста  $\omega(z)$  функциясын есептеу екі мақсатқа қызмет етеді. Біріншіден, бұл шама арқылы алынған  $\rho(z)$  және  $p(z)$  нәтижелерінің физикалық интерпретациясы жеңілдейді: қысымның теріс мәндерге ауысуы немесе оның шамасының өзгеруі кеңеюдің үдеу режимімен қалай байланысатыны айқындалады. Екіншіден,  $\omega(z)$   $\lambda$  параметрінің әсерін бір функцияда жинақтап көрсетуге мүмкіндік береді, себебі  $\lambda$  өзгерген сайын тек  $\rho(z)$  пен  $p(z)$  ғана емес, олардың арақатынасы да өзгереді. Нәтижесінде  $\omega(z)$  қисықтарының пішіні, олардың шектік мәндері және қызыл ығысумен өзгеру қарқыны әртүрлі болуы мүмкін; бұл айырмашылықтар модельдің стандартты  $\Lambda$ CDM сценарийіне жақындығын немесе одан ауытқуын сапалық әрі сандық тұрғыдан бағалауға жағдай жасайды.

Сонымен қатар  $\omega(z)$  параметрі энергия шарттарын талдаумен де тығыз байланысты. Энергия шарттары көбіне тығыздық пен қысым комбинациялары арқылы жазылатындықтан,  $\omega(z)$  функциясының мінезі белгілі бір параметрлік аймақтарда энергия шарттарының орындалуына немесе бұзылуына әкелуі мүмкін. Сондықтан  $\omega(z)$ -ті есептей отырып, кейінгі бөлімдердегі NEC, WEC, SEC, DEC талаптарымен бірлесе қарастырып, физикалық тұрғыдан жарамды шешімдердің аймағын нақтылаймыз. Осы тұрғыдан  $\omega(z)$  функциясы алынған шешімдерді түсіндіру ғана емес, сонымен қатар модельдің параметрлерін физикалық критерийлер арқылы сүзгіден өткізу үшін де қолайлы құрал болып табылады.

Осыған сәйкес күй теңдеуі параметрі төмендегі қатынас арқылы анықталады

$$\omega(z) = \frac{p(z)}{\rho(z)} \quad (21)$$

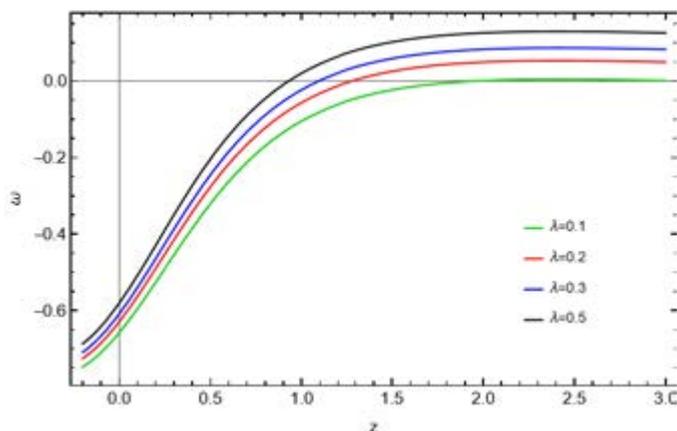
(20), (19) формулаларын қолдансақ,  $\omega(z)$  келесі түрде жазылады

$$\omega(z) = -\frac{(3+6\lambda)H^2(z)+2(1+3\lambda)H(z)}{(3+6\lambda)H^2(z)-2\lambda H(z)} \quad (22)$$

Егер  $H = -(1+q)H^2$  қатынасын енгізсек, онда  $\omega(z)$  тек  $q(z)$  арқылы өрнектеледі

$$\omega(z) = -\frac{(3+6\lambda)-2(1+3\lambda)(1+q(z))}{(3+6\lambda)+2\lambda(1+q(z))} \quad (23)$$

Сурет 2 -  $\omega(z)$  эволюциясы  $\lambda$  -ның әртүрлі мәндері үшін берілген. График бойынша үлкен қызыл ығысу аймағында  $\omega(z)$  материяға жуық режимге ығысады, ал қазіргі кезеңге жақындағанда  $\omega(z)$  теріс мәндер аймағында қалып, үдемелі кеңеюге сәйкес келетін интервалдардың бар екенін көрсетеді.



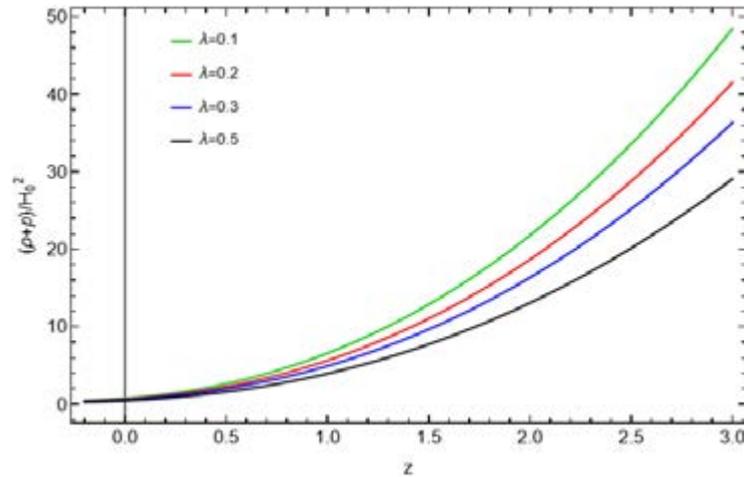
**Сурет 2 - Әртүрлі  $\lambda$  мәндері үшін толық күй теңдеуі параметрі  $\omega$ -ның қызыл ығысу  $z$ -ке тәуелді эволюциясы**

Осылайша, алынған нәтижелер дивергенциясыз параметрленудің  $H(z)$  және  $q(z)$  арқылы кеңею тарихын орнықты сипаттайтынын, ал  $f(R, T) = R + 2\lambda T$  моделінде  $\lambda$  параметрінің  $\rho(z)$ ,  $p(z)$ ,  $\omega(z)$  эволюциясын өзгертіп, кеш уақыттағы үдемелі кеңею режимін сипаттауға мүмкіндік беретінін көрсетеді.

Алынған  $\rho(z)$  және  $p(z)$  функцияларының физикалық дұрыстығын тексеру үшін энергия шарттарын қарастырамыз. Классикалық түрде келесі екі шартқа назар аударамыз: NEC – нөлдік энергия шарты (Null Energy Condition), WEC – әлсіз энергия шарты (Weak Energy Condition), SEC – күшті энергия шарты (Strong Energy Condition), DEC – басым энергия шарты (Dominant Energy Condition)

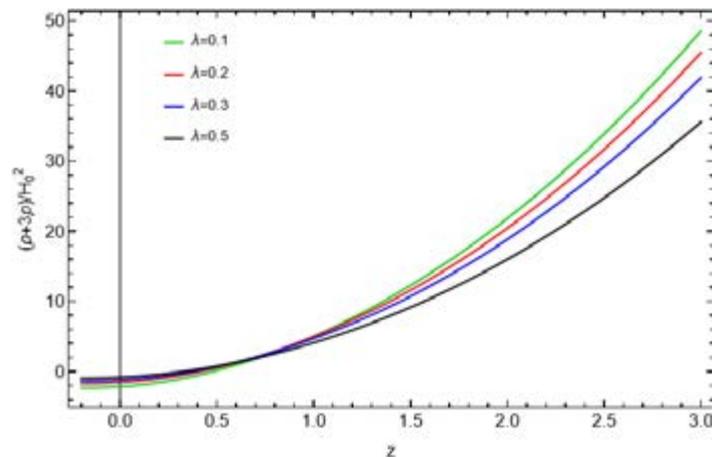
NEC шарты  $\rho(z) + p(z) \geq 0$  теңсіздігімен анықталады. Осыған сәйкес өлшемсіз түрде  $(\rho + p)/H_0^2$  шамасын есептеп, оның қызыл ығысумен өзгерісінің әртүрлі

мәндері үшін графикте көрсетілді. Сурет 3-тен  $(\rho + p)/H_0^2$  функциясы кең  $z$  аралығында оң мәндер аймағында сақталатынын көреміз, яғни NEC шарты модель эволюциясы барысында орындалады. Бұл нәтиже материя-геометрия байланысы енгізілген жағдайда да энергия ағынының физикалық тұрғыдан қабылданатын режимде қалатынын көрсетеді.



Сурет 3 – NEC:  $(\rho + p)/H_0^2$  функциясының  $z$ -ке тәуелділігі

SEC шарты  $\rho(z) + 3p(z) \geq 0$  түрінде жазылады және ол гравитациялық тартылыстың әдеттегі режимін сипаттайтын негізгі энергия шарттарының бірі болып табылады. Классикалық космологияда бұл шарттың бұзылуы көбіне кеш уақыттағы үдеумен байланыстырылып, тиімді қысымның теріс үлесі күшейетін режимдердің бар екенін көрсетеді.



Сурет 4 – SEC:  $(\rho + 3p)/H_0^2$  функциясының  $z$ -ке тәуелділігі

Сурет 4-те  $(\rho + 3p)/H_0^2$  шамасының қызыл ығысуға тәуелділігі  $\lambda = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5$  мәндері үшін берілген. Бұл салыстыру  $\lambda$  параметрінің материя-геометрия байланысын күшейту арқылы кеңею динамикасын сандық тұрғыдан қалай

өзгертетінін көрсетуге мүмкіндік береді. Графиктен төмен қызыл ығысуларда шаманың нөл маңында өзгеруі немесе белгілі аралықтарда нөлге жақындауы SEC шартының кеш уақыттарда бұзылуы мүмкін екенін аңғартады, ал бұл үдемелі кеңею сценарийімен үйлеседі. Сонымен бірге  $\lambda$  өзгерген сайын қисықтардың деңгейі мен өсу қарқыны айырмашылық көрсетеді, яғни SEC талаптарының орындалу аймақтары параметрге сезімтал түрде ығысады; демек,  $\lambda$  кеш уақыттағы динамиканы реттейтін маңызды фактор ретінде көрінеді. Осы нәтижелер  $f(R, T) = R + 2\lambda T$  моделінде үдеуді сипаттайтын режимдерде SEC шартының бұзылуы мүмкін болатынын және бұл бұзылудың  $\lambda$  мәніне тәуелді екенін көрсетеді.

DEC шарты идеал сұйықтық үшін  $\rho(z) \geq 0$ ,  $\rho(z) \geq |p(z)|$  түрінде жазылады. Бұл талап энергия тығыздығының қысым модулінен кем болмауын қамтамасыз етіп, энергия-импульс ағынының физикалық тұрғыда басым режимде қалуын сипаттайды, яғни аса экзотикалық күйдің басым болу мүмкіндігін шектейді. Алынған  $\rho(z)$  және  $p(z)$  нәтижелері бойынша қарастырылған  $\lambda$  мәндері үшін  $\rho(z) - |p(z)|$  шамасы зерттелген қызыл ығысу аралығында оң мәнді сақтайды, сондықтан DEC шарты осы параметрлер жиыны үшін орындалады.

Осылайша, энергия шарттарын талдау  $f(R, T) = R + 2\lambda T$  моделінің таңдалған параметрлер аймағында физикалық тұрғыдан келісімді екенін көрсетеді. Атап айтқанда, NEC және WEC шарттарының орындалуы тиімді энергия тығыздығының оң болуын және энергия ағынының физикалық мағынада қалуын қамтамасыз етеді, ал DEC шарты қысым мен тығыздықтың қатынасы себепті шектен тыс режимдердің пайда болмауын шектейтін қосымша критерий ретінде қызмет етеді. Сонымен қатар SEC шарты ( $\rho + 3p$ ) комбинациясымен анықталатындықтан, оның бұзылуы көбіне кеш уақыттардағы үдеумен байланысты және тиімді қысымның теріс үлесі күшейетін режимдердің бар екенін білдіреді. Алынған графиктерімізде  $\lambda$  параметрінің өзгеруі осы комбинацияның қызыл ығысуға тәуелді эволюциясын сандық тұрғыдан өзгертетінін көрсетіп, SEC шартын бұзатын немесе оны қайта қалпына келтіретін аймақтардың  $\lambda$ -ға сезімтал екенін аңғартады. Демек,  $\lambda$  материя-геометрия байланысын реттейтін маңызды параметр болып табылады және оның мәніне қарай модель кеш уақыттардағы үдеуді сипаттайтын режимдерді бере алады, әрі энергия шарттары тұрғысынан физикалық жарамды параметрлік облыстарды бөліп көрсетуге мүмкіндік береді. Соңында, бұл талдау алынған нәтижелерді стандартты  $\Lambda$ CDM болжамдарымен салыстыруға негіз болып, модификацияланған гравитацияның бақылаулық тұрғыдан тексерілуіне алғышарт жасайды.

### Қорытынды

Бұл жұмыста материя – геометрияның минималды емес байланысы бар  $f(R, T)$  гравитациясының сызықтық моделі  $f(R, T) = R + 2\lambda T$  қарастырылды. Дивергенциясыз баяулау параметрленуі негізінде Ғаламның кеңею тарихын сипаттайтын  $H(z)$  функциясы қалпына келтіріліп, алынған өрнек модификацияланған Фридман теңдеулеріне енгізілді. Осы тәсіл арқылы негізгі космологиялық шамалардың эволюциясы зерттеліп, энергия тығыздығы  $\rho(z)$ , қысым  $p(z)$  және күй теңдеуі параметрі  $\omega(z)$  үшін аналитикалық және графикалық нәтижелер алынды. Нәтижелер  $\lambda$

параметрінің модель динамикасына айтарлықтай әсер ететінін көрсетті:  $\lambda$  өзгерген сайын кеңею қарқынының сипаттамалары,  $\rho(z)$  және  $p(z)$  функцияларының деңгейі мен эволюциялық мінезі, сондай-ақ  $\omega(z)$  параметрінің қызыл ығысуға тәуелділігі сандық тұрғыдан өзгереді. Бұл байланыс параметрі материяның ізі арқылы геометрияға енгізілетін түзетулерді реттеп, кеш уақыттардағы үдеуді сипаттайтын тиімді динамиканың қалыптасуына ықпал ететіні байқалады.

Модельдің физикалық үйлесімділігін бағалау мақсатында классикалық энергия шарттары NEC, WEC, SEC, DEC талданды. Талдау нәтижесінде таңдаулы параметрлер аймағында NEC және WEC шарттарының орындалуы модельдің физикалық тұрғыдан қабылданатын режимдер бере алатынын көрсетеді. Сонымен қатар үдемелі кеңеюмен байланысты режимдерде SEC шартының кейбір қызыл ығысу аралықтарында бұзылуы мүмкін екені анықталды; бұл құбылыс үдемелі кеңею сценарийімен үйлеседі және  $\lambda$  параметрінің кеш уақыттардағы динамиканы реттеудегі ролін айқындайды. Демек, энергия шарттары тұрғысынан алынған нәтижелер  $f(R,T)=R+2\lambda T$  моделінің үдеуді сипаттайтын режимдерге қабілетті екенін және сонымен бірге физикалық жарамды параметрлік аймақтарды бөліп көрсетуге мүмкіндік бар екенін растайды.

Жалпы алғанда, дивергенциясыз кинематикалық параметрлену  $f(R,T)$  гравитациясы шеңберінде кеш уақыттағы космостық үдеуді сапалық тұрғыдан түсіндіруге және модель параметрлерінің әсерін жүйелі түрде бағалауға тиімді құрал болып табылады. Болашақта жұмысты кеңейту үшін  $\lambda$  параметрін кеңірек диапазонда зерттеу, бақылаулық деректермен бірлескен параметрлік шектеулер жүргізу, сондай-ақ тұрақтылық пен қозуларды талдау бағыттары перспективалы болып табылады. Бұл қадамдар ұсынылған модельдің бақылаулық тұрғыдан жарамдылығын тереңірек тексеруге және нәтижелерді стандартты  $\Lambda$ CDM болжамдарымен толық салыстыруға мүмкіндік береді.

#### **Алғыс айту, мүдделер қақтығысы**

Авторлар мүдделер қақтығысы жоқтығын мәлімдейді.

#### **Авторлардың қосқан үлесі**

**Жадыранова А.А.** – зерттеу міндеттерін тұжырымдау, әдіснаманы әзірлеу, ғылыми жетекшілік және жалпы редакциялау.

**Исмаил Ү.Қ.** – қолжазбаны дайындау, аналитикалық есептеулер жүргізу, материалдарды жинақтау және нәтижелерді талдау.

**Сноу У.М.** – ғылыми кеңес беру, теориялық талқылау, нәтижелерді интерпретациялау және мәтінді редакциялау.

**Жумабекова В.Н.** – әдебиеттерге шолу, нәтижелерді интерпретациялау, қолжазбаны редакциялау.

**Жусупова Н.К.** – есептеулерді қолдау, графиктерді дайындау және нәтижелерді рәсімдеу.

### Әдебиеттер тізімі

1. A.G. Riess et al., Observational evidence from supernovae for an accelerating universe and a cosmological constant, *The astronomical journal* 116, 6.1009 (1998). <https://doi.org/10.48550/arXiv.astro-ph/9805201>
2. S. Perlmutter et al., Measurements of  $\Omega$  and  $\Lambda$  from 42 high-redshift supernovae, *The Astrophysical Journal* 517, 6.656 (1999). <https://doi.org/10.48550/arXiv.astro-ph/9812133>
3. T. Harko et al.,  $f(R,T)$  gravity, *Physical Review D-Particles, Fields, Gravitation, and Cosmology* 84, p.024020 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.84.024020>
4. D. Foreman-Mackey et al., emcee: the MCMC hammer, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 125, 6.306 (2013). <https://doi.org/10.48550/arXiv.1202.3665>
5. M. Moresco, Raising the bar: new constraints on the Hubble parameter with cosmic chronometers at  $z \sim 2$ , *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters* 450, 6.L16-L20 (2015). <https://doi.org/10.1093/mnrasl/slv037>
6. D. M. Scolnic et al., The complete light-curve sample of spectroscopically confirmed SNe Ia from Pan-STARRS1 and cosmological constraints from the combined pantheon sample, *The Astrophysical Journal* 859, 6.101 (2018). <https://doi.org/10.3847/1538-4357/aab9bb>
7. W. Khylllep, A. Paliathanasis, J. Dutta, Cosmological solutions and growth index of matter perturbations in  $f(Q)$  gravity, *Physical Review D* 103, 6.103521 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.103.103521>
8. M. Koussour, S.H. Shekh, M. Bennai, Anisotropic nature of space-time in  $f(Q)$  gravity, *Physics of the Dark Universe* 36, 6.101051 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.dark.2022.101051>
9. M. Koussour, M. Bennai, On a Bianchi type-I space-time with bulk viscosity in  $f(R,T)$  gravity, *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* 19, 6.2250038 (2022). <https://doi.org/10.1142/S0219887822500384>
10. M. Koussour, M. Bennai, Cosmological models with cubically varying deceleration parameter in  $f(R,T)$  gravity, *Afrika Matematika* 33, 6.27 (2022). <https://doi.org/10.1007/s13370-022-00964-3>
11. M. Koussour et al., Late-time acceleration in  $f(Q)$  gravity: Analysis and constraints in an anisotropic background, *Annals of Physics* 445, 6.169092 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.aop.2022.169092>
12. M. Koussour, S.H. Shekh, M. Bennai, Cosmic acceleration and energy conditions in symmetric teleparallel  $f(Q)$  gravity, *Journal of High Energy Astrophysics* 35, 6.43-51 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jheap.2022.05.002>
13. M. Koussour et al., Quintessence Universe and cosmic acceleration in  $f(Q,T)$  gravity, *International Journal of Modern Physics D* 31, 6.2250115 (2022). <https://doi.org/10.1142/S0218271822501152>
14. N. Myrzakulov et al., Constraining the  $f(R,T)=R+2\lambda T$  cosmological model using recent observational data, *Chinese Physics C* 47, 6.115107 (2023). <https://doi.org/10.1088/1674-1137/acf2fa>
15. B.S. Goncalves, P. Moraes, B. Mishra, Cosmology from Non-Minimal Geometry-Matter Coupling, *Fortschritte der Physik* 71, 6.2200153 (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2101.05918>
16. M. Koussour, A. De, Observational constraints on two cosmological models of  $f(Q)$  theory, *The European Physical Journal C* 83, 6.400 (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.11765>
17. M. Koussour et al., A New Parametrization of Hubble Parameter in  $f(Q)$  Gravity, *Fortschritte der Physik* 71, 6.2200172 (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2208.04723>
18. M. Koussour et al., Constant sound speed and its thermodynamical interpretation in  $f(Q)$  gravity, *Nuclear Physics B* 990, 6.116158 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2023.116158>
19. M. Koussour et al., Thermodynamical aspects of Bianchi type-I Universe in quadratic form of  $f(Q)$  gravity and observational constraints, *Journal of High Energy Astrophysics* 37, 6.15-24 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jheap.2022.11.002>

20. N. Myrzakulov et al., Cosmological implications of the constant jerk parameter in  $f(Q,T)$  gravity theory, Chinese Journal of Physics. 86, 6.300-312 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2023.10.001>
21. K. El Bourakadi et al., Constant-roll and primordial black holes in  $f(Q,T)$  gravity, Physics of the Dark Universe. 41, 6.101246 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.dark.2023.101246>
22. T. Vinutha, V.V. Kuncham, S.K. Kolli, The study of anisotropic perfect fluid cosmological models in  $f(R,T)$  gravity, General Relativity and Gravitation. 55, 6.64 (2023). <https://doi.org/10.1007/s10714-023-03112-9>
23. N. Myrzakulov, M. Koussour, D.J. Gogoi, A new  $Om(z)$  diagnostic of dark energy in general relativity theory, The European Physical Journal C. 83, 6.594 (2023). <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-023-11794-3>
24. M. Koussour et al., Observational constraints on the equation of state of viscous fluid in  $f(R,T)$  gravity, Physics of the Dark Universe. 46, 6.101577 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.dark.2024.101577>
25. M. Koussour et al., Constraints on bulk viscosity in  $f(Q,T)$  gravity from  $H(z)$ /Pantheon+ data, Physics of the Dark Universe. 45, 6.101527 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.dark.2024.101527>
26. M. Koussour et al., Exploring accelerated expansion in the universe: A study of  $f(Q,T)$  gravity with parameterized EoS and cosmological constraints, Chinese Journal of Physics. 90, 6.108-120 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2024.04.024>

**A.A. Zhadyranova<sup>1</sup>, U.K. Ismail\*<sup>1</sup>, W.M. Snow<sup>2</sup>, V.N. Zhumabekova<sup>3</sup>, N.K. Zhusupova<sup>3</sup>**

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

<sup>2</sup>*Indiana University Bloomington, Bloomington, United States of America*

<sup>3</sup>*Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan*

(E-mail: [a.a.zhadyranova@gmail.com](mailto:a.a.zhadyranova@gmail.com), [umitismail848@gmail.com](mailto:umitismail848@gmail.com), [wsnow@iu.edu](mailto:wsnow@iu.edu), [zh.venera@mail.ru](mailto:zh.venera@mail.ru), [zhnaz88@gmail.com](mailto:zhnaz88@gmail.com))

### **Energy conditions in non-minimal $f(R, T)$ gravity with a divergence-free parameterization of the deceleration parameter**

**Abstract.** In this work, we study a divergence-free parameterization of the deceleration parameter within the simplest linear  $f(R,T)$  modified-gravity model featuring a non-minimal matter-geometry coupling,  $f(R,T)=R+2\lambda T$ , where  $R$  is the Ricci scalar,  $T$  is the trace of the energy-momentum tensor, and  $\lambda$  is the coupling parameter. Using this parameterization, we derive the Hubble parameter as a function of redshift,  $H(z)$ , and substitute it into the modified Friedmann equations. The model parameters are constrained with observational data from OHD (cosmic chronometers) and the Pantheon supernova compilation, and the present-day values of  $H_0$ ,  $q_0$ , and the evolutionary component  $q_1$  are numerically estimated; the results indicate a smooth transition of the Universe from decelerated to accelerated expansion. In addition, for different values of  $\lambda$ , we analyze the time evolution of the energy density  $\rho$  and the effective equation-of-state parameter  $\omega$ , identify deviations from the  $\Lambda$ CDM scenario, and clarify the role of  $\lambda$  in shaping the global cosmological dynamics. The energy-condition analysis shows that the NEC and DEC are satisfied throughout the evolution, whereas the SEC is violated at late times, in agreement with the observed cosmic acceleration. Overall, the divergence-free parameterization within  $f(R,T)$  gravity provides a viable framework to account for late-time acceleration while remaining consistent with observational and theoretical constraints. The results also provide a basis for a comparative analysis with the standard  $\Lambda$ CDM model and for placing observational bounds on the coupling parameter  $\lambda$ .

**Key words:** Divergence-free deceleration parameter,  $f(R, T)$  gravity, non-minimal coupling, cosmic acceleration, energy conditions, equation-of-state parameter,  $\Lambda$ CDM.

А.А. Жадыранова<sup>1</sup>, У.Қ. Исмаил<sup>\*1</sup>, У.М. Сноу<sup>2</sup>, В.Н. Жумабекова<sup>3</sup>, Н.К. Жусупова<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

<sup>2</sup> Университет Индианы в Блумингтоне, Блумингтон, Соединённые Штаты Америки

<sup>3</sup> Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

(E-mail: a.a.zhadyranova@gmail.com, umitismail848@gmail.com, wsnow@iu.edu, zh.venera@mail.ru, zhnaz88@gmail.com)

### Бездивергентная параметризация параметра замедления и энергетические условия в неминимальной $f(R, T)$ гравитации

**Аннотация.** В данной работе исследуется бездивергентную параметризацию параметра замедления в наиболее простой линейной модели модифицированной гравитации  $f(R, T)$  с неминимальной связью материи и геометрии:  $f(R, T) = R + 2\lambda T$ , где  $R$  - скаляр Риччи,  $T$  - след тензора энергии-импульса,  $\lambda$  - параметр связи. На основе указанной параметризации выводится параметр Хаббла в виде зависимости от красного смещения  $H(z)$ , после чего он подставляется в модифицированные уравнения Фридмана. Параметры модели ограничиваются наблюдательными данными ОНД (cosmic chronometers) и компиляции сверхновых Pantheon. Для современных значений численно оцениваются  $H_0$ ,  $q_0$  и эволюционная компонента  $q_1$ , полученные результаты показывают плавный переход Вселенной от фазы замедленного расширения к ускоренному. Кроме того, для различных значений  $\lambda$  анализируется временная эволюция плотности энергии  $\rho$  и параметра полного уравнения состояния  $\omega$ , выявляются отклонения от модели  $\Lambda$ CDM и уточняется роль параметра  $\lambda$  в формировании космологической динамики. Проверка энергетических условий показывает, что условия NEC и DEC выполняются на протяжении эволюции, тогда как условие SEC нарушается на поздних временах, что согласуется с наблюдаемым космическим ускорением. В целом, бездивергентная параметризация в рамках  $f(R, T)$ - гравитации позволяет описывать поздневременное ускорение, одновременно сохраняя согласованность с наблюдательными и теоретическими ограничениями. Полученные результаты создают основу для сравнительного анализа со стандартной моделью  $\Lambda$ CDM и для наложения наблюдательных ограничений на параметр  $\lambda$ .

**Ключевые слова:** бездивергентный параметр замедления,  $f(R, T)$  гравитация, неминимальная связь, космическое ускорение, энергетические условия, параметр уравнения состояния,  $\Lambda$ CDM.

### References

1. A.G. Riess et al., Observational evidence from supernovae for an accelerating universe and a cosmological constant, *The astronomical journal* 116, p.1009 (1998). <https://doi.org/10.48550/arXiv.astro-ph/9805201>
2. S. Perlmutter et al., Measurements of  $\Omega$  and  $\Lambda$  from 42 high-redshift supernovae, *The Astrophysical Journal*. 517, p.656 (1999). <https://doi.org/10.48550/arXiv.astro-ph/9812133>
3. T. Harko et al.,  $f(R, T)$  gravity, *Physical Review D-Particles, Fields, Gravitation, and Cosmology* 84, p.024020 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.84.024020>
4. D. Foreman-Mackey et al., emcee: the MCMC hammer, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 125, p.306 (2013). <https://doi.org/10.48550/arXiv.1202.3665>
5. M. Moresco, Raising the bar: new constraints on the Hubble parameter with cosmic chronometers at  $z \sim 2$ , *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters*. 450, p.L16-L20 (2015). <https://doi.org/10.1093/mnrasl/slv037>

6. D. M. Scolnic et al., The complete light-curve sample of spectroscopically confirmed SNe Ia from Pan-STARRS1 and cosmological constraints from the combined pantheon sample, *The Astrophysical Journal* 859, p.101 (2018). <https://doi.org/10.3847/1538-4357/aab9bb>
7. W. Khylllep, A. Paliathanasis, J. Dutta, Cosmological solutions and growth index of matter perturbations in  $f(Q)$  gravity, *Physical Review D* 103, p.103521 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.103.103521>
8. M. Koussour, S.H. Shekh, M. Bennai, Anisotropic nature of space-time in  $f(Q)$  gravity, *Physics of the Dark Universe* 36, p.101051 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.dark.2022.101051>
9. M. Koussour, M. Bennai, On a Bianchi type-I space-time with bulk viscosity in  $f(R,T)$  gravity, *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics* 19, p.2250038 (2022). <https://doi.org/10.1142/S0219887822500384>
10. M. Koussour, M. Bennai, Cosmological models with cubically varying deceleration parameter in  $f(R,T)$  gravity, *Afrika Matematika*. 33, p.27 (2022). <https://doi.org/10.1007/s13370-022-00964-3>
11. M. Koussour et al., Late-time acceleration in  $f(Q)$  gravity: Analysis and constraints in an anisotropic background, *Annals of Physics* 445, p.169092 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.aop.2022.169092>
12. M. Koussour, S.H. Shekh, M. Bennai, Cosmic acceleration and energy conditions in symmetric teleparallel  $f(Q)$  gravity, *Journal of High Energy Astrophysics* 35, p.43-51 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jheap.2022.05.002>
13. M. Koussour et al., Quintessence Universe and cosmic acceleration in  $f(Q,T)$  gravity, *International Journal of Modern Physics D*. 31, p.2250115 (2022). <https://doi.org/10.1142/S0218271822501152>
14. N. Myrzakulov et al., Constraining the  $f(R,T)=R+2\lambda T$  cosmological model using recent observational data, *Chinese Physics C* 47, p.115107 (2023). <https://doi.org/10.1088/1674-1137/acf2fa>
15. B.S. Goncalves, P. Moraes, B. Mishra, Cosmology from Non-Minimal Geometry-Matter Coupling, *Fortschritte der Physik*. 71, p.2200153 (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2101.05918>
16. M. Koussour, A. De, Observational constraints on two cosmological models of  $f(Q)$  theory, *The European Physical Journal C*. 83, p.400 (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.11765>
17. M. Koussour et al., A New Parametrization of Hubble Parameter in  $f(Q)$  Gravity, *Fortschritte der Physik*. 71, p.2200172 (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2208.04723>
18. M. Koussour et al., Constant sound speed and its thermodynamical interpretation in  $f(Q)$  gravity, *Nuclear Physics B*. 990, p.116158 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2023.116158>
19. M. Koussour et al., Thermodynamical aspects of Bianchi type-I Universe in quadratic form of  $f(Q)$  gravity and observational constraints, *Journal of High Energy Astrophysics*. 37, p.15-24 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jheap.2022.11.002>
20. N. Myrzakulov et al., Cosmological implications of the constant jerk parameter in  $f(Q,T)$  gravity theory, *Chinese Journal of Physics*. 86, p.300-312 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2023.10.001>
21. K. El Bourakadi et al., Constant-roll and primordial black holes in  $f(Q,T)$  gravity, *Physics of the Dark Universe*. 41, p.101246 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.dark.2023.101246>
22. T. Vinutha, V.V. Kuncham, S.K. Kolli, The study of anisotropic perfect fluid cosmological models in  $f(R,T)$  gravity, *General Relativity and Gravitation*. 55, p.64 (2023). <https://doi.org/10.1007/s10714-023-03112-9>
23. N. Myrzakulov, M. Koussour, D.J. Gogoi, A new  $Om(z)$  diagnostic of dark energy in general relativity theory, *The European Physical Journal C*. 83, p.594 (2023). <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-023-11794-3>
24. M. Koussour et al., Observational constraints on the equation of state of viscous fluid in  $f(R,T)$  gravity, *Physics of the Dark Universe*. 46, p.101577 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.dark.2024.101577>
25. M. Koussour et al., Constraints on bulk viscosity in  $f(Q,T)$  gravity from  $H(z)$ /Pantheon+ data, *Physics of the Dark Universe*. 45, p.101527 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.dark.2024.101527>

26. M. Koussour et al., Exploring accelerated expansion in the universe: A study of  $f(Q,T)$  gravity with parameterized EoS and cosmological constraints, Chinese Journal of Physics. 90, p.108-120 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2024.04.024>

**Авторлар туралы мәлімет:**

**Жадыранова А.А.** – PhD, жалпы және теориялық физика кафедрасының аға оқытушысы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Мұнайтпасов көшесі 13, Астана, Қазақстан.

**Исмаил Ү.Қ.** – хат-хабар авторы, жалпы және теориялық физика кафедрасының магистранты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Мұнайтпасов көшесі 13, Астана, Қазақстан.

**Сноу У.М.** – PhD, физика кафедрасының профессоры, Блумингтон қаласындағы Индиана университеті, Шығыс 3-көшесі 47405, Блумингтон, АҚШ.

**Жумабекова В.Н.** – PhD, физика кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Достық даңғылы 13, Алматы, Қазақстан.

**Жусупова Н.К.** – PhD докторант, физика кафедрасы, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Достық даңғылы 13, Алматы, Қазақстан.

**Жадыранова А.А.** – PhD, старший преподаватель кафедры общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва, ул. Мунайтпасова, 13, Астана, 010008, Казахстан.

**Исмаил Ү.Қ.** – автор для корреспонденции, магистрант кафедры общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва, ул. Мунайтпасова 13, Астана, 010008, Казахстан.

**Сноу У.М.** – PhD, профессор кафедры физики, Университет Индианы в Блумингтоне, ул. Восточная 3-я, 47405, Блумингтон, США.

**Жумабекова В.Н.** – PhD, ассоциированный профессор кафедры физики, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, просп. Достык 13, 050000, Алматы, Казахстан.

**Жусупова Н.К.** – докторант PhD кафедры физики, Казахский национальный педагогический университет имени Абая, просп. Достык 13, 050000, Алматы, Казахстан.

**Zhadyranova A.A.** – PhD, Senior Lecturer, Department of General and Theoretical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasova Street, Astana, 010008, Kazakhstan.

**Ismail U.K.** – the corresponding author, Master’s student, Department of General and Theoretical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Munaitpasova Street, Astana, 010008, Kazakhstan.

**Snow W.M.** – PhD, Professor, Department of Physics, Indiana University Bloomington, East 3rd Street, 47405, Bloomington, USA.

**Zhumabekova V.N.** – PhD, Associate Professor, Department of Physics, Abai Kazakh National Pedagogical University, 13 Dostyk Ave., 050000, Almaty, Kazakhstan.

**Zhusupova N.K.** – Doctoral student, Department of Physics, Abai Kazakh National Pedagogical University, 13 Dostyk Ave., 050000, Almaty, Kazakhstan.



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



IRSTI 29.15.19

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-37-46>

Review article

## An overview of the $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$ at $E_{\text{lab}} = 275\text{MeV}$

Lorenzo Federico Pappalardo<sup>1\*</sup> , Soukeras Vasilis<sup>1,2</sup> 

<sup>1</sup>Università degli Studi di Catania, Italy, <sup>2</sup>INFN, Laboratori Nazionali del Sud, Catania, Italy

(E-mail: [lorenzo.pappalardo10@gmail.com](mailto:lorenzo.pappalardo10@gmail.com), [soukeras@lns.infn.it](mailto:soukeras@lns.infn.it))

**Abstract.** The study of the neutrinoless double beta decay ( $0\nu\beta\beta$ ) by heavy-ion double charge exchange (HI-DCE) represents a crucial step toward understanding the fundamental properties of neutrinos and the possible violation of lepton number conservation. Among the candidate isotopes for this rare process,  $^{76}\text{Ge}$  plays a central role in current and next-generation experimental searches. In this work, I investigated the nuclear structure aspects relevant to the  $0\nu\beta\beta$  decay of  $^{76}\text{Ge}$  through the analysis of the  $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$  reaction at  $E_{\text{lab}}=275\text{MeV}$ . The reaction dynamics were modeled using the coupled-channels code FRESKO using the *Distorted Wave Born Approximation* (DWBA), which allows for a detailed description of inelastic excitations and single-nucleon transfer processes that are sensitive to nuclear transition densities. Complementary large-scale shell-model calculations were carried out with KSHELL to obtain spectroscopic amplitudes and nuclear matrix elements for the relevant states. The theoretical results were directly compared with experimental differential cross sections from the NUMEN Collaboration, showing good overall agreement in both magnitude and shape. This comparison validates the reliability of the adopted reaction and structure models and provides important constraints on the nuclear structure components that dominate the  $0\nu\beta\beta$  nuclear matrix elements.

**Keywords:** neutrinoless double beta decay ( $0\nu\beta\beta$ ), Majorana neutrinos, rare decay, nuclear matrix elements, heavy-ion reactions

### Introduction

The search for neutrinoless double beta decay ( $0\nu\beta\beta$ ) represents one of the most significant challenges in modern nuclear and particle physics, as its observation would provide unambiguous evidence of lepton number violation and confirm the Majorana nature of neutrinos. Beyond its fundamental implications for particle physics and cosmology, the  $0\nu\beta\beta$  decay is a sensitive probe of the

Received 19.11.2025. Revised 05.12.2025. Accepted 20.01.2026. Available online 30.03.2026.

\*the corresponding author

absolute neutrino mass scale. Several experimental collaborations, such as GERDA [1] and LEGEND [2], have focused on candidate nuclei including  $^{76}\text{Ge}$ , owing to its favorable nuclear properties and well-established experimental techniques.

The interpretation of experimental limits or potential future observations relies critically on the theoretical evaluation of the nuclear matrix elements (NME), which connect the measurable decay half-life to the effective neutrino mass. However, the NME cannot be directly measured, and current theoretical predictions differ significantly depending on the adopted nuclear structure model. These discrepancies highlight the necessity of constraining nuclear structure inputs through experimental observables related to the same transition operators involved in the  $0\nu\beta\beta$  decay.

In this context, heavy-ion double charge exchange (HI-DCE) reactions have been proposed as an alternative tool to access nuclear transitions analogous to those driving the  $0\nu\beta\beta$  decay. Such reactions involve similar initial and final states, and share the same spin-isospin operators, providing a possible experimental constraint on the nuclear matrix elements. However, the extraction of meaningful NME-related information from HI-DCE data requires a precise understanding of competing mechanisms, in particular multi-step one-nucleon and two-nucleon transfer processes that may populate the same mass partitions through sequential paths.

A systematic study of heavy-ion-induced one- and two-nucleon transfer reactions using  $^{12}\text{C}$ ,  $^{18}\text{O}$ , and  $^{20}\text{Ne}$  beams on different target nuclei is being carried out within the NUMEN collaboration project at the INFN-Laboratori Nazionali del Sud (LNS). The NUMEN program aims to investigate double charge exchange and related reaction mechanisms at energies around 15–25 MeV per nucleon, employing the MAGNEX large-acceptance spectrometer for the detection of reaction products with high resolution and efficiency. These measurements provide crucial benchmarks for theoretical models describing the dynamics of nucleon transfer and charge-exchange processes relevant to the  $0\nu\beta\beta$  decay.

Within this framework, the  $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$  system offers an ideal testing ground, as it connects the  $^{76}\text{Ge}$  and  $^{76}\text{Se}$  nuclei involved in the  $0\nu\beta\beta$  decay through single and multinucleon exchange processes. The study of one-proton stripping and one-neutron pickup reactions at  $E_{\text{lab}}=275\text{MeV}$  allows us to test the predictive power of both the nuclear structure and the reaction models. In this work, the reaction dynamics are analyzed using the coupled-channels code FRESKO [3], which accounts for inelastic excitations and transfer couplings. Spectroscopic amplitudes and nuclear matrix elements were obtained from large-scale shell-model calculations performed with KSHELL [4], ensuring a consistent microscopic description of the nuclear states involved.

The comparison between theoretical predictions and experimental differential cross sections provides a stringent test of the adopted models and interactions. The results of this analysis represent a key step toward improving the reliability of nuclear structure and reaction frameworks used to interpret heavy-ion double charge exchange data and, ultimately, to constrain the nuclear matrix elements that govern the neutrinoless double beta decay ( $0\nu\beta\beta$ ).

This paper is organized as follows. Section II describes the experimental setup and the MAGNEX large-acceptance spectrometer. Section III presents the methodology of the conducted study, while Section IV shows the results of the elastic channel, the inelastic excitations channel of projectile and target nuclei, the one-proton stripping and one-neutron pickup channels. Finally, Section V summarizes the main conclusions and perspectives of this work.

### Experimental setup: MAGNEX spectrometer

The MAGNEX large-acceptance magnetic spectrometer, developed and operated at the INFN-Laboratori Nazionali del Sud (LNS) in Catania (Italy), is a key instrument for the study of nuclear reactions involving heavy ions at intermediate energies. The device is characterized by a solid-angle acceptance of about 50 msr and a momentum acceptance of approximately  $-14.3\%$  to  $+10.3\%$ . Its optical system consists of a large-aperture quadrupole and dipole magnet configuration, coupled to a high-resolution focal plane detector (FPD) that enables the identification and tracking of the emitted ions.

A central feature of MAGNEX is its ability to perform precise ray reconstruction of particle trajectories. The reconstruction technique is based on high-order differential algebraic methods implemented through the COSY INFINITY code, allowing for the correction of higher-order aberrations up to the 10th order. This enables an accurate determination of the momentum vector and scattering angles of detected ions, achieving a momentum resolution of about  $1/1800$  and an angular resolution of  $\approx 0.2^\circ$ . Furthermore, the spectrometer provides a mass resolution of approximately  $1/160$ , obtained through the simultaneous measurement of energy, momentum, and charge of the ejectiles.

The optical characteristics and large acceptance of MAGNEX make it a powerful and versatile tool for nuclear reaction studies, including single- and multi-nucleon transfer, inelastic excitation, and double charge exchange processes. Its high precision in angle and momentum reconstruction also allows the extraction of absolute cross sections with an accuracy of a few percent, demonstrating its suitability for detailed investigations of reaction mechanisms and nuclear structure observables. Further information could be available in [5].

In the present experiment, a  $^{20}\text{Ne}$  beam with an energy of 306 MeV was produced by the superconducting cyclotron at INFN-LNS and directed onto a carbon target enriched with  $^{76}\text{Ge}$ . The  $^{19}\text{F}$  (one-proton stripping) and  $^{21}\text{Ne}$  (one-neutron pickup) ejectiles were momentum analyzed by the MAGNEX large acceptance magnetic spectrometer.

### Methodology

The theoretical interpretation of the angular distributions for the  $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$  reaction in the different channels was carried out using the FRESKO code.

The optical model (OM) potential was determined through a parameter search performed with the integrated SFRESKO code, using the experimental angular distribution data provided by the NUMEN collaboration as a reference. The inelastic differential cross section was calculated within the DWBA framework, assuming a pure rotational model to describe the excitation levels. To evaluate the spectroscopic amplitudes required for the channel involving one-nucleon transfer, the KSHELL code was employed in combination with the FRESKO reaction code to calculate the angular distribution of the cross section.

### Results

In the following section, the results of the theoretical angular distribution of the cross section are presented for the different reaction channels.

- **Elastic channel**

The elastic channel can be described using a complex optical potential:

$$U_{OPT}(r) = V(r) + iW(r) \tag{1}$$

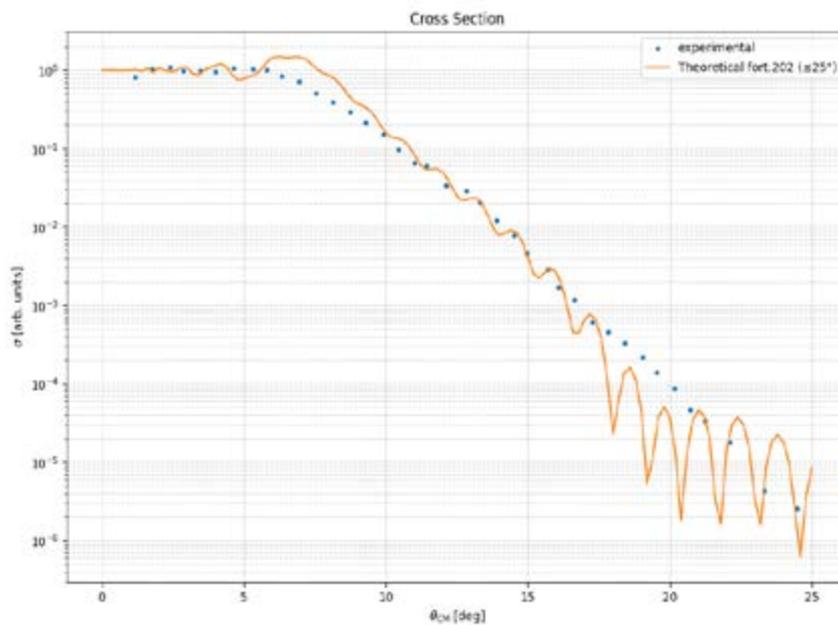
$V(r)$  is the real part of the potential, and  $W(r)$  is the imaginary part of the potential, described the non-elastic contributions and results as an absorptive effect for the elastic cross section, reducing the flux in the elastic channel. The real part  $V(r)$  of the OP is a central Woods-Saxon function in which the radius  $R$ , the strength  $V_0$  and the diffuseness are evaluated due to an SFRESCO code.

In the present work, the following parameters are adopted:

**Table 1. Parameters of the Optical Potential**

$V_0(\text{MeV})$	$r(\text{fm})$	$a(\text{fm})$	$W_0(\text{MeV})$	$r_i(\text{fm})$	$a_i(\text{fm})$
20.257	1.506	0.652	28.627	1.214	0.650

The results of the optical model (OM) calculations performed with this type of potential, together with the experimental data presented in the  $\sigma/\sigma_{RUTH}$  representation, are shown in Figure 1.



**Figure 1. Angular distribution of the elastic differential cross section in terms of ratio with the Rutherford cross section. Blue dots are experimental data**

• **Inelastic channel**

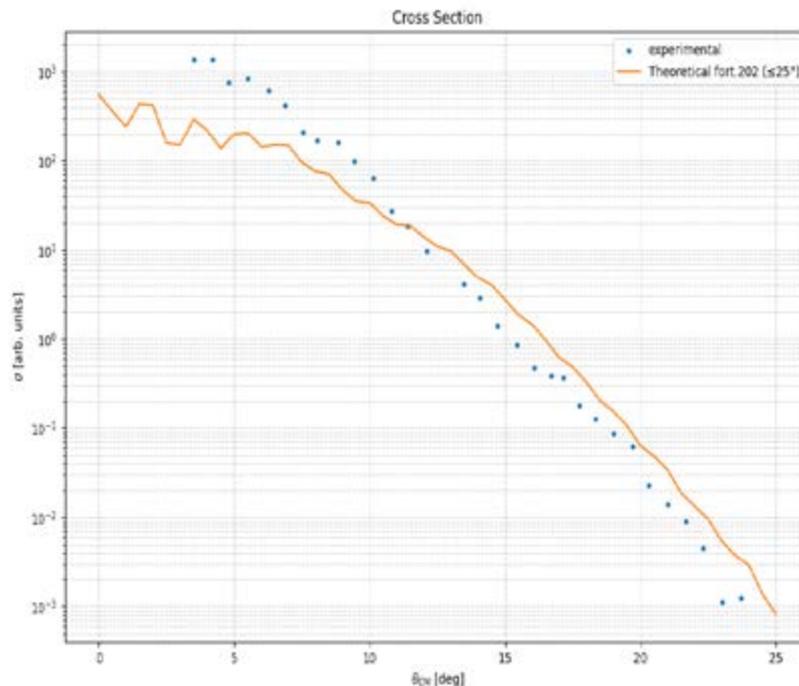
The angular distribution of the transition from the ground state of the target ( $0^+$ ) to the excited  $2^+$  state at 0.563 MeV was evaluated within the DWBA approximation. Assuming a pure rotational model, the transition to the  $2^+$  state was treated as a quadrupole excitation.

Using the KSHELL code, the reduced transition probability of  $^{76}\text{Ge}$  was calculated in order to describe the Coulomb deformation of the nucleus, yielding the value  $B(E2; 0^+ \rightarrow 2^+) = 0.37 e^2b^2$ .

The nuclear coupling potentials  $V_{i2}(r)$  were treated in the first-order approximation, following the formulation of G. Satchler [6], given by:

$$V_{i2}(r) = \frac{\delta_{i2}}{4} \frac{dU(r)}{dr} \quad (2)$$

where the deformation lengths  $\delta_{i2} = \beta_{i2}R_i$  are computed from the deformation parameters  $\beta_{i2}$  and the nuclear radii  $R_i$  of each nucleus  $i$ . The results are shown in Figure 2.

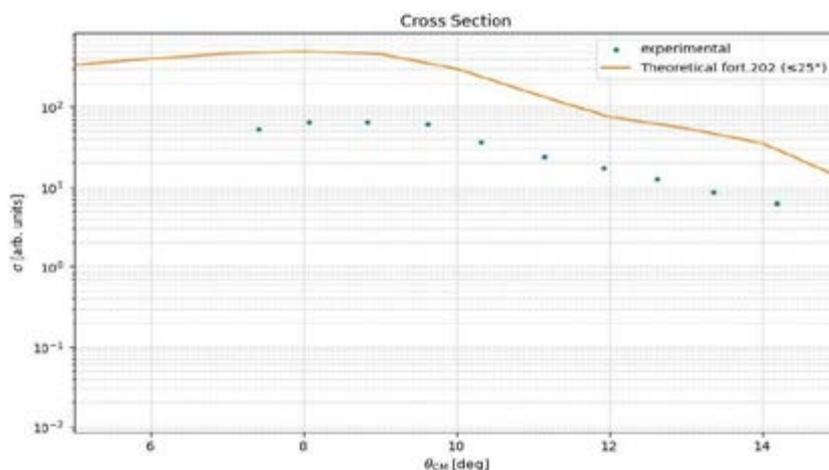


**Figure 2. Angular distribution of the inelastic differential cross section in terms of the ratio with the Rutherford cross section. Blue dots are experimental data**

### • Neutron pick-up

Particular attention was devoted to nucleon-transfer processes. In particular, the neutron pick-up mechanism in the reaction  $^{76}\text{Ge}(^{20}\text{Ne}, ^{21}\text{Ne})^{75}\text{Ge}^*$  was investigated. The theoretical angular distribution of the cross section (shown in Fig. 3) was evaluated by assuming the  $^{20}\text{Ne}$  nucleus in the state with angular momentum  $5/2^+$  at an excitation energy of 0.351 MeV. For the residual nucleus  $^{75}\text{Ge}$ , the first five excited states were considered.

The spectroscopic amplitudes required as input for the FRESKO code were calculated using KSHELL, employing the *w* interaction for the projectile nucleus and jun45 for the target nucleus. Moreover, in order to reduce the number of degrees of freedom and limit computational effort, a *particle-hole truncation* was introduced, which significantly decreased the overall time consumption of the simulation.



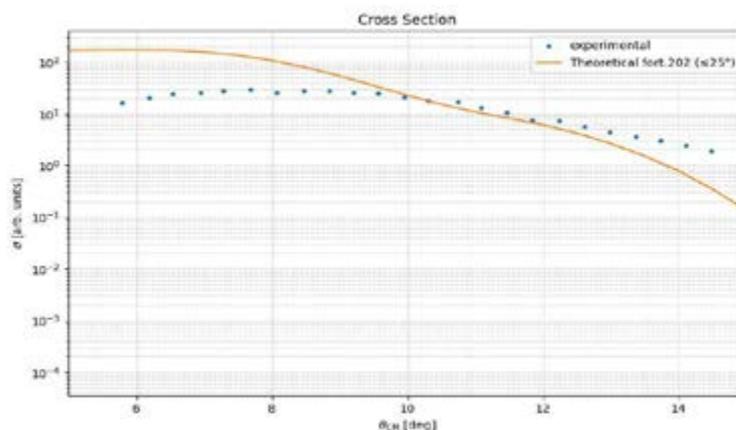
**Figure 3. Angular distribution of the 1N-Pick up differential cross section in terms of ratio with the Rutherford cross section. Blue dots are experimental data**

- **Proton stripping**

As a final analysis, the theoretical angular distribution of the cross section associated with the proton stripping process in the reaction  $^{76}\text{Ge}(^{20}\text{Ne}, ^{19}\text{F})^{77}\text{As}$  was evaluated, and the corresponding prediction is presented in Figure 4. As in the previous cases, the calculation was performed within the DWBA framework, which provides the most suitable theoretical description for single-nucleon transfer mechanisms at intermediate energies.

For the emitted nucleus  $^{19}\text{F}$ , the state with spin and parity  $5/2^+$  at an excitation energy of 0.197 MeV was considered, consistent with the nuclear configurations expected for a stripping process. Regarding the residual nucleus  $^{77}\text{As}$ , the nuclear structure input was constructed by including the first five excited states of the target  $^{76}\text{Ge}$ , in order to obtain a more comprehensive description of the accessible population channels in the reaction.

KSHELL spectroscopic amplitudes, required to characterize the structural contribution of the various transfer channels and to provide input for the FRESKO code, were computed using KSHELL, employing the appropriate interaction models for the nuclei involved.



**Figure 4. Angular distribution of the 1P-Stripping differential cross section in terms of ratio with the Rutherford cross section. Blue dots are experimental data**

## Discussion

In this work, I put under investigation the system  $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$  at a beam energy of  $E_{lab} = 306\text{MeV}$  for different reaction mechanisms. This reaction system is of particular interest within the framework of the NUMEN project, which aims to constrain the nuclear matrix elements relevant to neutrino-less double beta decay ( $0\nu\beta\beta$ ) through the study of the corresponding heavy-ion-induced double charge exchange reaction. Achieving this objective requires a thorough understanding and accurate quantification of all multistep transfer processes connecting the same initial and final mass partitions. The results reported here contribute to this broader effort by providing essential experimental benchmarks and theoretical insights needed to improve the reaction modelling and, ultimately, the reliability of the extracted nuclear matrix elements.

In the *elastic channel*, good agreement with experimental data is observed for small angles, while at larger angles an oscillation of the theoretical angular distribution of the cross section emerges. This behavior could be attributed to convergence problems in the *FRESCO* code, probably related to the shape of the potential used. A possible solution could consist of a more accurate fit of the experimental data.

In the *inelastic channel*, the angular distribution of the cross section correctly reproduces the experimental data, but a more realistic description could be obtained by adopting a model-independent approach for excitation, as an alternative to the pure rotor model.

Finally, for the *one-nucleon transfer channels*, an increase in the degrees of freedom in the interaction model would allow more accurate spectroscopic amplitude values, thus improving the overall agreement with the experimental data.

In conclusion, due to the quantum nature of the reaction mechanism, it is not possible to experimentally isolate the cross sections associated with individual nuclear states. Instead, the measured observables represent the coherent outcome of all contributing processes. For this reason, a robust theoretical framework for nucleon-transfer reactions becomes essential, as it enables the prediction of cross sections for intermediate steps that cannot be accessed experimentally. Such theoretical guidance is crucial for completing the reaction picture and for supporting the interpretation of the measured data, ultimately allowing for a more accurate reconstruction of the reaction dynamics involved in the studied system.

## Conclusion

In general, there was good agreement between the theoretical angular distributions of the cross section in the different reaction channels and the experimental data, except in the neutron pick-up channel. These results confirm the reliability of the model adopted and allow indirect access to information on nuclear matrix elements, which cannot be determined directly. Looking ahead, a significant development of this research could consist of extending the calculation times and modelling complexity of the simulations with KSHELL, to employ interactions with a greater number of degrees of freedom and obtain more accurate and complete spectroscopic amplitudes.

## Acknowledgements

I am grateful to the L.N. Gumilyov Eurasian National University for hosting me during my internship. My sincere thanks also go to Bakytzhan Urazbekov for his guidance and support.

### The contribution of the authors

**Pappalardo L.F.** – is responsible for all the phases of the research, including the writing of the FRESCO code, the interpretation of the results, and the writing of the manuscript.

**Soukeras V.** – supervised the study, verified the accuracy of the results and the implementation of the FRESCO code, and critically reviewed the manuscript.

### References

1. Gerda, Collaboration, GERDA Experiment – Max Planck Institute for Nuclear Physics, available at: <https://www.mpi-hd.mpg.de/gerda/>
2. N. Abgrall et al., LEGEND Collaboration, arXiv, Legend-1000 preconceptual. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.11462>
3. Thompson, I. J., Coupled reaction channels calculations in nuclear physics, Computer Physics Reports 7, pp. 167-212 (1988).
4. N. Shimizu, T. Mizusaki, Y. Utsuno, and Y. Tsunoda, Thick-restart block Lanczos method in nuclear shell-model calculations, Computation Physics Community, pp. 244-372 (2019).
5. F. Cappuzzello et al., MAGNEX: an innovative large acceptance spectrometer for nuclear reaction studies in, Magnets: Types, Uses and Safety (New York: Nova Publisher Inc.,2019) pp. 9-15.
6. Satchler, G. Direct nuclear reactions (Oxford, UK: Clarendon Press, 1983), Vol. 68.
7. Collaboration, NUMEN. Available at: <https://web.infn.it/NUMEN/index.php/it/>

**Лоренцо Федерико Паппалардо<sup>1\*</sup>, Сукерас Василис<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Катания университеті, Катания, Италия*

<sup>2</sup>*INFN, Оңтүстік ұлттық зертханалар, Катания, Италия*  
(E-mail: [lorenzo.pappalardo10@gmail.com](mailto:lorenzo.pappalardo10@gmail.com), [soukeras@lns.infn.it](mailto:soukeras@lns.infn.it))

### **E<sub>lab</sub> = 275MeV энергиядағы 20Ne+76Ge реакцияға шолу**

**Андатпа.** Ауыр иондардың екі заряд алмасуы (HI-DCE) әдісі арқылы бейтарап нейтриносыз қос бета ыдырауын ( $0\nu\beta\beta$ ) зерттеу нейтринолардың негізгі қасиеттерін түсінуге және лептон санының сақталу заңының бұзылу мүмкіндігін анықтауға бағытталған маңызды қадам болып табылады. Бұл сирек процесс үшін кандидат изотоптардың ішінде  $^{76}\text{Ge}$  қазіргі және келесі буындағы эксперименттік ізденістерде орталық рөл атқарады. Осы жұмыста мен  $^{76}\text{Ge}$  ядросының  $0\nu\beta\beta$  ыдырауына қатысты ядролық құрылым аспектілерін  $E_{\text{lab}}=275$  МэВ энергиясындағы  $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$  реакциясын талдау арқылы зерттедім. Реакция динамикасы Distorted Wave Born Approximation (DWBA) әдісін қолданатын FRESCO куплетілген каналдар коды арқылы модельденді, бұл ядролық өту тығыздықтарына сезімтал серпімсіз қоздырылулар мен бір нуклонды тасымалдау процестерін егжей-тегжейлі сипаттауға мүмкіндік береді. Қосымша ауқымды қабықша-модель есептеулері KSHell бағдарламасымен жүргізіліп, тиісті күйлер үшін спектроскопиялық амплитудалар мен ядролық матрица элементтері алынды. Теориялық нәтижелер NUMEN ынтымақтастығының эксперименттік дифференциалдық қималарымен тікелей салыстырылып, мәнді де пішіні жағынан да жақсы сәйкестік көрсетті. Бұл салыстыру

қолданылған реакция мен құрылым модельдерінің сенімділігін растап,  $0\nu\beta\beta$  ядролық матрица элементтерін басым ететін ядролық құрылым компоненттеріне маңызды шектеулер қояды.

**Түйін сөздер:** бейтарап нейтрино қатысатын қос бета ыдырау ( $0\nu\beta\beta$ ), майорана нейтринолары, сирек ыдырау, ядролық матрица элементтері, ауыр иондық реакциялар

**Лоренцо Федерико Паппалардо<sup>1\*</sup>, Сукерас Василис<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>Университет Катани, Италия

<sup>2</sup>INFN, Южные национальные лаборатории, Катания, Италия

(E-mail: [lorenzo.pappalardo10@gmail.com](mailto:lorenzo.pappalardo10@gmail.com), [soukeras@lns.infn.it](mailto:soukeras@lns.infn.it))

### Обзор реакции $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$ при энергии $E_{\text{lab}} = 275\text{MeV}$

**Аннотация.** Исследование безнейтринного двойного бета-распада ( $0\nu\beta\beta$ ) с помощью двойного обмена зарядами тяжелых ионов (HI-DCE) представляет собой важный шаг к пониманию фундаментальных свойств нейтрино и возможного нарушения сохранения лептонного числа. Среди изотопов, подходящих для этого редкого процесса,  $^{76}\text{Ge}$  играет центральную роль в экспериментальных поисках текущего и следующего поколения. В данной работе я исследовал аспекты ядерной структуры, имеющие отношение к распаду ( $0\nu\beta\beta$ )  $^{76}\text{Ge}$ , посредством анализа реакции  $^{20}\text{Ne}+^{76}\text{Ge}$  при  $E_{\text{lab}}=275$  МэВ. Динамика реакции была смоделирована с помощью кода fresco с использованием приближения Distorted Wave Born Approximation (DWBA), которое позволяет детально описать неупругие возбуждения и процессы переноса одного нуклона, чувствительные к плотностям ядерных переходов. Дополнительные крупномасштабные расчеты по модели оболочки были выполнены с помощью KSHell для получения спектроскопических амплитуд и ядерных матричных элементов для соответствующих состояний. Теоретические результаты были непосредственно сопоставлены с экспериментальными дифференциальными сечениями, полученными в рамках коллаборации NUMEN, что показало хорошее общее согласие как по величине, так и по форме. Это сопоставление подтверждает надежность принятых моделей реакции и структуры и дает важные ограничения на компоненты ядерной структуры, которые доминируют в элементах ядерной матрицы  $0\nu\beta\beta$ .

**Ключевые слова:** безнейтринный двойной бета-распад ( $0\nu\beta\beta$ ), нейтрино Майораны, редкий распад, элементы ядерной матрицы, реакции тяжелых ионов

### References

1. Gerda, Collaboration, GERDA Experiment – Max Planck Institute for Nuclear Physics, available at: <https://www.mpi-hd.mpg.de/gerda/>
2. N. Abgrall et al., LEGEND Collaboration, arXiv, Legend-1000 preconceptual. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.11462>
3. Thompson, I. J., Coupled reaction channels calculations in nuclear physics, Computer Physics Reports 7, pp. 167-212 (1988).
4. N. Shimizu, T. Mizusaki, Y. Utsuno, and Y. Tsunoda, Thick-restart block Lanczos method in nuclear shell-model calculations, Computation Physics Community, pp. 244-372 (2019).

5. F. Cappuzzello et al., MAGNEX: an innovative large acceptance spectrometer for nuclear reaction studies in, Magnets: Types, Uses and Safety (New York: Nova Publisher Inc.,2019) pp. 9-15.
6. Satchler, G. Direct nuclear reactions (Oxford, UK: Clarendon Press, 1983), Vol. 68.
7. Collaboration, NUMEN. Available at: <https://web.infn.it/NUMEN/index.php/it/>

**Information about the authors:**

Pappalardo Lorenzo Federico – the corresponding author, master student in Nuclear Physics, University of Catania, Italy

Soukeras Vasilis – PhD, research fellow at the Laboratori Nazionali del Sud and the Università degli Studi di Catania, Italy

**Паппалардо Лоренцо Федерико** – автор для корреспонденции, магистрант по ядерной физике, Университет Катании, Италия

**Сукерас Василис** – PhD, научный сотрудник в Южной национальной лаборатории INFN и в Университет Катании, Италия

**Паппалардо Лоренцо Федерико** – хат-хабар авторы, Ядролық физика мамандығының магистранты, Катания университеті, Катания, Италия.

**Сукерас Василис** – PhD, ғылыми қызметкер, Оңтүстік ұлттық зертханалары және Катания университеті, Катания, Италия.



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



IRSTI 29.19.31; 44.31.35

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-47-63>

Scientific article

## Design and experimental study of a low-temperature Stirling engine model

G.B. Baiman<sup>✉</sup>, G.M. Baubekova\*<sup>✉</sup>, D.T. Pazylova<sup>✉</sup>

*M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan*

*(E-mail: bgb\_zht@mail.ru ,baubekova83@mail.ru, danapazyl@mail.ru)*

**Abstract.** This paper aims to study the physical principles of a low-temperature Stirling engine and develop a working model. Both ideal and realistic cycle parameters are considered. Actual energy losses occurring during engine operation are analyzed, and approaches for accounting for them in modeling are proposed, facilitating theoretical research on low-temperature heat engines. Various Stirling engine modifications are also considered, and their potential efficiency is analyzed as a function of temperature, material properties, and operating conditions. The construction of an experimental engine model contributes to a deeper understanding of the heat transfer and energy conversion mechanisms in closed cycles, which is important for the development of heat engine theory. Experimental research also contributes to the development of a domestic scientific base in the field of alternative energy. The study makes an educational and methodological contribution: a model has been proposed that can clearly demonstrate the operation of a Stirling engine and conduct basic experiments, making it a useful tool in educational practice.

**Keywords:** heat engine, Stirling engine, thermodynamic processes, heat transfer, heat exchange element.

### Introduction

The Stirling engine originated in the early 1800s when Scottish clergyman and inventor Robert Stirling (1790-1878) developed an alternative to the steam engines that dominated that era. His 1816 patent described an initial prototype operating on a closed thermodynamic cycle with external thermal input. Safety considerations drove this invention, as steam engines frequently exploded due to excessive pressure and inadequate temperature regulation. Stirling aimed to create a more reliable and safer thermal machine [1, p.42].

His original device, termed an "air engine," featured a basic design utilizing air as the working fluid. A critical component was the regenerator – a heat exchange element that enhanced efficiency through thermal energy recycling. Although the regenerator reached full effectiveness later, Robert Stirling pioneered this concept.

Received 26.12.2025. Revised 09.02.2026. Accepted 23.02.2026. Available online 30.03.2026.

\*the corresponding author

Subsequently, his brother James Stirling, a professional engineer, joined the development effort. Together, they produced more powerful variants, including a unit constructed in 1843 that powered pumps at a foundry facility. Despite their efforts, the Stirling engine couldn't compete with advancing steam engine technology. Its power output and reliability were constrained by available materials, particularly metals lacking sufficient thermal resistance, which limited operating temperatures. The Stirling engine found applications in smaller mechanisms and pumping systems, but interest gradually declined with the widespread adoption of internal combustion engines and electric machinery [2, p.2134].

Interest in Stirling engines resurged significantly during the latter half of the 20th century. This revival stemmed from advances in materials science, especially heat-resistant alloys that improved engine thermal tolerance, alongside growing demand for alternative, environmentally cleaner energy sources [11, p.48].

During the 1930s-1950s, Philips Corporation (Netherlands) conducted extensive Stirling engine research and modernization. The initial objective was to create silent electrical generators for radio receivers in remote areas without electricity. Philips engineers developed compact, reliable units, including models employing helium as the working fluid. Despite successful demonstrations, commercial adoption remained limited due to competing technologies, particularly batteries and gasoline generators [3, p.395].

In the late 20th and early 21st centuries, the Stirling engine has experienced renewed interest among researchers and engineers for several reasons:

- High theoretical efficiency approaching the Carnot cycle
- Versatility in thermal sources: renewable energy sources (solar, biomass combustion, geothermal heat) and low-temperature sources, including body heat
- Minimal noise and vibration, making it attractive for medical equipment and underwater vessels
- Environmental friendliness, as the engine itself produces no combustion products; all processes occur externally to the working chamber

Applications in space technology, micro-generators, autonomous power systems, and experimental vehicles [5, p.56].

#### Current Applications

Contemporary Stirling engine applications include:

- Solar power stations (e.g., Dish-Stirling systems)
- Space technology (NASA and ESA projects as energy sources for extended missions)
- Military applications (submarines, where silence and autonomy are critical)
- Small-scale energy generation (cogeneration units for residences and farms)
- Engineering education, as instructional models and laboratory setups

Low-temperature Stirling engine variants are also under development, operating on temperature gradients such as between human body temperature surfaces and cold surfaces, or between warm water and ambient air. These serve to demonstrate thermodynamic processes and educational purposes [11, p.67].

### The methodology

The Stirling engine is a thermal machine with an external heat supply, operating on a closed thermodynamic cycle. Its operation is based on the Stirling cycle, consisting of four idealized processes: two isothermal and two isochoric (constant volume) transformations [10, p. 44].

The schematic diagram shows the primary Stirling engine components: working piston and displacer, heater, cooler, and regenerator, along with expansion and compression volumes [4, p.23].

Essential engine elements include:

- Working and displacement pistons, with a phase regulator ensuring synchronized operation,
- Heater and cooler,
- Regenerator-heat exchange element that stores and releases thermal energy,
- Heat rejection system-radiators or heat exchangers [12, p. 103].

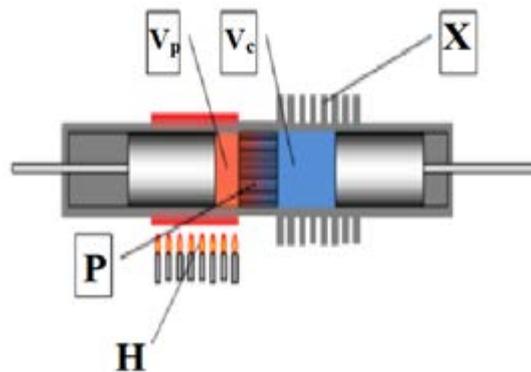
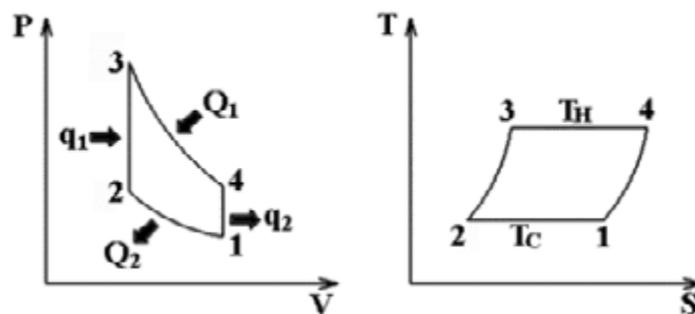


Figure 1. Stirling engine schematic

The Stirling cycle is a reversible thermodynamic process utilizing compressible working gas in a closed volume. It consists of two isotherms and two isochores, forming a closed cycle in  $p$ - $V$  and  $T$ - $S$  coordinates. The Stirling machine can operate in direct cycle (as an engine) or reverse cycle (as a refrigeration machine). In the  $p$ - $V$  and  $T$ - $S$  diagrams,  $Q_1$  represents heat absorbed from the heater,  $Q_2$  represents heat rejected to the cooler,  $q_1$  represents heat returned from the regenerator to the working fluid during isochoric heating, and  $q_2$  represents heat extracted from the working fluid by the regenerator during isochoric cooling. The enclosed area in  $p$ - $V$  coordinates represents useful work per cycle, while the area in  $T$ - $S$  coordinates equals heat converted to work per cycle [7, p.186].

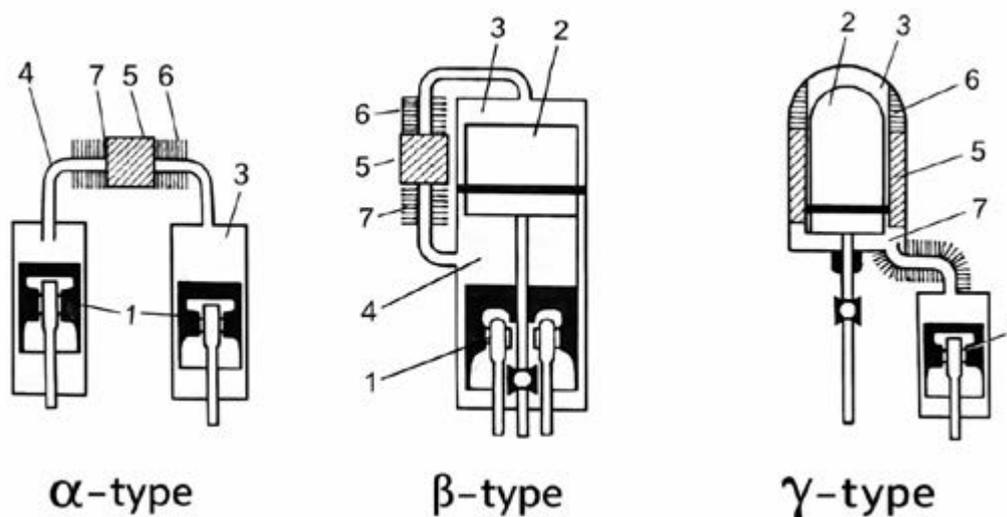
Figure 2 illustrates the heat interactions within the Stirling cycle.  $Q_1$  denotes the heat supplied by the heater (J), while  $Q_2$  represents the heat transferred to the cooler (J). The quantities  $q_1$  and  $q_2$  describe the heat exchange with the regenerator:  $q_1$  is the heat delivered back to the working fluid during isochoric heating, and  $q_2$  is the heat absorbed by the regenerator during isochoric cooling (J).

The enclosed area of the cycle in the  $P$ - $V$  diagram corresponds to the net work produced per cycle. In the  $T$ - $S$  diagram, the enclosed area represents the portion of heat converted into mechanical work [8, p.35].



**Figure 2. Thermodynamic representation of the Stirling cycle**

Stirling engines are categorized based on their structural design, which is determined by the arrangement of cylinders, pistons, and displacers. The three principal configurations - alpha ( $\alpha$ ), beta ( $\beta$ ), and gamma ( $\gamma$ ) - are depicted in Figure 3. Each configuration exhibits distinct design characteristics and is suitable for specific applications. Figure 3 visually highlights the structural differences among these Stirling engine types.



**Figure 3. Three main Stirling engine configurations based on the cylinder connection arrangement. 1 – power piston, 2 – displacer, 3 – expansion space, 4 – compression space, 5 – regenerator, 6 – heater, 7 – cooler**

Stirling engines are classified by construction type based on cylinder, piston, and displacer configuration. Three main configurations exist: alpha ( $\alpha$ ), beta ( $\beta$ ), and gamma ( $\gamma$ ), each with distinct characteristics and application areas.

*Alpha Configuration ( $\alpha$ -type):* The alpha engine consists of two separate pistons in two separate cylinders. One cylinder is continuously heated, the other cooled. Pistons connect to the crankshaft through a connecting rod mechanism. Working gas moves between hot and cold zones, expanding and contracting in different pistons [6, p.134-138].

*Beta Configuration ( $\beta$ -type):* The beta engine has one cylinder containing both the working piston and displacer. Pistons are coaxial but non-contacting. The displacer moves gas between hot and cold cylinder sections, while the working piston converts pressure into mechanical work [5, p. 52-59].

*Gamma Configuration ( $\gamma$ -type):* The gamma engine resembles the beta but has two separate cylinders: one for the displacer, another for the working piston. They connect through a common working volume. This arrangement simplifies construction, improving cooling and insulation [12, p. 88-93].

*Configuration Selection and Justification.* For this modeling effort, a gamma-type Stirling engine was selected. It is most suitable for low-temperature conditions due to its construction simplicity, ease of assembly, and stable operation at low temperature gradients. The gamma configuration allows separation of working and displacement cylinders, simplifying visual inspection and operation demonstration [9, p.33].

Selection rationale:

- Construction and assembly simplicity
- High stability at low temperature differentials ( $\Delta T = T_h - T_c$ )
- Material availability
- Safety for educational purposes

Materials and Components.

The Stirling engine model was constructed using inexpensive and readily available materials, which are listed in Table 1.

**Table 1. Parts and materials**

Component	Material	Notes
Working cylinder	Glass flask	Transparent for process observation
Piston	Aluminum	Lightweight and easily machined
Displacement cylinder	Plastic	Heat-resistant and transparent
Membrane	Rubber	Flexible and sealed
Regulator	Wire	Motion transfer between cylinders
Base and frame	Aluminum	Rigidity and stability

Tools utilized during assembly: mini-drill, adhesive, soldering iron, jigsaw, files, caliper, ruler, thermometer.

Assembly Process

The model assembly consisted of several production stages:

- Base fabrication and cylinder mounting
- Installation of working and displacement pistons
- Crank mechanism assembly

- Regenerator connection (if present)
- Joint sealing and leak testing
- Testing and troubleshooting

#### Design Features for Low-Temperature Operation

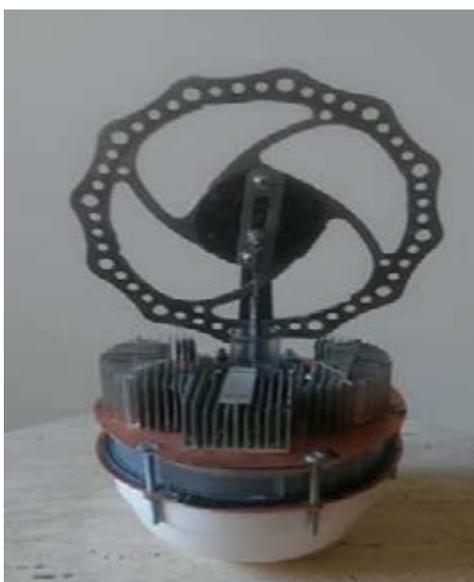
- Large working volume utilization
- Minimizing heat losses through cold zone insulation
- Increasing heat exchange surface area in the hot zone
- Using lightweight components to reduce inertial losses
- Air as working agent, eliminating sealing requirements

#### Safety Measures

- Pre-startup seal verification
- Heater insulation from exposed elements
- Eye protection during testing (goggles recommended)
- Safe heat source usage (e.g., hot water cup)
- Electrical safety compliance when using a heater or soldering iron

*Experimental Model Construction.* Energy conversion from thermal to mechanical form represents one of the most significant processes in contemporary energy systems. The Stirling engine model provides a clear and effective demonstration of this transformation. This thermal machine type is characterized by its capability to operate across various temperature gradients, including relatively low differentials [13, p.25].

This work examines not only the theoretical operating principles of the Stirling engine but also presents a practical implementation of an experimental model. Particular emphasis is placed on assembly stages and experimentation demonstrating rotational frequency dependence on temperature differential (Figure 4) [14, p.56].



**Figure 4. External view of the engine, together with a cup of hot water**

The experimental Stirling engine model represents a functional low-temperature Stirling engine implementation with magnetic coupling. The engine base is a 160 mm diameter cylinder, closed on both sides by circular disks of 170 mm diameter. The cylinder body is plastic, a material with low thermal conductivity. Disks are metallic with high thermal conductivity (1 mm thick copper sheet). Disks seal the cylinder hermetically using rubber gaskets. The distance between disks (chamber height) is 40 mm. Lower and upper disks are fastened with screws, forming a cylinder containing the displacer. This cylinder volume constitutes the Stirling engine working volume. Thus, the model represents a two-plate construction where air volume is enclosed between two metal disks.

The lower disk, through which heat is supplied, is called the "hot" disk. The upper disk, through which heat is removed, is called the "cold" disk. For improved heat removal, radiators are installed on the upper ("cold") disk. At the center of the upper disk's external surface is an opening for working cylinder sleeve installation, plus a flywheel support. The flywheel support is a shaft with a disk at one end for attachment to the upper ("cold") disk. The shaft's opposite end has a head with an opening for flywheel shaft installation with a bearing. The flywheel is installed on the bearing assembly shaft of the upper head support. The 160 mm diameter flywheel is a thin steel with a plastic hub. An axle offset 12 mm from the flywheel axis is installed in the hub.

The glass sleeve-working cylinder is designated by position 9, in which the piston moves. The piston connects to the flywheel through a connecting rod bearing the working cylinder.

The distance from the flywheel axis to the connecting rod upper head axis determines the piston working stroke (20 mm). The glass sleeve is made from a 20 mm diameter medical syringe. For effective engine operation, the sleeve should ideally be fabricated from a metal with high thermal conductivity. The piston is manufactured from epoxy resin. An axle hole is drilled approximately midway through the piston, through which it connects to the connecting rod lower head.

The displacer is a circular disk of foam insulation board, 10 mm smaller in diameter than the cylinder (150 mm diameter), with 18 mm thickness. The displacer occupies half the engine working volume. Foam insulation board is a material with low thermal conductivity and low density (lightweight).

A 10 mm diameter neodymium magnet is bonded into the displacer center for magnetic coupling with the piston, which also has an attached magnet for displacer connection.

Heating the lower plate (in this case with a hot water cup) and cooling the upper plate creates a temperature gradient that causes air expansion and compression. Consequently, reciprocating motion arises, converted into rotational movement. This model serves educational purposes and visually demonstrates the operating principle of a thermal machine with external heat supply.

Figure 5 shows the main components of the Stirling engine model.

The experimental Stirling engine model consists of the following components:

1. Lower metal plate (heater) - The engine body contacts the hot surface (in this case, hot water in the vessel on which the lower plate is positioned).



- Assembly materials used:
- Copper and steel elements for strength and thermal conductivity
- Magnets for piston drive without direct contact
- Transparent plastic and silicone gaskets for sealing
- Standard laboratory containers for hot water and ice

### Findings and discussion

*Operating Principle.* Stirling engine operation is based on cyclic heating and cooling of the working fluid. In this model, the working fluid is air enclosed in a sealed cylinder. When the lower displacer section is heated, air in the cylinder expands, pressure increases, and it pushes the working piston upward. Then the displacer moves air to the cold zone, where it cools and compresses, pressure drops, and the piston returns downward. This cyclic air movement between hot and cold zones creates periodic oscillations converted into flywheel rotational motion. Consequently, thermal energy transforms into mechanical energy, ensuring flywheel rotation. Thus, the Stirling engine operates through an external heat source and can effectively utilize even minimal temperature differentials.

#### Operating Conditions and Parameters

1. Heat source: For the developed model, the heat source is hot water in a cup (alternatively, a lamp or candle can be placed under the metal plate). Upper plate temperature:  $\sim 70-75^{\circ}\text{C}$ , lower plate temperature:  $\sim 20-25^{\circ}\text{C}$ . Minimum temperature gradient:  $\Delta T \sim 20^{\circ}\text{C}$ .
2. Flywheel rotational speed: 0.6-1.4 rpm depending on temperature gradient  $\Delta T$ .
3. Continuous operation time: Approximately 14 minutes per heat supply cycle.

#### Table 2 lists the dimensions of the Stirling engine model components.

Element	Size	Comment
Base diameter	160 mm	Heating plate
Displacer diameter	150 mm	Internal plastic body
Chamber height	40 mm	Distance between plates
Flywheel diameter	150 mm	Made from lightweight metal
Connecting rod length	30 mm	Connects the piston and crankshaft
Piston stroke	$\sim 20$ mm	Reciprocating motion
Model weight	$\sim 300$ g	Depending on the materials used

*Experimental Procedure.* The experiment consisted of two parts with different temperature conditions to study engine behavior at different temperature gradients.

First Experiment: The engine model is placed on a hot water cup at  $74.8^{\circ}\text{C}$ , while the upper plate is at room temperature ( $23^{\circ}\text{C}$ ), creating a temperature difference of approximately  $52^{\circ}\text{C}$ . The relationship between the temperature difference and the flywheel speed is shown in Table 3.

**Table 3. Results of the first experiment**

Lower Plate Temp (°C)	Upper Plate Temp (°C)	$\Delta T$	Rotation Speed (rpm)
74.1	26.3	47.8	0.9
72.3	28.2	44.1	0.85
68.0	28.7	39.3	0.8
67.3	29.0	38.3	0.7
66.0	28.0	38.0	0.6

Results show rotational frequency gradually decreased as the temperature differential decreased. Rotation duration was 4 minutes.

*Second Experiment:* In the second experiment, the model was cooled to room temperature, then ice pieces (0°C) were placed on the upper plate while the lower section remained at room temperature (~20°C). This created a 20°C temperature difference, sufficient for engine startup.

Subsequently, the lower plate was reheated while the upper remained ice-cooled. The temperature differential reached over 65°C. The results of the second experiment are presented in Table 4.

**Table 4. Results of the second experiment**

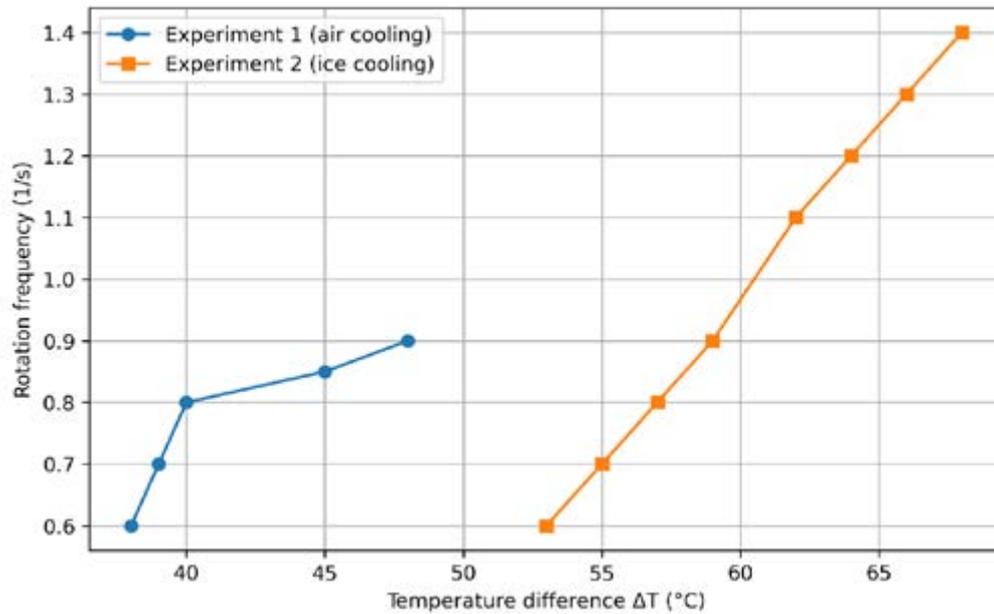
Lower Plate Temp (°C)	Upper Plate Temp (°C)	$\Delta T$	Rotation Speed (rpm)
74.8	6.8	68.0	1.4
73.3	6.6	66.7	1.3
72.0	6.0	64.4	1.2
71.2	5.8	62.0	1.1
68.6	5.5	59.1	1.0
67.6	5.4	57.2	0.9
61.0	5.3	55.7	0.8
58.7	5.2	53.5	0.7
56.4	4.8	52.6	0.6

During the second experiment, the engine operated for 14 minutes, demonstrating stable and clear operation at large temperature differentials.

The graphical relationship between rotation speed and temperature differential  $\Delta T$  for both experimental modes clearly shows that rotation speed increases with growing temperature differential, confirming the engine's thermodynamic efficiency at larger temperature gradients.

- Air cooling (lower  $\Delta T$ ) – left curve;
- Ice cooling (higher  $\Delta T$ ) – right curve.

The right curve shows the relationship between the rotation speed and the temperature difference at a larger temperature gradient. In this case, the lower part was reheated to approximately 74°C, while the upper part was cooled with ice.



**Figure 6. Dependence of the rotation frequency on the temperature difference**

For the Stirling engine, maximum theoretical efficiency is determined by the Carnot formula:

$$\eta = 1 - \frac{T_c}{T_H} \quad (1)$$

First Experiment (air cooling):

$$T_H = 74,1^{\circ}C = 347,25K, T_c = 26,3^{\circ}C = 299,45K \quad (2)$$

$$\eta_{max} = 1 - \frac{299.45}{347.25} \approx 13,8\% \quad (3)$$

Second Experiment (highest efficiency):  $T_H = 74,8^{\circ}C = 347,95K, T_c = 6,8^{\circ}C = 279,95K$

$$\eta_{2max} = 1 - \frac{279.95}{347.95} \approx 19,5\% \quad (4)$$

In reality, Stirling engine efficiency constitutes approximately 40% (maximum) of ideal efficiency. Thus:

$$\text{First experiment: } \eta_{1real} = 0,4\eta_{1max} = 0,4 \cdot 13,8 \approx 5,5\%$$

$$\text{Second experiment: } \eta_{2real} = 0,4\eta_{2max} = 0,4 \cdot 19,5 \approx 7,8\%$$

*Actual Efficiency from Experimental Parameters.* Useful work, knowing frequency  $f$ , flywheel mass  $m$ , and moment of inertia  $I$ , is determined from flywheel kinetic energy:

$$E_k = \frac{1}{2}I\omega^2 = \frac{1}{2}I(2\pi f)^2 = 2\pi^2 f^2 I \quad (5)$$

For a disk flywheel:

$$I = \frac{1}{2}mR^2 = \frac{1}{8}mD^2 = \frac{1}{8}\rho V D^2 = \frac{1}{8}\rho\pi\left(\frac{D}{2}\right)^2 h D^2 = \frac{\pi}{32}\rho h D^4 \quad (6)$$

There fore:

$$E_k = 2\pi^2 f^2 I = 2\pi^2 f^2 \frac{\pi}{32}\rho h D^4 = f^2 \frac{\pi^3}{16}\rho h D^4 \quad (7)$$

Substituting values  $D = 15\text{cm} = 0,15\text{m}$ ,  $h = 0,15\text{cm} = 0,0015\text{m}$ ,  $f = 0,9(1,4)\text{Hz}$ :

$$E_{k2} = f^2 \frac{\pi^3}{16}\rho h D^4 = 0,9^2 \frac{3,14^3}{16} 4000 \cdot 1,5 \cdot 10^{-3} \cdot (15 \cdot 10^{-2})^4 \approx 4,9\text{mJ}$$

$$E_{k2} = f^2 \frac{\pi^3}{16}\rho h D^4 = 1,4^2 \frac{3,14^3}{16} 4000 \cdot 1,5 \cdot 10^{-3} \cdot (15 \cdot 10^{-2})^4 \approx 11,6\text{mJ}$$

This represents minimal energy, natural for a desktop engine model, but clearly demonstrates heat-to-mechanical motion conversion. Thus, work equals approximately:

$$W_1 \approx 22\text{mJ} \text{ (first experiment)}$$

$$W_1 \approx 52\text{mJ} \text{ (second experiment)}$$

Heat Input Estimation:

Using the heat capacity equation:

$$Q = mc_V \Delta T \quad (8)$$

Here,  $m$  is the mass of the gas,  $c_V = C_V \mu = \frac{i R}{2M} = \frac{5}{2} \frac{8,31}{29 \cdot 10^{-3}} \approx 716\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$  is the specific heat capacity of air at constant volume (approximately), and  $\Delta T$  is the temperature difference between the hot and cold sections of the engine.

Let us estimate the volume  $V$  of the working chamber. For a cylinder with diameter  $d$  and piston stroke  $h$ , the volume  $V$  of the working chamber is given by the expression:

$$V = \pi \frac{d^2}{4} h \quad (9)$$

The mass of air can be determined using the ideal gas equation

$$m = \frac{PV\mu}{RT} \quad (10)$$

Alternatively, considering the formula for the volume  $V$  of the working chamber, we obtain:

$$m = \frac{P\mu}{RT} \pi \frac{d^2}{4} h \quad (11)$$

Substituting the numerical values into the formula for the mass, we have:  $d = 2,0\text{cm} = 0,020\text{m}$ ,  $h = 2,0\text{cm} = 0,020\text{m}$ ,  $P = 101325\text{Pa}$  (atmospheric pressure),  $\mu = 0,029\text{kg/mol}$ ,  $T \approx 300\text{K}$  (average temperature),  $R = 8,31\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ .

$$m = \frac{P\mu}{RT} \pi \frac{d^2}{4} h = \frac{101325 \cdot 29 \cdot 10^{-3}}{8,31 \cdot 300} 3,14 \frac{(20 \cdot 10^{-3})^2}{4} 20 \cdot 10^{-3} \approx 7,4\text{mg}$$

By substituting the obtained mass value into the heat formula and using  $\Delta T_1 \approx 40\text{K}$  for the first experiment and  $\Delta T_2 \approx 60\text{K}$  for the second experiment, we obtain:

$$Q_{H1} = mc_V \Delta T_1 = 7,4 \cdot 10^{-6} \cdot 716 \cdot 40 \approx 0,22\text{J}$$

$$Q_{H2} = mc_V \Delta T_2 = 7,4 \cdot 10^{-6} \cdot 716 \cdot 60 \approx 0,32\text{J} = \frac{3}{2} Q_{H1}$$

These values for the heat obtained by the model (approximate upper estimate) were calculated under the assumption that the gas in the cylinder is heated by  $40^\circ\text{C}$  (and by  $60^\circ\text{C}$  in the second experiment) during each cycle.

In practice, the actual amount of heat per cycle will be lower, since not all heat is converted into work; some is lost due to heat dissipation and uneven heating.

Now, let us calculate the actual efficiency of the experimental Stirling engine model using its parameters, according to the formula:

$$\eta_{1real}^* = \frac{W_1}{Q_{H1}} = \frac{4,9 \cdot 10^{-3}}{0,22} \approx 2,2\%$$

$$\eta_{2real}^* = \frac{W_2}{Q_{H2}} = \frac{11,6 \cdot 10^{-3}}{0,32} \approx 3,6\%$$

The difference between the actual efficiency, calculated under the assumption that Stirling engines achieve 40% of the ideal (Carnot cycle) efficiency, and the efficiency of the Stirling engine calculated from its parameters, is:

$$\text{first experiment } \frac{\eta_{1real}}{\eta_{1real}^*} = \frac{5,5}{2,2} \approx 2,5$$

$$\text{second experiment } \frac{\eta_{1real}}{\eta_{1real}^*} = \frac{7,8}{3,6} \approx 2,2$$

In reality, our model's efficiency was 16-18% of ideal (maximum) efficiency, whereas many

real Stirling engines achieve around 40%.

The obtained low efficiency (2,2% and 3,6%) is normal for a demonstration model. Friction losses, heat transfer, non-ideal cycle, and small gas mass significantly reduce efficiency. The theoretical limit (Carnot cycle efficiency) was ~13,8% and ~19,5%, but this is unattainable for a real model.

This Stirling engine model described in the work represents an accessible and clear method for demonstrating thermodynamic processes converting heat into mechanical work. Construction simplicity, use of inexpensive materials, and the capability to operate at temperature differentials of just ~20°C make it ideal for school and university laboratory work.

### **Conclusion**

1. The experimental model effectively demonstrates thermal energy conversion to mechanical energy, with efficiency and rotation speed directly dependent on the temperature differential between heating and cooling plates.

2. Even a small temperature difference (20°C) suffices for engine startup and stable operation. This confirms the engine's capability to operate on low-temperature energy sources.

3. Increasing the temperature differential increases flywheel rotation speed.

4. Model assembly requires precision and accurate fitting, especially regarding sealing and moving parts balancing. Model assembly is possible from accessible materials.

5. Obtained data can be utilized in school and university practice for studying thermodynamics, alternative energy, and engineering design fundamentals. This setup represents significant educational value for thermodynamics, physics, and engineering instruction.

### **Acknowledgements**

There are no conflicts to declare.

### **The contribution of the authors**

**G. Baiman** – Development of the research concept, formulation of the aims and objectives of the study, supervision of all stages of modeling and results analysis, and participation in writing the introduction and conclusion.

**G. Baubekova** – Collection and systematization of literature sources, preparation of materials for the methodology section, and critical revision of the manuscript text

**D. Pazylova** – Approval of the final version of the manuscript for publication.

### **Statement on the use of generative AI and AI-enabled technologies in the manuscript preparation process**

During the preparation of this paper, the authors used AI tools for text style improvement, as well as for clarity of wording. After using this service, the authors have checked and edited the content as needed and are fully responsible for the content of the published article.

### **References**

1. T.A. Arslan and T. Kocakulak, A comprehensive review on Stirling engines, Engineering Perspective No. 3, 42–56 (2023). <https://doi.org/10.29228/eng.pers.66847>
2. Y. Timoumi, I. Tlili, and S.B. Nasrallah, Performance optimization of Stirling engines, Renewable

Energy, 33 (9), 2134–2144 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.renene.2007.12.012>

3. C. H. Cheng and H. S. Yang, Optimization of geometrical parameters for Stirling engines based on theoretical analysis, *Renewable Energy*, 92, 395–405 (2016).

4. G. Walker, *Free-Piston Stirling Engines* (Springer, Berlin, 1985), pp. 23–99.

5. W.R. Martini, *Stirling Engine Design Manual*, NASA Technical Memorandum No. DOE/NASA/2112-1 (NASA, 1978), p. 300.

6. G. Walker, *Stirling Engines* (Clarendon Press, Oxford, 1980), p. 250.

7. A.D. Mekhtiev, V.V. Yugai, N.B. Kaliaskarov, A.D. Alkina, and D.M. Turdybekov, Using a Stirling engine for an ultra-low-capacity cogeneration thermal power plant with the possibility of using heat losses of metallurgical production, *Science Bulletin of S. Seifullin Kazakh Agrotechnical University*, No. 3 (98), 186–195 (2018).

8. A.D. Mekhtiev, E.Zh. Sarsikeev and S.K. Zhumazhanov, Heat engine with external heat supply for power supply of rural consumers, *Mechanics and Technology*, No. 1 (75), 35–44 (2012). <https://doi.org/10.55956/QVQL8487>

9. V.I. Kolchin and I.V. Sablukov, *Fundamentals of the Theory of Heat Engines* (Mashinostroenie, Moscow, 2000), p. 432.

10. I. Urieli and D.M. Berchowitz, *Stirling Cycle Engine Analysis* (Adam Hilger, Bristol, 1984), p. 200.

11. Yu.M. Popov, *Fundamentals of Technical Thermodynamics* (Vysshaya Shkola [High Education], Moscow, 2002), p. 387.

12. G.T. Reader and C.S. Hooper, *Stirling Engines* (Elsevier, Amsterdam, 1983), p. 290.

13. Yu.P. Ryabov, *Thermal Engines* (Energoatomizdat, Moscow, 1990), p. 305.

14. R.J. Senft, *Mechanical Efficiency of Heat Engines* (Cambridge University Press, Cambridge, 2007), p. 189.

**Г.Б. Байман, Г.М. Баубекова\*, Д.Т. Пазылова**

*М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан  
(E-mail: bgb\_zht@mail.ru, baubekova83@mail.ru, danapazyl@mail.ru)*

### **Төмен температуралы Стирлинг қозғалтқышының моделін жобалау және эксперименттік зерттеу**

**Аңдатпа.** Бұл мақаланың мақсаты – төмен температуралы Стирлинг қозғалтқышының физикалық принциптерін зерттеу және жұмыс моделін әзірлеу. Идеал және нақты циклдердің параметрлері қарастырылады. Қозғалтқыштың жұмысы кезінде пайда болатын нақты энергия шығындары талданады және оларды модельдеуде есепке алу тәсілдері ұсынылады, бұл төмен температуралы жылу қозғалтқыштары бойынша теориялық зерттеулерді жеңілдетеді. Стирлинг қозғалтқышының әртүрлі модификациялары да қарастырылады және олардың температураға, материалдық қасиеттерге және жұмыс жағдайларына байланысты әлеуетті тиімділігі талданады.

Тәжірибелік қозғалтқыш моделін құру тұйық циклдердегі жылу беру және энергияны түрлендіру механизмдерін тереңірек түсінуге ықпал етеді, бұл жылу қозғалтқышы теориясын дамыту үшін маңызды. Тәжірибелік зерттеулер баламалы энергия саласындағы отандық

ғылыми базаны дамытуға да үлес қосады.

Зерттеу білім беру және әдістемелік салаға үлес қосады: Стирлинг қозғалтқышының жұмысын анық көрсету және негізгі тәжірибелер жүргізу үшін пайдалануға болатын модель ұсынылды, бұл оны білім беру тәжірибесінде пайдалы құралға айналдырады.

**Түйін сөздер:** жылу қозғалтқышы, Стирлинг қозғалтқышы, термодинамикалық процестер, жылу беру, жылуалмасу элементі.

**Г.Б. Байман, Г.М. Баубекова\*, Д.Т. Пазылова**

*Южно-Казахстанский университет имени М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан  
(E-mail: bgb\_zht@mail.ru, baubekova83@mail.ru, danapazyl@mail.ru)*

### **Проектирование и экспериментальное исследование модели низкотемпературного двигателя Стирлинга**

**Аннотация.** Целью данной работы является изучение физических принципов работы низкотемпературного двигателя Стирлинга и создание его рабочей модели. В работе рассматриваются как идеальные, так и реальные параметры цикла. Анализируются реальные потери энергии, возникающие при работе двигателя, и предлагаются подходы к их учету при моделировании, что способствует теоретическим исследованиям низкотемпературных тепловых двигателей. Также рассматриваются различные модификации двигателя Стирлинга и анализируется их потенциальная эффективность в зависимости от температуры, особенностей материала и условий эксплуатации.

Построение экспериментальной модели двигателя способствует более глубокому пониманию механизмов теплопередачи и преобразования энергии в замкнутых циклах, что важно для развития теории тепловых двигателей. Экспериментальные исследования также способствуют развитию отечественной научной базы в области альтернативной энергетики.

Исследование вносит образовательный и методический вклад: предложена модель, с помощью которой можно наглядно продемонстрировать работу двигателя Стирлинга и провести основные эксперименты, что делает ее полезным инструментом в образовательной практике.

**Ключевые слова:** тепловой двигатель, двигатель Стирлинга, термодинамические процессы, теплопередача, теплообменный элемент

#### **References**

1. T.A. Arslan and T. Kocakulak, A comprehensive review on Stirling engines, *Engineering Perspective* No. 3, 42–56 (2023). <https://doi.org/10.29228/eng.pers.66847>
2. Y. Timoumi, I. Tlili, and S.B. Nasrallah, Performance optimization of Stirling engines, *Renewable Energy*, 33 (9), 2134–2144 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.renene.2007.12.012>
3. C. H. Cheng and H. S. Yang, Optimization of geometrical parameters for Stirling engines based on theoretical analysis, *Renewable Energy*, 92, 395–405 (2016).
4. G. Walker, *Free-Piston Stirling Engines* (Springer, Berlin, 1985), pp. 23–99.
5. W.R. Martini, *Stirling Engine Design Manual*, NASA Technical Memorandum No. DOE/NASA/2112-1 (NASA, 1978), p. 300.
6. G. Walker, *Stirling Engines* (Clarendon Press, Oxford, 1980), p. 250.
7. A.D. Mekhtiev, V.V. Yugai, N.B. Kaliaskarov, A.D. Alkina, and D.M. Turdybekov, Using a Stirling engine

for an ultra-low-capacity cogeneration thermal power plant with the possibility of using heat losses of metallurgical production, Science Bulletin of S. Seifullin Kazakh Agrotechnical University, No. 3 (98), 186–195 (2018).

8. A.D. Mekhtiev, E.Zh. Sarsikeev and S.K. Zhumazhanov, Heat engine with external heat supply for power supply of rural consumers, Mechanics and Technology, No. 1 (75), 35–44 (2012). <https://doi.org/10.55956/QVQL8487>

9. V.I. Kolchin and I.V. Sablukov, Fundamentals of the Theory of Heat Engines (Mashinostroenie, Moscow, 2000), p. 432.

10. I. Urieli and D.M. Berchowitz, Stirling Cycle Engine Analysis (Adam Hilger, Bristol, 1984), p. 200.

11. Yu.M. Popov, Fundamentals of Technical Thermodynamics (Vysshaya Shkola [High Education], Moscow, 2002), p. 387.

12. G.T. Reader and C.S. Hooper, Stirling Engines (Elsevier, Amsterdam, 1983), p. 290.

13. Yu.P. Ryabov, Thermal Engines (Energoatomizdat, Moscow, 1990), p. 305.

14. R.J. Senft, Mechanical Efficiency of Heat Engines (Cambridge University Press, Cambridge, 2007), p. 189.

#### **Information about the authors:**

**Baiman G.B.** – Senior Lecturer, Department of Physics, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan.

**Baubekova G.M.** – corresponding author, Senior Lecturer, Department of Physics, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan.

**Pazylova D.T.** – PhD, associate professor, Department of Physics, M. Auezov South Kazakhstan University, Shymkent, Kazakhstan.

**Байман Г.Б.** – Физика кафедрасының аға оқытушысы, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.

**Баубекова Г.М.** – хат-хабар авторы, Физика кафедрасының оқытушысы, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.

**Пазылова Д.Т.** – PhD, Физика кафедрасының доценті, М.Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан университеті, Шымкент, Қазақстан.

**Байман Г.Б.** – старший преподаватель кафедры Физика, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

**Баубекова Г.М.** – автор для корреспонденции, преподаватель кафедры Физика, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

**Пазылова Д.Т.** – PhD, доцент кафедры Физика, Южно-Казахстанский университет имени М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан.



© 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



УДК 52 (15)

МРНТИ 29.05.45

Тип статьи: научная статья

<https://doi.org/10.32523/26-6836-2025-154-1-64-83>

## Анализ отказов бортовых комплексов управления космических аппаратов в условиях воздействия факторов космического пространства

А.С. Ошманова<sup>1\*</sup>, В.Ф. Грищенко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

<sup>2</sup>Институт ионосферы, Алматы, Казахстан

(E-mail: aizhan.oshmanova@icloud.com, grischenko.v@ionos.kz)

**Аннотация.** Во время эксплуатации космических аппаратов (КА) различного назначения возникают отказы в бортовой электронной аппаратуре, приводящие к развитию нештатных ситуаций, а иногда и к потере спутников. Как правило, отказы возникают в бортовом комплексе управления (БКУ) КА. Многие исследователи считают, что отказы возникают в результате ионизирующего излучения в околоземном космическом пространстве (ОКП). Поэтому чрезвычайно важным и необходимым является оценка работы БКУ КА в условиях комплексного воздействия факторов околоземного космического пространства (ОКП).

Представлены ориентированные графы БКУ, характеризующие распространение ошибок, и описывается взаимосвязь вершин и рёбер. На основе вероятностных характеристик функциональных модулей разработана методика идентификации направления распространения ошибок, которые определяют наибольшую структурную уязвимость системы.

Показано, что отказы БКУ определяются архитектурой системы, а не случайными флуктуациями параметров модели. Разработанный параметр направления отказов позволяет установить уязвимость функциональных узлов, оказывающих влияние на работу системы управления в условиях комплексного воздействия факторов космического пространства. Полученные результаты используются при проектировании БКУ космических аппаратов с целью повышения их устойчивости к комплексному воздействию факторов космического пространства и условиям эксплуатации.

**Ключевые слова:** бортовой комплекс управления, радиационно-индуцированная ошибка, ориентированный граф, отказ, космический аппарат.

Поступила 18.02.2026. После доработки 4.03.2026. Принята к печати 4.03.2026.

Доступно онлайн 30.03.2026.

\*автор для корреспонденции

## Введение

Известно, что во время функционирования КА различного назначения возникают отказы в бортовой электронной аппаратуре, которые могут приводить к развитию нештатных ситуаций, иногда и к потере КА в целом [1–3]. Повышение надежности космических систем, в основном, выполняется путем совершенствования технологий изготовления систем космической техники в наземных условиях. Более того, в наземных моделирующих условиях и наземных предполетных испытаниях отсутствуют системы, позволяющие учитывать комплексное воздействие факторов космического пространства. Поэтому чрезвычайно актуальным является поиск новых методов и подходов для повышения надежности бортовых электронных систем и увеличения срока активного существования (САС) бортовых комплексов в реальных условиях.

Объектом данного исследования является БКУ КА различного назначения. Предметом исследования является определение уязвимости узлов и элементов БКУ к внешним воздействиям.

Целью данной работы является оценка отказов бортовой электронной аппаратуры с учётом радиационно-индуцированных SEL и электростатических разрядов (ЭСР) с использованием ориентированных графов структур.

Задачи исследования. Основной задачей является разработка математической модели для поиска уязвимости БКУ КА различного назначения. Использование теории графов в анализе отказов – это мощный инструмент математического моделирования.

Методология работы направлена на поиск параметров отказоустойчивости бортовых систем с использованием ориентированных графов, которые можно использовать для анализа работы БКУ в режиме on-line для принятия управленческих решений.

### *Физические механизмы радиационно-индуцированных отказов*

Известно, что во время эксплуатации в условиях комплексного воздействия факторов космического пространства в бортовой электронной аппаратуре космических аппаратов различного назначения (КА) возникают сбои и отказы в модулях памяти. Следует отметить, что сбои (мягкие ошибки) восстанавливаются через некоторое время, а отказы (катастрофические) не восстанавливаются и могут приводить к развитию нештатных ситуаций, а иногда и к потере спутников. Кроме того, КА во время эксплуатации постоянно бомбардируется электронами и ионами плазмы, а также подвергается УФ-излучению. Из-за этого различные участки КА (антенны, солнечные панели, экранно-вакуумная изоляция) заряжаются и могут провоцировать так называемые электростатические разряды (ЭСР).

Тяжелые ядра космических лучей (КЛ) могут вызывать не только «мягкие» сбои в памяти (переворот бита), но и провоцировать короткие замыкания и разряды по шинам питания. Этот класс явлений называется *SEL (Single Event Latch-up)* — одиночное защелкивание.

Современные исследования [4] подтверждают, что электростатические разряды способны вызывать специфические много битовые ошибки (MBU) из-за инъекции заряда в области шин питания. ЭСР — это мощный электромагнитный импульс (ЭМИ), который наводит скачки напряжения непосредственно на шинах данных и питания. ЭСР

может вызвать ложные команды записи в память или необратимый пробой изоляции между дорожками на печатной плате. Статистика показывает, что более 50% всех аномалий в работе спутников связаны с электризацией.

В условиях космического пространства электронные компоненты подвергаются воздействию ионизирующего излучения, которое может приводить к возникновению радиационно-индуцированных ошибок. Наиболее распространённые нарушения вызываются взаимодействием заряженных частиц с чувствительными элементами микросхем [5,6].

Ошибки приводят не только к локальным сбоям отдельных функциональных блоков, но и к распространению отказов по системе вследствие логических, информационных и управляющих связей между компонентами [7]. В связи с этим, традиционные методы оценки надёжности, основанные на анализе отдельных элементов или предположении независимости отказов, оказываются недостаточными для выявления наиболее уязвимых структурных фрагментов системы [8].

Радиационное воздействие околоземного космического пространства включает галактические космические лучи, солнечные космические лучи и частицы радиационных поясов Земли [1,2]. Тяжелые заряженные частицы, воздействуя на элементы модулей памяти, вызывают локальную ионизацию, что может приводить к изменению логического состояния запоминающих элементов и регистров [5,9].

В последние годы всё большее внимание уделяется методам структурного анализа, позволяющим учитывать топологию системы и взаимосвязи между её компонентами [8–10]. Одним из перспективных подходов является графовое моделирование, при котором архитектура бортовой вычислительной системы представляется в виде ориентированного графа, а распространение отказов интерпретируется как направления этого графа [11].

Ошибки возникают в результате накопления заряда в чувствительных областях полупроводниковых структур, превышающего порог переключения логического элемента [5,12]. Вероятность возникновения ошибок зависит от интенсивности и энергетического спектра потока частиц, а также от конструктивных и технологических особенностей электронной компонентной базы [13].

С физической точки зрения ошибки рассматриваются как случайный процесс, интенсивность которых определяется факторами космического пространства и характеристиками защищённости космической системы [3,14]. При этом отказ одного функционального блока может приводить к искажению данных или управляющих сигналов, распространяющихся по системе и вызывающих вторичные отказы в других элементах [6].

Анализ отказов бортовой вычислительной системы учитывает не только вероятность возникновения ошибок в отдельных компонентах, но и структуру взаимосвязей между ними, определяющую возможные направления распространения отказов. Разработанная графовая модель позволяет формализовать архитектуру системы и исследовать её уязвимость с точки зрения физически обусловленных отказов [8,15].

## Методология

### Гипотеза исследования.

Физико-математическая модель направления распространения отказов бортовых систем управления с использованием ориентированных графов, которая используется для анализа работы БКУ космических аппаратов (КА) в режиме on-line и принятия управленческих решений.

В качестве основного метода используется исследование распространения отказов структуры бортового комплекса управления. Данный метод основан на физико-математическом представлении системы в виде ориентированного графа, где вершины описывают элементы бортовой аппаратуры, а рёбра отображают связи между ними.

Такое представление позволяет исследовать топологию системы и определить взаимное влияние её элементов. Анализ направлений распространения отказов по графовой модели дает возможность выявить уязвимые узлы системы, а также оценить влияние отдельных элементов на общую работоспособность БКУ. Кроме того, физико-математическая графовая модель обеспечивает наглядную визуализацию структуры системы и взаимодействия её компонентов.

Анализ отказов бортовых систем управления космических аппаратов выполнен с использованием ориентированных графов, позволяющих формализовать структуру системы и направление распространения отказов между её элементами. Применение графовой модели даёт возможность исследовать работу бортового комплекса управления (БКУ) и выявлять элементы, оказывающие наибольшее влияние на устойчивость функционирования системы. Такой подход может быть использован для оценки состояния системы и принятия управленческих решений при анализе её работоспособности.

Исследование проводилось в несколько этапов. На первом этапе был выполнен анализ структурной схемы бортового комплекса управления космического аппарата «Монитор-Э», что позволило определить основные элементы системы и их функциональные связи.

На втором этапе на основе полученной структурной информации были построены ориентированные графы, в которых вершины соответствуют элементам БКУ, включая вычислительные модули, блоки памяти, интерфейсные контроллеры и подсистемы управления. Ориентированные рёбра графа отражают направление информационных и функциональных связей между элементами системы.

На следующем этапе выполнен структурный анализ построенной графовой модели, позволяющий определить возможные маршруты распространения отказов и выявить элементы, оказывающие существенное влияние на функционирование БКУ.

Метод исследования. Использование статистических данных отказов для оценки отказоустойчивости системы и определение основных показателей её функционирования.

На основе полученных данных рассчитаны следующие характеристики:

- вероятность безотказной работы системы;
- среднее время наработки на отказ;

- вероятность отказа отдельных элементов системы;
- наиболее значимые маршруты распространения отказов в структуре БКУ.

Полученные результаты позволяют определить элементы системы, отказ которых может привести к возникновению нештатных ситуаций или снижению эффективности функционирования бортового комплекса управления.

*Графовое представление архитектуры бортового комплекса управления.*

Для анализа ошибок бортового комплекса управления (БКУ) с учётом радиационно-индуцированных отказов архитектура системы представляется в виде ориентированного графа

$$G=(V,E) \quad (1)$$

где  $V=\{v_i\}$  – множество вершин, соответствующих функциональным модулям БКУ, а  $E=\{e_{ij}\}$  – множество ориентированных рёбер, описывающих потоки данных, сигналов управления и функциональные зависимости между модулями.

Каждая вершина графа соответствует логически или функционально выделяемому элементу БКУ, такому как вычислительный модуль, память, интерфейсный контроллер или подсистема управления. Ориентированные рёбра отражают направленность передачи информации и управляющих воздействий, что позволяет моделировать асимметричное распространение отказов в системе [8,9].

Радиационно-индуцированный отказ, возникающий в одном из функциональных модулей БКУ, может распространяться по системе вдоль ориентированных рёбер графа, приводя к нарушению функционирования последующих элементов. Пути в ориентированном графе естественным образом интерпретируются как возможные траектории распространения отказов, обусловленных физическими механизмами одиночных радиационных событий [3,6].

Для количественной оценки направления распространения отказов в ориентированном графе используется вероятностная модель, основанная на характеристиках функциональных модулей и их связей.

Особый интерес представляет параметр распространения отказов – путь с минимальным значением надёжности, определяющий наибольшую структурную уязвимость БКУ [9,11]. Выявление такого направления позволяет установить связь между физическими параметрами радиационной среды и архитектурными особенностями БКУ, а также определить элементы, наиболее чувствительные к радиационно-индуцированным сбоям.

Использование графового представления обеспечивает формализацию топологии БКУ, наглядность анализа и создаёт основу для дальнейшего исследования устойчивости при изменении параметров радиационной обстановки, что будет рассмотрено в последующих разделах.

*Построение ориентированного графа для оценки отказов БКУ*

Для количественного анализа направления распространения отказов БКУ используется ориентированный граф, введенный в предыдущем разделе, формула (1). В рамках рассматриваемого подхода отказ БКУ интерпретируется как результат распространения радиационно-индуцированных нарушений по функциональным и управляющим связям между элементами системы.

Каждой вершине  $v_i \in V$ , соответствующей функциональному модулю БКУ, сопоставляется вероятность безотказной работы  $p_i$ , определяемая интенсивностью радиационного воздействия и характеристиками электронной компонентной базы. Аналогично каждому ориентированному ребру  $e_{ij} \in E$ , описывающему связь между модулями  $v_i$  и  $v_j$ , может быть поставлена в соответствие вероятность корректной передачи информации  $p_{ij}$ .

В предположении независимости отказов элементов, надёжность отдельного пути распространения отказов

$$P_k = \{v_{i_1}, v_{i_2}, \dots, v_{i_m}\} \quad (2)$$

пределяется как произведение вероятностей безотказной работы всех вершин и рёбер, входящих в данный путь:

$$R(P_k) = \prod_{v_i \in P_k} p_i \prod_{e_{ij} \in P_k} p_{ij} \quad (3)$$

С физической точки зрения данная величина характеризует вероятность сохранения корректного функционирования соответствующей последовательности модулей БКУ при воздействии радиационной среды. Малые значения  $R(P_k)$  указывают на повышенную уязвимость системы к радиационно-индуцированным сбоям.

В рамках предлагаемого подхода вводится понятие направления распространения отказов, определяемого как направление с минимальной надёжностью:

$$P_{crit} = \arg \min_{P_k \in \mathcal{P}} R(P_k), \quad (4)$$

где  $\mathcal{P}$  — множество всех допустимых ориентированных путей в графе БКУ.

Формула (4) используется для выявления *направления распространения отказа*, соответствующего минимальному значению надёжности среди возможных маршрутов.

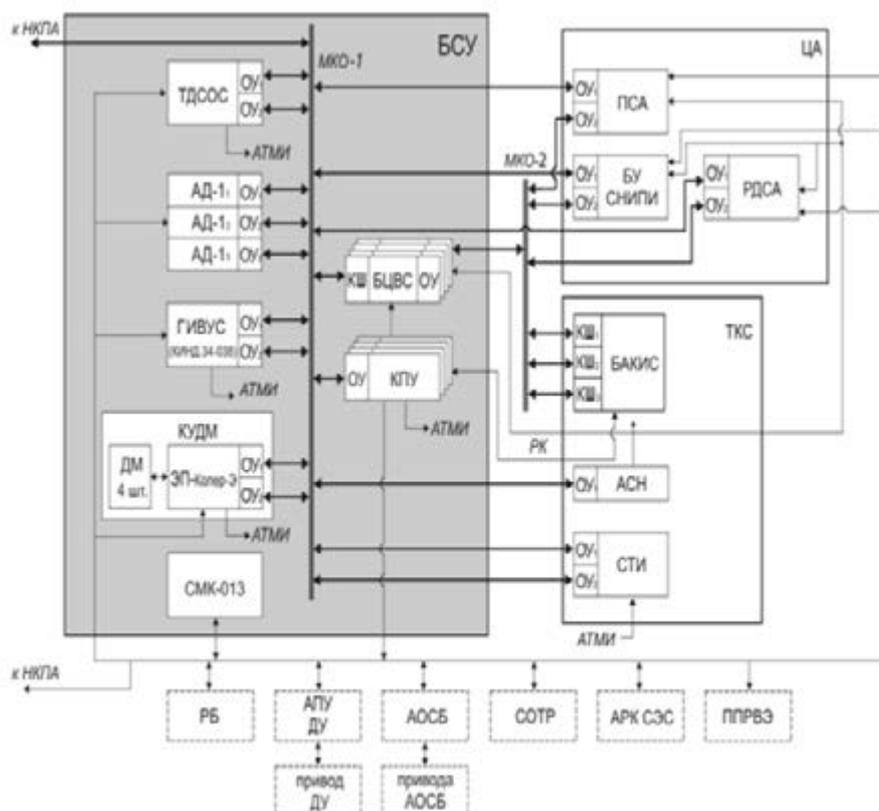
Под направлением распространения отказов в работе понимается ориентированный маршрут в графе системы.

Выявление направлений распространения отказов позволяет установить структурные элементы БКУ, наиболее подверженные влиянию радиационно-индуцированных отказов, и связать их с физическими параметрами радиационной среды. В отличие от классических методов оценки надёжности, основанных на анализе отдельных компонентов, предложенный графовый подход учитывает топологию системы и механизмы распространения отказов.

Полученная формулировка создаёт основу для дальнейшего анализа надёжности БКУ при изменении параметров радиационного воздействия, что позволяет оценить робастность архитектуры БКУ в различных условиях функционирования.

### Построение графовой модели бортового комплекса управления

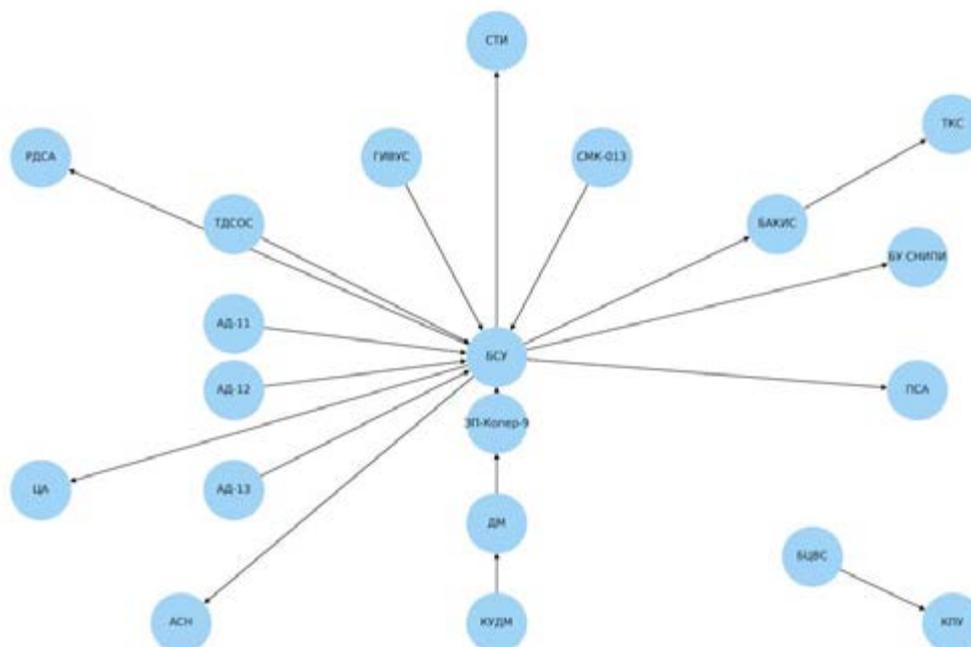
В соответствии с предложенной формализацией для анализа безотказности БКУ была построена графовая модель, отражающая основные функциональные и управляющие связи между ключевыми модулями системы. Модель носит обобщённый характер, что позволяет рассматривать её как типовую архитектуру БКУ. В качестве примера рассматривается графовая модель КА «Монитор-Э». На рисунке 1 представлена структурная схема БКУ КА «Монитор-Э» [16].



**Рисунок 1. Структурная схема БКУ КА «Монитор-Э»**

Структурная схема БКУ космического аппарата «Монитор-Э» представляет собой совокупность функциональных подсистем, обеспечивающих управление движением аппарата, сбор и обработку информации, взаимодействие с целевой аппаратурой и обмен данными с наземным комплексом управления.

Центральным элементом структуры является БКУ, осуществляющий координацию работы измерительных, исполнительных и информационных подсистем. В состав БКУ входят датчики ориентации и движения, включая астронавигационные и инерциальные средства (ТДСОС, АД-11, АД-12, АД-13, ГИВУС), а также вспомогательные устройства контроля и измерений (СМК-013). На рисунке 2 представлен ориентированный граф БКУ КА «Монитор-Э».



**Рисунок 2. Ориентированная структурная схема бортовой системы управления космического аппарата «Монитор-Э»**

Для формирования и реализации управляющих воздействий в структуре предусмотрен исполнительный контур, включающий командно-управляющий двигатель (КУДМ), двигатель-маховик (ДМ) и электронный преобразователь (ЭП «Копер-9»), обеспечивающие стабилизацию и ориентацию космического аппарата.

Вычислительный контур управления представлен бортовой цифровой вычислительной системой (БЦВС) и командно-программным устройством (КПУ), которые обеспечивают обработку информации, выполнение алгоритмов управления и формирование команд для исполнительных и информационных подсистем.

Взаимодействие с внешними системами реализуется через подсистемы целевой аппаратуры (ЦА), систему телеметрических измерений (СТИ), аппаратуру связи с наземным комплексом (БАКИС-ТКС), а также вспомогательные навигационные и сервисные подсистемы (АСН, ПСА, РДСА, БУ СНИПИ).

Для формализации структуры бортовой системы управления и последующего анализа распространения отказов структурная схема БСУ была представлена в виде ориентированного графа.

Вершины графа соответствуют функциональным блокам и подсистемам БСУ, а ориентированные рёбра отражают направления передачи управляющих воздействий, информационных и командных сигналов между ними. Направление рёбер выбиралось в соответствии с логикой функционирования системы и архитектурой взаимодействия подсистем.

Центральная вершина графа соответствует БСУ, от которой исходят рёбра к подсистемам целевой аппаратуры, телеметрии и связи, а также к вычислительному

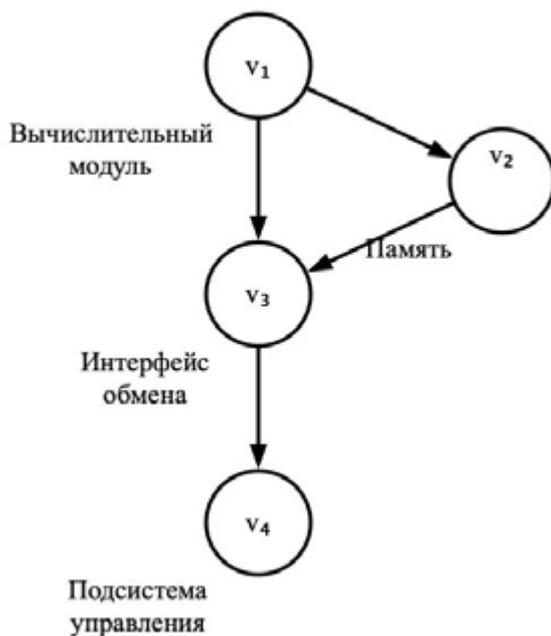
и исполнительному контурам управления. Такое представление позволяет наглядно отразить иерархию системы и выявить узлы, через которые проходят основные потоки управления и информации.

Построенный ориентированный граф используется в дальнейшем для анализа отказов бортовой системы управления космического аппарата «Монитор-Э».

Множество вершин ориентированного графа  $G=(V,E)$  формируется на основе функциональной декомпозиции БКУ и включает следующие элементы:

- $v_1$  – вычислительный модуль (центральный процессор БКУ);
- $v_2$  – подсистема памяти (оперативная и энергонезависимая память);
- $v_3$  – интерфейсный модуль обмена данными;
- $v_4$  – подсистема управления и принятия решений.

Ориентированные рёбра графа  $e_{ij} \in E$  описывают направленные потоки данных и управляющих сигналов между модулями БКУ. Наличие ребра  $e_{ij}$  означает, что отказ или искажение данных в модуле  $v_i$  может привести к нарушению функционирования модуля  $v_j$ . На рисунке 3 показано графовое представление архитектуры БКУ, используемое для анализа распространения радиационно-индуцированных отказов.



**Рисунок 3. Ориентированный граф архитектуры бортового комплекса управления**

Графовая модель отражает потенциальные пути распространения радиационно-индуцированных отказов, обусловленные архитектурой БКУ и логикой взаимодействия его компонентов. Каждой вершине  $v_i$  сопоставляется вероятность безотказной работы  $p_i$ , зависящая от чувствительности соответствующего модуля к одиночным радиационным событиям и параметров радиационной среды. Аналогично каждому ребру  $e_{ij}$  сопоставляется вероятность корректной передачи данных  $p_{ij}$ , учитывающая возможные искажения информации при распространении отказов.

Значения вероятностей  $p_i$  и  $p_{ij}$  в настоящей работе рассматриваются как параметрические величины и используются для сравнительного анализа путей распространения отказов, а не для точного прогноза абсолютной надёжности бортового комплекса управления.

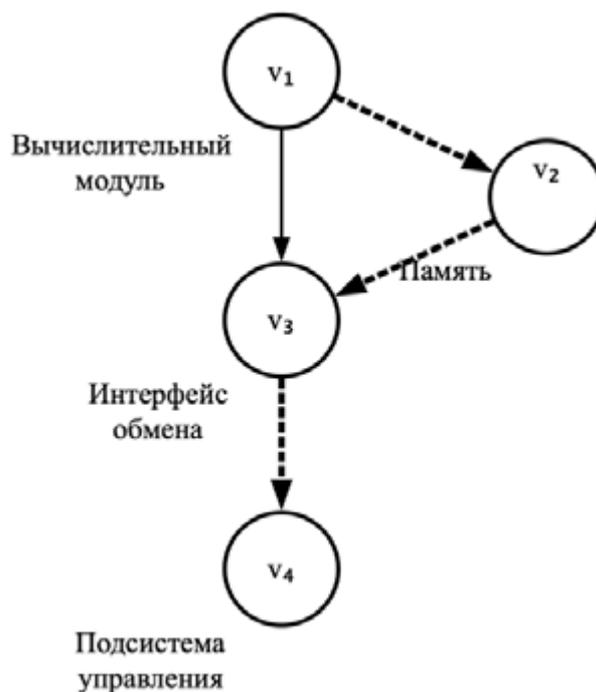
На основе заданной графовой модели бортового комплекса управления и вероятностных характеристик его элементов проводится анализ всех допустимых ориентированных путей распространения отказов в графе системы. Для каждого пути рассчитывается значение направления распространения отказов в соответствии с вероятностной моделью, введённой в разделе 4.

Критерием минимальной надёжности БКУ, определяющим наибольшую структурную уязвимость системы, является направление распространения отказов в графе БКУ. Проведённые расчёты показали, что направление определяется последовательностью вершин

$$v_1 \rightarrow v_2 \rightarrow v_3 \rightarrow v_4, \quad (5)$$

что указывает на ключевую роль соответствующих функциональных модулей в формировании надёжности системы.

Графическое представление ориентированного графа БКУ с выделением направления распространения отказов приведено на рисунке 4. Выделение направления позволяет наглядно продемонстрировать архитектурно обусловленные уязвимости системы и определить функциональные модули, оказывающие наибольшее влияние на общую надёжность БКУ.



**Рисунок 4. Ориентированный граф бортового комплекса управления с выделенным направлением распространения отказов**

На рисунках 1 и 2 представлена детальная структурная схема БКУ (датчики АД-11, АД-12, ГИВУС, КУДМ, ЭП «Копер-9» и др.), тогда как на рисунке 3 система представлена в виде графа из четырех вершин.

Агрегация элементов в вершины графа выполнялась по функционально-логическому принципу, а именно:

- в одну вершину объединялись элементы, реализующие единую функцию и имеющие тесные внутренние связи;
- внутренние взаимодействия внутри такого блока существенно более интенсивны, чем внешние связи с другими блоками;
- для задачи анализа распространения отказов определяющими являются именно межблочные связи, а не внутренняя микроструктура.

Таким образом, каждая вершина графа соответствует функционально завершённой подсистеме системного уровня, внутри которого отказ распространяется значительно быстрее, чем между подсистемами.

Цель построения графа на рисунке 3 заключалась в анализе межфункционального распространения отказов, а не в исследовании отдельных элементов. Поэтому использована укрупненная модель.

Чтобы исключить потерю значимых связей, при агрегации соблюдались следующие критерии:

1. сохранялись все информационные и энергетические связи между функциональными блоками;
2. не объединялись элементы, между которыми возможны независимые сценарии отказов;
3. проверено, что удаление внутренних связей не изменяет путей распространения отказов между блоками.

Локальные уязвимости внутри агрегированных вершин действительно могут существовать; однако они относятся к другому уровню декомпозиции и анализируются в рамках детальной схемы (рис. 1, 2). В настоящей работе исследуется системный уровень, поэтому выбранная степень агрегирования соответствует цели исследования.

Проведённый анализ показал, что отказы, как правило, возникают в вычислительном модуле и подсистеме памяти, что согласуется с физической природой ошибок, наиболее часто проявляющихся в элементах с высокой плотностью хранения информации. Полученный результат подчёркивает ключевую роль архитектурных решений в формировании устойчивости БКУ к воздействию космической радиационной среды.

#### *Анализ графовой модели параметра распространения отказов БКУ*

Для оценки безотказности предложенного графового подхода был проведён анализ направления распространения отказов бортового комплекса управления (БКУ) при изменении интенсивности радиационного воздействия. В рамках данного анализа рассматривались вариации вероятностей безотказной работы вершин и рёбер графа, отражающие изменение интенсивности радиационного воздействия.

Параметры  $p_i$  и  $p_{ij}$ , сопоставленные элементам графовой модели БКУ, варьировались в заданных диапазонах, соответствующих умеренным изменениям радиационной

обстановки, характерным для различных орбитальных условий и фаз солнечной активности [1–3]. При этом структура графа и топология функциональных связей между модулями БКУ оставались неизменными.

Результаты анализа показали, что при умеренных вариациях параметров радиационной среды направление распространения отказов сохраняет свою структуру, а изменения отдельных путей не приводят к смене доминирующего уязвимого маршрута. Это свидетельствует о том, что направление распространения ошибок определяется преимущественно архитектурными особенностями БКУ, а не случайными флуктуациями параметров модели.

С физической точки зрения данный результат указывает на то, что ключевые уязвимости БКУ формируются на уровне структурной организации системы и связей между функциональными модулями. Даже при изменении интенсивности радиационного воздействия наиболее чувствительные элементы БКУ продолжают играть определяющую роль в механизмах распространения отказов.

Выявление направления распространения отказов позволяет установить функциональные модули БКУ, требующие повышенного уровня защиты или резервирования. В отличие от классических методов анализа надёжности, ориентированных на отдельные элементы, графовый подход обеспечивает системный взгляд на проблему и позволяет учитывать механизмы каскадного распространения отказов, обусловленные структурой БКУ.

#### *Анализ полученных результатов*

Полученные результаты показали, что в современных микросхемах возникают отказы, функционально влияющие на работу космических систем. Например, в КМОП-структурах транзисторы расположены очень плотно. Между ними существуют паразитные (нежелательные) структуры, которые ведут себя как обычные тиристоры. Если есть защита, питание временно снимается, но данные в памяти при этом теряются.

Отмечаются и другие опасные эффекты «по шине». Помимо защелкивания, существуют и другие сценарии, когда частица бьет по силовым цепям:

SEB (Single Event Burnout) – Одинокое выгорание, характерно для мощных полевых транзисторов (MOSFET). Частица вызывает локальный пробой, и через транзистор проходит лавинообразный ток, разрушающий структуру.

SEGR (Single Event GateRupture) – Одиноким пробоем затвора: Частица пробивает тонкий слой диэлектрика в транзисторе, что приводит к необратимому замыканию управляющей цепи на канал.

Даже при использовании в составе бортовой аппаратуры КА модулей памяти категории Space или Military, в условиях космического полета при комплексном воздействии факторов космического пространства указанные отказы были зарегистрированы на реальных космических аппаратах.

*Для обеспечения функционирования бортовой аппаратуры КА принимаются следующие меры.*

**Таблица 1. Методы снижения радиационно-индуцированных отказов бортовой аппаратуры КА**

Метод	Описание
Радиационно-стойкая база (Rad-Hard)	Использование технологии «кремний на изоляторе» (SOI), где транзисторы изолированы друг от друга слоем диоксида кремния, что исключает эффект защелкивания.
LOD (Latch-up Detection)	Специальные схемы мониторинга тока. Как только ток по шине превышает порог, защита мгновенно отключает питание модуля на миллисекунды.
Троирование (TMR)	Резервирование блоков памяти, при котором при отказе одного из них система продолжает работать по мажоритарному принципу (2 из 3).

Детальный механизм отказов в реальных условиях является предметом отдельных исследований, результаты которых будут представлены в дальнейших публикациях.

Полученные результаты создают основу для дальнейшего исследования направления ошибок при изменении параметров радиационной обстановки, а также для разработки рекомендаций по повышению безотказности архитектуры БКУ.

*Сравнительный анализ метода Дерево отказов и метода графов для оценки отказов БКУ.*

Известно, что классические методы (FTA – Fault Tree Analysis, RBD – Reliability Block Diagrams) являются стандартом. Однако, FTA и схемы целостности статичны. Они плохо учитывают перекрестные связи и каскадные эффекты (когда отказ в одной шине питания из-за ТЗЧ вызывает сбой в логике соседа, что не предусмотрено прямой иерархией «дерева»). В то время как графовый подход позволяет выявлять «циклы» и «узлы деградации», которые в дереве отказов представлены как независимые ветви.

Основное отличие заключается в том, что традиционные методы (FTA, RBD) базируются на дедуктивной логике «сверху вниз» и ориентированы на независимые цепочки отказов. Однако для бортовой аппаратуры, подверженной воздействию тяжелых заряженных частиц (ТЗЧ) и электростатических разрядов (ЭСР), критическим является возникновение неявных топологических связей.

В частности, предложенный графовый метод позволил выявить:

- Эффект «защелкивания» (SEL) в смежных цепях: Классическое дерево отказов рассматривает модули памяти и контроллер питания как отдельные блоки. Графовая модель, учитывающая физическую близость и общие шины питания, выявила уязвимость к групповому отказу при прохождении одной частицы с высоким LET.
- Каскадные сбои при ЭСР, в отличие от схем функциональной целостности, граф топологии позволил идентифицировать «узкие места» в разводке шин, где электростатический разряд на корпусе наводит помехи сразу на несколько информационных каналов.

Таким образом, эффективность методики подтверждается выявлением направления распространения отказов, которые в классических Деревьях отказов считались маловероятными из-за предположения о независимости событий» [17–18].

Для иллюстрации превосходства графового метода был проведен сравнительный анализ критического узла бортового управляющего комплекса КА «Монитор–Э».

Классический подход (FTA), рассматривал основной и дублирующий массивы памяти как независимые элементы. Вероятность их одновременного отказа оценивалась как пренебрежимо малая ( $10^{-9}$ ), так как дерево отказов не учитывало пространственные и электрофизические связи между ними.

Предложенный графовый подход, позволил идентифицировать направления распространения отказов (узел графа с высокой степенью центральности), соответствующие общей шине питания и топологически близким областям кристалла. Моделирование показало, что при воздействии тяжелых заряженных частиц (ТЗЧ) возникает риск одиночного события (SEL), приводящего к каскадному отказу обоих каналов памяти одновременно.

**Таблица 2. Сравнительный анализ классического (FTA) и предложенного графового подходов на примере анализа отказов КА «Монитор–Э»**

№ п/п	Характеристика	Классический метод (Деревья отказов / FTA)	Предложенный графовый метод (Топологический граф)
1	Объект анализа	Иерархическая логика функций	Физико-логическая структура соединений
2	Учет взаимосвязей	Только прямые функциональные зависимости	Прямые, перекрестные и паразитные связи
3	Учет взаимосвязей	Только прямые функциональные зависимости	Прямые, перекрестные и паразитные связи
4	Оценка резервирования	Считает каналы независимыми (вероятности перемножаются)	Выявляет общие точки отказа в топологии
5	Чувствительность к ТЗЧ/ЭСР	Рассматривается как случайный сбой одного узла	Моделирует «разряд по шине» и его влияние на соседние узлы графа
6	Выявленная уязвимость для «Монитор–Э»	Не выявлена (высокая расчетная надежность дублированных систем)	Обнаружена: риск одновременного блокирования каналов памяти при SEL в узле шинного формирователя
7	Количественный показатели	Вероятность отказа: $P \approx 10^{-8}$ (ложный отказ)	Коэффициент уязвимости узла: $V > 0.75$ (указывает на критическую связь)

Как видно из Таблицы 2, классический анализ по методу FTA дает избыточно оптимистичный прогноз надежности для КА «Монитор-Э», так как не учитывает физическую природу распространения электростатического разряда и ионизационных эффектов по общим шинам. В то время как предложенный графовый метод позволяет количественно оценить «связанность» отказов.

В частности, использование центральности узлов графа позволило выявить, что компоненты, считавшиеся независимыми в FTA, фактически имеют общую «критическую дистанцию» по цепям питания. Это объясняет наблюдаемые на практике аномалии в работе бортовой аппаратуры, которые не предсказывались традиционными расчетами при проектировании.

1. Что пропустил классический метод FTA: Расчет по методу дерева отказов для «Монитор-Э» мог показать высокую надежность, так как вероятность одновременного выхода из строя основного и резервного блоков памяти крайне мала (произведение вероятностей:  $P1 \times P2$ ). В FTA они выглядят как параллельные независимые ветви.

2. Что выявил графовый подход: Графовая модель учитывает физическую трассировку шин питания на плате. При прохождении тяжелого ядра (ТЗЧ) в области шинного формирователя возникает эффект SEL (защелкивания). Поскольку графовая модель связывает узлы не только функционально, но и по «линиям питания», она обнаруживает, что один ионный трек может вызвать короткое замыкание общей шины, питающую и основную, и резервный чип памяти.

Таким образом, графовый метод выявил уязвимость общей причины, которую классический расчет квалифицировал как безопасную из-за допущения о независимости отказов резервированных цепей.

Предложенный графовый подход демонстрирует устойчивость к вариациям характеристик радиационной среды и может рассматриваться как параметр надежности для выявления архитектурно обусловленных уязвимостей БКУ. Полученные результаты подтверждают применимость метода для анализа отказов бортовых комплексов управления в широком диапазоне условий функционирования и создают основу для разработки рекомендаций по повышению радиационной стойкости систем управления космических аппаратов.

## Заключение

Предложен графовый подход к анализу отказов БКУ космического аппарата с учётом радиационно-индуцированных ошибок. Ориентированные рёбра графа  $e_{ij} \in E$  описывают направленные потоки ошибок и управляющих сигналов между модулями БКУ. Наличие ребра  $e_{ij}$  означает, что отказ или искажение данных в модуле  $v_i$  может привести к нарушению функционирования модуля  $v_j$ .

Сформулировано понятие направления распространения отказов, определяемого как путь с минимальной надёжностью в графе БКУ. Показано, что выявление такого направления позволяет установить уязвимость системы, не выявляемую на этапе проектирования отдельных компонентов. Анализ движения потоков отказов позволяет

выявить уязвимые узлы, подверженные воздействию внешней среды, визуализировать направления работоспособности системы.

Архитектура БКУ формализована в виде ориентированного графа, позволяющего учитывать функциональные и управляющие связи между модулями системы и моделировать механизмы распространения отказов. Показано, что отказы определяются архитектурой БКУ, а не случайными флуктуациями параметров модели. Это подчёркивает важность архитектурных решений при проектировании бортовых комплексов управления, функционирующих в условиях космического излучения.

Полученные результаты могут быть использованы при анализе и проектировании БКУ космических аппаратов с целью повышения их устойчивости к комплексному воздействию факторов космического пространства и условиям эксплуатации.

### **Финансирование.**

Данная работа финансируется Комитетом по науке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (ИРН BR31714741 «Фундаментальное исследование солнечно-земных связей и их влияния на околоземное космическое пространство и технологическую инфраструктуру»).

### **Вклад авторов.**

**Ошманова А.С.** – проведение исследования, выполнение расчётов и формального анализа, интерпретация полученных результатов, подготовка и написание текста рукописи.

**Грищенко В.В.** – концептуализация исследования, разработка методологии, научное руководство работой, критический анализ и валидация результатов, подготовка первоначального проекта рукописи, рецензирование и редактирование текста.

**Ошманова А.С.** и **Грищенко В.В.** – участие в обсуждении результатов исследования, утверждение окончательного варианта статьи для публикации и согласие нести ответственность за все аспекты работы, включая достоверность представленных данных.

Конфликт интересов соавторов отсутствует.

### **Список литературы**

1. M.A. Xapsos, G.P. Summers, J.L. Barth, Probability model for worst-case solar proton event fluences, IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. 46, No. 6, p. 1481–1485 (1999). <https://doi.org/10.1109/23.819111>.
2. G.C. Messenger, M.S. Ash, The Effects of Radiation on Electronic Systems, Van Nostrand Reinhold, New York (1997).
3. P.E. Dodd, L.W. Massengill, Basic mechanisms and modeling of single-event upset in digital microelectronics, IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. 50, No. 3, p. 583–602 (2003). <https://doi.org/10.1109/TNS.2003.813129>.
4. X. Cao, Y. Liu, H. Wang et al., Comparative study on the soft errors induced by single-event effects and space electrostatic discharge, Electronics, Vol. 10, No. 7, Article 802 (2021). <https://doi.org/10.3390/electronics10070802>.
5. R.C. Baumann, Soft errors in advanced semiconductor devices — Part I: The three radiation

sources, IEEE Transactions on Device and Materials Reliability, Vol. 1, No. 1, p. 17–22 (2001). <https://doi.org/10.1109/7298.946456>.

6. P. Shivakumar, M. Kistler, S. Keckler, D. Burger, L. Alvisi, Modeling the effect of technology trends on the soft error rate of combinational logic, Proceedings of the International Conference on Dependable Systems and Networks, p. 389–398 (2002). <https://doi.org/10.1109/DSN.2002.1028924>.

7. A. Avizienis, J.-C. Laprie, B. Randell, C. Landwehr, Basic concepts and taxonomy of dependable and secure computing, IEEE Transactions on Dependable and Secure Computing, Vol. 1, No. 1, p. 11–33 (2004). <https://doi.org/10.1109/TDSC.2004.2>.

8. M. Modarres, M. Kaminskiy, V. Krivtsov, Reliability Engineering and Risk Analysis, CRC Press, Boca Raton (2016).

9. R. Diestel, Graph Theory, 5th ed., Springer, Berlin (2017).

10. Y. Kermarrec, J. Leduc, Reliability modeling of complex systems using directed graphs, Reliability Engineering & System Safety, Vol. 94, No. 2, p. 359–367 (2009).

11. E. Zio, Reliability engineering: Old problems and new challenges, Reliability Engineering & System Safety, Vol. 94, p. 125–141 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.res.2008.06.002>.

12. G. Levitin, The Universal Generating Function in Reliability Analysis and Optimization, Springer, London (2005).

13. A.H. Johnston, Radiation effects in advanced microelectronics technologies, IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. 45, No. 3, p. 1339–1354 (1998). <https://doi.org/10.1109/23.685206>.

14. D.M. Fleetwood, Total ionizing dose effects in MOS and low-dose-rate-sensitive linear-bipolar devices, IEEE Transactions on Nuclear Science, Vol. 60, No. 3, p. 1706–1730 (2013). <https://doi.org/10.1109/TNS.2013.2259260>.

15. E.L. Petersen, Single-Event Effects in Aerospace, Wiley, Chichester (2011).

16. А.Г. Бровкин, Б.Г. Бурдыгов, С.В. Гордийко и др., Бортовые системы управления космическими аппаратами, учебное пособие, под ред. А.С. Сырова, МАИ-ПРИНТ, Москва, 304 с. (2010).

17. Fault Tree Handbook with Aerospace Applications, NASA/SP-2022-6122, National Aeronautics and Space Administration, Washington, DC (2022).

18. [https://s3vi.ndc.nasa.gov/ssri-kb/static/resources/Fault%20Tree%20Handbook\\_NASA.pdf](https://s3vi.ndc.nasa.gov/ssri-kb/static/resources/Fault%20Tree%20Handbook_NASA.pdf)

19. J. Zhu, X. Yang, L. Wang et al., Graph-based reliability analysis for complex spacecraft electronic systems, Reliability Engineering & System Safety, Vol. 234, Article 108567 (2022).

**А.С. Ошманова<sup>1\*</sup>, В.Ф. Грищенко<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>эл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті, Алматы, Қазақстан

<sup>2</sup>Ионосфера институты, Алматы, Қазақстан

(E-mail: [aizhan.oshmanova@icloud.com](mailto:aizhan.oshmanova@icloud.com), [grischenko.v@ionos.kz](mailto:grischenko.v@ionos.kz))

### **Ғарыш кеңістігі факторларының әсері жағдайында ғарыш аппараттарының борттық басқару кешендерінің істен шығуын талдау**

**Аңдатпа.** Әртүрлі мақсаттағы ғарыш аппараттарын (ҒА) пайдалану барысында борттық электрондық аппаратурада істен шығулар пайда болуы мүмкін. Мұндай жағдайлар штаттан тыс

режимдердің дамуына, кейбір жағдайларда тіпті спутниктердің толық жоғалуына алып келеді. Әдетте мұндай ақаулар ғарыш аппаратының борттық басқару кешенінде (ББК) туындайды. Көптеген зерттеушілер бұл ақаулардың негізгі себептерінің бірі ретінде Жер маңындағы ғарыш кеңістігіндегі (ЖМҒК) иондаушы сәулеленудің әсерін көрсетеді. Сондықтан Жер маңындағы ғарыш кеңістігі факторларының кешенді әсері жағдайында ғарыш аппаратының борттық басқару кешенінің жұмысын бағалау аса маңызды міндет болып табылады.

Жұмыста қателердің таралуын сипаттайтын ББК-нің бағытталған графтары ұсынылған, сондай-ақ графтың төбелері мен қабырғалары арасындағы өзара байланыстар сипатталған. Функционалдық модульдердің ықтималдықтық сипаттамалары негізінде жүйенің құрылымдық тұрғыдан ең осал элементтерін анықтайтын қателердің таралу бағытын сәйкестендіру әдістемесі әзірленді.

Зерттеу нәтижелері ББК-дегі ақаулардың модель параметрлерінің кездейсоқ флуктуацияларымен емес, жүйе архитектурасымен анықталатынын көрсетті. Ұсынылған ақаулардың таралу бағыты параметрі ғарыш кеңістігі факторларының кешенді әсері жағдайында басқару жүйесінің жұмысына ықпал ететін функционалдық түйіндердің осалдық деңгейін анықтауға мүмкіндік береді. Алынған нәтижелер ғарыш аппараттарының борттық басқару кешендерін жобалау кезінде оларды ғарыш кеңістігі факторларының кешенді әсеріне және пайдалану жағдайларына төзімділігін арттыру мақсатында қолданылуы мүмкін.

**Түйін сөздер:** борттық басқару кешені, радиациямен индукцияланған қате, бағытталған граф, істен шығу, ғарыш аппараты.

**A.S. Oshmanova<sup>1\*</sup>, V.F. Grishchenko<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Kazakh National University. al-Farabi, Almaty, Kazakhstan*

<sup>2</sup> *Institute of Ionosphere, Almaty, Kazakhstan*

*(E-mail: aizhan.oshmanova@icloud.com, grischenko.v@ionos.kz)*

### **Failure Analysis of Spacecraft Onboard Control Complexes under the Influence of Space Environment Factors**

**Abstract.** During the operation of spacecraft designed for various missions, failures may occur in onboard electronic equipment, which can lead to off-nominal situations and, in some cases, even to the loss of satellites. As a rule, such failures arise in the spacecraft's onboard control complex (OCC). Many researchers associate these failures with the effects of ionizing radiation in the near-Earth space environment (NESE). Therefore, evaluating the performance of spacecraft onboard control complexes under the combined influence of near-Earth space environmental factors is an important and necessary task.

Directed graphs of the onboard control complex are presented to describe the propagation of errors, and the relationships between graph vertices and edges are analyzed. Based on the probabilistic characteristics of functional modules, a methodology has been developed to identify the direction of error propagation that determines the highest structural vulnerability of the system.

The results show that failures of the onboard control complex are determined primarily by the system architecture rather than by random fluctuations of model parameters. The proposed parameter

describing the direction of failure propagation makes it possible to identify vulnerable functional nodes affecting the operation of the control system under the combined influence of space environment factors. The obtained results can be applied in the design of spacecraft onboard control complexes in order to improve their resilience to the combined effects of space environment factors and operational conditions.

**Keywords:** onboard control system, radiation-induced error, directed graph, failure, spacecraft.

## References

1. M.A. Xapsos, G.P. Summers, J.L. Barth, Probability model for worst-case solar proton event fluences, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, Vol. 46, No. 6, p. 1481–1485 (1999). <https://doi.org/10.1109/23.819111>.
2. G.C. Messenger, M.S. Ash, *The Effects of Radiation on Electronic Systems*, Van Nostrand Reinhold, New York (1997).
3. P.E. Dodd, L.W. Massengill, Basic mechanisms and modeling of single-event upset in digital microelectronics, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, Vol. 50, No. 3, p. 583–602 (2003). <https://doi.org/10.1109/TNS.2003.813129>.
4. X. Cao, Y. Liu, H. Wang et al., Comparative study on the soft errors induced by single-event effects and space electrostatic discharge, *Electronics*, Vol. 10, No. 7, Article 802 (2021). <https://doi.org/10.3390/electronics10070802>.
5. R.C. Baumann, Soft errors in advanced semiconductor devices — Part I: The three radiation sources, *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability*, Vol. 1, No. 1, p. 17–22 (2001). <https://doi.org/10.1109/7298.946456>.
6. P. Shivakumar, M. Kistler, S. Keckler, D. Burger, L. Alvisi, Modeling the effect of technology trends on the soft error rate of combinational logic, *Proceedings of the International Conference on Dependable Systems and Networks*, p. 389–398 (2002). <https://doi.org/10.1109/DSN.2002.1028924>.
7. A. Avizienis, J.-C. Laprie, B. Randell, C. Landwehr, Basic concepts and taxonomy of dependable and secure computing, *IEEE Transactions on Dependable and Secure Computing*, Vol. 1, No. 1, p. 11–33 (2004). <https://doi.org/10.1109/TDSC.2004.2>.
8. M. Modarres, M. Kaminskiy, V. Krivtsov, *Reliability Engineering and Risk Analysis*, CRC Press, Boca Raton (2016).
9. R. Diestel, *Graph Theory*, 5th ed., Springer, Berlin (2017).
10. Y. Kermarrec, J. Leduc, Reliability modeling of complex systems using directed graphs, *Reliability Engineering & System Safety*, Vol. 94, No. 2, p. 359–367 (2009).
11. E. Zio, Reliability engineering: Old problems and new challenges, *Reliability Engineering & System Safety*, Vol. 94, p. 125–141 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.ress.2008.06.002>.
12. G. Levitin, *The Universal Generating Function in Reliability Analysis and Optimization*, Springer, London (2005).
13. A.H. Johnston, Radiation effects in advanced microelectronics technologies, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, Vol. 45, No. 3, p. 1339–1354 (1998). <https://doi.org/10.1109/23.685206>.
14. D.M. Fleetwood, Total ionizing dose effects in MOS and low-dose-rate-sensitive linear-bipolar devices, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, Vol. 60, No. 3, p. 1706–1730 (2013). <https://doi.org/10.1109/TNS.2013.2259260>.
15. E.L. Petersen, *Single-Event Effects in Aerospace*, Wiley, Chichester (2011).

16. A.G. Brovkin, B.G. Burdygov, S.V. Gordiyko et al., Bortovye sistemy upravleniya kosmicheskimi apparatami [Onboard control systems of spacecraft], training manual [uchebnoe posobie], edited by A.S. Syrova, MAI-PRINT, Moskva, 304 p. (2010). [in Russian]
17. Fault Tree Handbook with Aerospace Applications, NASA/SP-2022-6122, National Aeronautics and Space Administration, Washington, DC (2022).
18. [https://s3vi.ndc.nasa.gov/ssri-kb/static/resources/Fault%20Tree%20Handbook\\_NASA.pdf](https://s3vi.ndc.nasa.gov/ssri-kb/static/resources/Fault%20Tree%20Handbook_NASA.pdf)
19. J. Zhu, X. Yang, L. Wang et al., Graph-based reliability analysis for complex spacecraft electronic systems, Reliability Engineering & System Safety, Vol. 234, Article 108567 (2022).

#### **Сведения об авторах:**

**Ошманова А.С.** – автор для корреспонденции, докторант PhD, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, пр. аль-Фараби, 72, 050040, Алматы, Казахстан.

**Грищенко В.Ф.** – к. ф.-м. н., доцент, Институт ионосферы, ул. Ионосфера, 117, Алматы, 050020, Казахстан.

**Oshmanova A.S.** – the corresponding author, Doctoral student, Al-Farabi Kazakh National University, Al-Farabi Ave. 72, 050040, Almaty, Kazakhstan.

**Grichshenko V.F.** – Supervisor, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Institute of Ionosphere, Ionosfera St. 117, Almaty, 050020, Kazakhstan

**Ошманова А.С.** – хат-хабар авторы, докторант, әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университеті, әл-Фараби көшесі 72, 050040, Алматы қаласы, Қазақстан.

**Грищенко В.Ф.** – физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, Ионосфера институты, Ионосфера көшесі 117, Алматы, 050020, Қазақстан



Copyright: © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



МРНТИ 539.371; 539.1.09

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-84-103>

Научная статья

## Роль реакционных фазовых трансформаций в композитных керамиках в изменении прочностных и теплофизических характеристик

Р. Елшибеков<sup>1\*</sup>, Ш.Г. Гиниятова<sup>1,2</sup>, Ш. Хаметов<sup>1,2</sup>, Г.А. Баймбетова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

<sup>2</sup>РГП на ПХВ Институт ядерной физики АРКАЭ, Алматы, Казахстан

(E-mail: e\_rinat92@mail.ru, giniyatova\_shg@enu.kz, khametov@inp.kz, bgulzada\_74@mail.ru)

**Аннотация.** В работе приведены результаты оценки влияния вариации соотношения компонентов в композитных  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамиках на изменение фазового состава, обусловленного инициализацией реакционных фазовых трансформаций, а также определение роли фазовых трансформаций на изменение прочностных и теплофизических характеристик. Установлено, что управление фазовым составом композитных  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамик позволяет целенаправленно оптимизировать их прочностные свойства, а наиболее благоприятное сочетание прочностных характеристик достигается при промежуточных концентрациях SiC, равной 0.2–0.3 М, обеспечивающих высокий уровень механической надежности материалов в условиях интенсивных внешних воздействий. Результаты термошоковых испытаний подтверждают, что наиболее высокая устойчивость к резким температурным воздействиям реализуется в композитных  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамиках с содержанием SiC, равным 0,2–0,3 М, при которых обеспечивается оптимальный баланс между теплопроводностью, механической прочностью и способностью структуры к релаксации термически индуцированных напряжений. Полученные данные этой работы имеют важное практическое значение для оценки работоспособности данных материалов в условиях нестационарных температурных режимов и аварийных ситуаций, характерных для эксплуатации инертных матриц дисперсного ядерного топлива.

**Ключевые слова:** композитные керамики, карбид кремния, упрочнение, термошоковое воздействие, твердость, индуцированные напряжения функция, ықтималдылық тығыздығы, квантты-механикалық орташа, оператор, тығыздық матрицасы, үлестірім функциясы.

Поступила 12.02.2026. После доработки 27.02.2026. Принята к печати 27.02.2026.

Доступно онлайн 30.03.2026.

\*автор для корреспонденции

## **Введение**

Интерес к разработкам и научно-исследовательским работам, направленным на изучение керамических материалов и их устойчивости к внешним воздействиям, обусловлен широким спектром потенциального применения керамик. Это связано с их высокими показателями твердости, химической инертности по отношению к большинству агрессивных сред, износостойкости и жаростойкости. Совокупность данных свойств позволяет рассматривать керамические материалы в качестве конструкционных и функциональных материалов, способных эффективно эксплуатироваться в экстремальных условиях [1,2]. При этом одной из ключевых проблем керамик, несмотря на высокие показатели твердости, большинство керамик являются достаточно хрупкими материалами, что приводит к тому, что даже наличие малого количества дефектов может привести к снижению прочности, а также ограничить потенциал использования при экстремальных условиях, связанных в первую очередь с воздействием высоких температур или механических нагрузок [3,4]. Ввиду высокой хрупкости керамик, их применение в ряде инженерных задач может быть ограничено, особенно там, где конструкции подвергаются ударным нагрузкам, вибрациям, резким перепадам температуры и циклическому нагружению [5,6]. При высокотемпературных режимах эксплуатации, резкое изменение температуры может привести к возникновению температурных градиентов по толщине керамик, что в свою очередь обусловлено различиями в теплофизических свойствах керамик [7–9]. Формирование температурных градиентов приводит к инициализации термически-индуцированных деформационных напряжений растягивающего и сжимающего типов, величины которых могут значительно превышать прочностные характеристики керамик. В результате формируются микротрещины, эволюция которых при дополнительных внешних нагрузках или циклических термических воздействиях может привести к образованию макротрещин с последующим разрушением и растрескиванием. Особенно опасным является то, что микрповреждения часто остаются скрытыми на ранних стадиях, но при дальнейшем воздействии нагрузки становятся центрами концентрации напряжений и ускоряют деградацию материала [10–12].

Помимо термошоковых воздействий, существует множество других факторов, способных инициировать повреждения и разрушение конструкций из композитных материалов, включая керамические композиты [13,14]. К таким факторам относятся циклические механические нагрузки, ударные воздействия, ползучесть при высоких температурах, абразивный износ, эрозия потоком частиц, химическая коррозия, окисление и воздействие агрессивных газовых или жидких сред. В композитных материалах дополнительными механизмами разрушения могут выступать расслоение, потеря сцепления на границе «матрица-армирование», выкрашивание, образование пор и дефектов в процессе эксплуатации [15]. Интерес к данным типам керамических материалов, в особенности к изменению их теплофизических параметров обусловлен необходимостью повышения эффективности механизмов теплопередачи в композитных керамиках, рассматриваемых как кандидатные материалы для

инертных матриц дисперсного ядерного топлива. Увеличение теплопроводности керамик необходимо для снижения вероятности возникновения локальных областей перегрева при эксплуатации, а также возможности беспрепятственного отвода тепла, возникающего в процессе деления, тем самым снижая термическую нагрузку на керамические материалы инертных матриц. Кроме того, эксплуатационные условия часто носят комбинированный характер: например, одновременно действуют высокие температуры, механические вибрации и химически активная среда. В таких случаях процесс разрушения становится более сложным и ускоренным, а вероятность внезапного отказа конструкции возрастает. Именно поэтому разработка керамических и керамико-композитных материалов с повышенной устойчивостью к трещинообразованию и с возможностью самовосстановления микрповреждений рассматривается как перспективное направление, способное существенно повысить надежность и ресурс высокотемпературных и высоконагруженных компонентов.

### **Материалы и методы**

В качестве объекта для исследования в данной работе были выбраны композитные  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамики, которые являются одними из кандидатных материалов для использования в качестве материалов инертных матриц дисперсного ядерного топлива. Интерес к данному типу композитных керамик обусловлен сочетанием высокой термодинамической стабильности, химической инертности по отношению к топливным фазам и продуктам деления, а также высокой радиационной стойкости, позволяющей сдерживать воздействие, как осколков деления, так и продуктов ядерных реакций в виде гелия или водорода. При этом, несмотря на относительно невысокую теплопроводность чистого диоксида циркония (порядка 1,7–2,5 Вт/(м·К)), его использование в составе композитных и многофазных керамик позволяет компенсировать данный недостаток за счёт введения высокотеплопроводных фаз или оптимизации микроструктуры материала. Выбор карбида кремния в качестве модифицирующей добавки к диоксиду циркония обусловлен возможностью повышения теплофизических свойств материала за счет формирования теплопроводящих путей, связанных с более высокой теплопроводностью карбида кремния. Кроме того, введение карбида кремния способствует повышению сопротивляемости материала внешним воздействиям благодаря образованию дополнительных межфазных границ, которые препятствуют распространению трещин при изменении внешних нагрузок. В частности, добавление карбида кремния (SiC) в состав  $\text{ZrO}_2$  может рассматриваться как один из эффективных подходов к целенаправленной модификации структурных, механических и теплофизических характеристик керамических матриц, в том числе предназначенных для применения в составе инертных матриц дисперсного ядерного топлива.

Синтез композитных керамических материалов состава  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  осуществлялся с применением метода механохимического твердофазного перемалывания исходных порошков с последующим высокотемпературным спеканием в кислородосодержащей среде. На первом этапе проводили тщательное смешение и механическую активацию

порошков диоксида циркония и карбида кремния, что позволяло повысить их реакционную способность, улучшить распределение компонентов по объему смеси и сформировать более однородную микроструктуру будущего композита.

Механохимическая обработка способствовала измельчению частиц, увеличению удельной поверхности, накоплению дефектов кристаллической решетки и активации межфазных взаимодействий между  $ZrO_2$  и SiC. Данный подход является эффективным для получения композитов с мелкодисперсной структурой, поскольку позволяет снизить диффузионные барьеры и ускорить процессы спекания. После стадии перемалывания полученную порошковую смесь подвергали формованию, а затем высокотемпературному спеканию.

Спекание проводилось в кислородосодержащей атмосфере, что являлось принципиально важным условием для формирования функциональных свойств композита. В таких условиях происходило частичное окисление SiC с образованием  $SiO_2$ , который может выступать в роли «заполняющей» фазы и участвовать в механизмах самозалечивания микротрещин. Кроме того, взаимодействие продуктов окисления с матрицей  $ZrO_2$  способствовало формированию прочной межфазной связи и стабилизации структуры композитного материала.

После механохимической обработки, полученные порошковые смеси подвергались высокотемпературному спеканию в муфельной печи Nabertherm LE 4/11/R6 (Nabertherm, Лилиенталь, Германия), обеспечивающей точный контроль температурного режима и стабильность атмосферы в рабочей камере. Перед спеканием порошки формовали в образцы требуемой геометрии методом одноосного прессования, что позволяло получить заготовки с достаточной механической прочностью для последующей термообработки.

Спекание осуществлялось при температуре 1500 °C с выдержкой при заданной температуре в течение 5 часов. Выбор данной температуры обусловлен необходимостью интенсификации диффузионных процессов, активации межфазного взаимодействия компонентов и достижения высокой степени уплотнения материала. Продолжительная изотермическая выдержка способствовала снижению остаточной пористости, формированию прочных межзеренных контактов и развитию устойчивой микроструктуры композита. Скорость нагрева составляла 20 °C/мин, что позволяло минимизировать возникновение термических напряжений, связанных с резкими температурными градиентами, и обеспечить равномерное протекание процессов уплотнения, спекания и рекристаллизации по всему объему образца. Контролируемый режим нагрева также снижал вероятность образования макро- и микротрещин на ранних стадиях термообработки, что особенно важно для хрупких керамических материалов.

Изучение прочностных характеристик осуществлялось с использованием метода индентирования, реализованного на микротвердомере Durolin M1 (Metkon, Бурса, Турция). Определение твердости приповерхностных слоев керамик было проведено с использованием алмазного индентера в виде пирамидки Виккерса, нагрузка на индентер при измерении составляла порядка 50 Н, что позволило определить изменение твердости на глубине порядка 300 – 500 нм. При измерении твердости, каждое последующее индентирование осуществлялось на расстоянии не менее 10 – 30 мкм

друг от друга с целью исключения эффектов перекрытия трещин и деформированных зон, образующихся в результате индентирования. Измерение прочностных свойств осуществлялось на образцах, запрессованных в таблетки.

Определение трещиностойкости осуществлялось путем определения размеров отпечатка индентера и его формы, отражающей деформацию поверхности при индентировании. На основании проведенных измерений оценивалась величина критического коэффициента интенсивности напряжений ( $K_{IC}$ ), характеризующей способность материала сопротивляться хрупкому разрушению при наличии трещины в условиях внешних механических нагрузок, сравнительный анализ которой позволил определить кинетику изменения устойчивости керамик к внешним воздействиям и определить роль армирующего эффекта при изменении фазового состава керамик.

Определение прочности на сжатие проводилось с применением испытательной машины LFM-L 10kN (Walter + Bai AG, Лёнинген, Швейцария). Испытания образцов проводились путем их сжатия в специальных держателях, использование которых позволило определить величину максимального давления, выдерживаемого образцами при их растрескивании.

Определение теплофизических параметров керамик проводилось с использованием метода определения изменений продольного теплового потока, реализованного с использованием прибора измерителя теплопроводности КИТ-800 (КБ Теплофон, Россия). Измерение теплофизических параметров исследуемых керамик было осуществлено с применением метода определения измерений продольного теплового потока, когда нагрев осуществляется путем размещения образца на нагревателе с последующим контролем разницы температур с обеих сторон образца в широком диапазоне изменений температуры нагрева. Данный подход основан на регистрации величины теплового потока, проходящего через образец при заданном температурном градиенте, и последующем расчете коэффициента теплопроводности по закону Фурье для одномерного теплопереноса. Для описания механизмов теплопередачи и изменений теплофизических свойств керамик использовалась модель фононной передачи тепла в образцах.

Испытание на устойчивость керамик к процессам термошокового воздействия были осуществлены с использованием методики, при которой образцы керамик подвергаются быстрому нагреву в муфельной печи до температуры 1500 °С, выдерживаются при ней в течение 1 часа, после чего извлекаются на воздух, тем самым создавая резкий перепад температурного воздействия на образец при его извлечении из камеры печи на воздух. Количество циклов повторений подобных экспериментов составило не менее 5 циклов в серии, что позволило оценить кинетику деструкции керамик в процессе термошокового воздействия. После каждого цикла испытаний образцы подвергались оценке изменения прочностных характеристик с целью выявления изменений и определения влияния термического воздействия обусловленного резким градиентом температурного воздействия на прочностные характеристики.

Испытания на устойчивость квысокотемпературному старению образцов композитных керамик осуществлялись путем проведения экспериментов по размещению образцов

композитных керамики в муфельной печи с последующим нагревом ее до температуры 1000 °С и выдержке образцов в ней в течение 500 часов, что позволило имитировать длительное температурное воздействие на структуру керамики, а также изменение их прочностных характеристик в зависимости от состава. По окончании экспериментов были оценены прочностные и теплофизические характеристики исследуемых керамики, результаты которых позволили определить влияние высокотемпературного воздействия на деградацию характеристик керамики.

### Результаты и обсуждение

В таблице 1 приведены результаты оценки фазового состава керамики в зависимости от вариации соотношения компонент в составе  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамики после термического спекания.

**Таблица 1. Данные фазового состава  $(1-x)\text{ZrO}_2 - x\text{SiC}$  керамики**

Фаза	Концентрация SiC в составе керамики, М						
	0	0.05	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
ZrO <sub>2</sub> моноклинная	100	86±3	72±4	60±4	25±2	-	-
SiC гексагональная	-	8±1	11±2	15±2	25±3	29±2	27±2
SiO <sub>2</sub> тетрагональная	-	2±1	2±1	4±1	4±1	6±2	8±2
ZrSiO <sub>4</sub> тетрагональная	-	4±1	14±2	21±2	46±4	65±3	65±3

Согласно оценке фазовых трансформаций в составе  $(1-x)\text{ZrO}_2 - x\text{SiC}$  керамики при малых концентрациях компонента SiC в составе, доминирующую роль играет моноклинная фаза ZrO<sub>2</sub>, в то время как при увеличении SiC в структуре наблюдается возникновение реакционных фазовых трансформаций типа  $m\text{-ZrO}_2 \rightarrow t\text{-ZrSiO}_4$ , что в свою очередь приводит к изменению соотношения весовых вкладов фаз, а также полному доминированию фазы циркона  $t\text{-ZrSiO}_4$  в составе при концентрациях SiC выше 0.3 М.

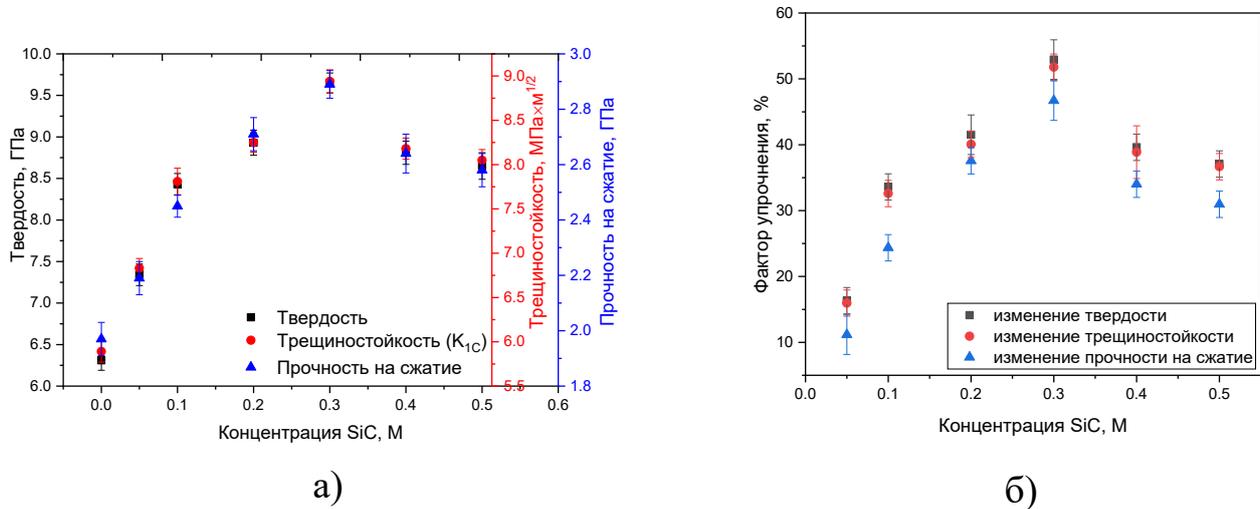
Немаловажную роль в изменении фазового состава композитных керамики играет определение их прочностных и теплофизических характеристик. Вариация соотношения компонент в составе композитных керамики, как правило, приводит к инициализации формирования дополнительных межфазных границ, возникающих при смешивании двух компонент в составе, а также в результате фазовых трансформаций или процессов формирования твердого раствора в случае слаборастворимых компонент [16, 17]. Наличие межфазных границ в составе керамики, а также изменение их плотности при

вариации соотношения компонент, и как следствие, изменению весовых долей фаз в составе керамик, оказывает существенное влияние на механизмы перераспределения напряжений в материале, процессы торможения и отклонения трещин, а также на сопротивление разрушению при статических и динамических нагрузках. Также изменение размеров зерен, связанное с формированием мелкодисперсной фракции, равномерно распределённой в межфазной структуре, способствует повышению трещиностойкости и прочности композитной керамики за счёт активации механизмов микротрещинообразования, межфазного скольжения и рассеяния энергии разрушения.

На рисунке 1 приведены результаты изменения морфологических особенностей синтезированных керамик в зависимости от вариации соотношения компонент в составе, отражающие влияние фазовых трансформаций на форму и расположение зерен в составе керамик, а также формирование межфазных границ в процессе спекания. Согласно представленным данным видно, что изменение прочностных характеристик исследуемых образцов керамик носит явно нелинейный характер и определяется не только изменением весовых вкладов компонент в составе, но и фазовыми трансформациями, происходящими при термическом отжиге образцов. В случае малых концентраций SiC, равной 0.05 М, согласно данным фазового анализа в структуре доминирует фаза  $ZrO_2$ , а также присутствуют включения в виде фазы  $ZrSiO_4$  и SiC, весовые вклады которых составляют менее 15 вес. %, что приводит к малым изменениям прочностных характеристик исследуемых композитных керамик. В данном случае малые изменения обусловлены тем, что изолированные SiC частицы, в также включения  $ZrSiO_4$ , не обеспечивают эффективного армирующего эффекта, тем самым упрочнение керамик относительно  $ZrO_2$  незначительно и составляет порядка 10 – 15 %. Увеличение доли SiC в составе композитных керамик до 0,1–0,3 М приводит к практически линейному характеру увеличения прочностных характеристик, а максимум значений прочностных параметров наблюдается для образцов 0.7  $ZrO_2$ –0.3 SiC фазовый состав которых представлен смесью трех фаз, доминирующей фазой  $ZrSiO_4$  и равным содержанием  $ZrO_2$  и SiC, с небольшими включениями в виде  $SiO_2$  фазы, наличие которой обусловлено процессами термического окисления карбида кремния при спекании. В данном случае увеличение прочностных характеристик исследуемых керамик обусловлено формированием развитой сети межфазных границ, изменением размеров зерен и их плотностью, создающих армирующий эффект за счет формирования SiC и  $ZrSiO_4$  в составе. При этом следует отметить, что включения  $ZrSiO_4$  выступают в роли переходных слоев, снижающие локальные концентрации напряжений на границах  $ZrO_2$ /SiC зерен.

При концентрациях SiC выше 0.3 М наблюдаемый тренд снижения прочностных характеристик обусловлен доминированием в составе  $ZrSiO_4$  фазы, а также полным вытеснением фазы  $ZrO_2$  в результате реакционных фазовых трансформаций типа  $ZrO_2 + SiO_2 \rightarrow ZrSiO_4$ , завершение которых при росте весового вклада SiC приводит к увеличению доли оксида кремния, наличие которого негативно сказывается на прочностных характеристиках керамик, а также достижением эффекта насыщения структуры и повышением хрупкости керамики за счет эффекта структурной неоднородности, что

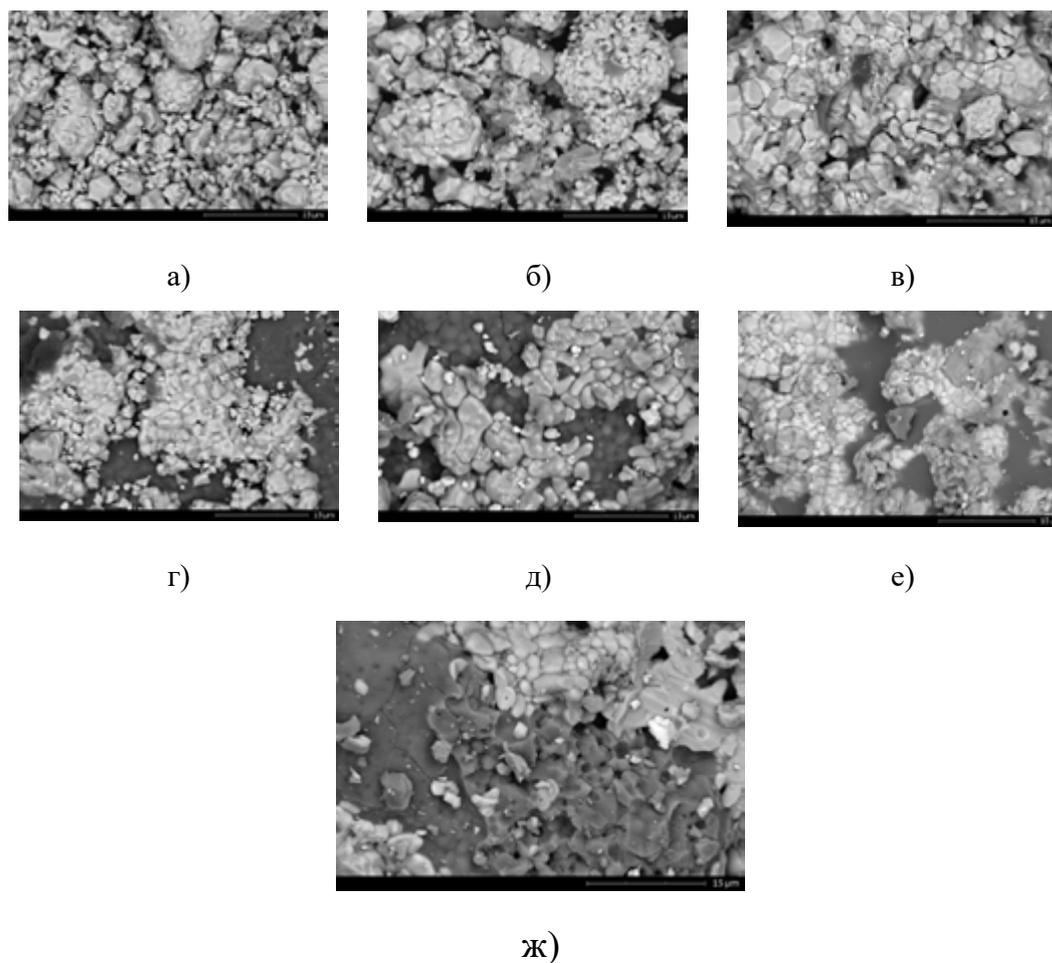
наглядно демонстрируют результаты морфологических особенностей приведенные на рисунке 2.



**Рисунок 1. Результаты изменения прочностных характеристик композитных (1-x) ZrO<sub>2</sub> - xSiC керамик: а) результаты оценки изменений твердости, трещиностойкости и прочности на сжатие при вариации соотношения компонент в составе; б) результаты оценки факторов упрочнения керамик в зависимости от вариации соотношения компонентов в составе**

На рисунке 1б приведены результаты оценки изменения факторов упрочнения, рассчитанных для исследуемых образцов путем сравнения результатов твердости, трещиностойкости и прочности на сжатие образцов ZrO<sub>2</sub> без добавления SiC с результатами, полученными для образцов (1-x)ZrO<sub>2</sub>-xSiC керамик в случае вариации соотношения компонент в составе, приводящих к изменению фазового состава. Результаты факторов упрочнения свидетельствуют о влиянии фазового состава, а также изменений, связанных с протеканием реакционных фазовых трансформаций в составе керамик, оказывающих непосредственное влияние на изменение устойчивости керамик и их прочностные свойства. Максимально достигаемое значение упрочнения (повышение твердости, трещиностойкости, прочности на сжатие) наблюдается при концентрациях SiC равной 0,2–0,3 М, и составляет порядка 45–50 % в сравнении с результатами, полученными для керамик ZrO<sub>2</sub>. Одним из основных механизмов упрочнения является армирование оксидной матрицы ZrO<sub>2</sub> частицами SiC, связанным с формированием межфазных границ, а также сдерживанию процессов кристаллизации зерен ZrO<sub>2</sub> в крупные агломераты в процессе спекания, что наглядно видно из результатов оценки морфологических особенностей, приведенных на рисунке 2. Добавление SiC и механохимическая активация способствуют уменьшению среднего размера зерен ZrO<sub>2</sub> и подавлению их аномального роста при спекании. Уменьшение размера зерен приводит к увеличению плотности границ зерен, которые препятствуют зарождению и распространению микротрещин. В результате возрастает твердость и прочность керамик. При этом в случае

концентраций 0.05 – 0.1 М, результаты упрочнения композитных керамик обусловлены формированием устойчивой  $ZrO_2$  матрицы с включениями в виде мелкодисперсной фракции SiC, при этом формирование  $ZrSiO_4$  приводит к созданию буферных слоев между зернами карбида кремния и диоксида циркония. В случае концентраций SiC 0,2–0,3 М, наблюдается значительное изменение морфологических особенностей, обусловленное формированием матрицы из SiC с включениями в виде мелкодисперсной фракции  $ZrO_2$  зерен, плотно упакованных вместе с включениями в виде  $ZrSiO_4$ .



**Рисунок 2. Результаты морфологических особенностей композитных (1-х)  $ZrO_2 - xSiC$  керамик, полученные с применением метода растровой электронной микроскопии: а) исходный  $ZrO_2$ ; б) при добавлении 0.05 М SiC; в) при добавлении 0.1 М SiC; г) при добавлении 0.2 М SiC; д) при добавлении 0.3 М SiC; е) при добавлении 0.4 М SiC; ж) при добавлении 0.5 М SiC**

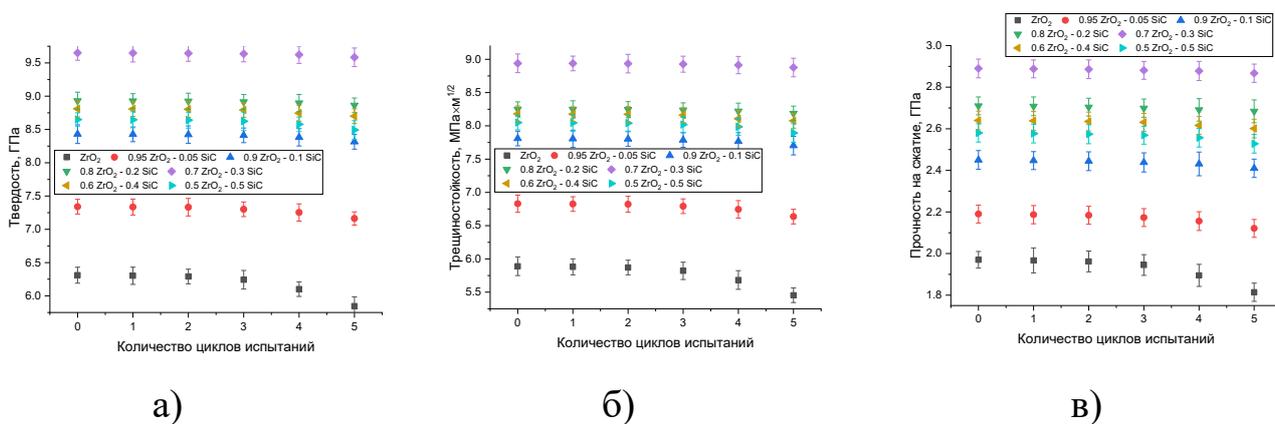
Увеличение трещиностойкости в случае композитных керамик обусловлено тем, что трещины, образующиеся в результате внешних механических воздействий вынуждены распространяться по более сложным траекториям, огибая твердые частицы SiC и

межфазные области. Это приводит к увеличению эффективной длины пути трещины, снижению концентрации напряжений в ее вершине и повышению сопротивления хрупкому разрушению. При этом изменение соотношения фаз в составе за счет доминирования  $ZrSiO_4$  приводит к уменьшению количества граничных эффектов, что наглядно продемонстрировано на рисунках 2е – 2ж, что в свою очередь обуславливает снижение устойчивости к растрескиванию, а также прочностных характеристик.

Одной из важных характеристик композитных керамик, рассматриваемых в качестве материалов инертных матриц дисперсного ядерного топлива, является их устойчивость к термическим и термошоковым воздействиям, которые могут возникнуть в процессе их эксплуатации в случае аварийных или непредвиденных ситуаций, связанных с нарушением теплоотвода, изменением режимов охлаждения или локальным перегревом топливных элементов. Сами по себе термошоковые воздействия представляют собой резкое изменение температуры образцов, что может привести к резкому снижению прочностных характеристик керамик за счет формирования термически-индуцированных напряжений, возникающих при градиенте температурного воздействия, процессов окисления в результате воздействия воздушной охлажденной среды на горячую поверхность керамик. При превышении критического уровня таких напряжений происходит инициирование и развитие микротрещин, что сопровождается резким снижением механической прочности и трещиностойкости материала. В условиях быстрого охлаждения возможно протекание процессов окисления карбидной фазы SiC и формирования поверхностных оксидных слоев, отличающихся по теплофизическим и механическим свойствам от основного материала. Образование таких слоев приводит к возникновению дополнительных внутренних напряжений на границе «оксидный слой – объем керамики», что способствует ускоренному зарождению поверхностных трещин и их дальнейшему распространению вглубь материала.

На рисунке 3 приведены результаты оценки изменений прочностных характеристик в ходе термошоковых испытаний в зависимости от количества циклов воздействия, отражающие влияние градиентов температур, возникающих в результате извлечения образцов из горячей камеры на воздух на устойчивость прочностных характеристик. Общий характер наблюдаемых изменений прочностных характеристик отражает степень деградации параметров при увеличении количества циклов, свидетельствующий о накопительном эффекте деструкции, вызванной резким изменением температуры воздействия на образцы при извлечении их на воздух. При этом Анализ изменения прочностных характеристик после термошокового воздействия свидетельствует о различной степени деградации прочностных свойств в зависимости от содержания карбида кремния. Согласно представленным данным, максимальная степень деградации прочностных характеристик наблюдается для  $ZrO_2$  керамик, в то время как для образцов с добавлением SiC тренды снижения прочностных свойств имеют гораздо меньшую зависимость от количества циклов и меньшие изменения при большом количестве последовательных воздействий. В данном случае выраженное снижение устойчивости к деградации, установленное для образцов  $ZrO_2$  керамик в

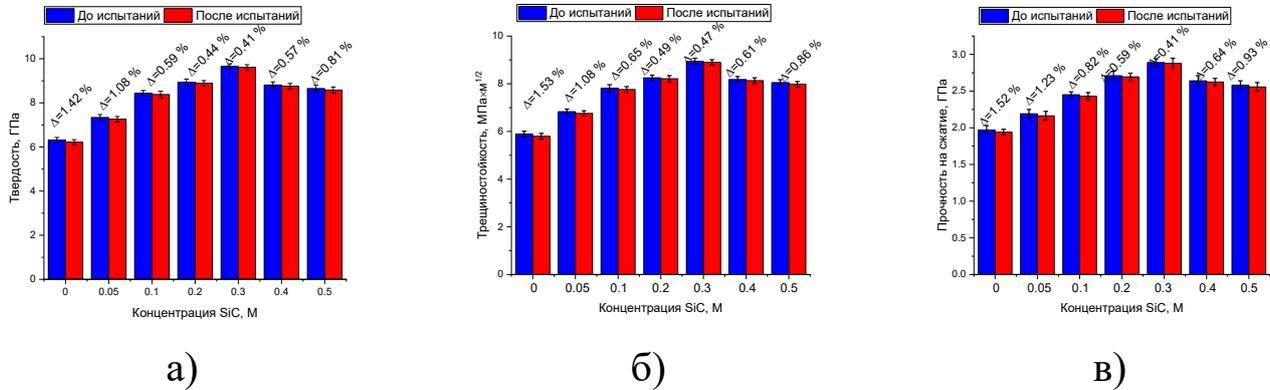
сравнении с другими типами керамик обусловлено различием теплопроводности, значение которой для  $ZrO_2$  значительно меньше, чем для композитных керамик, в результате чего возникает высокий температурный градиент, способствующий росту термически – индуцированных деформационных напряжений. Максимальное снижение устойчивости прочностных параметров для  $ZrO_2$  керамик после 5 последовательных циклов термошокового воздействия составляет порядка 7,5–8 % от начальных значений, в то время как для композитных керамик данное изменение составляет от 1 до 2 % в зависимости от фазового состава керамик, обусловленному вариацией соотношения компонентов в составе.



**Рисунок 3. Результаты термошоковых испытаний композитных  $(1-x)ZrO_2 - xSiC$  керамик: а) результаты изменения твердости; б) результаты изменения трещиностойкости; в) результаты прочности на сжатие**

На рисунке 4 приведены результаты изменения прочностных характеристик исследуемых керамик в случае длительного воздействия высоких температур. Общий тренд изменений прочностных характеристик после термического отжига в течение 500 часов показал малые изменения значений твердости, трещиностойкости и прочности на сжатие, что свидетельствует о достаточно высокой стабильности прочностных свойств керамик к температурным воздействиям без каких-либо дополнительных внешних воздействий. Максимальное изменение прочностных характеристик для исследуемых образцов наблюдается для  $ZrO_2$  керамик, для которых термическое воздействие в течение 500 часов приводит к снижению прочностных параметров порядка 1,4–1,5 % от начальных значений. При этом изменение фазового состава за счет добавления в состав SiC и образования силикатных фаз приводит к уменьшению разницы между значениями прочностных характеристик до и после испытаний, которое составляет менее 0,5 % для образцов  $0,8 ZrO_2-0,2 SiC$  и  $0,7 ZrO_2-0,3 SiC$  керамик. Следует также отметить, что доминирование в составе керамик фазы  $ZrSiO_4$  и вытеснение фазы  $ZrO_2$  приводит к увеличению разницы значений прочностных характеристик после

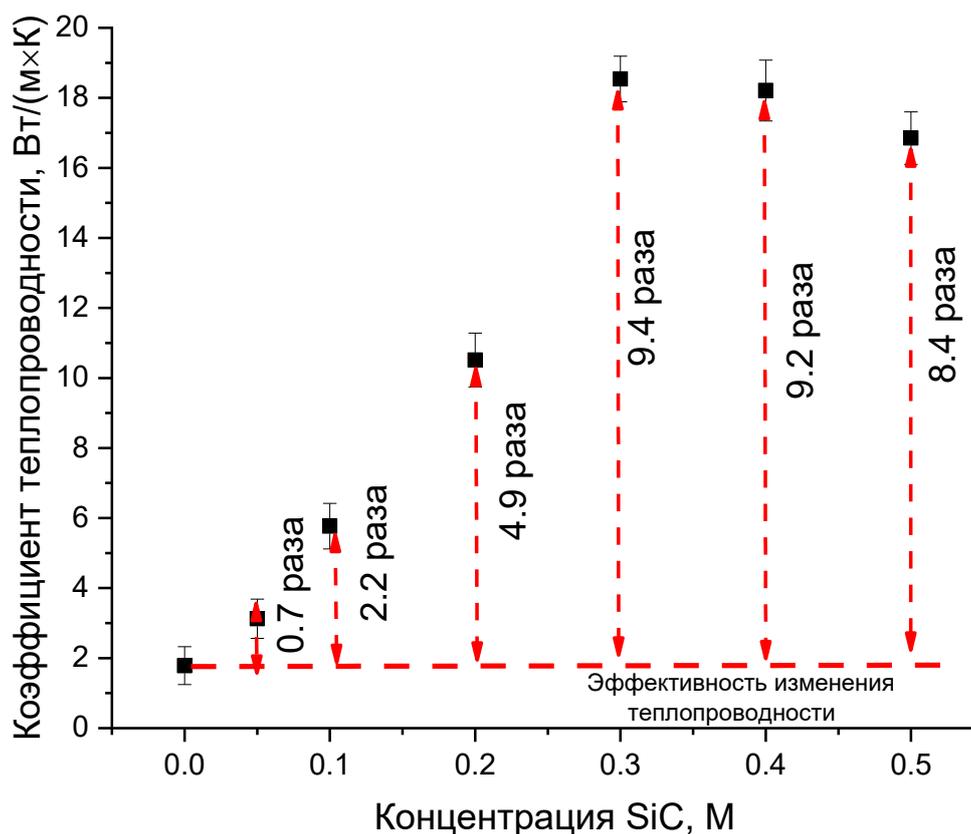
высокотемпературного воздействия, что обусловлено снижением количества межфазных границ в составе композитных керамик, также обусловленных изменением фазового состава.



**Рисунок 4. Результаты оценки изменения прочностных параметров в результате экспериментов, имитирующих высокотемпературное воздействие в течение длительного времени: а) результаты изменения твердости; б) результаты изменения трещиностойкости; в) результаты прочности на сжатие**

На рисунке 5 приведены результаты оценки изменений коэффициента теплопроводности исследуемых композитных  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамик в зависимости от соотношения компонент в составе. Согласно представленным данным изменений коэффициента теплопроводности видно, что изменение теплофизических свойств керамик имеет явно выраженную зависимость от соотношения компонент в составе керамик, а также фазового состава, обусловленного изменением весовых вкладов  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{SiC}$  и  $\text{ZrSiO}_4$ . При добавлении малых концентраций  $\text{SiC}$  в состав керамик наблюдается увеличение теплопроводности составляет порядка 0,7–2,2 раза в сравнении с результатами для  $\text{ZrO}_2$  керамик. При этом малые изменения, несмотря на высокие значения теплопроводности  $\text{SiC}$ , обусловлены тем, что частицы карбида кремния присутствуют в составе керамик в виде разрозненных включений, не образующих непрерывных теплопроводящих путей, а рост теплопроводности ограничивается интенсивным рассеянием фононов на межфазных границах. При увеличении концентрации  $\text{SiC}$  до  $x=0.20$  M наблюдается более существенный рост коэффициента теплопроводности до 8,0–10,0 Вт/(м·К), что соответствует увеличению примерно в 4,9 раза. Данный эффект обусловлен увеличением доли высокотеплопроводной карбидной фазы и формированием частично связанной теплопроводящей сети, обеспечивающей более эффективный перенос тепла. Максимальные значения теплопроводности фиксируются при  $x=0,30-0,4$  M, где коэффициент теплопроводности достигает 18,0–19,0 Вт/(м·К), что соответствует росту в 9,2–9,4 раза относительно исходной  $\text{ZrO}_2$  керамики. В этом диапазоне фазовый состав характеризуется существенной долей  $\text{SiC}$  при наличии оксидных и силикатных фаз, формирующих устойчивую, но еще структурно

неоднородную теплопроводящую сеть. При дальнейшем увеличении концентрации SiC до  $x \approx 0.50$  коэффициент теплопроводности несколько снижается и составляет порядка 16 – 19 Вт/(м×К) (увеличение в 8.4 раза), что может быть связано с ростом доли межфазных границ, повышенной дефектностью структуры и возможным увеличением остаточной пористости, ограничивающих эффективный перенос тепла несмотря на высокую теплопроводность карбида кремния.



**Рисунок 5. Результаты оценки изменения коэффициента теплопроводности исследуемых композитных  $(1-x)\text{ZrO}_2 - x\text{SiC}$  керамик в зависимости от вариации соотношения компонент в составе**

Сравнительный анализ изменений коэффициента теплопроводности для образцов композитных  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамик с традиционными оксидными керамиками, используемыми в качестве инертным матриц, в частности, стабилизированном диоксиде циркония, для которых значение коэффициента теплопроводности составляет порядка 2,0–2,5 Вт/(м×К), в случае композитных керамик  $\text{MgO-ZrO}_2$  или  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$  величина теплопроводности составляет порядка 3–5 Вт/(м×К) [18,19], для композитных керамик  $\text{BeO-ZrO}_2$ , значения коэффициента теплопроводности составляют порядка 8–12 Вт/(м×К), при этом применение BeO сопровождается серьезными технологическими ограничениями, связанными с его токсичностью и сложностью получения композитов

с ним. В данной связи полученные значения для  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамик в случае когда концентрация SiC составляет 0,3–0,4 М, достигнутые значения коэффициента теплопроводности составляют порядка 16–19 Вт/(м×К), что делает данные керамики одними из перспективных среди оксидных или композитных оксидных керамик, рассматриваемых в качестве кандидатных материалов для инертных матриц [20]. При этом полученные значения коэффициента теплопроводности существенно ниже теплопроводности монолитного SiC ( $\approx 120\text{--}200$  Вт/(м×К)), однако существенно превосходят показатели оксидных и силикатных систем при сохранении их химической и радиационной стабильности.

### **Заключение**

Установлено, что прочностные характеристики композитных  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамик существенно зависят от их фазового состава и демонстрируют выраженный нелинейный характер при вариации содержания карбида кремния. Показано, что при низких концентрациях SiC ( $x \leq 0.1$  М) механическое поведение материала определяется преимущественно оксидной матрицей  $\text{ZrO}_2$ , что соответствует относительно низким значениям твердости, трещиностойкости и прочности на сжатие вследствие хрупкости оксидной фазы и отсутствия эффективного армирования, обусловленного добавлением SiC, а также формированием силикатной фазы, выполняющей роль буферной прослойки, снижающей напряжения на границах  $\text{ZrO}_2/\text{SiC}$  зерен.

Получены результаты циклических испытаний, связанных с изучением влияния вариации соотношения компонентов и фазового состава керамик на изменение устойчивости к термошоковым воздействиям, связанным с резким изменением температуры воздействия на образцы.

Установлено, что в данном диапазоне фазового состава реализуется оптимальный баланс между армирующим эффектом SiC, развитием сети межфазных границ и релаксацией напряжений за счет промежуточных фаз, что обеспечивает повышение прочностных характеристик и устойчивости к хрупкому разрушению в случае термических воздействий. Максимальные значения коэффициента теплопроводности достигают 18–19 Вт/(м×К), что в 8–9 раз превышает теплопроводность исходной  $\text{ZrO}_2$  керамики и существенно превосходит показатели большинства оксидных керамик, рассматриваемых в качестве материалов инертных матриц дисперсного ядерного топлива.

### **Благодарность**

Исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (No. AP26104441).

### **Вклад авторов**

**Р. Елшибеков** – проведение экспериментов, обработка результатов, установление взаимосвязи между определенными параметрами, подготовка публикации, общий анализ данных.

**Ш.Г. Гиниятова** – анализ и обработка данных, интерпретация полученных зависимостей, определение кинетики изменения прочностных характеристик.

**Ш. Хаметов** – проведение экспериментальных работ, отработка режимов измерений теплофизических характеристик, проведение экспериментов на устойчивость к термошоковым воздействиям.

**Г.А. Баймбетова** – проведение экспериментов по определению фазового состава, анализ и обработка данных, интерпретация полученных зависимостей, определение кинетики изменения прочностных характеристик.

### Список литературы

1. F. Tavangarian, D. Hui, G. Li, Crack-healing in ceramics, Composites Part B: Engineering 144, 56–87 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.02.025>
2. S. K. Lee, W. Ishida, S. Y. Lee, K. W. Nam, K. Ando, Crack-healing behavior and resultant strength properties of silicon carbide ceramic, Journal of the European Ceramic Society 25, 569–576 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2004.01.021>
3. H. S. Kim, M. K. Kim, S. B. Kang, S. H. Ahn, K. W. Nam, Bending strength and crack-healing behavior of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiC composites ceramics, Materials Science and Engineering: A. 483–484, 672–675 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.09.169>
4. S. K. Lee, M. Ono, W. Nakao, K. Takahashi, K. Ando, Crack-healing behaviour of mullite/SiC/Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> composites and its application to the structural integrity of machined components, Journal of the European Ceramic Society 25, 3495–3502 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2004.08.024>
5. J. Lin, Y. Huang, H. Zhang, Crack healing and strengthening of SiC whisker and ZrO<sub>2</sub> fiber reinforced ZrB<sub>2</sub> ceramics, Ceramics International 40, 16811–16815 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.07.040>
6. X. Zhang, L. Xu, S. Du, W. Han, J. Han, Preoxidation and Crack-Healing Behavior of ZrB<sub>2</sub>-SiC Ceramic Composite, Journal of the American Ceramic Society 91, 4068–4073 (2008). <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2008.02760.x>
7. H. Tomaszewski, M. Boniecki, H. Weglarz, Toughness-curve behaviour of alumina-SiC and ZTA-SiC composites, Journal of the European Ceramic Society 20, 1215–1224 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0955-2219\(99\)00273-3](https://doi.org/10.1016/S0955-2219(99)00273-3)
8. S. Zhao, G. Yuan, D. Zhang, P. Xu, G. Li, W. Han, Formation and elimination mechanism of thermal blistering in Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si system, Journal of Materials Science 56, 17478–17489 (2021). <https://doi.org/10.1007/s10853-021-06441-9>
9. K. Houjou, K. Ando, K. Takahashi, Crack-healing behaviour of ZrO<sub>2</sub>/SiC composite ceramics, International Journal of Structural Integrity 1, 73–84 (2010). <https://doi.org/10.1108/17579861011023810>
10. K. W. Nam, J. R. Hwang, The crack healing behavior of ZrO<sub>2</sub>/SiC composite ceramics with TiO<sub>2</sub> additive, Journal of mechanical science and technology 26, 2093–2096 (2012). <https://doi.org/10.1007/s12206-012-0521-5>
11. M. Ono, W. Nakao, K. Takahashi, M. Nakatani, K. Ando, A new methodology to guarantee the structural integrity of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiC composite using crack healing and a proof test, Fatigue & fracture of engineering materials & structures 30, 599–607 (2007). <https://doi.org/10.1111/j.1460-2695.2007.01132.x>

12. K. Houjou, K. Takahashi, Crack-healing behavior of ZrO<sub>2</sub>/SiC composite ceramics and strength properties of crack-healing specimens, *International Journal of Structural Integrity* 3, 41–52 (2012). <https://doi.org/10.1108/17579861211209984>
13. J. Chai, Y. Zhu, T. Shen, Y. Liu, L. Niu, S. Li, P. Jin, M. Cui, Z. Wang, Assessing fracture toughness in sintered Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> (3Y)-SiC ceramic composites through indentation technique, *Ceramics International* 46, 27143–27149 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.07.194>
14. J. Delage, E. Saiz, N. Al Nasiri, Fracture behaviour of SiC/SiC ceramic matrix composite at room temperature, *Journal of the European Ceramic Society* 42, 3156–3167 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2022.01.060>
15. Z. Chen, L. Ji, N. Guo, C. Xu, S. Zhang, Crack healing and strength recovery of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/TiC/TiB<sub>2</sub> ceramic tool materials, *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials* 87, 105167 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2019.105167>
16. Y. Li, B. Guo, G. Huang, S. Kubo, P. Shu, Characterization and thermal performance of nitrate mixture/SiC ceramic honeycomb composite phase change materials for thermal energy storage, *Applied Thermal Engineering* 81, 193–197 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.02.008>
17. D. B. Borgekov, S. B. Azambayev, A. L. Kozlovskiy, D. I. Shlimas, Effect of Phase Composition Variation of Oxy-Nitride Composite Ceramics on Heat Resistance and Preservation of Strength Parameters, *Crystals* 14, 744 (2024). <https://doi.org/10.3390/cryst14080744>
18. B. S. Constantino, Y. J. Sohn, G. Mauer, Magnesia-stabilized zirconia (MSZ) thermal barrier coatings by suspension plasma spraying: Coating properties and service life behavior, *Journal of the European Ceramic Society* 45, 117790 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2025.117790>
19. D. B. Borgekov, A. L. Kozlovskiy, D. I. Shlimas, R. I. Shakirzyanov, A. I. Popov, M. Konuhova, Study of the effect of variation of thermal annealing conditions on the structural ordering and phase formation processes in ZrO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ceramics, *Kompleksnoe Ispolzovanie Mineralnogo Syra* 336, 48–63 (2026). <https://doi.org/10.31643/2026/6445.05>
20. Z. Chen, L. Wang, P. Du, Y. Shi, G. Xue, C. Xie, Yu. Hou, Z. Wang, Effects of different sintering additives Re<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Re= Y, Nd, Gd, Sm, and Yb) on the thermal conductivity, mechanical properties and dielectric properties of AlN ceramics, *Journal of Alloys and Compounds* 1023, 180180 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2025.180180>

**R. Elshibekov<sup>1\*</sup>, Sh.G. Giniyatova<sup>1,2</sup>, Sh. Khametov<sup>1,2</sup>, G.A. Baimbetova<sup>2</sup>**

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

<sup>2</sup>RSE on the REM Institute of Nuclear Physics of the ARKAE, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: e\_rinat92@mail.ru, giniyatova\_shg@enu.kz, khametov@inp.kz, bgulzada\_74@mail.ru )

### **The role of reactive phase transformations in composite ceramics in changing strength and thermal characteristics**

**Abstract.** The paper presents the results of the assessment of the influence of variations in the ratio of components in composite (1-x)ZrO<sub>2</sub> – xSiC ceramics on the change in phase composition caused by the initialization of reactive phase transformations, as well as the determination of the role of phase

transformations on the change in strength and thermal characteristics. It has been established that control over the phase composition of composite  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  ceramics allows for the targeted optimization of their strength properties, and the most favorable combination of strength characteristics is achieved at intermediate SiC concentrations of 0.2 – 0.3 M, ensuring a high level of mechanical reliability of materials under conditions of intense external influences. The results of thermal shock tests confirm that the highest resistance to sudden temperature effects is achieved in composite  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  ceramics with a SiC content of 0.2 – 0.3 M, which ensures an optimal balance between thermal conductivity, mechanical strength, and the ability of the structure to relax thermally induced stresses. The data obtained are of great practical importance for the assessment of the performance of these materials under conditions of non-stationary temperature conditions and emergency situations typical for the operation of inert matrices of dispersed nuclear fuel.

**Key words:** composite ceramics, silicon carbide, strengthening, thermal shock effect, hardness, induced stresses

**Р. Елшибеков<sup>1\*</sup>, Ш.Г. Гиниятова<sup>1,2</sup>, Ш. Хаметов<sup>1,2</sup>, Г.А. Баймбетова<sup>2</sup>**

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

<sup>2</sup>ҚРАЭА Ядролық физика институты ШЖҚ РМК, Алматы, Қазақстан

(E-mail: e\_rinat92@mail.ru, giniyatova\_shg@enu.kz, khametov@inp.kz, bgulzada\_74@mail.ru )

### **Композиттік керамикасындағы реактивті фазалық түрленулердің беріктік пен жылулық сипаттамалардың өзгеруіндегі рөлі**

**Аңдатпа.** Мақалада реактивті фазалық түрлендірулерді инициализациялаудан туындаған фазалық құрамның өзгеруіне композитті  $(1-x)\text{ZrO}_2 - x\text{SiC}$  керамикасындағы компоненттердің арақатынасындағы өзгерістердің әсерін бағалау нәтижелері, сондай-ақ беріктік пен жылулық сипаттамалардың өзгеруіне фазалық түрлендірулердің рөлін анықтау нәтижелері ұсынылған. Композитті  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамикасының фазалық құрамын бақылау олардың беріктік қасиеттерін мақсатты түрде оңтайландыруға мүмкіндік беретіні және беріктік сипаттамаларының ең қолайлы үйлесімі 0.2 – 0.3 M аралық SiC концентрацияларында қол жеткізілетіні, бұл қарқынды сыртқы әсерлер жағдайында материалдардың механикалық сенімділігінің жоғары деңгейін қамтамасыз ететіні анықталды. Термиялық соққы сынақтарының нәтижелері кенеттен температура әсеріне ең жоғары төзімділік SiC мөлшері 0.2 – 0.3 M болатын композиттік  $(1-x)\text{ZrO}_2-x\text{SiC}$  керамикасында қол жеткізілетінін растайды, бұл жылу өткізгіштік, механикалық беріктік және құрылымның термиялық индукцияланған кернеулерді босату қабілеті арасындағы оңтайлы тепе-теңдікті қамтамасыз етеді. Алынған деректер дисперсті ядролық отынның инертті матрицаларын пайдалану кезінде тән болатын тұрақсыз температуралық режимдер мен авариялық жағдайлардағы осы материалдардың жұмысқа қабілеттілігін бағалау үшін маңызды практикалық мәнге ие.

**Түйін сөздер:** композиттік керамика, кремний карбиді, нығайту, термиялық соққы әсері, қаттылық, индукцияланған кернеулер

## References

1. F. Tavangarian, D. Hui, G. Li, Crack-healing in ceramics, *Composites Part B: Engineering* 144, 56–87 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.02.025>
2. S. K. Lee, W. Ishida, S. Y. Lee, K. W. Nam, K. Ando, Crack-healing behavior and resultant strength properties of silicon carbide ceramic, *Journal of the European Ceramic Society* 25, 569–576 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2004.01.021>
3. H. S. Kim, M. K. Kim, S. B. Kang, S. H. Ahn, K. W. Nam, Bending strength and crack-healing behavior of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiC composites ceramics, *Materials Science and Engineering: A*. 483–484, 672–675 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.09.169>
4. S. K. Lee, M. Ono, W. Nakao, K. Takahashi, K. Ando, Crack-healing behaviour of mullite/SiC/Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> composites and its application to the structural integrity of machined components, *Journal of the European Ceramic Society* 25, 3495–3502 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2004.08.024>
5. J. Lin, Y. Huang, H. Zhang, Crack healing and strengthening of SiC whisker and ZrO<sub>2</sub> fiber reinforced ZrB<sub>2</sub> ceramics, *Ceramics International* 40, 16811–16815 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2014.07.040>
6. X. Zhang, L. Xu, S. Du, W. Han, J. Han, Preoxidation and Crack-Healing Behavior of ZrB<sub>2</sub>-SiC Ceramic Composite, *Journal of the American Ceramic Society* 91, 4068–4073 (2008). <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2008.02760.x>
7. H. Tomaszewski, M. Boniecki, H. Weglarz, Toughness-curve behaviour of alumina-SiC and ZTA-SiC composites, *Journal of the European Ceramic Society* 20, 1215–1224 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0955-2219\(99\)00273-3](https://doi.org/10.1016/S0955-2219(99)00273-3)
8. S. Zhao, G. Yuan, D. Zhang, P. Xu, G. Li, W. Han, Formation and elimination mechanism of thermal blistering in Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Si system, *Journal of Materials Science* 56, 17478–17489 (2021). <https://doi.org/10.1007/s10853-021-06441-9>
9. K. Houjou, K. Ando, K. Takahashi, Crack-healing behaviour of ZrO<sub>2</sub>/SiC composite ceramics, *International Journal of Structural Integrity* 1, 73–84 (2010). <https://doi.org/10.1108/17579861011023810>
10. K. W. Nam, J. R. Hwang, The crack healing behavior of ZrO<sub>2</sub>/SiC composite ceramics with TiO<sub>2</sub> additive, *Journal of mechanical science and technology* 26, 2093–2096 (2012). <https://doi.org/10.1007/s12206-012-0521-5>
11. M. Ono, W. Nakao, K. Takahashi, M. Nakatani, K. Ando, A new methodology to guarantee the structural integrity of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiC composite using crack healing and a proof test, *Fatigue & fracture of engineering materials & structures* 30, 599–607 (2007). <https://doi.org/10.1111/j.1460-2695.2007.01132.x>
12. K. Houjou, K. Takahashi, Crack-healing behavior of ZrO<sub>2</sub>/SiC composite ceramics and strength properties of crack-healing specimens, *International Journal of Structural Integrity* 3, 41–52 (2012). <https://doi.org/10.1108/17579861211209984>
13. J. Chai, Y. Zhu, T. Shen, Y. Liu, L. Niu, S. Li, P. Jin, M. Cui, Z. Wang, Assessing fracture toughness in sintered Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub> (3Y)-SiC ceramic composites through indentation technique, *Ceramics International* 46, 27143–27149 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.07.194>
14. J. Delage, E. Saiz, N. Al Nasiri, Fracture behaviour of SiC/SiC ceramic matrix composite at room temperature, *Journal of the European Ceramic Society* 42, 3156–3167 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2022.01.060>

15. Z. Chen, L. Ji, N. Guo, C. Xu, S. Zhang, Crack healing and strength recovery of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/TiC/TiB<sub>2</sub> ceramic tool materials, International Journal of Refractory Metals and Hard Materials 87, 105167 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2019.105167>

16. Y. Li, B. Guo, G. Huang, S. Kubo, P. Shu, Characterization and thermal performance of nitrate mixture/SiC ceramic honeycomb composite phase change materials for thermal energy storage, Applied Thermal Engineering 81, 193–197 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.02.008>

17. D. B. Borgekov, S. B. Azambayev, A. L. Kozlovskiy, D. I. Shlimas, Effect of Phase Composition Variation of Oxy–Nitride Composite Ceramics on Heat Resistance and Preservation of Strength Parameters, Crystals 14, 744 (2024). <https://doi.org/10.3390/cryst14080744>

18. B. S. Constantino, Y. J. Sohn, G. Mauer, Magnesia-stabilized zirconia (MSZ) thermal barrier coatings by suspension plasma spraying: Coating properties and service life behavior, Journal of the European Ceramic Society 45, 117790 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2025.117790>

19. D. B. Borgekov, A. L. Kozlovskiy, D. I. Shlimas, R. I. Shakirziyanov, A. I. Popov, M. Konuhova, Study of the effect of variation of thermal annealing conditions on the structural ordering and phase formation processes in ZrO<sub>2</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ceramics, Kompleksnoe Ispolzovanie Mineralnogo Syra 336, 48–63 (2026). <https://doi.org/10.31643/2026/6445.05>

20. Z. Chen, L. Wang, P. Du, Y. Shi, G. Xue, C. Xie, Yu. Hou, Z. Wang, Effects of different sintering additives Re<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Re= Y, Nd, Gd, Sm, and Yb) on the thermal conductivity, mechanical properties and dielectric properties of AlN ceramics, Journal of Alloys and Compounds 1023, 180180 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2025.180180>

#### **Сведения об авторах:**

**Р. Елшибеков** – автор для корреспонденции, докторант кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

**Ш.Г. Гиниятова** – к.ф.-м.н., научный сотрудник Лаборатории ядерной физики, Астанинский филиал Института ядерной физики Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Астана, Казахстан, преподаватель–исследователь кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

**Ш. Хаметов** – докторант кафедры «Теплоэнергетика», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан, лаборант технологической лаборатории трековых мембран Астанинского филиала Института ядерной физики Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Алматы, Казахстан.

**Г.А. Баймбетова** – к.ф.-м.н., научный сотрудник Института ядерной физики Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Алматы, Казахстан.

**R. Elshibekov** – the corresponding author, PhD student, Department of «Nuclear physics, new materials and technologies», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

**Sh.G. Giniyatova** – Cand. sci. (phys.-math.), Researcher at the Laboratory of nuclear physics, Astana Branch of the Institute of nuclear physics of the Atomic energy agency of the Republic of Kazakhstan, Astana, Kazakhstan; Lecturer-researcher at the department of «Nuclear physics, new materials and technologies», L.N. Gumilyov Eurasian national university, Astana, Kazakhstan.

**Sh. Khametov** – PhD student, Department of «Thermal power engineering», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan; Laboratory assistant at the Technological laboratory of track membranes, Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics of the Atomic Energy Agency of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan.

**G.A. Baimbetova** – Cand. sci. (phys.-math.), researcher at the Institute of Nuclear Physics of the Atomic Energy Agency of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan.

**Р. Елшибеков** – хат-хабар авторы, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының докторанты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

**Ш.Г. Гиниятова** – ф.-м. ғ. к., Ядролық физика зертханасының ғылыми қызметкері, Қазақстан Республикасының Атом энергиясы агенттігінің Ядролық физика институтының Астана филиалы, Астана, Қазақстан; «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының оқытушы-зерттеушісі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

**Ш. Хаметов** – «Жылуэнергетика» кафедрасының докторанты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан; Тректік жарғақтар технологиялық зертханасының зертханашысы, Қазақстан Республикасының Атом энергиясы агенттігінің Ядролық физика институтының Астана филиалы, Астана, Қазақстан.

**Г.А. Баймбетова** – ф.-м.ғ.к., Қазақстан Республикасы Атом энергиясы агенттігі Ядролық физика институтының ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан.



Copyright: © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



МРНТИ 29.19.22

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-104-123>

Научная статья

## Изучение влияния вариации фазового состава в $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$ нанокompозитах на сдерживание механизмов коррозионного воздействия

К.Б. Калиекперова\*<sup>1,2</sup>, Р.И. Шакирзянов<sup>1</sup>, Д.И. Тишкевич<sup>3</sup>, А.Ж. Жақсылық<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

<sup>2</sup>РГП на ПХВ Институт ядерной физики АРКАЭ, Алматы, Казахстан

<sup>3</sup>ГНПО «Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь

<sup>4</sup>Казахский национальный аграрный исследовательский университет, Алматы, Казахстан

(E-mail: kaliekperova\_kb\_1@enu.kz, shakirzyanov\_ri@enu.kz, dashachushkova@gmail.com, ag.vet21@gmail.com)

**Аннотация.** В работе приведены результаты исследований влияния изменений фазового состава  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитов на устойчивость к процессам коррозионного воздействия, возникающих контакт наночастиц с модельными буферными фосфатными растворами, имитирующими физиологическую среду организма. Сравнительный анализ результатов при 25 °С и 45 °С позволяет сделать вывод о том, что температура является определяющим фактором, контролирующим степень структурных изменений шпинельной фазы в жидкой среде. При комнатной температуре нанокompозиты демонстрируют высокую кристаллохимическую стабильность, тогда как при 45 °С наблюдается постепенная эволюция катионного распределения, приводящая к увеличению степени инверсии и росту катионного беспорядка в структуре шпинели  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$ . В ходе проведенных исследований было установлено, что рост содержания аморфной фазы коррелирует с зафиксированным увеличением степени инверсии шпинельной фазы и ростом катионного беспорядка, что указывает на единый механизм деградации, включающий катионную миграцию, дефектообразование и частичную аморфизацию структуры. При этом даже в наиболее жестких условиях деградации (45 °С, 7 суток) суммарная доля аморфных включений остается ограниченной, что подтверждает удовлетворительную структурную устойчивость исследуемых нанокompозитов.

**Ключевые слова:** наночастицы, коррозионное воздействие, структурная деградация, разупорядочение, инверсия

Поступила 10.02.2026. После доработки 27.02.2026. Принята к печати 27.02.2026. Доступно онлайн 30.03.2026.

<sup>1</sup>\*автор для корреспонденции

## **Введение**

Магнитные нанокompозиты на основе Fe,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ,  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$  и их модификаций рассматриваются как одни из наиболее перспективных функциональных наноматериалов для различных применений благодаря сочетанию магнитоуправляемости, относительной биосовместимости, высокой удельной поверхности и возможности поверхностной функционализации [1–3]. Их ключевое преимущество заключается в том, что они могут управляться внешним магнитным полем и выполнять сразу несколько функций, включая возможности их использования в диагностических, терапевтических и транспортных направлениях [4,5].

В случае использования железосодержащих нанокompозитов в биомедицинских приложениях, включая магнитную гипертермию, особое значение приобретают исследования, направленные на определение химической стабильности и биологической безопасности наноструктур, а также процессов деградации при эксплуатации и накопления продуктов коррозии, способных оказать негативное влияние за счет токсического эффекта [6,7]. Как правило, в процессе эксплуатации в физиологических или модельных биологических средах наноструктуры способны подвергаться коррозионно-деградационным процессам, за счет высокой удельной поверхности, дефектности кристаллической структуры, а также активного взаимодействия с компонентами биологических жидкостей [8]. Подобные продукты трансформации способны оказывать неблагоприятное воздействие на биологические системы, включая развитие токсических эффектов различной степени выраженности [9].

Деградация железосодержащих нанокompозитов может сопровождаться изменением фазового состава и катионного распределения, трансформацией при поверхностных слоев и высвобождением ионов железа, а также других компонент входящих в состав нанокompозита. При этом накопление продуктов коррозии и ионных форм металлов в биологических тканях или клеточных структурах способно приводить к возникновению токсических эффектов, связанных с окислительным стрессом, нарушениями клеточного метаболизма и активацией воспалительных реакций. Все эти процессы могут оказать существенное влияние на биосовместимость наноструктур, а также ограничить возможности их практического применения [10,11]. При этом подобные изменения способны не только снижать функциональные характеристики наноматериалов, но и существенно влиять на их поведение в биологических средах. Наиболее значимыми механизмами потенциального негативного воздействия являются индукция окислительного стресса за счет образования активных форм кислорода, нарушение клеточного метаболизма, повреждение мембран и белковых структур, а также активация воспалительных реакций [12,13]. В ряде случаев эти процессы могут сопровождаться изменением экспрессии генов, запуском апоптотических механизмов и нарушением нормальной регуляции клеточного цикла. В совокупности перечисленные эффекты способны снижать биосовместимость наноструктур и ограничивать возможности их клинического или практического применения.

При рассмотрении потенциала применения железосодержащих нанокompозитов в качестве основы для магнитной гипертермии одним из дополнительных факторов риска является воздействие переменных магнитных полей, которые в свою очередь могут ускорить процессы деградации нанокompозитов, способные усилить миграцию ионов. В этой связи подобные эффекты обуславливают необходимость детального изучения кинетики коррозионных процессов и оценки цитотоксичности как исходных наноструктур, так и продуктов их трансформации в условиях, максимально приближенных к реальным биомедицинским сценариям использования при практическом применении [14].

В этой связи возникает необходимость проведения комплексных исследований, включающих изучение кинетики коррозионных процессов, мониторинг фазовых и структурных трансформаций, а также оценку цитотоксичности как исходных наноструктур, так и продуктов их деградации. При этом принципиально важно, чтобы такие исследования проводились в условиях, максимально приближенных к реальным биомедицинским сценариям применения, включая модельные физиологические растворы, клеточные тест-системы и экспериментальные режимы, имитирующие воздействие магнитных полей. Подобный подход позволяет обеспечить более корректную оценку рисков, повысить достоверность прогнозирования биологического поведения нанокompозитов и обосновать возможности их безопасного практического использования.

### **Материалы и методы**

Для синтеза нанокompозитов на основе соединений феррита цинка использовались  $\text{FeCl}_3 \times 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_3$ ,  $\text{ZnO}$  и лимонная кислота. Все химические реактивы были приобретены у компании Sigma Aldrich. Химическая чистота исходных компонентов, используемых для синтеза, составляла 99.95 %. Синтез железосодержащих нанокompозитов осуществлялся в три этапа, схематичное представление которых приведено на рисунке 1а. Температура спекания образцов при вариации соотношения компонент в составе смеси  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  составляла  $1000^\circ\text{C}$ , время отжига составляло 5 часов, после чего образцы остывали вместе с печью в течение 20 – 24 часов до полного остывания и достижения комнатной температуры. Отжиг проводился в муфельной печи Nabertherm LE 4/11/R6 (Nabertherm, Лилиенталь, Германия). Данные режимы спекания были получены экспериментальным путем. При данной температуре происходит формирование хорошо структурированных нанокompозитов с высокой степенью структурного упорядочения.

Для определения температуры спекания образцов с целью выявления условий, при которых основной фазой является ферритная фаза  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$ , было проведено исследование влияния вариации температуры на процессы фазообразования нанокompозитов. Варьирование температуры спекания было осуществлено в диапазоне от  $100^\circ\text{C}$  до  $1000^\circ\text{C}$  с шагом  $100^\circ\text{C}$ , скорость нагрева  $20^\circ\text{C}/\text{мин}$ . Согласно результатам работы [15], варьирование температуры спекания приводит к инициализации процессов фазовых трансформаций

в структуре нанокompозитов, связанных с трансформацией  $\text{Fe}_3\text{O}_4 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3$ , протекающих при температуре 400 – 500 °С, и формированием фазы  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  при температуре 600 °С с последующим увеличением ее вклада, а также вытеснению примесной фазы гематита в диапазоне от 500 до 800 °С. Согласно полученным результатам при температурах отжига 900 – 1000 °С наблюдается полное завершение процессов фазовых трансформаций типа  $\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{ZnFe}_2\text{O}_4$ , которое сопровождается структурными изменениями, обусловленными упорядочением структуры шпинели и уменьшении примесных фаз в виде оксида цинка.

Определение кинетики деградации  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитов было осуществлено путем проведения серии экспериментов, включающих в себя выдержку наноструктур в модельном буферном растворе, имитирующем воздействие физиологической среды. В качестве модельного раствора использовался фосфатно-солевой буферный раствор (PBS), широко применяемый в биохимических и клеточных исследованиях для работы с белками и другими биомолекулами. Данный раствор имитирует условия внутренней среды организма и обеспечивает поддержание стабильного уровня кислотности, соответствующего физиологической норме ( $\text{pH} = 7,4$ ). Эксперименты проводились при двух температурных режимах 25 °С и 45 °С, поддержание температуры модельных буферных растворов в течение всего времени эксперимента проводилось с использованием шейкера-инкубатора IKA KS 3000ic control (IKA, Штауффен-им-Брайсгау, Германия). Определение массы было осуществлено, однако ее изменения в процессе экспериментов были незначительны и находились в пределах допустимых погрешностей, так как используемая среда не является агрессивной, в результате чего процессы коррозии протекают медленнее, что приводит к малым изменениям массы. Время экспериментов составляло 7 дней, контроль проб с целью выявления структурных изменений, связанных с воздействием буферного раствора и процессами окисления был осуществлен путем измерения рентгеновских дифрактограмм исследуемых образцов после 1, 3, 5 и 7 дней нахождения образцов нанокompозитов в модельном растворе. Выбор температурных режимов тестирования обусловлен возможностью оценки кинетики деградации нанокompозитов в условиях хранения и эксплуатации в гипертермических исследованиях. На рисунке 1б приведено изображение размещения образцов в шейкере-инкубаторе и их внешний вид в модельном буферном растворе.



а)



б)

**Рисунок 1. (а) Схематичное представление основных этапов синтеза; (б) Эксперименты на оценку коррозионной стойкости  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитов в модельном буферном растворе**

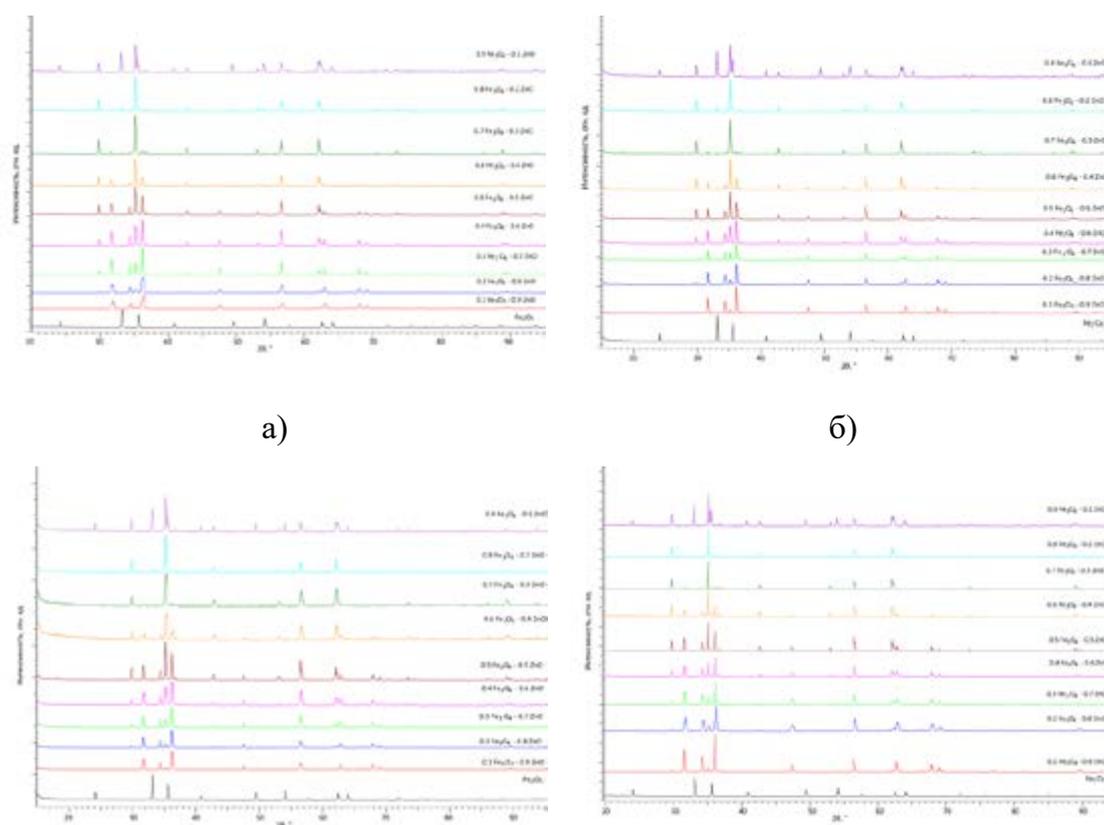
Определение изменений структурных параметров исследуемых нанокompозитов в зависимости от времени и температуры воздействия модельных растворов было проведено с применением метода рентгеновской дифракции. Съёмка рентгеновских дифрактограмм была выполнена на дифрактометре D8 ADVANCE ECO (Bruker, Карлсруэ, Германия). Съёмка дифрактограмм проводилась в геометрии Брегг – Брентано в угловом диапазоне  $2\theta=20-100^\circ$ , с шагом  $0,05^\circ$ . Определение фазового состава и структурных параметров осуществлялось в программном коде DiffracEVA v.4.2, для определения фаз использовалась базы данных PDF-2 (2016).

Определение степени инверсии ( $\delta$ ), характеризующей распределение катионов в окто- и тетраэдрических позициях шпинельной кристаллической решетки, а также изменение их положений при вариации фазового состава оценивалось с применением данных, полученных с использованием метода рентгеноструктурного анализа. Для определения использовались значения интегральных интенсивностей (площадей рефлексов) дифракционных рефлексов (220), (400), (440), наиболее чувствительных к изменению и перераспределению катионов в окто- и тетраэдрических позициях.

## Результаты и обсуждение

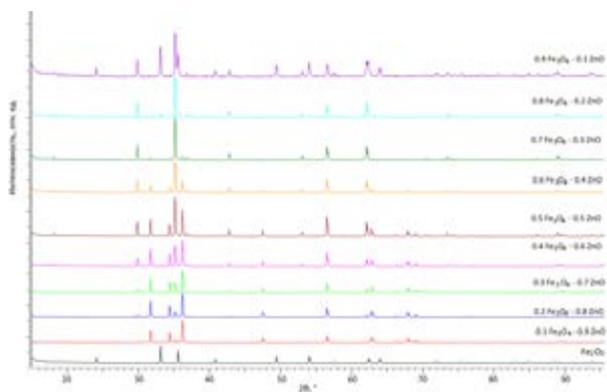
Эксперименты, направленные на изучение кинетики деградации нанокompозитов, были проведены путем размещения нанокompозитов в модельных растворах при температурах 25 °C и 45 °C в течение временного диапазона от 1 до 7 дней.

В качестве основного метода характеристики оценки структурных изменений, вызванных взаимодействием компонент модельных растворов и нанокompозитами был применен метод рентгеноструктурного анализа. Результаты оценки кинетики изменения структурных свойств нанокompозитов в зависимости от времени нахождения в модельной среде при различных температурных режимах приведены на рисунках 2–3 в качестве образца сравнения был выбран порошок оксида железа  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , используемый для синтеза нанокompозитов, также отожженный при температуре 1000 °C, с целью инициализации фазовых трансформаций типа  $\text{Fe}_3\text{O}_4 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3$ . Выбор данного порошка для сравнения был сделан с целью сравнения кинетики деградации нанокompозитов с оксидом железа, который также рассматривается как один из материалов для магнитной гипертермии.

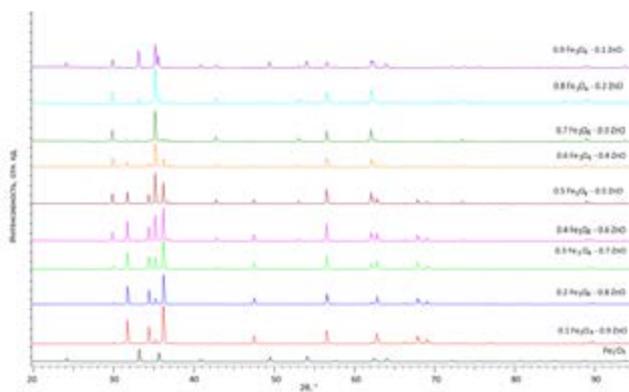


**Рисунок 2. Результаты рентгеновской дифракции исследуемых  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитов при нахождении их в буферном модельном растворе PBS при температуре 25 °C: а) после 1 дня испытаний; б) после 3 дней испытаний; в) после 5 дней испытаний; г) после 7 дней испытаний**

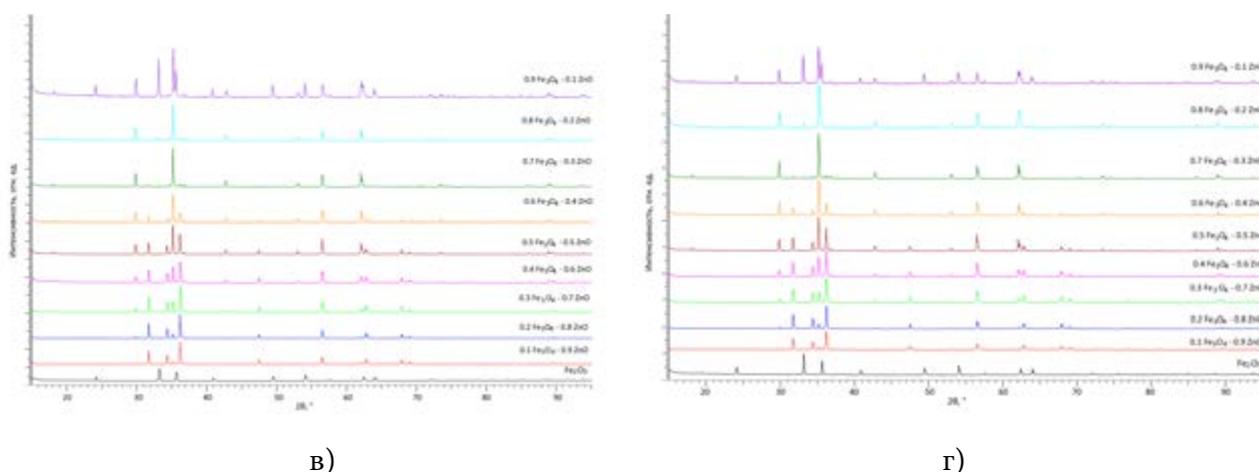
Общий вид представленных дифрактограмм исследуемых образцов нанокompозитов отражает основные изменения, обусловленные коррозионными процессами, протекающими при взаимодействии наночастиц с модельным буферным раствором, которые выражаются в изменении формы и интенсивности дифракционных рефлексов, без формирования дополнительных рефлексов, свидетельствующих о появлении новых фаз в составе нанокompозитов. Подобные изменения формы дифракционных рефлексов, связанные с формированием асимметрии рефлексов, обусловлены накоплением структурных дефектов, связанных с перераспределением катионов, локальными искажениями координационных полиэдров и нарушением дальнего порядка за счет формирования точечных дефектов и кислородных вакансий [16,17]. При этом характер структурных изменений носит явно выраженный временной характер, обусловленный накоплением структурных искажений при увеличении времени контакта образцов со средой. Также следует отметить, что отсутствие появления новых дифракционных рефлексов, характерных для примесных или ферригидритных фаз в составе нанокompозитов, обусловленных процессами окисления и изменений кристаллохимического состояния шпинельной фазы, свидетельствует о малом влиянии буферного раствора PBS на окислительные процессы, а также влияние вариации фазового состава нанокompозитов на устойчивость к внешним окислительным процессам, связанным с длительным пребыванием в среде.



а)



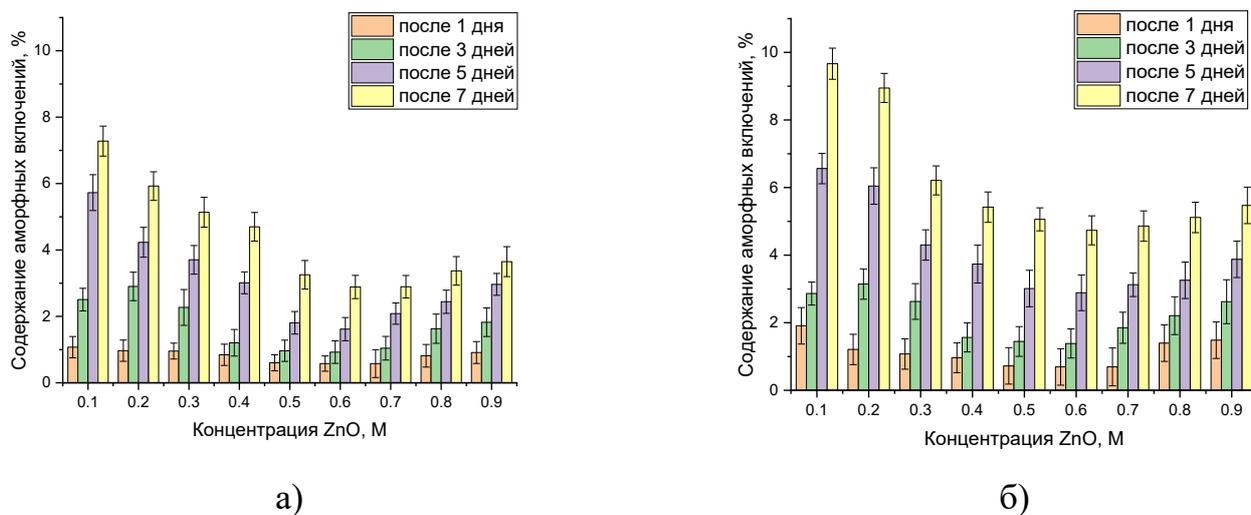
б)



**Рисунок 3. Результаты рентгеновской дифракции исследуемых  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитов при нахождении их в буферном модельном растворе PBS при температуре 45 °C: а) после 1 дня испытаний; б) после 3 дней испытаний; в) после 5 дней испытаний; г) после 7 дней испытаний**

Следует отметить, что увеличение температуры буферного модельного раствора с 25 °C до 45 °C также не приводит к формированию дополнительных рефлексов, характерных для примесных включений в составе нанокompозитов, однако степень структурных изменений, характеризующихся увеличением асимметрии дифракционных рефлексов и изменение их интенсивности свидетельствует об усилении деформационных искажений и активизации процессов окисления в условиях воздействия буферного раствора и увеличения времени экспозиции.

На рисунке 4 приведены результаты оценки содержания аморфных включений в образцах  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитов в зависимости от времени нахождения в буферном растворе PBS. Данные были рассчитаны с использованием полученных значений степени кристалличности до и после выдержки образцов в модельных растворах с последующим сравнением данных и вычислением разности изменений, отражающих образование областей разупорядочения за счет разрушения полиэдров и потере дальнего порядка в кристаллической решетке.



**Рисунок 4. Результаты оценки содержания аморфных включений, образующихся в процессе деградации в буферном растворе PBS: а) при температуре 25 °С; б) при температуре 45 °С**

При температуре 25 °С во всём диапазоне концентраций вариации соотношения компонентов в составе нанокompозитов наблюдается постепенный рост содержания аморфных включений с увеличением времени выдержки в растворе PBS. Для образцов с низкой концентрацией ZnO (0,1 – 0,3 М) величина аморфной фазы более выражена в сравнении с результатами с более высокой концентрацией ZnO в состав а и составляет порядка 6 – 7 % после 7 суток экспозиции. Подобные изменения обусловлены эффектами окисления, связанными с наличием в структуре нанокompозитов фазы гематита, наличие которой усиливает процессы структурной деградации за счет окисления и накопления продуктов коррозии.

По мере увеличения концентрации ZnO до 0,4–0,6 М наблюдается умеренное снижение доли аморфных включений, что свидетельствует о сравнительно высокой структурной стабильности шпинельной фазы  $ZnFe_2O_4$  и ограниченном характере деградационных процессов при комнатной температуре. В области высоких концентраций ZnO (0,7–0,9 М) содержание аморфной фазы несколько увеличивается, однако остаётся на умеренном уровне, что указывает на то, что при 25 °С деградационные процессы носят преимущественно поверхностный характер и не приводят к масштабной аморфизации материала.

При температуре 45 °С характер деградации существенно изменяется. Уже после 3 суток выдержки наблюдается значительное увеличение содержания аморфных включений по сравнению с условиями 25 °С. Для образцов с низким содержанием ZnO доля аморфной фазы возрастает до ~5–7 %, а после 7 суток достигает значений порядка 9–10 % (в образцах, в которых присутствуют включения в виде фазы гематита). Для образцов с концентрацией ZnO равной 0,3–0,6 М наблюдается менее выраженные

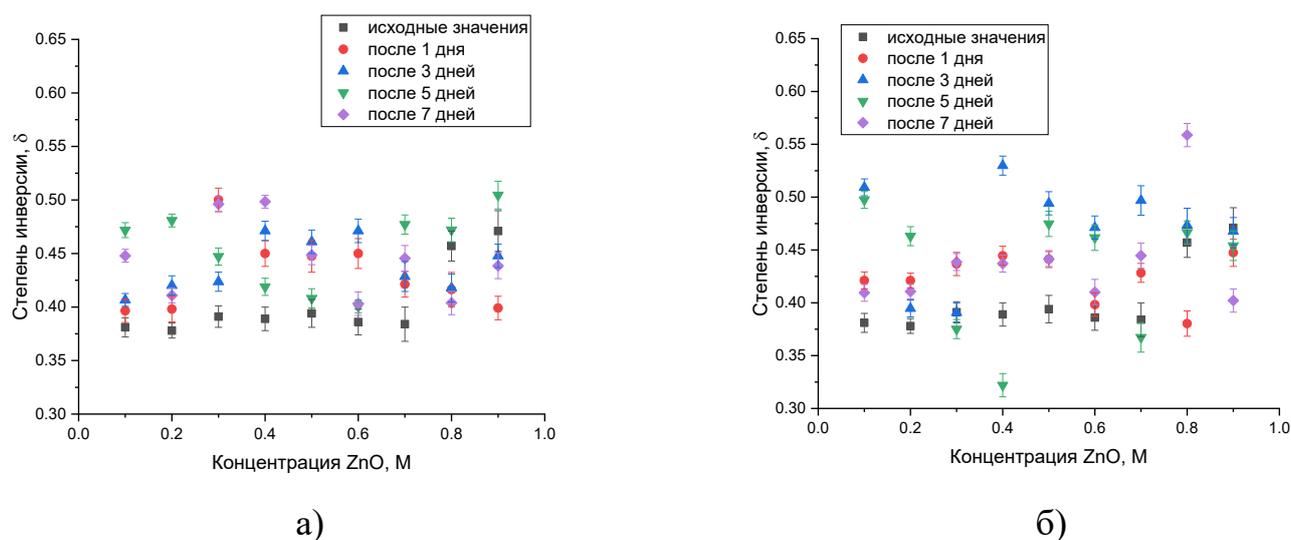
изменения структурной деградации, связанные с аморфизацией, что свидетельствует о том, что для данных наноструктур достигается оптимальное сочетание шпинельной и гексагональной фаз, обеспечивающих максимальное число активных межфазных границ, на которых при повышенных температурах происходит сдерживание процессов окисления.

В области высоких концентраций ZnO (0.7–0.9 M) также наблюдается заметный рост доли аморфной фазы, однако его абсолютные значения несколько ниже, чем для образцов, содержащих включения фазы гематита. Это может быть обусловлено доминированием более химически устойчивой гексагональной фазы ZnO, менее подверженной аморфизации в условиях воздействия PBS.

Сравнение результатов при 25 °C и 45 °C показывает, что температура является ключевым фактором, определяющим интенсивность образования аморфных включений в процессе деградации. Повышение температуры приводит к активации диффузионных процессов, усилению взаимодействия поверхности наночастиц с компонентами буферного раствора и ускорению разрушения дальнего кристаллического порядка в приграничных и дефектных областях [18,19].

На рисунке 5 приведены результаты оценки степени инверсии исследуемых образцов  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитов в зависимости от времени нахождения в буферном растворе при температурах 25 °C и 45 °C. Изучение эффекта инверсии направлено на определение изменений катионного распределения в составе нанокompозитов, которое является прямым подтверждением структурных изменений в образцах при их деградации и последующем разупорядочении в результате длительного контакта со средой. При этом использование данной величины позволяет оценить влияние вариации фазового состава на устойчивость нанокompозитов к процессам деструкции.

Согласно представленным данным, в случае увеличения времени нахождения нанокompозитов в модельном буферном растворе при температуре 25 °C изменение величины степени инверсии изменяется незначительно, при сохранении тренда к увеличению  $\delta$  с ростом времени выдержки, однако данные изменения минимальны, что указывает на высокую структурную стабильность шпинельной фазы  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$ , что свидетельствует об отсутствии интенсивных процессов катионной миграции и фазовой деградации. При этом следует отметить, что в случае температуры среды 25 °C воздействие среды модельного раствора оказывает ограниченное влияние на кристаллохимическое состояние шпинели, а перераспределение катионов носит локальный и слабовыраженный характер, который наиболее проявляется при времени экспозиции 7 дней, а также для образцов с включениями в виде фазы гематита, которая более подвержена структурной деградации чем включения оксида цинка. Также следует отметить, что вне зависимости от начального значения степени инверсии для образцов с различным фазовым составом, общий тренд наблюдаемых изменений свидетельствует о том, что процессы окисления, протекающие в структуре нанокompозитов обусловлены увеличением катионного перераспределения и, как следствие, росту катионного беспорядка в структуре.



**Рисунок 5. Результаты оценки изменений степени инверсии в  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитах в зависимости от времени нахождения в модельном буферном растворе: а) при температуре 25 °С; б) при температуре 45 °С**

В экспериментах при размещении нанокompозитов в буферном модельном растворе при температуре 45 °С, изменения степени инверсии имеют более выраженный характер в зависимости от времени экспозиции. При этом заметный рост степени инверсии наблюдается после 3–5 суток пребывания в растворе PBS, в максимальные изменения наблюдаются после 7 суток. Также следует отметить, что наиболее выраженные изменения наблюдаются для образцов, содержащих включения фазы гематита, а также для образцов, в которых содержание шпинельной фазы  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  минимально, и присутствует в виде мелкодисперсных включений, подверженных более интенсивному влиянию поверхностных и интерфейсных дефектов. Следует отметить, что рост степени инверсии при изменении температуры модельного раствора обусловлен интенсификацией активации диффузионных процессов ионов  $\text{Fe}_3^+$  и  $\text{Zn}_2^+$ , а также усилением дефектных и гидратационных процессов на межфазных границах. Увеличение температуры способствует снижению энергетических барьеров для катионной миграции и стабилизации более инверсных, термодинамически выгодных конфигураций шпинельной структуры, что приводит к перестройке кристаллической решетки [20], а также накоплению дефектных включений и искажению координационных полиэдров. Также свой вклад вносят процессы взаимодействия поверхности наночастиц с компонентами буферного раствора, что может приводить к локальным искажениям координационного окружения катионов и дальнейшему перераспределению ионов  $\text{Fe}_3^+$  и  $\text{Zn}_2^+$  между тетраэдрическими и октаэдрическими позициями.

Сопоставление результатов оценки содержания аморфных включений с данными по изменению степени инверсии шпинельной фазы  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  позволяет установить

их прямую причинно-следственную взаимосвязь. Во всех исследуемых образцах рост доли аморфной составляющей сопровождается увеличением степени инверсии  $\delta$ , что указывает на единый механизм структурной деградации, включающий катионную миграцию, дефектообразование и частичное разрушение дальнего кристаллического порядка.

При температуре 25 °С, где содержание аморфных включений возрастает умеренно и не превышает нескольких процентов даже после 7 суток выдержки в PBS, изменения степени инверсии также носят ограниченный характер. Наблюдаемая слабая тенденция к росту  $\delta$  коррелирует с локальной аморфизацией в приповерхностных и межфазных областях  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4/\text{ZnO}$ , не оказывая существенное влияние на объемные изменения в шпинельной структуре. В данных условиях катионное перераспределение реализуется преимущественно вблизи дефектных областей, что приводит к формированию частично инверсных, но структурно стабильных конфигураций шпинели. При повышенной температуре 45 °С наблюдается значительно более выраженный рост содержания аморфной фазы, который сопровождается резким увеличением степени инверсии  $\delta$ , достигающей максимальных значений для образцов с пониженным весовым вкладом шпинельной фазы. Это свидетельствует о том, что аморфизация структуры облегчает катионную миграцию между тетраэдрическими и октаэдрическими позициями за счёт разрушения локальных координационных связей и снижения энергетических барьеров для перестройки кристаллохимического состояния шпинели.

Установлено увеличение содержания аморфной фазы и рост степени инверсии являются взаимосвязанными проявлениями механизмов деградации. Аморфизация структуры снижает кристаллохимическую устойчивость шпинельной фазы  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  и способствует дальнейшему перераспределению катионов, тогда как рост степени инверсии отражает глубину этих структурных изменений.

На рисунке 6 приведена схема, отражающая основные механизмы структурной деградации, вызванные коррозионными процессами при нахождении  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитов в модельном буферном растворе. Анализ экспериментальных данных показывает, что деградационные процессы в исследуемых нанокompозитах имеют комплексный характер и обусловлены взаимосвязанными изменениями фазового состава, кристаллохимического состояния шпинельной фазы  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  и степени её инверсии. Эти процессы активируются в условиях воздействия жидкой среды, повышенной температуры и длительного времени экспозиции и могут существенно влиять на функциональные свойства материала.



**Рисунок 6. Основные механизмы коррозии в  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозитах**

Одним из ключевых механизмов деградации является термо- и средо-индуцированная миграция катионов  $\text{Fe}_3^+$  и  $\text{Zn}_2^+$  между тетраэдрическими и октаэдрическими позициями шпинельной решётки. Повышение температуры и наличие буферного раствора способствуют снижению энергетических барьеров для катионной диффузии, что приводит к постепенному росту степени инверсии  $\delta$ . Увеличение доли ионов  $\text{Fe}_3^+$  в тетраэдрических позициях сопровождается усилением катионного беспорядка и отклонением кристаллохимической структуры от исходного метастабильного состояния. Такой процесс носит необратимый или слабообратимый характер и является одним из ранних признаков структурной деградации шпинельной фазы [21]. В свою очередь, рост степени инверсии тесно связан с увеличением концентрации структурных дефектов, включая кислородные вакансии, локальные искажения координационных полиэдров и нарушения дальнего порядка. Формирование и накопление дефектов обусловлено как межфазными напряжениями на границах  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4/\text{ZnO}$ , так и взаимодействием поверхности наночастиц с компонентами буферного раствора. Повышенная дефектность снижает структурную устойчивость шпинели и облегчает дальнейшую катионную перестройку, усиливая деградационные процессы [22]. Также следует отметить, что поверхностная гидратация, адсорбция ионов из раствора и изменение локального координационного окружения катионов могут также приводить к дестабилизации поверхностных слоёв, что в свою очередь стимулирует рост степени инверсии как способ снижения свободной энергии системы.

## Заключение

Результаты экспериментов, моделирующих воздействие буферного раствора PBS на структуру нанокompозитов, свидетельствуют о том, что исследуемые нанокompозиты обладают удовлетворительной устойчивостью к воздействию физиологической среды при умеренных температурах, а выявленные температурно-зависимые изменения степени инверсии следует учитывать при оценке их долговременной структурной стабильности и функциональных свойств, в том числе в контексте магнитной гипертермии и биомедицинских применений.

Сопоставление результатов оценки содержания аморфных включений с данными по изменению степени инверсии шпинельной фазы  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  показывает их прямую взаимосвязь и указывает на единый механизм структурной деградации нанокompозитов. Рост доли аморфной составляющей сопровождается увеличением степени инверсии  $\delta$ , что отражает усиление катионной миграции и дефектообразования в структуре шпинели. При температуре 25 °C данные процессы носят ограниченный характер и локализуются преимущественно в приповерхностных и межфазных областях, что приводит лишь к незначительному росту  $\delta$ . При повышенной температуре 45 °C увеличение содержания аморфных включений становится существенно более выраженным и коррелирует с резким ростом степени инверсии, особенно в диапазоне концентраций  $\text{ZnO}$ , соответствующем максимальному числу межфазных границ  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4/\text{ZnO}$ . Это свидетельствует о том, что аморфизация структуры снижает кристаллохимическую устойчивость шпинельной фазы и облегчает перераспределение катионов между тетраэдрическими и октаэдрическими позициями, приводя к формированию более инверсных и дефектных состояний. Таким образом, увеличение содержания аморфной фазы и рост степени инверсии являются взаимосвязанными проявлениями деградационных процессов, определяющих эволюцию структурного состояния и функциональных свойств исследуемых нанокompозитов.

## Благодарность

Исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (№ BR28713365).

## Список литературы

1. Raturi, P. et al., Ferrite nanoparticles for sensing applications, *Materials Horizons: From Nature to Nanomaterials*, pp. 151-187 (2023). [https://doi.org/10.1007/978-981-99-2583-4\\_9](https://doi.org/10.1007/978-981-99-2583-4_9)
2. Zhang, J. et al.,  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  nanoparticles: Synthesis, characterization, and enhanced gas sensing property for acetone, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 221, pp. 55-62 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.snb.2015.06.040>
3. Jeyadevan, B. et al., Polyol process for Fe-based hard( $\text{FeCo}$ - $\text{FePt}$ ) and soft( $\text{FeCo}$ ) magnetic nanoparticles, *IEEE Transactions on Magnetics*, 42(10), pp. 3030-3035 (2006). <https://doi.org/10.1109/tmag.2006.880149>

4. Can, M.M., Coşkun, M. and Firat, T., A comparative study of nanosized iron oxide particles; magnetite ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), maghemite ( $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) and hematite ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ), using ferromagnetic resonance, *Journal of Alloys and Compounds*, 542, pp. 241-247 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2012.07.091>
5. Salih, S.J. and Mahmood, W.M., Review on magnetic spinel ferrite ( $\text{MFe}_2\text{O}_4$ ) nanoparticles: From synthesis to application, *Heliyon*, 9(6), pp. 1-10 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e16601>
6. Céspedes, E. et al., Bacterially synthesized ferrite nanoparticles for magnetic hyperthermia applications, *Nanoscale*, 6(21), pp. 12958-12970 (2014). <https://doi.org/10.1039/c4nr03004d>
7. Sharifi, I., Shokrollahi, H. and Amiri, S., Ferrite-based magnetic nanofluids used in hyperthermia applications, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 324(6), pp. 903-915 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.10.017>
8. Kobayashi, T., Cancer hyperthermia using magnetic nanoparticles, *Biotechnology Journal*, 6(11), pp. 1342-1347 (2011). <https://doi.org/10.1002/biot.201100045>
9. Lemine, O.M. et al., Comparative heating efficiency of hematite ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) and nickel ferrite nanoparticles for magnetic hyperthermia application, *Ceramics International*, 46(18), pp. 28821-28827 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.08.047>
10. Li, R. et al., Corrosion at nanoscale: Insights from nanoscale zero-valent iron (NZVI) oxidation, *ACS ES&T Engineering*, 5(12), pp. 3198-3207 (2025). <https://doi.org/10.1021/acsestengg.5c00198>
11. Yaohan, D. et al., Strength degradation of a ferrite-bainite weathering steel subjected to corrosion fatigue environment, *Corrosion Science*, 208, p. 110690 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2022.110690>
12. Ansari F. A. et al., Volatile corrosion inhibitors for ferrous and non-ferrous metals and alloys: A review, *International Journal of Corrosion and Scale Inhibition*, 7(2), pp. 126-150 (2018). <https://doi.org/10.17675/2305-6894-2018-7-2-2>
13. Ma, I.A. et al., A concise review on corrosion inhibitors: Types, mechanisms and electrochemical evaluation studies, *Journal of Coatings Technology and Research*, 19(1), pp. 241-268 (2021). <https://doi.org/10.1007/s11998-021-00547-0>
14. Wang, J. et al., Corrosion resistant coating with passive protection and self-healing property based on  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ -MBT nanoparticles, *Corrosion Communications*, 7, pp. 1-11 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.corcom.2021.12.005>
15. Kaliyekperova, K.B. et al., Synthesis and investigation of the applicability of  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{ZnO}$  nanoparticles as a basis for hyperthermic studies, *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, 11, p. 101195 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2025.101195>
16. Dolabella, S. et al., Lattice strain and defects analysis in nanostructured semiconductor materials and devices by high-resolution x-ray diffraction: Theoretical and practical aspects, *Small Methods*, 6(2), p. 2100932 (2021). <https://doi.org/10.1002/smt.202100932>
17. Robinson, I. and Harder, R., Coherent X-ray diffraction imaging of strain at the nanoscale, *Nature Materials*, 8(4), pp. 291-298 (2009). <https://doi.org/10.1038/nmat2400>
18. Stepan, T. et al., Effect of nanoparticle size on the near-surface pH-distribution in aqueous and carbonate buffered solutions, *Electrochimica Acta*, 409, p. 139923 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2022.139923>

19. Hotze, E.M., Phenrat, T. and Lowry, G.V., Nanoparticle Aggregation: Challenges to understanding transport and reactivity in the environment, *Journal of Environmental Quality*, 39(6), pp. 1909-1924 (2010). <https://doi.org/10.2134/jeq2009.0462>

20. Chen, Y. et al., Interfacial reconstruction via A-site cationic inversion: Unlocking superior PMS activation in CO/MN Spinels for advanced water decontamination, *Applied Surface Science*, 709, p. 163844 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2025.163844>

21. Zhao, Q. et al., Spinels: Controlled preparation, oxygen reduction/evolution reaction application, and beyond, *Chemical Reviews*, 117(15), pp. 10121-10211 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00051>

22. Tatarchuk, T., Studying the defects in spinel compounds: Discovery, formation mechanisms, classification, and influence on catalytic properties, *Nanomaterials*, 14(20), p. 1640 (2024). <https://doi.org/10.3390/nano14201640>

**К.Б. Калиекперова<sup>\*1,2</sup>, Р.И. Шакирзянов<sup>1</sup>, Д.И. Тишкевич<sup>3</sup>, А.Ж. Жақсылық<sup>4</sup>**

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

<sup>2</sup>ҚРАЭА Ядролық физика институты ШЖҚ РМК, Алматы, Қазақстан

<sup>3</sup>«Беларусь Ұлттық ғылым академиясының материалтану ғылыми-практикалық орталығы»  
МФПК, Минск, Беларусь

<sup>4</sup>Қазақ ұлттық аграрлық зерттеу университеті КЕАҚ, Алматы, Қазақстан  
(E-mail: kaliekperova\_kb\_1@enu.kz, shakirzyanov\_ri@enu.kz, dashachushkova@gmail.com, ag.vet21@gmail.com)

### **(1-x)Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> – xZnO нанокompозиттеріндегі фазалық құрамның өзгеруінің коррозия механизмдерінің тежелуіне әсерін зерттеу**

**Аңдатпа.** Мақалада  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  нанокompозиттерінің фазалық құрамының өзгеруінің нанобөлшектер дененің физиологиялық ортасын модельдейтін модельдік фосфат буферлік ерітінділерімен жанасқан кезде пайда болатын коррозия процестеріне төзімділікке әсерін зерттеу нәтижелері ұсынылған. 25 °C және 45 °C температурадағы нәтижелерді салыстырмалы талдау сұйық ортадағы шпинель фазасының құрылымдық өзгерістер дәрежесін басқаратын анықтаушы фактор температура болып табылады деген қорытынды жасауға мүмкіндік береді. Бөлме температурасында нанокompозиттер жоғары кристалдық химиялық тұрақтылықты көрсетеді, ал 45 °C температурада катиондардың таралуының біртіндеп эволюциясы байқалады, бұл инверсия дәрежесінің артуына және  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  шпинелінің құрылымында катиондық бұзылыстың артуына әкеледі. Жүргізілген зерттеулер барысында аморфты фаза құрамының артуы шпинель фазасының инверсия дәрежесінің тіркелген артуымен және катиондық бұзылыстың өсуімен корреляцияланатыны анықталды, бұл катион миграциясын, ақаудың пайда болуын және құрылымның ішінара аморфттануын қамтитын бірыңғай деградация механизмін көрсетеді. Сонымен қатар, тіпті ең ауыр ыдырау жағдайларында да (45 °C, 7 күн) аморфты

қосындылардың жалпы үлесі шектеулі болып қалады, бұл зерттелген нанокөмірлердің қанағаттанарлық құрылымдық тұрақтылығын растайды.

**Түйін сөздер:** нанобөлшектер, коррозия, құрылымдық деградация, бұзылыс, инверсия

**К.В. Kaliyekperova<sup>\*1,2</sup>, R.I. Shakirzyanov<sup>1</sup>, D.I. Tishkevich<sup>3</sup>,  
A.Zh. Zhaksylyk<sup>4</sup>**

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

<sup>2</sup>RSE on the REM Institute of Nuclear Physics of the ARKAE, Almaty, Kazakhstan

<sup>3</sup>SSPA "Scientific and Practical Center of NAS of Belarus for Materials Science", Minsk, Belarus

<sup>4</sup>NJSC Kazakh National Agrarian Research University, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: kaliekperova\_kb\_1@enu.kz, shakirzyanov\_ri@enu.kz, dashachushkova@gmail.com, ag.vet21@gmail.com)

### **Study of the influence of phase composition variation in $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$ nanocomposites on the inhibition of corrosion mechanisms**

**Abstract.** The paper presents the results of studies of the influence of changes in the phase composition of  $(1-x)\text{Fe}_3\text{O}_4 - x\text{ZnO}$  nanocomposites on the resistance to corrosion processes that occur when nanoparticles come into contact with model phosphate buffer solutions that simulate the physiological environment of the body. A comparative analysis of the results at 25 °C and 45 °C makes it possible to conclude that temperature is the determining factor controlling the degree of structural changes of the spinel phase in a liquid medium. At room temperature, the nanocomposites exhibit high crystal chemical stability, whereas at 45 °C, a gradual evolution of the cation distribution, leading to an increase in the inversion degree and an increase in cationic disorder in the structure of  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  spinel, is observed. During the conducted studies, it was established that the growth in the content of the amorphous phase correlates with the recorded increase in the degree of inversion of the spinel phase and the growth of cationic disorder, which indicates a single degradation mechanism, including cation migration, defect formation, and partial amorphization of the structure. Moreover, even under the most severe degradation conditions (45 °C, 7 days), the total proportion of amorphous inclusions remains limited, which confirms the satisfactory structural stability of the studied nanocomposites.

**Keywords:** nanoparticles, corrosion, structural degradation, disorder, inversion

#### **References**

1. Raturi, P. et al., Ferrite nanoparticles for sensing applications, *Materials Horizons: From Nature to Nanomaterials*, pp. 151-187 (2023). [https://doi.org/10.1007/978-981-99-2583-4\\_9](https://doi.org/10.1007/978-981-99-2583-4_9)
2. Zhang, J. et al.,  $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$  nanoparticles: Synthesis, characterization, and enhanced gas sensing property for acetone, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 221, pp. 55-62 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.snb.2015.06.040>

3. Jeyadevan, B. et al., Polyol process for Fe-based hard(FCT-FePt) and soft(FeCo) magnetic nanoparticles, IEEE Transactions on Magnetics, 42(10), pp. 3030-3035 (2006). <https://doi.org/10.1109/tmag.2006.880149>
4. Can, M.M., Coşkun, M. and Firat, T., A comparative study of nanosized iron oxide particles; magnetite ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), maghemite ( $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) and hematite ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ), using ferromagnetic resonance, Journal of Alloys and Compounds, 542, pp. 241-247 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2012.07.091>
5. Salih, S.J. and Mahmood, W.M., Review on magnetic spinel ferrite ( $\text{MFe}_2\text{O}_4$ ) nanoparticles: From synthesis to application, Heliyon, 9(6), pp. 1-10 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e16601>
6. Céspedes, E. et al., Bacterially synthesized ferrite nanoparticles for magnetic hyperthermia applications, Nanoscale, 6(21), pp. 12958-12970 (2014). <https://doi.org/10.1039/c4nr03004d>
7. Sharifi, I., Shokrollahi, H. and Amiri, S., Ferrite-based magnetic nanofluids used in hyperthermia applications, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 324(6), pp. 903-915 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2011.10.017>
8. Kobayashi, T., Cancer hyperthermia using magnetic nanoparticles, Biotechnology Journal, 6(11), pp. 1342-1347 (2011). <https://doi.org/10.1002/biot.201100045>
9. Lemine, O.M. et al., Comparative heating efficiency of hematite ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) and nickel ferrite nanoparticles for magnetic hyperthermia application, Ceramics International, 46(18), pp. 28821-28827 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.08.047>
10. Li, R. et al., Corrosion at nanoscale: Insights from nanoscale zero-valent iron (NZVI) oxidation, ACS ES&E Engineering, 5(12), pp. 3198-3207 (2025). <https://doi.org/10.1021/acsestengg.5c00198>
11. Yaohan, D. et al., Strength degradation of a ferrite-bainite weathering steel subjected to corrosion fatigue environment, Corrosion Science, 208, p. 110690 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2022.110690>
12. Ansari F. A. et al., Volatile corrosion inhibitors for ferrous and non-ferrous metals and alloys: A review, International Journal of Corrosion and Scale Inhibition, 7(2), pp. 126-150 (2018). <https://doi.org/10.17675/2305-6894-2018-7-2-2>
13. Ma, I.A. et al., A concise review on corrosion inhibitors: Types, mechanisms and electrochemical evaluation studies, Journal of Coatings Technology and Research, 19(1), pp. 241-268 (2021). <https://doi.org/10.1007/s11998-021-00547-0>
14. Wang, J. et al., Corrosion resistant coating with passive protection and self-healing property based on  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ -MBT nanoparticles, Corrosion Communications, 7, pp. 1-11 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.corcom.2021.12.005>
15. Kaliyekperova, K.B. et al., Synthesis and investigation of the applicability of  $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{ZnO}$  nanoparticles as a basis for hyperthermic studies, Case Studies in Chemical and Environmental Engineering, 11, p. 101195 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2025.101195>
16. Dolabella, S. et al., Lattice strain and defects analysis in nanostructured semiconductor materials and devices by high-resolution x-ray diffraction: Theoretical and practical aspects, Small Methods, 6(2), p. 2100932 (2021). <https://doi.org/10.1002/smt.202100932>
17. Robinson, I. and Harder, R., Coherent X-ray diffraction imaging of strain at the nanoscale, Nature Materials, 8(4), pp. 291-298 (2009). <https://doi.org/10.1038/nmat2400>

18. Stepan, T. et al., Effect of nanoparticle size on the near-surface pH-distribution in aqueous and carbonate buffered solutions, *Electrochimica Acta*, 409, p. 139923 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2022.139923>

19. Hotze, E.M., Phenrat, T. and Lowry, G.V., Nanoparticle Aggregation: Challenges to understanding transport and reactivity in the environment, *Journal of Environmental Quality*, 39(6), pp. 1909-1924 (2010). <https://doi.org/10.2134/jeq2009.0462>

20. Chen, Y. et al., Interfacial reconstruction via A-site cationic inversion: Unlocking superior PMS activation in CO/MN Spinel for advanced water decontamination, *Applied Surface Science*, 709, p. 163844 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2025.163844>

21. Zhao, Q. et al., Spinel: Controlled preparation, oxygen reduction/evolution reaction application, and beyond, *Chemical Reviews*, 117(15), pp. 10121-10211 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.7b00051>

22. Tatarchuk, T., Studying the defects in spinel compounds: Discovery, formation mechanisms, classification, and influence on catalytic properties, *Nanomaterials*, 14(20), p. 1640 (2024). <https://doi.org/10.3390/nano14201640>

#### **Сведения об авторах:**

**Калиекперова К.Б.** – автор для корреспонденции, докторант PhD кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

**Шакирзянов Р.И.** – к.ф.-м.н., младший научный сотрудник, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

**Тишкевич Д.И.** – к.ф.-м.н., доцент, старший научный сотрудник лаборатории физики магнитных пленок Государственного научно-производственного объединения «Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению», Минск, Беларусь.

**Жақсылық А.Ж.** – докторант PhD, Казахский национальный аграрный исследовательский университет, Алматы, Казахстан.

**Калиекперова К.Б.** – хат-хабар авторы, PhD докторант, Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар кафедрасы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

**Шакирзянов Р.И.** – физика-математика ғылымдарының кандидаты, кіші ғылыми қызметкері, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

**Тишкевич Д.И.** – физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, аға ғылыми қызметкер, магниттік пленка физикасы зертханасы, «Беларусь Ұлттық ғылым академиясының материалтану ғылыми-практикалық орталығы» мемлекеттік ғылыми-өндірістік бірлестігі, Минск, Беларусь.

**Жақсылық А.Ж.** – PhD докторант, Қазақ ұлттық аграрлық зерттеу университеті, Алматы, Қазақстан.

**Kaliyekperova K.B.** – the corresponding author, PhD student, Department of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

**Shakirzyanov R.I.** – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Junior Researcher, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

**Tishkevich D.I.** – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Senior Researcher, Laboratory of Magnetic Film Physics, State Scientific and Production Association "Scientific and Practical Center for Materials Science of the National Academy of Sciences of Belarus", Minsk, Belarus.

**Zhaksylyk A.Zh.** – PhD student, Kazakh National Agrarian Research University, Almaty, Kazakhstan.



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 29.05.15

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-124-136>

ҒЫЛЫМИ МАҚАЛА

## Ашық кванттық жүйелердің динамикасын Ли топтары мен алгебралары арқылы зерттеу

Т.Б. Қоштыбаев<sup>1</sup>, А.К. Ершина<sup>1\*</sup>, А.М. Татенов<sup>1</sup>,  
А.Т. Жавлиева<sup>1</sup>, М.Е. Алиева<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан, <sup>2</sup>Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

(E-mail: koshtybayev70@mail.ru, 50ershina@gmail.com, a.tatenov1@gmail.com, zhavliyeva.11@gmail.com, moldir-2008@mail.ru)

**Аңдатпа.** Мақалада кванттық жүйелердің күйлерін, үзіліссіздік және симметриялылық қасиеттерін тығыздық матрицасы арқылы сипаттауға арналған теориялық зерттеулер ұсынылған. Операторлар, олардың коммутациялары Ли топтары мен алгебралары арқылы өрнектелді. Тығыздық матрицасына арналған Нейман немесе Лиувилдің кванттық теңдеуін стационар гамильтониан үшін шешу арқылы жүйедегі барлық оқиғалардың себептеріне Ли алгебралары тұрғысынан талдаулар жасалды. Тығыздық матрицасының уақытқа тәуелділігінен бақыланушылар тәуелділігіне өту арқылы бақыланушылардың Гейзенбергтік көріністегі динамикасына арналған және бақыланушылардың Ли алгебрасын өзгертпейтін унитарлы теңдеулерге қол жеткізілді. Линдبلاد теңдеуін стационарлы супер оператор үшін шешу арқылы қоршаған ортамен әлсіз әсерлесетін ашық кванттық жүйелердің динамикасына жан-жақты баға берілді. Қоршаған ортамен әсерлесетін кванттық әлемнен классикалық әлемге өту мүмкіндігі Блох шарының сығылуы арқылы көрсетілді. Лидің бір алгебрасынан басқа бір алгебрасына көшу жағдайлары нақтыланды. Линдبلاد теңдеуі және оның шешімі Гелл–Манн матрицасы үлгісінде жазылды. Есептеулер кезінде ішкі алгебралардың базистері мен генераторларының арасындағы байланыстар төрт өлшемді жағдайға сәйкестендірілді. Уақыт айнымалысының үлкен мәндері үшін тығыздық матрицасының сығыла алатын аймағының математикалық нұсқасы анықталды.

**Түйін сөздер:** алгебра, топтар, кванттық ашық жүйе, тығыздық матрицасы, операторлар, симметрия, үзіліссіздік, күйлер

Жіберілді 14.01.2026. Өзгертілді 7.02.2026. Қабылданды 25.02.2026. Онлайн қол жетімді 30.03.2026.

\*хат-хабар авторы

## Кіріспе

Топтар мен симметриялар теориясы математикалық физиканың есептеу, зерттеу, талдау аппараты ретінде теориялық физикадағы маңызды құбылыстарды зерттеу құралына айналып отыр. Элементар бөлшектер физикасындағы, космологиядағы және осы секілді басқа да ғылыми салалардағы (бағыттардағы) үздіксіз симметрияларды зерттеуде Лидің топтары мен алгебралары маңызды рөл атқаруда. Релятивистік физиканың негізін Лоренц және Пуанкере топтары құраса, элементар бөлшектердің заманауи теориясы калибрлеуші топтағы калибрлік симметрияны басшылыққа алады. Ли алгебраларының қалыптасу қарқыны Ли топтарының дамуына байланысты болады. Ли алгебралары мен топтарының теориясын 1870 жылы норвегиялық математик Софус Ли (1842–1899) қалаған болатын, алайда бұл теорияға мұндай атты (атауды) 1934 жылы неміс математигі Герман Вейл берді. Бұған дейін бұл теория «топтың инфиниттік түрлендірулері» деген атпен белгілі болған. Софус Ли дифференциалдық теңдеулер үшін Эверис Галуаның алгебралық теңдеулерге арнап жасаған теориясына ұқсас өзіндік ерекшелігі бар теория жасағысы келді. Оның осы бағытта атқарған қажырлы еңбектерінің нәтижесінде дүниеге Ли топтарының теориясы келді. Ли әртүрлі сипаттағы (ерекшеліктегі) дифференциалдық теңдеулерді интегралдауға арналған арнайы әдістерді талдай келе мынадай қорытындыға тоқталды: бұл әдістердің барлығы да шын мәнісінде интегралдаудың жалпыламалы тәсілінің дербес жағдайлары болуы мүмкін [1,2]. Ли топтарының концепциясы математика мен жаратылыстың *үзіліссіздік және симметриялылық* атты фундаменталды (іргелі) екі идеяларын тоғыстырды. Сонымен бірге, Ли алгебралары-базистік элементтері коммутация немесе антикоммутация ережелеріне бағынатын алгебра.

Кванттық механикадағы ашық жүйе деп сыртқы ортамен энергия және зат алмаса алатын жүйені айтады. Жүйе ашық болуы үшін тағы бір маңызды шарт орындалуы тиіс, ол – яғни жүйенің динамикасына қатысты кез-келген бір бақыланушы шаманы өлшеу әрекеттері осы жүйенің кванттық күйінің қайтымсыз өзгерістерімен байланыста болуы. Сондықтан да, ашық жүйелердің кванттық теориясында кванттық өлшеулердің орны ерекше. Классикалық механикада өлшеулер аса бір маңызға ие емес. Ашық жүйелер гамильтонды және гамильтонды емес болып бөлінеді. Гамильтондық жүйелердің даму қарқыны толықтай оның гамильтонианымен анықталады. Мұндай жүйелер унитарлы операторлардың бір параметрлі тобы арқылы сипатталады. Қозғалыс теңдеулері ретінде Нейман және Гейзенберг теңдеулері қолданылады. Сыртқы әсерлердің ықпалындағы маркты гамильтонды емес кванттық жүйелердің динамикасы Линдблад теңдеуімен анықталады.

Кеңістік – уақыт пен бөлшектердің түрленуі кезінде кванттық механика теңдеулерінің өзгеріссіз қалуы кванттық механикадағы *симметриялар* деп аталады. Жалпы алғанда, физикадағы симметрияларға, инварианттылық пен сақталу заңдарына физикалық теориялар мен модельдерді жасау кезіндегі шектеулер ретінде қарайтыны жасырын емес. Ал, іс жүзінде бұлар – мәселені шешудің және нақтылы бір нәтижені болжаудың таптырмас тәсілдері. Сақталу заңдары мәселені түбегейлі шешіп бере алмағанымен, шешуге қатысты ережелер мен шектеулерді ұтымды пайдалануға бағыт-бағдар береді.

Соңғы уақытты элементар бөлшектер физикасын симметриялық тұрғыда зерттеу шындап қолға алынған, яғни физиканың бұл саласына Ли топтары мен алгебраларын қолданылуы үздіксіз симметриялы құбылыстардың жан-жақты зерттелуіне жол ашты. Кванттық механикадағы кеңістіктік айналу мен уақыт бойынша ығысуды үзіліссіз симетриялар қатарына жатқызуға болады. Ли алгебралары – Ли топтарының сызықтық жуықталған кейіпі (үлгісі), ол математикалық есептеулерді ықшамды, әрі оңтайлы жүргізуге мүмкіндік береді. Кванттық механикадағы импульс және бұрыштық момент операторлары Ли алгебрасының генераторлары ретінде бақыланатын шамалармен байланысы бар. Ал, Ли топтары болса кванттық күйлерді симметриялық қасиеттеріне қарай кластарға бөліп бере алады. Мысалы, айналу (айналыс) топтары атомдар мен ядролардың сфералық симметрияларын зерттесе, Пуанкере топтары релятивистік кванттық механикадағы бөлшектің жай-күйін қарастырады. Кванттық механикадағы бұрыштық момент  $SO(3)$  айналыс топтары арқылы сипатталады. Сонымен бірге, Ли топтары кванттық сандар мен энергия деңгейлерін анықтайтын симметриялармен айналысатын болғандықтан, олар арқылы атомдар мен ядролардың спектрлерінің құрылымын түсіндіре аламыз. Өрістердің кванттық теориясында Ли топтары лагранжиандардың симметриясын сипаттауда және элементар бөлшектерді кластарға бөлу мақсатында қолданылады. Олай болса, Лидің алгебралары мен топтарын кванттық жүйелер мен олардың әсерлесулерін терең түсінуге мүмкіндік (пәрмен) беретін құдіретті математикалық аппарат ретінде тануға болады екен. Байланысқан күйлер спектрлерінің кулондық тарту өрісінде квантталуын және үш өлшемді изотропты осциллятордың кванттық күйлерінің симметрия топтары көрінісінде сипатталуын Ли алгебрасының кванттық физикадағы қолданысының тағы бір көрінісі деп қабылдау керек. Кванттық жүйедегі симметриялар мен заңдылықтар көбіне операторлар алгебрасы арқылы өрнектеледі, бұл қадам олардың динамикасы мен қасиеттерін қозғалыс теңдеулерін шешпей-ақ зерттей беруге жағдай жасайды. Осы келтірілген жағдайлар мен мақаланың тақырыбы бойынша төменде келтірілген бірқатар тың мәселелер қарастырылып, шешілетін болады:

- кванттық жүйелердің күйлерін, үзіліссіздік және симметриялылық қасиеттерін тығыздық матрицасы арқылы сипаттау;
- жүйелердегі симметрияларды, операторларды, коммутацияларды Ли топтары мен алгебралары арқылы зерттеу;
- тығыздық матрицасына аралған Нейман немесе Лиувилдің кванттық теңдеуін стационарлы гамильтониан жағдайында шешу арқылы жүйедегі оқиғалардан ақпараттар алу;
- оқиғалардың себептеріне Ли алгебрасы арқылы талдаулар жасау;
- тығыздық матрицасының уақытқа тәуелділігінен бақыланушылар тәуелділігіне ауысу арқылы бақыланушылардың Гейзенбергтік көріністегі динамикасын сипаттайтын және бақыланушылардың Ли алгебрасын өзгертпейтін унитарлы теңдеулерге қол жеткізу;
- ашық кванттық жүйелердің динамикасын Линдبلاد теңдеуін супер оператор жағдайында шешу;

- ашық кванттық әлемнен классикалық әлемге өтуді Блох шарының сығылуы арқылы түсіндіру;
- Лидің бір алгебрасынан екінші бір жаңа алгебраға көшу жағдайларын көрсету, Линдبلاد теңдеуі мен оның шешімін Гелл-Манн матрицасы үлгісінде жазу.
- ішкі алгебралардың базистері мен генераторларының арасындағы байланыстарды төрт өлшемді жағдайға сәйкестендіру.

### Әдіснама

Ли топтары мен алгебраларының физикадағы, математикадағы және химиядағы симметрияларды сипаттауын, талдауын зерттеу әдіснамасына жатқызуға болады. Осылармен бірге, атомдық және субатомдық деңгейдегі құбылыстарды модельдеу, импульс пен энергия секілді бақыланатын шамаларға қатысты есептеулерді жүргізу және еркіндік дәрежелерінің саны үлкен болып келген жүйелерге өрістің кванттық теориясын қолдану мәселелері де Ли топтары мен алгебраларының қолданылу әдіснамасына кіреді. Топтардың жалпы теориясы молекулалық құрылымдар мен кристалдық торлардың кластарын қарастырса, Ли топтары дифференциалдық теңдеулер мен көпқырлылықтарды және теориялық физикадағы заңдылықтарды басқарып отыратын симметрияларды сипаттау мақсатында қолданылады. Кванттық механикадағы алгебралық тәсілдер қатарына кванттық жүйелерді сипаттайтын гильберттік кеңістіктерге ұқсайтын алгебралық құрылымдарды жатқызуға болады. Кванттық механикада Ли топтары жүйенің эволюциясын сипаттайтын унитарлы (тұтас) түрлендірулер рөлін, ал Ли алгебралары бақыланатын физикалық шамалар мен олардың түрленуіне сәйкес келетін эрмиттік операторлар қызметін атқарады. Орбитадағы электрондардың жүйесі, электрондардың пайда болуы мен жойылуына қатысты операторлардың арасындағы коммутациялық қатынастыр Ли алгебрасының негізгі зерттеу нысандарына жатады [3]. Бұл жерде коммутаторлар классикалық механикадағы Пуассон жақшаларының кванттық үлгісі болып табылады. Ли алгебрасы мен Ли топтарының арасында  $\exp_{\text{Li}}(A)$  түрдегі экспоненттік байланыс бар, мұндағы  $A$ -Ли алгебрасының элементі (эрмиттік матрица), ал осы байланыстың нәтижесінде Ли тобының элементі (унитарлы матрица) пайда болады. Кванттық есептеулерде Ли топтары мен алгебралары кубиттердің күйлерін басқару үшін қолданылады. Ли алгебрасы унитарлы операторлар жиынын құрастыруға жағдай жасайды, ал олар өз кезегінде кванттық алгоритмдердің орындалуын іске асырады. Олай болса, Ли алгебраларын үздіксіз симметриясы бар кванттық жүйелерді зерттеуге қолданылатын математикалық аппарат деп және кванттық есептеулерде кванттық алгоритмдерді жасау, талдау құралы деп қабылдауға болады екен.

### Нәтижелер мен Талқылау

Саны жағынан өте көп құбылыстарды жан-жақты сипаттай алатын ең алғашқы іргелі физикалық теория – классикалық механика. Ал, кванттық механика болса осындай құбылыстардың өрісін кеңейтіп берді. Кванттық әлемді сипаттау тәсілдерінің барлығының да өзіндік ерекшелігі болғанымен, солардың ішінде тығыздық

матрицасының алатын орны бөлек десе болады. Оның элементі (құрамдас бөлігі) ретінде қандай да бір көп өлшемді нысанды қарастыруға болады. Мысалы, сфера арқылы Блох кубитінің күйлерін сипаттай алатын болсақ, онда классикалық әлем осы сфера ішіндегі  $z$  бағытта тартылған кесіндіге және тығыздық матрицасының диагоналды элементтеріне сәйкес келетін болады. Ал, сфераның барлық қалған бөлігі кванттық әлемге тиесілі. Матрицаның диагоналды емес элементтері арқылы сипатталатын әртүрлі күйлердің суперпозициялануы – кванттық теорияның өзіне ғана тән ерекшелік.

Физикада дүниеге келген жаңа теорияда ескі теория шекті жағдай ретінде отырады. Кванттық және классикалық механиканың математикалық аппараттарын байланыстыру үшін  $\hbar \rightarrow 0$  шартынан басқа Ли алгебралары арқылы сипатталатын шекті жағдайлар да бар. Тұйық жүйелер үшін шредингерлік көріністегі тығыздық матрицасы фон Нейман теңдеуі немесе кванттық жүйенің суперпозиция, коммутаттылық емес және т.с.с. қасиеттерін қасиеттерін толықтай сақтайтын Лиувилл теңдеуі арқылы анықталады:

$$\dot{\rho}(t) = \frac{i}{\hbar} [\rho(t), H] = L(t)\rho(t) \quad (1)$$

мұндағы  $L(t)$  – Лиувиллдің супероператоры [4]. Егер,  $H$  гамильтониан уақытқа тәуелді болмаса, онда (1)-дің шешімі

$$\rho(t) = Y(t)\rho(0)Y^*(t) = \Omega_t\rho(0) = \exp(Lt)\rho(0) \quad (2)$$

Бұл шешімде  $Y(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)$  және  $\Omega = \exp(Lt)$ . Тығыздық матрицасының уақытқа тәуелділігін бақыланушылар тәуелділігіне аудару арқылы бақыланушылардың Гейзенбергтік көріністегі динамикасына қол жеткізетін боламыз:

$$\dot{\Gamma}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, \Gamma(t)] = L^*(t)\Gamma(t) \quad (3)$$

$$\Gamma(t) = Y^*(t)\Gamma(0)Y(t) = \Omega^*(t)\Gamma(0) = \exp(L^*t)\Gamma(0) \quad (4)$$

Осы жазылған унитарлық (тұтас) теңдеулер бақыланушылардың Ли алгебрасының түр-сипатын өзгертпейді.

Қоршаған ортамен әлсіз әсерлесулерге түсетін ашық кванттық жүйелердің динамикасы Лиувилл теңдеуінен алынатын төмендегі Линдблад теңдеуімен көрсетіледі:

$$\dot{\rho} = \frac{i}{\hbar} [\rho, H] + \sum_k v_k \left\{ V_k \rho V_k^* - \frac{1}{2} (V_k V_k^* \rho + \rho V_k V_k^*) \right\} = L(t)\rho(t) \quad (5)$$

Байқап отырғанымыздай, (5) – теңдеу (1) – теңдеудің оң жағына (ашық жүйелердің динамикасының тұтастылығына сәйкес келетін бөлігіне) механиканың шашыраңқылығына жауап беретін мүшелерді қосу арқылы алынған. Теңдеудегі  $V_k$  – Линдблад операторлары болғандықтан,  $L$  – Линдбладтың супер операторлары деп аталатын болады,  $v_k$  – жүйедегі әртүрлі әлсіреулерге сәйкес келетін релаксациялар

жылдамдығы.  $L$ -дің стационарлы (уақытқа тәуелсіз) жағдайына сәйкес келетін (5)-теңдеудің шешімін (2)-секілді кейіпте жазуға болады:

$$\rho(t) = \Omega_t \rho(0) = \exp(Lt) \rho(0) \quad (6)$$

Қоршаған ортамен әсерлесулер кванттық қасиеттердің жойылуына жеткізеді де ашық жүйеде классикалық заңдылықтар орын ала бастайды. Бұл жағдай тығыздық матрицасындағы диагоналды емес элементтердің нөлге айналуына және бақыланушылар алгебрасына қосымша абельді ішкі алгебралардың қосылуына себеп болады. Осы келтірілген тұжырымдарға мысал келтіру арқылы түсініктеме жасап өтейік: (1)-теңдеу екі деңгейлі жүйенің бастапқы күйлерін айналдыра отырып, оның  $z$  осыне (классикалық әлемге) жақындап кетпеуін қадағалап отырады [5, 6]; ал (5)-теңдеу болса бастапқы кванттық күйлерді  $z$  осыне барынша жақындата отырып, оны классикалық күйге айналдырады. Олай болса, Лидбладтың (5) және (6) түрлердегі теңдеулері арқылы сипатталатын ашық кванттық жүйелердің динамикасы кванттық әлемді (Блох шары) классикалық жағдайға ( $z$  осындағы кесіндіге) дейін сығады (контракция). Ли алгебраларының (топтарының) кеңістіктік контракциясы да топтың құрылымдық тұрақтыларының сығылуы түрінде байқалады, бұл жағдай коммутаторлардың нөлденуіне әкеліп соғады. Олай болса, қоршаған ортамен әсерлесетін кванттық әлемнен классикалық әлемге өту мүмкіндігін контракция тілінде түсіндіруге болады екен.

Гейзенбергтік бейнеде  $A$  бақыланушылар үшін Линдблад теңдеуі мына түрде жазылады:

$$\dot{A} = \frac{i}{\hbar} [H, A] + \sum_k v_k \left\{ V_k^* A V_k - \frac{1}{2} (V_k^* V_k, A) \right\} = L^*(t) A(t) \quad (7)$$

$$A(t) = \Omega_t^*(A) = \exp(L^* t) A(0) \quad (8)$$

(8)-ге сәйкес келетін коммутациялық қатынастардың уақыт бойынша өзгерістері төмендегідей:

$$[A_i, A_j]_t \equiv (\Omega_t^*)^{-1} [\Omega_t^*(A_i), \Omega_t^*(A_j)] \equiv C_{ij}^k(t) A_k \quad (9)$$

Бастапқы алгебра жаңаланатын  $t \rightarrow \infty$  шартында бастапқы Ли алгебрасының контракциясы деп аталатын төмендегі өрнек шығады:

$$[A_i, A_j]_\infty \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} [A_i, A_j]_t = C_{ij}^k(\infty) A_k \quad (10)$$

$g$  белгілеуіндегі Ли алгебра құрамынан  $g_0$  құрылымдық алгебрасын бөліп алайық, ал құрылымдағы қалған генераторлар  $g_1$  ішкі жиынын құрайтын болсын. Жалпы сипаттағы коммутациялық қатынастарды мына түрде көрсетуге болады [7–9]:

$$[g_0, g_0] = g_0, \quad [g_0, g_1] = g_0 + g_1, \quad [g_1, g_1] = g_0 + g_1 \quad (11)$$

$g_1$ -гі барлық генераторларды  $\theta$ -ға көбейтейік:

$$[g_0, g_0]_\theta = g_0, [g_0, g_1]_\theta = \theta g_0 + g_1, [g_1, g_1]_\theta = \theta^2 g_0 + \theta g_1 \quad (12)$$

$\theta \rightarrow 0$  шартында жаңа Ли алгебрасына өтеміз, оған сәйкес келетін коммутациялық қатынастар төмендегідей кейіпті қабылдайды:

$$[g_0, g_0]_0 \in g_0, [g_0, g_1]_0 = \in g_1, [g_1, g_1]_0 = 0 \quad (13)$$

Лидің  $su(3)$  алгебрасындағы генераторлардың диагоналды түрлендірулерін Гелл-Манн матрицасы үлгісінде беруге болады:

$$\tilde{\delta} = M_\theta \delta \quad (14)$$

Мұндағы  $\delta = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_s)^\rho$ ,  $\delta_i$ -Гелл-Манн матрицалары,  $M_\theta$ -диагоналдарында  $\theta_i$  параметрлері ғана тұратын диагоналдық матрица. Үш деңгейлі жүйелер (кутрит) мен Лидің  $su(3)$  алгебрасын қолдана отырып Линдблад теңдеуінің шешімдерін Гелл-Манн матрицасы кейіпіне келтіруге болады. Бұл жерде  $g_1$  жиынындағы бақыланушылар өздерінің кванттық қасиеттерін жойып, абельдік ішкі алгебра құрайтын болады. Ал,  $g_0$  құрылымындағы бақыланушылар болса сыртқы әсерге төзімділік қасиет көрсете отырып өзгеріссіз қала береді.  $su(3)$ -тен бір өлшемді  $g_0$  алгебраны таңдап алу кезінде осы алгебраға кіретін тығыздық матрицасы тек стационар күйлерге ғана қатысты болады. Лиувилдің супер операторының  $(L, L^*)$  меншікті мәндерінде ( $\ell$ ) релаксация жылдамдықтары, диссипатция процестері және декогеренттілік туралы мәліметтер болғандықтан, олар жүйенің ең маңызды физикалық қасиеттерін анықтап бере алады [10, 11]. (5) және (7) түрлердегі Линдблад теңдеулерін (13)-контракциясында жазу үшін  $g_0$  ретінде базисі  $\lambda_3, \lambda_8, \lambda_6, \lambda_7$  түрдегі 4 өлшемді  $g_0 = E(1) + su(2)$  ішкі алгебраны аламыз, ал  $g_1$ -гі генераторлар рөлін  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_4, \lambda_5$  Гелл-Манн матрицалары атқарады.  $M_\theta$  контракциясының түрленуі төмендегідей түрде орындалады:

$$M_\theta g = g_0 + \theta g_1 = \begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & a_{23}^* & a_{33} \end{vmatrix} + \theta \begin{vmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} \\ a_{12}^* & 0 & 0 \\ a_{13}^* & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (15)$$

Нәтижеде, осы түрлендіруге сәйкес келетін тығыздық матрицасына арналған Линдблад теңдеуі мен оның шешімі мынадай болады [12]:

$$\dot{\rho} = -v \begin{vmatrix} 0 & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & 0 & 0 \\ \rho_{31} & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \rho(t) = \begin{vmatrix} \rho_{11}(0) & e^{-vt} \rho_{12}(0) & e^{-vt} \rho_{13}(0) \\ e^{-vt} \rho_{21}(0) & \rho_{22}(0) & \rho_{23}(0) \\ e^{-vt} \rho_{31}(0) & \rho_{32}(0) & \rho_{33}(0) \end{vmatrix} \quad (16)$$

Уақыттың үлкен мәндерінде тығыздық матрицасы сыртқы әсерлерге төзімді

$$g_0 = E(1) + su(2) \quad (17)$$

аймаққа дейін сығыла алады.

## Қорытынды

Мақалада көтерілген мәселелер, олардың шешілу әдістері және алынған нәтижелер ұсынылып отырған тақырыптың өзектілігін айғақтайды. Тақырып аясында авторлар ұжымы орындалған ауқымды математикалық есептеулерді соңғы уақыттағы заманауи зерттеулермен ұштастыру арқылы кванттық ашық жүйелердің динамикасын дамытуға өздерінің де үлестерін қоса білді деген сенімдеміз. Ли топтары мен алгебраларын кванттық жүйеге қолдану арқылы ондағы бірқатар симметриялық қасиеттерді жан-жақты түсіндіруге болатындығы дәлелденді. Осы бағытта мынадай нақтылы нәтижелерге қол жеткізілді: жүйелердегі симметриялар, операторлар және олардың өзара коммутацияларды Ли топтары мен алгебралары арқылы зерттелді; тығыздық матрицасына аралған Нейман, Лиувилдің теңдеулері стационар жағдайлар үшін шешіліп, сол арқылы жүйедегі процестерден мәліметтер алынды; тығыздық матрицасының уақытқа тәуелділігінен бақыланушылар тәуелділігіне өту арқылы Гейзенбергтік көріністегі унитарлы теңдеулер шығарылып көрсетілді; ашық кванттық жүйелердің динамикасы Линдблад теңдеуі арқылы зерттелді; кванттық әлемнен классикалық ортаға өту жағдайлары Блох шарының сығылуы арқылы қарастырылды; Ли алгебралары арасындағы байланыстардың механизмдері зерделеніп, Линдблад теңдеуі мен оның шешімін Гелл-Манн матрицасы үлгісіне келтіру іске асырылды; ішкі алгебралардың базистері мен генераторларының арасындағы байланыстар төрт өлшемді жағдайға негізінде жасалды. Алынған осы теориялық нәтижелерді алгебраға негізделген алгоритмдік әдістерде, кванттық технологиялар мен есептеулерде, көп кубитті кванттық жүйелерде қолдануға болады. Ең бастысы, бұл нәтижелер ашық кванттық жүйелер динамикасын зерттеу модельдерін жасау кезінде өзіндік септігін тигізе алады.

## Авторлардың қосқан үлесі.

Т.Б. Қоштыбаев – кванттық жүйелердің күйлеріне, үзіліссіздік пен симметриялылық қасиеттеріне тығыздық матрицасы арқылы сипаттау мәселесін қойып, оның шешілу жолдарын ұсынушы. Тығыздық матрицасына аралған Нейман немесе Лиувилдің кванттық теңдеуін стационар гамильтониан үшін шешті, сол арқылы жүйедегі барлық оқиғалардың себептеріне Ли алгебрасы арқылы талдаулар жасады. Тығыздық матрицасының уақытқа тәуелділігінен бақыланушылар тәуелділігіне өту арқылы бақыланушылардың Гейзенбергтік көріністегі динамикасын сипаттайтын және бақыланушылардың Ли алгебрасын өзгертпейтін унитарлы теңдеулерін алуға атсалысты. Ілеспе хатты әзірлеп, редакцияға жолдауды іске асыруға басшылық жасаған.

А.К. Ершина – тығыздық матрицасының уақытқа тәуелділігінен бақыланушылар тәуелділігіне өту арқылы бақыланушылардың Гейзенбергтік көріністегі динамикасын сипаттайтын, әрі бақыланушылардың Ли алгебрасын өзгертпейтін унитарлы теңдеулерді алуға арналған есептеулерді орындады. Қоршаған ортамен әлсіз әсерлесетін ашық кванттық жүйелердің динамикасы Линдблад теңдеуін стационарлы супер оператор үшін шешті. Әдебиеттерді іріктеу жұмыстарына басшылық жасаушы. Операторлардың коммутацияларын Ли топтары мен алгебралары арқылы жүзеге асыруды орындаған.

А.М. Татенов – қоршаған ортамен әлсіз әсерлесетін ашық кванттық жүйелердің динамикасы Линдبلاد теңдеуін стационарлы супер оператор үшін шешуге атсалысты. Әдебиеттерді іріктеуге көмектесті. Мәтіндегі математикалық өрнектерді тексерді.

А.Т. Жавлиева – қоршаған ортамен әлсіз әсерлесетін ашық кванттық жүйелердің динамикасы Линдبلاد теңдеуін стационарлы супер оператор үшін шешуге атсалысты, шешімнің шарттарын тексерді. Әдебиеттерді іріктеу жұмыстарына басшылық жасаушы. Операторлардың коммутацияларын Ли топтары мен алгебралары арқылы жүзеге асыруды орындаған.

М.Е. Алиева – есептеулер кезіндегі ішкі алгебралардың базистері мен генераторларының арасындағы байланыстар төрт өлшемді жағдайға сәйкестендірді. Уақыт айнымалысының үлкен мәндері үшін тығыздық матрицасының сығыла алатын аймағының математикалық нұсқасын анықтауға атсалысты. Мақаланың талапқа сай рәсімделуін орындап, аңдатпаның орыс және ағылшын мәтіндерін жазды, әдебиеттер тізімінің ағылшын нұсқасын жасады және мақаланы сайт арқылы редакцияға жолдады.

### Әдебиеттер тізімі

1. С.Н. Торгаев, И.Д. Шульга, Е.А. Юрченко, М.Л. Громов, Основы квантовых вычислений (СТТ, Томск, 2020), с. 100.
2. Е.В. Мещерина, А.Н. Благовисная, О.А. Пихтилькова, Развитие теории алгебры Ли, Вестник Омского университета, №1, с.4-11 (2022). [https://www.doi.org/%2010.24147/1812-3996.2022.27\(1\).4-11](https://www.doi.org/%2010.24147/1812-3996.2022.27(1).4-11)
3. Э.В. Киссин, В.С. Шульман, О представлениях групп и алгебр в пространствах с индефинитной метрикой, Contemporary Mathematics. Fundamental Directions, №2, с.295-315 (2021). <https://doi.org/10.22363/2413-3639-2021-67-2-295-315>
4. В.В. Варламов, Алгебраическая квантовая механика, Математические структуры и моделирование, №2, с.4-23 (2020). <https://doi.org/10.24147/2222-8772.2020.2.4-23>
5. В.В. Варламов, Алгебраическая квантовая механика, Математические структуры и моделирование, №3, с.4-24 (2021). <https://doi.org/10.24147/2222-8772.2021.3.4-24>
6. В.В. Горбачевич, Основы теории Ли для E-структур и некоторые ее применения, Известия РАН. Серия Математика, №2, с.34-61 (2022). <https://doi.org/10.4213/im9115>
7. А.А. Premet, D.I. Stewart, Classification of the maximal subalgebras of exceptional Lie algebras over fields of good characteristic, Journal of the American Mathematical Society 32 (4), p.965-1008 (2019). <https://doi.org/10.1090/jams/926>
8. А.В. Сюракшин, В.Д. Лахно, В.Ю. Юшанхай, Компьютерное моделирование переноса заряда в молекуле ДНК в рамках простой модели открытой квантовой системы, Математическая биология и биоинформатика, № 19, с.212-231 (2024). <https://doi.org/10.17537/2024.19.212>
9. T. Yoneya, K. Fujimoto, Y. Kawaguchi, Path-integral formulation of truncated Wigner approximation for bosonic Markovian open quantum systems, Annals of Physics 479, No 170072 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.aop.2025.170072>
10. H. Triviño, F. Mesa, V.A. Ballesteros, Quantification of memory effects in topological two-band open quantum systems, Heliyon 22(10), No e40552 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e40552>

11. J. Polonyi, Action for classical, quantum, closed and open systems, Annals of Physics 467, No 169694 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.aop.2024.169694>

12. E.V. Karachanskaya, Programmed control with probability 1 for stochastic dynamical systems, Journal of Mathematical Sciences 248 (1), p.67-79 (2020). <https://doi.org/10.1007/s10958-020-04856-4>

**Т.Б. Коштыбаев<sup>1</sup>, А.К. Ершина<sup>1\*</sup>, А.М. Татенов<sup>1</sup>,  
А.Т. Жавлиева<sup>1</sup>, М.Е. Алиева<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Казахский национальный женский педагогический университет,  
Алматы, Казахстан*

<sup>2</sup> *Казахский национальный педагогический университет имени Абая,  
Алматы, Казахстан*

*(E-mail: koshtybayev70@mail.ru, 50ershina@gmail.com, a.tatenov1@gmail.com,  
zhavliyeva.11@gmail.com, moldir-2008@mail.ru)*

### **Исследование динамики открытых квантовых систем с использованием групп и алгебр Ли**

**Аннотация.** В статье предложены подходы описания состояний квантовых систем, свойств непрерывности и симметрии через матрицу плотности, а также исследование симметрий в системах, операторов и их коммутаторов с помощью групп и алгебр Ли. В частности, с помощью решений уравнения Неймана или квантового уравнения Лиувилля для случая стационарного гамильтониана, была получена информация обо всех процессах, происходящих в системе, а также с помощью алгебры Ли были проанализированы причины этих процессов. Переходя от временных зависимостей к зависимостям наблюдаемых были получены унитарные уравнения, описывающие динамику в гейзенберговском представлении, не изменяющие алгебру Ли. Динамика открытых квантовых систем, слабо взаимодействующих с окружающей средой, описаны с помощью решений уравнения Линдблада для стационарного супероператора. Переход от квантового мира, взаимодействующего с окружающей средой, к классическому миру осуществлен через условия сжатия шара Блоха. Были установлены условия переходов от одной алгебры к новой алгебре. Уравнение Линдблада и его решение записаны в образце матрицы Гелл-Манна. Во время расчетов связи между базисами внутренних алгебр и генераторами были приведены к четырехмерному случаю. Для больших значений временной переменной показана математическая формулировка области сжимаемости матрицы плотности.

**Ключевые слова:** алгебра, группы, квантовая открытая система, матрица плотности, операторы, симметрия, непрерывность, состояния.

**T.B. Koshtybayev<sup>1</sup>, A.K. Yershina<sup>1\*</sup>, A.M. Tatenov<sup>1</sup>, A.T. Zhavliyeva<sup>1</sup>, M.E. Aliyeva<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Kazakh National Women's Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan*

<sup>2</sup> *Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan*

*(E-mail: koshtybayev70@mail.ru, 50ershina@gmail.com, a.tatenov1@gmail.com, zhavliyeva.11@gmail.com, moldir-2008@mail.ru)*

### **Study of the dynamics of open quantum systems using Lie groups and algebras**

**Abstract.** The paper proposes approaches to the description of quantum system states and to the properties of continuity and symmetry through the density matrix, and explores symmetries in systems, operators, and their commutators using Lie groups and Lie algebras. Specifically, by solving the Neumann equation (or quantum Liouville equation) for a stationary Hamiltonian, information was obtained from all processes occurring in the system, and the underlying causes of these processes were analysed through Lie algebra. By considering the transition from temporal dependencies to the dependence of observables, unitary equations were obtained that describe the dynamics of observables in the Heisenberg representation while preserving the structure of the Lie algebra. The dynamics of open quantum systems weakly interacting with the environment are described through solutions of the Lindblad equation for a stationary superoperator. The quantum-to-classical transition, for a system interacting with its environment, was demonstrated under the condition of Bloch sphere contraction. The conditions for transitions from one algebra to another and for the formation of new algebras were established. The Lindblad equation and its solution were expressed in the Gell-Mann matrix representation. In the course of the calculations, the relations between the bases of internal algebras and generators were reduced to the four-dimensional case. For large values of the time variable, a mathematical formulation of the density matrix contractivity was presented.

**Keywords:** algebra, groups, open quantum system, density matrix, operators, symmetry, continuity, states.

#### **References**

1. Torgaev S.N., Shul'ga I.D., Jurchenko E.A., Gromov M.L. Osnovy kvantovyh vychislenij [Fundamentals of Quantum Computing] (Tomsk, STT, 2020, 100 p.). [in Russian]
2. Meshherina E.V., Blagovisnaja A.N., Pihitil'kova O.A. Razvitie teorii algebrы Li [Development of the Theory of Lie Algebras], Vestnik Omskogo universiteta [Bulletin of Omsk University], 1(27), 4-11 (2022). [https://doi.org/10.24147/1812-3996.2022.27\(1\).4-11](https://doi.org/10.24147/1812-3996.2022.27(1).4-11). [in Russian]
3. Kissin Je.V., Shul'man V.S. O predstavlenijah grupp i algebr v prostranstvah s indefinitnoj metrikoj [On Representations of Groups and Algebras in Spaces with an Indefinite Metric], Contemporary Mathematics. Fundamental Directions, 2(67), 295-315 (2021). <https://doi.org/10.22363/2413-3639-2021-67-2-295-315> [in Russian]
4. Varlamov V.V. Algebraicheskaia kvantovaja mehanika [Algebraic Quantum Mechanics], Matematicheskie struktury i modelirovanie [Mathematical Structures and Modeling], 2(54), 4-23 (2020). <https://doi.org/10.24147/2222-8772.2020.2.4-23> [in Russian]

5. Varlamov V.V. Algebraicheskaia kvantovaja mehanika [Algebraic Quantum Mechanics], Matematicheskie struktury i modelirovanie [Mathematical Structures and Modeling], 3 (59), 4-24 (2021). <https://doi.org/10.24147/2222-8772.2021.3.4-24> [in Russian]
6. Gorbacevich V.V. Osnovy teorii Li dlja E-struktur i nekotorye ee primenenija [Fundamentals of Lie Theory for E-Structures and Some of Its Applications], Izvestija RAN. Serija Matematika [Izvestiya of the Russian Academy of Sciences. Mathematics Series], 2(86), 34-61 (2022). <https://doi.org/10.4213/im9115> [in Russian]
7. Premet A.A., Stewart D.I. Classification of the maximal subalgebras of exceptional Lie algebras over fields of good characteristic, Journal of the American Mathematical Society, 32 (4), 965-1008 (2019). <https://doi.org/10.1090/jams/926>
8. Sjurakshin A.V., Lahno V.D., Jushanhaj V.Ju. Komp'yuternoe modelirovanie perenosa zarjada v molekule DNK v ramkah prostoj modeli otkrytoj kvantovoj sistemy [Computer simulation of charge transfer in a DNA molecule within a simple model of an open quantum system], Matematicheskaja biologija i bioinformatika [Mathematical Biology and Bioinformatics], 19(1), 212-231 (2024). <https://doi.org/10.17537/2024.19.212> [in Russian]
9. Toma Yoneya, Kazuya Fujimoto, Yuki Kawaguchi, Path-integral formulation of truncated Wigner approximation for bosonic Markovian open quantum systems, Annals of Physics, 479, No 170072 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.aop.2025.170072>
10. Triviño H., Mesa F., Ballesteros V.A. Quantification of memory effects in topological two-band open quantum systems, Heliyon, 22 (10), No e40552 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e40552>
11. Janos Polonyi. Action for classical, quantum, closed and open systems, Annals of Physics, 467, No 169694 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.aop.2024.169694>
12. Karachanskaya E.V. Programmed control with probability 1 for stochastic dynamical systems, Journal of Mathematical Sciences (United States), 248 (1), 67-79 (2020). <https://doi.org/10.1007/s10958-020-04856-4>

#### Авторлар туралы мәлімет

**Қоштыбаев Т.Б.** – физика–математика ғылымдарының кандидаты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының доценті, Әйтеке би көшесі, 99, 050000, Алматы, Қазақстан

**Ершина А.К.** – хат–хабар авторы, физика–математика ғылымдарының докторы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының профессоры, Әйтеке би көшесі, 99, 050000, Алматы, Қазақстан

**Татенов А.М.** – физика–математика ғылымдарының кандидаты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының доценті, Әйтеке би көшесі, 99, 050000, Алматы, Қазақстан

**Жавлиева А.Т.** – педагогика ғылымдарының магистрі, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының оқытушысы, Алматы қ., Әйтеке би көшесі, 99, 050000, Алматы, Қазақстан

**Алиева М.Е.** – жаратылыстану ғылымдарының магистрі, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті физика кафедрасының аға оқытушысы, Достық даңғылы, 13, 050000, Алматы, Қазақстан

**Қоштыбаев Т.Б.** – кандидат физико–математических наук, доцент кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, ул. Айтеке би, 99, 050000, Алматы, Казахстан

**Ершина А.К.** – автор для корреспонденции, доктор физико–математических наук, профессор кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, ул. Айтеке би, 99, 050000, Алматы, Казахстан

**Татенов А.М.** – кандидат физико–математических наук, доцент кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, ул. Айтеке би, 99, 050000, Алматы, Казахстан

**Жавлиева А.Т.** – магистр педагогических наук, преподаватель кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, ул. Айтеке би, 99, 050000, Алматы, Казахстан

**Алиева М.Е.** – магистр естественных наук, старший преподаватель кафедры физики Казахского национального педагогического университета имени Абая, пр. Достык, 13, 050000, Алматы, Казахстан

**Koshtybayev T.B.** – candidate of physical and mathematical sciences, Associate Professor, Department of Physics, Kazakh National Women's Pedagogical University, Aiteke bi street, 99, 050000, Almaty, Kazakhstan

**Yershina A.K.** – the corresponding author, doctor of physical and mathematical sciences, 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, Associate Professor, Department of Physics, Kazakh National Women's Pedagogical University, Aiteke bi street, 99, 050000, Almaty, Kazakhstan

**Zhavliyeva A.T.** – master of Pedagogical Sciences, lecturer of the Department of physics of the Kazakh National Women's Teacher Training University, Aiteke bi street, 99, 050000, Almaty, Kazakhstan

**Aliyeva M.E.** – master of sciences, Senior lecturer, Department of Physics, Abai Kazakh National Pedagogical University, Dostyk Ave., 13, 050000, Almaty, Kazakhstan



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



IRSTI 29.15.35

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2026-154-1-137-153>

Review Article

## Lithium borohydride ( $\text{LiBH}_4$ ) as a promising material for neutron–gamma radiation shielding

K. Nalibay\* , N. Amangeldi 

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

(E-mail: kanatbekati@gmail.com, nur19792@mail.ru)

**Abstract.** This review discusses recent progress in neutron–gamma radiation shielding, with a focus on composite materials containing lithium borohydride ( $\text{LiBH}_4$ ). The work is mainly based on the study by Lotfalian et al. (2024), where Monte Carlo neutron-transport simulations using the MCNPX code were applied to assess the performance of  $\text{LiBH}_4$  incorporated into high-performance concrete (HPC). Instead of presenting new experimental or numerical results, this article aims to summarize and interpret existing data, explain the key physical mechanisms involved, and critically assess the assumptions and limitations of the reported approaches.

Special attention is given to the role of  $\text{LiBH}_4$  as a multifunctional component that combines neutron moderation and absorption within a single material system. The review highlights its effectiveness in reducing fast-neutron flux, which remains a major challenge for conventional concrete-based shielding materials. In addition, the potential benefits related to shield compactness, thickness reduction, and long-term stability are discussed. At the same time, unresolved issues such as the lack of experimental validation and practical concerns related to material behavior under realistic conditions are addressed. Overall, this review provides a balanced perspective on the potential of  $\text{LiBH}_4$ -based shielding materials and outlines key directions for future research and practical implementation.

**Keywords:** radiation shielding, lithium borohydride, fast neutrons, high performance concrete, Monte Carlo simulation

### Introduction

Radiation shielding plays a fundamental role in ensuring the safe operation of nuclear reactors, particle accelerators, medical radiation facilities, and spacecraft. The primary difficulty in shielding design lies in the simultaneous attenuation of neutrons and gamma rays, particularly for hard neutron spectra typical of fast reactors.

Conventional materials such as concrete, lead, and polyethylene are widely used; however, they suffer from large required thicknesses, high mass, or limited effectiveness against fast neutrons. As a result, modern research increasingly focuses on composite materials incorporating neutron absorbers and moderators.

Received 15.01.2026. Revised 06.02.2026. Accepted 06.02.2026. Available online 30.03.2026.

\*the corresponding author

Among light elements, boron and lithium possess exceptionally high neutron absorption cross-sections, while hydrogen is an efficient neutron moderator. Lithium borohydride ( $\text{LiBH}_4$ ), consisting solely of these elements, represents a unique candidate for radiation shielding. Its application as a shielding component was systematically investigated in the recent work by Lotfalian et al. [1], which forms the main subject of the present review. The present article does not present new numerical simulations. Instead, it provides a critical synthesis of recent Monte Carlo-based studies, with particular emphasis on the physical mechanisms, performance metrics, and practical limitations of  $\text{LiBH}_4$ -containing shielding materials. While the numerical data are taken from published sources (primarily Ref. [1]), the comparative analysis, interpretation of trends, and practical conclusions are provided by the authors.

## Methodology

### *Physical principles of neutron and gamma shielding*

#### *Neutron interactions*

Neutron attenuation in matter is governed by elastic scattering, inelastic scattering, and absorption. For a homogeneous material, the macroscopic cross section for a given interaction channel can be written as:

$$\Sigma = \sum_i N_i \sigma_i$$

where  $N_i$  is the atomic number density of nuclide  $i$  and  $\sigma_i$  is its microscopic cross section.

In shielding practice, neutron attenuation is often characterized using an effective removal cross section (especially for fast neutrons), which serves as an engineering parameter for comparing materials rather than a strict exponential-law constant for all energies. Physically, the effective removal cross section represents the probability that a fast neutron is removed from the primary neutron beam through a combination of scattering and absorption processes.

Hydrogen-rich components effectively slow down fast neutrons via elastic scattering, while isotopes such as  $^{10}\text{B}$  and  $^6\text{Li}$  capture thermalized neutrons through reactions such as  $^{10}\text{B}(n, \alpha) ^7\text{Li}$  and  $^6\text{Li}(n, \alpha) ^3\text{H}$ . These reactions convert neutron energy into charged particles that are readily stopped within the shielding medium [2].

#### *Gamma-ray attenuation*

Gamma-ray attenuation in matter is commonly approximated by the exponential attenuation law:

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

where  $I_0$  and  $I$  are the incident and transmitted intensities,  $\mu$  is the linear attenuation coefficient, and  $x$  is the material thickness. In general, gamma shielding improves with increasing material density and effective atomic number  $Z$ , due to enhanced photoelectric absorption, Compton scattering, and (at high energies) pair production.

### *High-performance concrete as a shielding matrix*

High-performance concrete (HPC) has attracted increasing interest as a structural and functional matrix for radiation shielding. Compared with ordinary concrete, HPC typically exhibits higher strength, reduced porosity, and improved durability, enabling thinner shielding structures without sacrificing mechanical integrity [3].

From a radiation-protection perspective, concrete shields are often optimized by incorporating functional fillers. Adding boron carbide to concrete improves neutron shielding, especially for low-energy neutrons [3]. Metal-oxide fillers (e.g., WO<sub>3</sub>) are frequently investigated to enhance gamma attenuation, including micro- and nano-sized additives [5]. Heavy aggregates such as magnetite and limonite can also increase photon attenuation compared with conventional mixes.

Overall, HPC provides a flexible host matrix for combining such additives. When space is limited, HPC-based composites can be attractive because they offer improved structural performance while supporting tailored neutron and gamma attenuation through appropriate filler selection [4].

The use of HPC as a matrix is particularly relevant for hydrogen- and boron-containing fillers, such as LiBH<sub>4</sub>, because its reduced porosity and improved mechanical stability may mitigate some of the compatibility and durability concerns associated with reactive or hygroscopic additives.

### *Lithium borohydride (LiBH<sub>4</sub>) in radiation shielding*

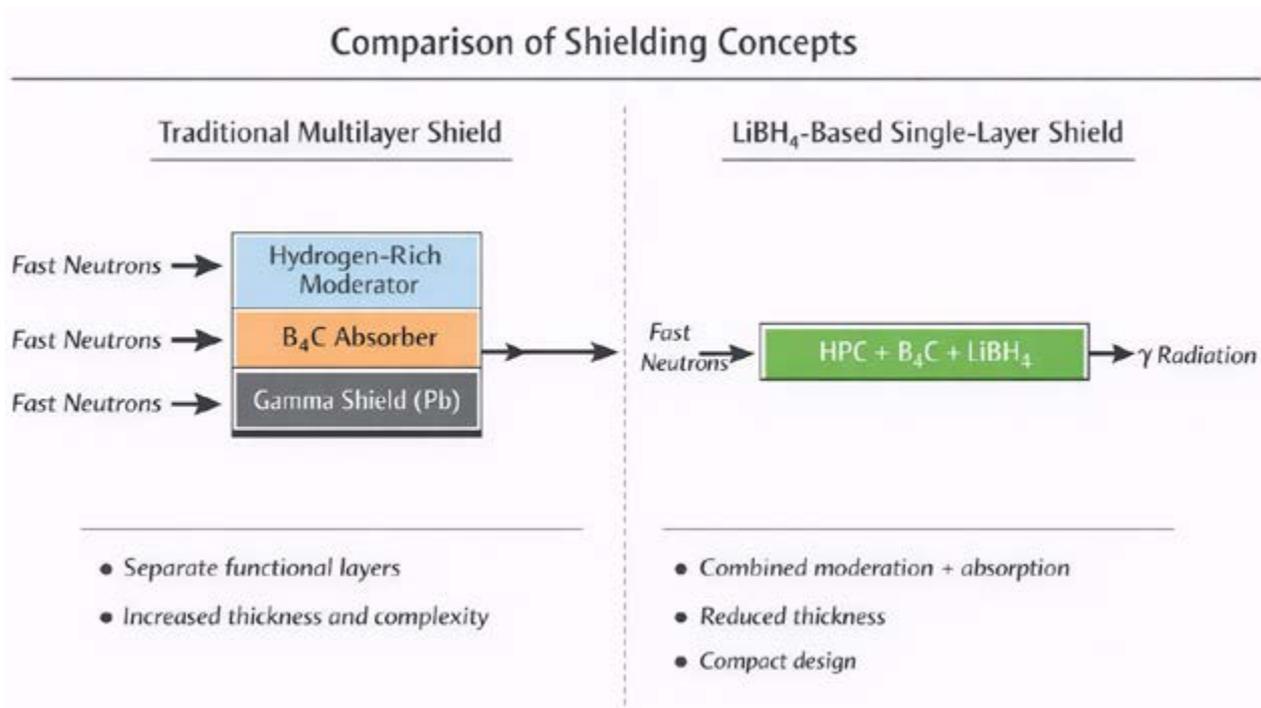
Lithium borohydride (LiBH<sub>4</sub>) is a lightweight compound composed of elements with favorable nuclear properties for neutron shielding. Hydrogen provides efficient moderation of fast neutrons via elastic scattering, while boron and lithium isotopes contribute to neutron absorption after thermalization.

Unlike conventional absorbers such as boron carbide, LiBH<sub>4</sub> can act as both a moderator and an absorber in a single compound, enabling a single-layer shielding concept and potentially reducing the need for separate moderating and absorbing layers [1]. Lithium- and boron-containing systems have also been investigated in other material classes (e.g., borate glasses), supporting the broader motivation for combining these elements in shielding design [5].

The study by Lotfalian et al. [1] is among the first systematic evaluations of LiBH<sub>4</sub> as a shielding additive in concrete-based composites and is therefore a useful focal point for the present review.

### *Key conceptual advantages of LiBH<sub>4</sub>-based shielding systems*

- simultaneous moderation and absorption;
- effectiveness for intermediate-energy neutrons (100 keV–1 MeV);
- potential reduction of multilayer shielding concepts;
- low predicted absorber depletion under fast-reactor irradiation.



**Figure 1. Schematic comparison of conventional multilayer neutron-gamma shielding concepts and LiBH<sub>4</sub>-based single-layer composite shields**

In traditional designs, moderation, absorption, and gamma attenuation are achieved using separate layers, resulting in increased thickness and structural complexity. In contrast, LiBH<sub>4</sub>-containing HPC composites enable combined moderation and absorption within a single material layer, allowing more compact shielding configurations.

#### *Monte Carlo modeling and benchmarking*

In the reviewed study [1], Monte Carlo simulations were carried out using the MCNPX 2.7E radiation transport code originally developed at Los Alamos National Laboratory. It should be emphasized that the simulations discussed in this review were performed by the original authors; no independent MCNPX calculations were conducted in the present work.

The neutron-gamma source in Ref. [1] was the MET-1000 sodium-cooled fast reactor benchmark. Core layout and compositions were taken from established benchmark specifications [6].

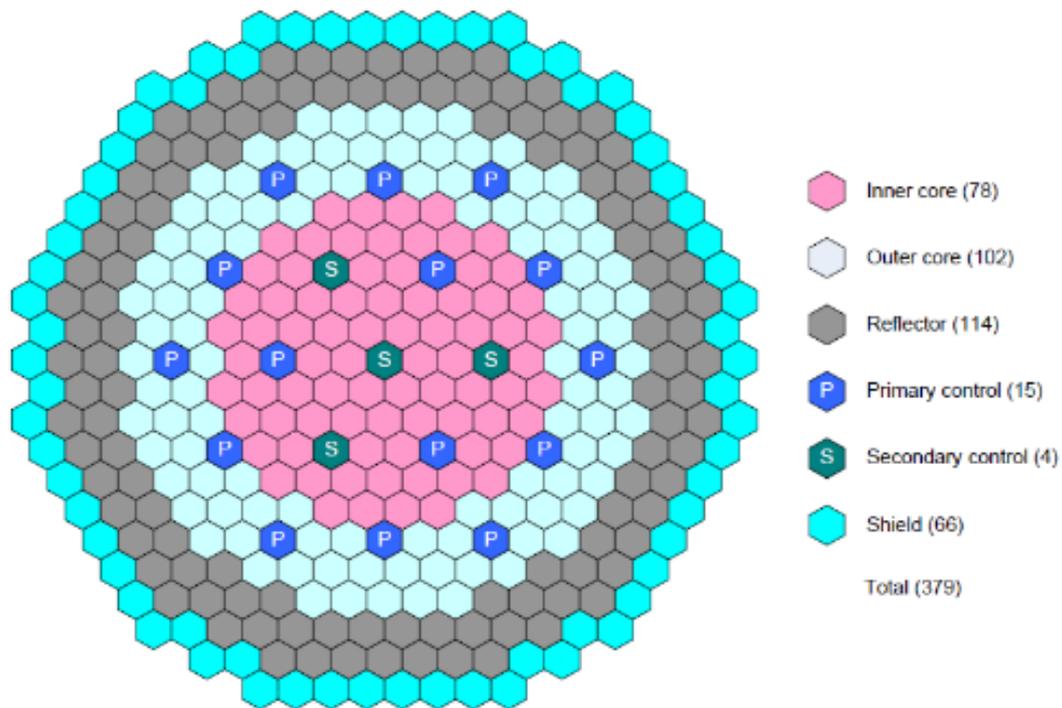


Figure 2. Radial layout of the MET-1000 core (as reported in Ref. [1])

Benchmark calculations reported in Ref. [1] yielded an effective multiplication factor ( $K_{eff}$ ) of approximately 1.02, which is consistent with published reference data and supports the validity of the computational model [6,7].

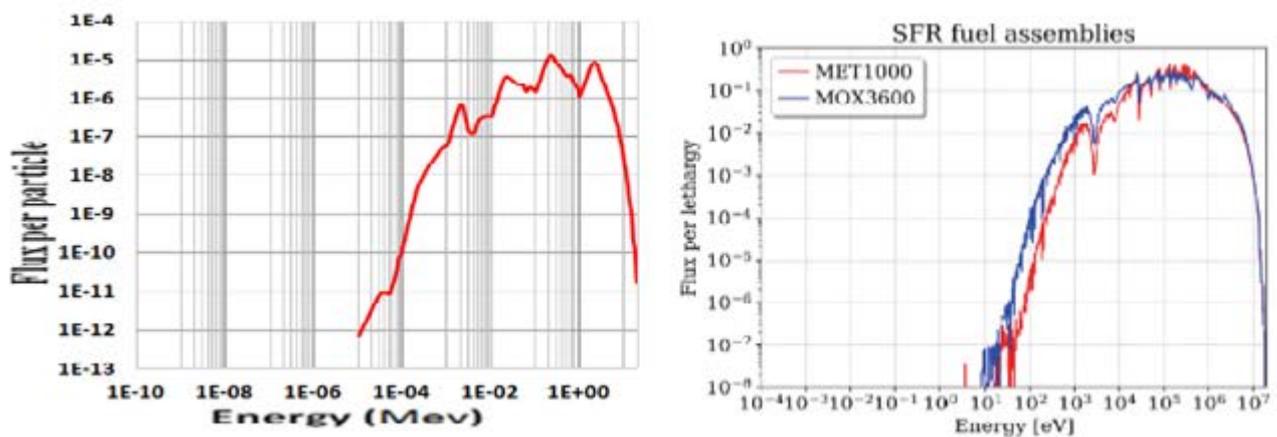
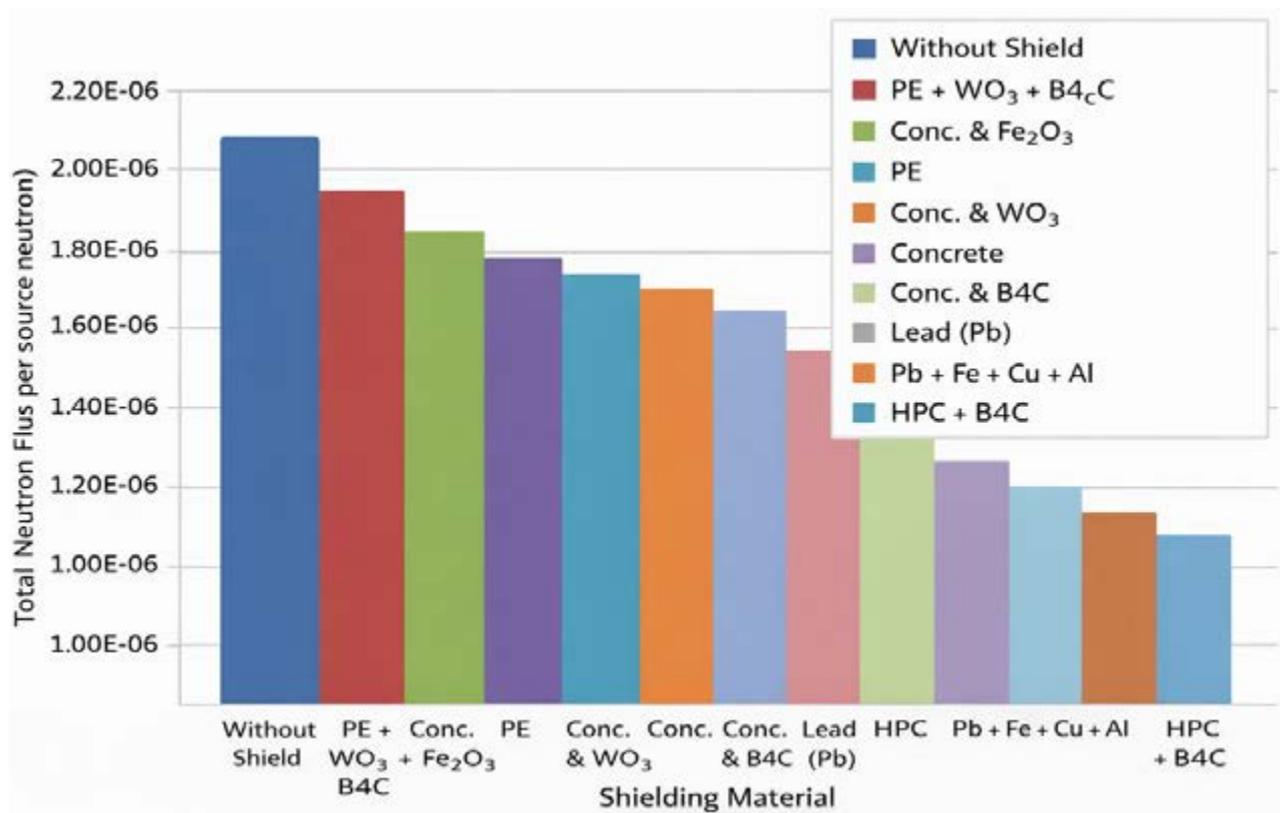


Figure 3. Comparison of neutron flux behind various shielding materials (5 cm thickness; data from Ref. [1])

*Shielding performance and thickness optimization**Neutron attenuation*

The reviewed study reports that high-performance concrete (HPC) containing 10 wt.% B<sub>4</sub>C and 5 wt.% LiBH<sub>4</sub> significantly reduces neutron flux over a broad energy range [1]. In the broader shielding literature, boron-carbide additives are primarily associated with enhanced absorption of low-energy neutrons due to their high capture cross sections [3], whereas hydrogen-rich components are widely employed to improve the moderation of fast neutrons [8].

The results indicate that LiBH<sub>4</sub>-containing composites provide improved attenuation in the intermediate neutron energy range, particularly between 100 keV and 1 MeV, complementing the low-energy effectiveness typically attributed to boron-based absorbers [7].



**Figure 4. Total neutron flux after different types of shields with a thickness of 5 cm (Ref. [1])**

Conventional concrete provides limited reduction, whereas boron-containing systems show improved suppression due to enhanced capture of moderated neutrons. Lead exhibits poor neutron shielding, consistent with its low effectiveness for neutron moderation and absorption. Overall, the reported trends support the advantage of boron- and hydrogen-containing composites for neutron attenuation.

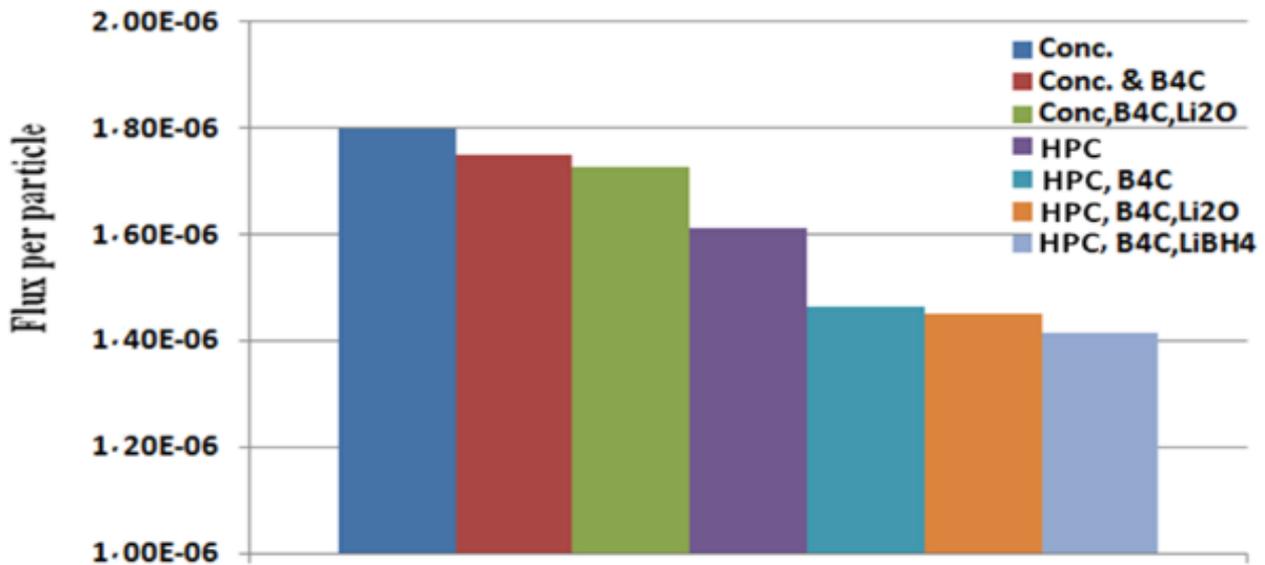


Figure 5. Total neutron flux through new and conventional shields (5 cm) (Ref. [1])

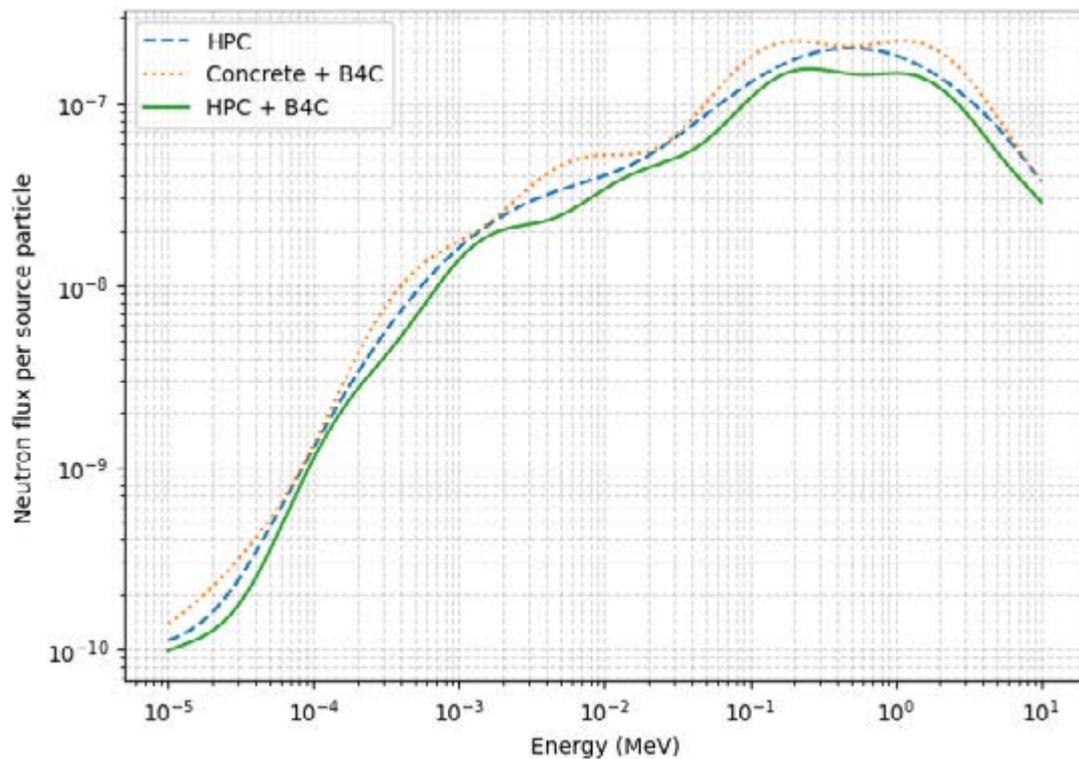


Figure 6. Schematic comparison of neutron energy spectra after shielding with HPC, concrete +  $\text{B}_4\text{C}$ , and HPC +  $\text{B}_4\text{C}$ . The figure illustrates qualitative trends reported in Ref. [1]

The neutron spectra in Figure 6 indicate that boron-containing shields reduce the low-energy part of the spectrum more effectively than plain HPC, consistent with enhanced thermal-neutron capture. At the same time, moderation shifts the spectrum toward lower energies, and the combined moderator-absorber concepts provide a more balanced suppression across energy regions. These qualitative trends are consistent with the role of hydrogen for moderation and boron for absorption.

From an engineering perspective, these results indicate that  $\text{LiBH}_4$ -containing composites are particularly attractive for shielding systems exposed to fast and intermediate-energy neutron spectra, where simultaneous moderation and absorption are required within limited thickness.

### Gamma attenuation

Although lithium borohydride is introduced primarily to enhance neutron shielding, the reviewed results indicate that HPC-based composites can also provide acceptable attenuation of gamma radiation when sufficient thickness is used [1]. In general, gamma-ray shielding is dominated by material density and effective atomic number, with high-Z materials (e.g., lead) typically exhibiting stronger photon attenuation, while cementitious matrices provide moderate attenuation that increases with thickness.

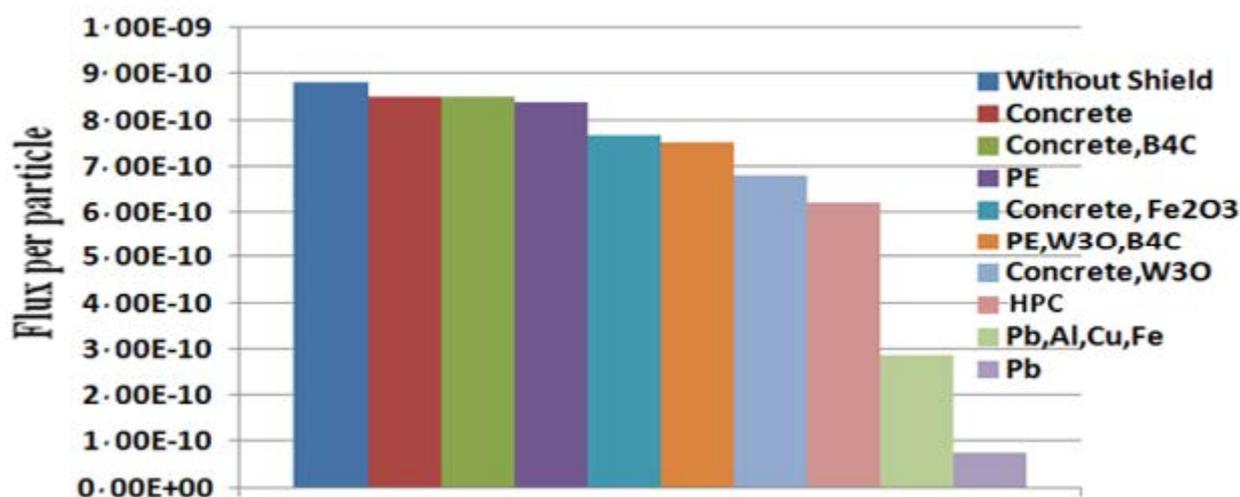
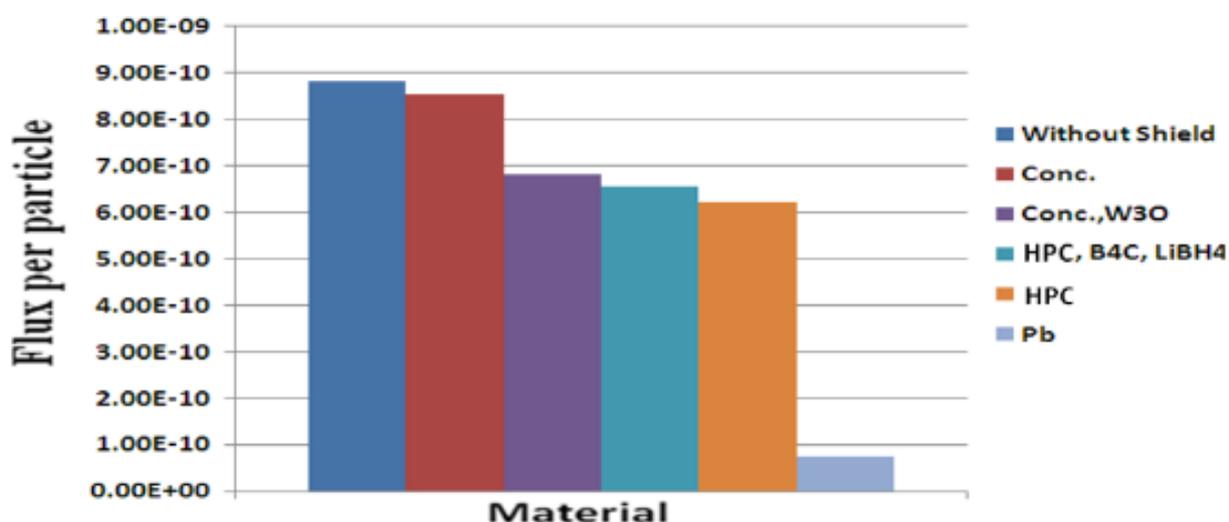


Figure 7. Total transmitted gamma flux behind different shields (5 cm thickness; reproduced from Ref. [1])

The observed ranking is consistent with the established understanding that heavy-metal shields (e.g., Pb) are highly effective for gamma rays, whereas polymer-based or low-Z hydrogenous materials are comparatively less efficient for photon attenuation. Concrete-based systems generally occupy an intermediate position due to their moderate density, while the use of high-Z fillers (such as tungsten-containing additives) is associated with improved gamma attenuation trends reported in shielding literature.



**Figure 8. Comparison of gamma flux behind the  $\text{LiBH}_4$ -based “new” shield and selected conventional shields (5 cm; reproduced from Ref. [1])**

Figure 8 further contrasts the gamma flux behind the  $\text{LiBH}_4$ -containing “new” composite shield with selected conventional shielding options at the same thickness (Ref. [1]). The comparison suggests that the principal benefit of  $\text{LiBH}_4$ -based composites lies in neutron performance, whereas gamma attenuation remains largely governed by the bulk properties of the composite (matrix density and composition) rather than by  $\text{LiBH}_4$  itself. Consequently, when gamma shielding requirements are stringent, the reviewed results support the common design approach of combining neutron-optimized materials with high-Z components or dense concrete formulations to achieve balanced neutron–gamma protection.

In practical applications, this suggests that  $\text{LiBH}_4$ -based composites should be combined with sufficiently dense matrices or high-Z additives when stringent gamma-shielding requirements are imposed.

#### *Thickness optimization and compactness*

In shielding design, the half-value layer (HVL) is frequently used as a comparative engineering metric to assess material effectiveness, rather than as a strict exponential attenuation parameter for neutron fields. The HVL is defined as the material thickness required to reduce the incident radiation intensity by 50% and is widely employed for engineering comparison of shielding materials. For the optimized HPC– $\text{B}_4\text{C}$ – $\text{LiBH}_4$  composite discussed in Ref. [1], the reported neutron HVL is approximately 3.3 cm, compared with about 4.5 cm for conventional boron-doped concrete.

Thickness-dependent analyses further indicate that a shield thickness of approximately 30 cm provides effective attenuation of both neutrons and gamma rays, achieving strong suppression of the neutron flux while maintaining acceptable gamma shielding performance. From a practical standpoint, this behavior corresponds to an estimated volume reduction of

roughly 40% relative to conventional concrete-based shielding concepts. Such compactness represents a key advantage of  $\text{LiBH}_4$ -containing composites in applications where space and mass constraints are critical in nuclear, accelerator-based, and compact radiation facilities.

### *Shielding performance summary*

**Table 1. Shield materials and functional roles (synthesized from Ref. [1])**

Shield concept	Main neutron function	Main gamma function	Notes
Ordinary concrete (Conc.)	Limited moderation (low H fraction)	Moderate attenuation	Baseline cementitious shield
Concrete + 10 wt.% $\text{B}_4\text{C}$	Strong absorption of low-energy neutrons	Similar to concrete	Reported as the best conventional option in Ref. [1]
High-performance concrete (HPC)	Similar moderation; improved mechanical properties	Typically improved vs. ordinary concrete	Useful when space is limited
HPC + 10 wt.% $\text{B}_4\text{C}$	Absorption is enhanced at low neutron energies	Comparable to HPC	Improves thermal-neutron suppression
HPC + 10 wt.% $\text{B}_4\text{C}$ + 5 wt.% $\text{LiBH}_4$	Moderation + absorption across wider energies	Acceptable at sufficient thickness	best among the configurations tested in Ref. [1]
Lead (Pb)	Inefficient for neutrons	Excellent gamma attenuation	Often used as a secondary layer

Table 1 summarizes the functional roles of the investigated shielding concepts, highlighting the complementary contributions of moderation, absorption, and gamma attenuation. Among the reviewed materials, the HPC +  $\text{B}_4\text{C}$  +  $\text{LiBH}_4$  composite exhibits the most balanced performance across neutron energy ranges while maintaining acceptable gamma-ray shielding at sufficient thickness.

Key quantitative shielding performance indicators reported in Ref. [1] are compiled in Table 2. Collectively, these metrics support the conclusion that  $\text{LiBH}_4$ -containing HPC composites offer a compact and multifunctional shielding solution compared with conventional boron-doped concrete systems.

**Table 2. Summary of key quantitative shielding parameters reported in Ref. [1]**

Metric (reported in Ref. [1])	Value
Neutron energy range where $\text{LiBH}_4$ is more effective	100 keV – 1 MeV
Recommended shield thickness	30 cm
Neutron attenuation at 30 cm	~95% reduction
Gamma attenuation at 30 cm	~92% reduction
Relative thickness/volume reduction vs. Conc. + $\text{B}_4\text{C}$	~40%
Neutron HVL (half-value layer)	3.32 cm
Gamma HVL (half-value layer)	2.47 cm

For the engineering context, Table 3 provides a qualitative comparison of  $\text{LiBH}_4$ -containing composites with alternative modern shielding material classes.

**Table 3. Qualitative comparison of  $\text{LiBH}_4$ -containing cementitious composites with alternative shielding material classes**

Material class	Neutron shielding effectiveness	Gamma shielding effectiveness	Cost & availability	Technological feasibility	Long-term durability
$\text{LiBH}_4$ -containing HPC composites	High (balanced moderation + absorption; compactness)	Medium (matrix-governed; can be improved with dense/high-Z components)	Medium–High (specialty additive; may be offset by volume reduction)	High (concrete technology mature; requires handling/compatibility measures)	Medium (depends on moisture control; chemical compatibility)
Hydrogenous polymer composites (PE/rubber-based)	Medium–High (good moderation; absorber loading needed)	Low–Medium (low-Z $\rightarrow$ weaker photon attenuation unless high-Z fillers used)	Medium (often scalable)	High (molding/modularity)	Medium (aging, temperature/radiation effects vary)
Glassy Li–B systems (lithium borate glasses)	Medium–High (capture + composition tuning)	Medium (composition-dependent; can be enhanced)	Medium (process-dependent)	Medium (high-T processing; size limitations)	High chemical stability / Medium mechanical (brittleness risk)

### *Long-term stability and isotope depletion*

Long-term performance is a critical requirement for shielding materials exposed to sustained neutron fields, as absorber depletion and radiation-induced material changes may reduce shielding effectiveness over time.

In Ref. [1], time-dependent burnup calculations were performed to estimate the consumption of key neutron absorbers, namely  $^{10}\text{B}$  and  $^6\text{Li}$ . After 180 days of continuous reactor operation, the reported depletion remained low (approximately 0.32% for  $^{10}\text{B}$  and 0.05% for  $^6\text{Li}$ ), indicating that the neutron attenuation capability of the proposed shielding material should remain largely stable over the considered time window.

Beyond nuclear depletion effects, the long-term chemical and structural stability of  $\text{LiBH}_4$ -containing composites remains an open question. Lithium borohydride is known to be hygroscopic and chemically reactive, and potential issues such as moisture uptake, hydrogen release, and radiation-induced microstructural changes have not yet been experimentally assessed. These factors may influence both the mechanical integrity and the long-term shielding performance of cementitious composites incorporating  $\text{LiBH}_4$  and therefore require dedicated experimental investigation.

Related studies on boron- and lithium-containing shielding systems, such as lithium borate glasses, suggest that carefully designed compositions can maintain effective neutron attenuation over extended periods, provided that chemical stability and matrix compatibility are adequately addressed [9].

## **Results and discussions**

The reviewed results collectively indicate that lithium borohydride enables a shift from traditional multilayer shielding strategies toward more compact single-layer concepts. By combining neutron moderation and absorption within a single compound,  $\text{LiBH}_4$ -based composites address a key challenge in shielding fast-neutron spectra — simultaneous suppression of high-energy and thermalized neutrons without excessive thickness. Fast-neutron spectra in the MeV energy range pose a particular challenge for shielding design, since purely absorbing materials become less effective at high neutron energies. In particular, the reported effectiveness in the intermediate energy range complements the well-established low-energy performance of boron-based absorbers, yielding a more balanced attenuation profile.

At the same time, the reviewed evidence remains primarily simulation-based and should be interpreted accordingly. The conclusions in Ref. [1] rely on Monte Carlo transport modeling without experimental benchmarking, and practical material issues—such as the hygroscopic and reactive nature of  $\text{LiBH}_4$  and its long-term compatibility with cementitious matrices—have not yet been systematically validated under realistic environmental and irradiation conditions. Therefore, targeted neutron–gamma attenuation measurements on representative  $\text{LiBH}_4$ -containing composite specimens under well-characterized sources are a key next step to validate the reported trends. In addition, existing experimental analogs for lithium–boron shielding systems (e.g., lithium borate glasses investigated experimentally and by Monte Carlo methods) provide contextual support for the feasibility of Li–B-based shielding concepts [10].

## **Conclusions**

This review highlights LiBH<sub>4</sub> as a promising additive for compact neutron–gamma shielding composites, particularly when combined with HPC and B<sub>4</sub>C. The reviewed Monte Carlo results reported in Ref. [1] suggest improved fast-neutron attenuation and reduced shielding thickness compared with conventional concrete-based concepts. Overall, LiBH<sub>4</sub>-based composites represent a strong conceptual direction for compact shielding design.

### **Implications, Limitations, and Research Outlook**

From an application perspective, LiBH<sub>4</sub>-containing composites appear most relevant for fast reactors, accelerator-driven systems, and compact radiation facilities where space constraints limit the practicality of thick conventional shields. To move the concept from simulation to implementation, future research should prioritize the following directions:

1. Experimental benchmarking: fabricate representative HPC–B<sub>4</sub>C–LiBH<sub>4</sub> specimens and measure neutron–gamma attenuation under well-characterized sources to validate simulation trends.
2. Environmental and chemical stability: assess moisture uptake, possible hydrogen release, and microstructural changes during thermal cycling and irradiation-relevant heating.
3. Mechanical compatibility: quantify how LiBH<sub>4</sub> affects compressive strength, cracking behavior, and long-term integrity of cementitious matrices.
4. Multi-code verification: reproduce key transport results using alternative Monte Carlo toolchains (e.g., Geant4 or comparable codes) to reduce code-dependent uncertainties.
5. System-level assessment: evaluate practical deployment constraints (fabrication route, encapsulation/barrier strategies, safety handling, and lifecycle performance).

Overall, while LiBH<sub>4</sub>-based composites are not yet a mature shielding technology, the reviewed findings provide a solid foundation for targeted experimental and engineering development.

## **The contribution of the authors**

Nalibay K. – conceived the review framework; performed the literature search and selection; carried out the critical analysis and synthesis of the reviewed study; prepared all tables/figures; wrote the original draft; revised and finalized the manuscript.

Amangeldi N. – provided scientific supervision; reviewed the manuscript and contributed to editing; approved the final version.

Statement on the use of generative AI and AI-enabled technologies in the manuscript preparation process

During the preparation of this paper, the authors used Chat GPT for language editing and text style improvement, as well as for clarity of wording. After using this service, the authors have checked and edited the content as needed and are fully responsible for the content of the published article.

## References

1. Lotfalian M., Athari Allaf M., Mansouri M. Lithium Borohydride (LiBH<sub>4</sub>): An Innovative Material for Neutron Radiation Shielding (2024). arXiv:2406.03640
2. F. Bostelmann, A.M. Holcomb, J.B. Clarity, W.J. Marshall, V. Sobes, B.T. Rearden, Nuclear data performance assessments for advanced reactors, Oak Ridge National Laboratory (2019), DOI: <https://doi.org/10.2172/1506806>
3. Salimi M., Ghal-Eh N., Asadi Amirabadi E. Characterization of a new shielding rubber for use in neutron-gamma mixed fields, Nuclear Science and Techniques, Vol. 29 (2018). <https://doi.org/10.1007/s41365-018-0371-7>
4. Reda S.M. Gamma ray shielding by a new combination of aluminum, iron, copper and lead using MCNP5, Arab Journal of Nuclear Science and Applications (2016).
5. Yıldız Yorgun N., Kavaz E., Tekin H.O., Sayyed M.I., Özdemir Ö.F. Borax effect on gamma and neutron shielding features of lithium borate glasses: experimental and Monte Carlo studies, Materials Research Express (2019). <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab4fcc>
6. Stankovic S.J., Ilic R., Jankovic K., Loncar B. Gamma radiation absorption characteristics of concrete with components of different type materials, Acta Physica Polonica A, Vol. 117 (2010). <https://doi.org/10.12693/aphyspola.117.812>
7. Han Y., Zhou T. Performance analysis of high-performance concrete materials in civil construction, Materials (2023). <https://doi.org/10.3390/ma16165711>
8. Mokhtari K., Kheradmand Saadi M., Panahi H.A., Jahanfarnia G. Shielding properties of ordinary concrete reinforced with nano polymer particles containing PbO-H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> for dual protection against gamma and neutron radiations, Radiation Physics and Chemistry, Vol. 189 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2021.109711>
9. Cai Y., Hu H., Pan Z., Sun W., Yan M. Metaheuristic optimization in shielding design for neutrons and gamma rays reducing dose equivalent as much as possible, Annals of Nuclear Energy, Vol. 120 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2018.05.038>
10. Tekin H.O., Singh V.P., Manici T. Effects of micro-sized and nano sized WO<sub>3</sub> on mass attenuation coefficients of concrete by using MCNPX code, Applied Radiation and Isotopes, Vol. 121 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2016.12.040>

**Қ. Нәлібай\*, Н. Амангелді**

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

*(E-mail: kanatbekati@gmail.com, nur19792@mail.ru)*

## **Литий боргидридi (LiBH<sub>4</sub>) нейтрон-гамма сәулеленуден қорғайтын экрандау үшін перспективті материал**

**Аннотация.** Бұл шолуда литий борогидридін (LiBH<sub>4</sub>) қамтитын композиттік материалдарға басаназар аударатырып, нейтронды-гамма сәулеленуден қорғау саласындағы соңғы жетістіктер талқыланады. Жұмыс негізінен Лотфалиан және т.б. (2024) зерттеуіне негізделген, онда жоғары өнімді бетонға (HPC) енгізілген LiBH<sub>4</sub> өнімділігін бағалау үшін MCNPX кодын қолдана отырып,

Монте-Карло нейтрон тасымалдау модельдеулері қолданылған. Жаңа эксперименттік немесе сандық нәтижелерді ұсынудың орнына, бұл мақалада бар деректерді қорытындылау және түсіндіру, негізгі физикалық механизмдерді түсіндіру және хабарланған тәсілдердің болжамдары мен шектеулерін сыни бағалау мақсат етіледі.

LiBH<sub>4</sub>-тің бір материалдық жүйеде нейтронды модерациялау мен сіңіруді біріктіретін көпфункционалды компонент ретіндегі рөліне ерекше назар аударылады. Шолуда оның жылдам нейтронды ағынды азайтудағы тиімділігі атап өтіледі, бұл дәстүрлі бетон негізіндегі қорғаныс материалдары үшін үлкен қиындық болып қала береді. Сонымен қатар, қалқанның тығыздығы, қалыңдығының азаюы және ұзақ мерзімді тұрақтылыққа байланысты әлеуетті артықшылықтар талқыланады. Сонымен қатар, эксперименттік валидацияның болмауы және нақты жағдайларда материалдың мінез-құлқына қатысты практикалық мәселелер сияқты шешілмеген мәселелер қарастырылады. Жалпы алғанда, бұл шолу LiBH<sub>4</sub> негізіндегі экрандау материалдарының әлеуетіне теңгерімді көзқарас береді және болашақ зерттеулер мен практикалық енгізудің негізгі бағыттарын белгілейді.

**Түйін сөздер:** радиациялық қорғаныс, литий боргидридi, жылдам нейтрондар, жоғары өнімді бетон, Монте-Карло әдісімен модельдеу

**Қ. Нәлібай\*, Н. Амангелді**

*Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,*

*Астана, Казахстан*

*(E-mail: kanatbekati@gmail.com, nur19792@mail.ru)*

### **Боргидрид лития (LiBH<sub>4</sub>) как перспективный материал для нейтронно-гамма радиационного экранирования**

**Аннотация.** В данном обзоре рассматриваются последние достижения в области защиты от нейтронно-гамма-излучения с акцентом на композитные материалы, содержащие борогидрид лития (LiBH<sub>4</sub>). Работа в основном основана на исследовании Лотфалиана и др. (2024), где моделирование переноса нейтронов методом Монте-Карло с использованием кода MCNPX применялось для оценки эффективности LiBH<sub>4</sub>, включенного в высокопрочный бетон (ВБ). Вместо представления новых экспериментальных или численных результатов, данная статья направлена на обобщение и интерпретацию существующих данных, объяснение ключевых физических механизмов и критическую оценку допущений и ограничений представленных подходов.

Особое внимание уделяется роли LiBH<sub>4</sub> как многофункционального компонента, сочетающего замедление и поглощение нейтронов в рамках одной материальной системы. В обзоре подчеркивается его эффективность в снижении потока быстрых нейтронов, что остается серьезной проблемой для традиционных экранирующих материалов на основе бетона. Кроме того, обсуждаются потенциальные преимущества, связанные с компактностью экрана, уменьшением толщины и долговременной стабильностью. В то же время рассматриваются нерешенные вопросы, такие как отсутствие экспериментальной проверки и практические

проблемы, связанные с поведением материалов в реальных условиях. В целом, этот обзор дает сбалансированное представление о потенциале экранирующих материалов на основе  $\text{LiBH}_4$  и определяет ключевые направления будущих исследований и практического применения.

**Ключевые слова:** радиационная защита, боргидрид лития, быстрые нейтроны, высокопрочный бетон, моделирование методом Монте-Карло.

### References

1. Lotfalian M., Athari Allaf M., Mansouri M. Lithium Borohydride ( $\text{LiBH}_4$ ): An Innovative Material for Neutron Radiation Shielding (2024). arXiv:2406.03640
2. F. Bostelmann, A.M. Holcomb, J.B. Clarity, W.J. Marshall, V. Sobes, B.T. Rearden, Nuclear data performance assessments for advanced reactors, Oak Ridge National Laboratory (2019), DOI: <https://doi.org/10.2172/1506806>
3. Salimi M., Ghal-Eh N., Asadi Amirabadi E. Characterization of a new shielding rubber for use in neutron-gamma mixed fields, Nuclear Science and Techniques, Vol. 29 (2018). <https://doi.org/10.1007/s41365-018-0371-7>
4. Reda S.M. Gamma ray shielding by a new combination of aluminum, iron, copper and lead using MCNP5, Arab Journal of Nuclear Science and Applications (2016).
5. Yıldız Yorgun N., Kavaz E., Tekin H.O., Sayyed M.I., Özdemir Ö.F. Borax effect on gamma and neutron shielding features of lithium borate glasses: experimental and Monte Carlo studies, Materials Research Express (2019). <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab4fcc>
6. Stankovic S.J., Ilic R., Jankovic K., Loncar B. Gamma radiation absorption characteristics of concrete with components of different type materials, Acta Physica Polonica A, Vol. 117 (2010). <https://doi.org/10.12693/aphyspola.117.812>
7. Han Y., Zhou T. Performance analysis of high-performance concrete materials in civil construction, Materials (2023). <https://doi.org/10.3390/ma16165711>
8. Mokhtari K., Kheradmand Saadi M., Panahi H.A., Jahanfarnia G. Shielding properties of ordinary concrete reinforced with nano polymer particles containing  $\text{PbO-H}_3\text{BO}_3$  for dual protection against gamma and neutron radiations, Radiation Physics and Chemistry, Vol. 189 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2021.109711>
9. Cai Y., Hu H., Pan Z., Sun W., Yan M. Metaheuristic optimization in shielding design for neutrons and gamma rays reducing dose equivalent as much as possible, Annals of Nuclear Energy, Vol. 120 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2018.05.038>
10. Tekin H.O., Singh V.P., Manici T. Effects of micro-sized and nano sized  $\text{WO}_3$  on mass attenuation coefficients of concrete by using MCNPX code, Applied Radiation and Isotopes, Vol. 121 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2016.12.040>

### Information about the authors

**Nalibay K.** – the corresponding author, 2nd year doctoral student, specialty «Nuclear Physics», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satbayev str., 2, Astana, Republic of Kazakhstan.

**Amangeldi N.** – PhD, Associate Professor, Institute of Nuclear Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Satbayev street, 2, Astana, Republic of Kazakhstan.

**Нәлібай Қ.** – хат-хабар авторы, «Ядролық физика» мамандығы бойынша 2 курс докторанты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Сәтбаев көшесі, 2, Астана, Қазақстан Республикасы.

**Амангелді Н.** – PhD, доцент, ядролық физика институты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Сәтбаев көшесі, 2, Астана, Қазақстан Республикасы.

**Нәлібай Қ.** – автор для корреспонденции, докторант 2 курса по специальности «Ядерная физика», Евразийский национальный университет имени Л. Н. Гумилева, ул. Сатбаева, 2, Астана, Республика Казахстан.

**Амангелді Н.** – PhD, доцент, Институт ядерной физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Сатбаева, 2, Астана, Республика Казахстан.



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 47.35.41

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-154-169>

Ғылыми мақала

## Ғарыштық құрылымдарды мониторингтеуде FBG сенсорларын қолдану

С.Ж.Көшкінбаев<sup>1,2</sup>, А.К.Сейтханова<sup>3</sup>, Н.К.Смайлов\*<sup>1</sup>, Қ.М.Ысырайыл<sup>1</sup>,  
А.Е.Куттыбаева<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы, Қазақстан,

<sup>2</sup>Мирас университеті, Шымкент, Қазақстан, <sup>3</sup>Ә.Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, Павлодар, Қазақстан

(E-mail: koshkinbaev\_s@miras.edu.kz, ainur1179@mail.ru, n.smailov@satbayev.university, kidir200091@gmail.com, a.kuttybayeva@satbayev.university)

**Аңдатпа.** Бұл мақала Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорларының ғарыштық ортаға тән қатал жағдайларда қолданылу мүмкіндігін кешенді түрде бағалауға арналған. Зерттеу барысында сенсорлардың вакуум жағдайында, термоциклдер әсерінде, механикалық жүктемелер кезінде және 800–1000 °С аралығындағы экстремалды температураларда жұмыс істеу қабілеті талданады. Regenerated FBG технологиясының жоғары температурада ұзақ мерзімді тұрақтылықты қамтамасыз ететіні және Bragg толқын ұзындығының спектралдық дрейфсіз сақталатыны көрсетіледі. Сонымен қатар Bragg толқын ұзындығының деформацияға сызықтық тәуелділігі сенсорлардың өлшеу дәлдігін негіздейді. Кірістірілген FBG сенсор желілерінің бір талшық бойында бірнеше параметрді бір мезгілде бақылау мүмкіндігі олардың құрылымдық денсаулықты мониторингтеу жүйелерінде (SHM) тиімді қолданылатынын дәлелдейді. Әдебиеттерді талдау нәтижесінде FBG сенсорларының ғарыштық ортада кешенді бағалануы жеткіліксіз екені және сенсор–құрылым–өлшеу жүйесі арасындағы байланыс жүйелік деңгейде жеткілікті қарастырылмағаны анықталды. Осы олқылықты толықтыру мақсатында вакуум, термоцикл және ультракүлгін әсерлері ескерілетін кешенді эксперименттік әдістеме ұсынылады. Төмен Жер орбитасы (LEO) ортасын модельдеу арқылы сенсорлардың ұзақ мерзімді тұрақтылығы мен сенімділігі талданады. Алынған нәтижелер FBG сенсорларын ғарыш аппараттарының құрылымдық күйін бақылауға арналған сенімді өлшеу платформасы ретінде қолдануға болатынын көрсетеді.

**Түйін сөздер:** Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорлары, ғарыштық орта, қатал жағдайлар, құрылымдық денсаулықты бақылау (SHM), ұзақмерзімді тұрақтылық, спектралдық дрейф, термовакуумдық сынақтар.

Жіберілді 16.01.2026. Өзгертілді 11.02.2026. Қабылданды 25.02.2026. Онлайн қол жетімді 30.03.2026.

\*хат-хабар авторы

## Кіріспе

Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорлары жоғары сезімталдығы, электромагниттік кедергілерге төзімділігі және бір талшықта көп нүктелі өлшеу жүргізу мүмкіндігі арқасында құрылымдық денсаулықты бақылау жүйелерінде кеңінен қолданылып келеді [1,2]. Бұл технология инженерлік құрылымдардың нақты күйін үздіксіз бақылауға мүмкіндік беретін тиімді құрал ретінде қалыптасты.

FBG сенсорларының жұмыс принципі Bragg толқын ұзындығының температура мен деформацияның әсерінен ығысуына негізделген және физикалық параметрлерді дәл анықтауға жағдай жасайды [3]. Осы қасиет оларды түрлі ортада қолдануға бейім әмбебап сенсорлық элементке айналдырады. Соңғы зерттеулерде FBG негізіндегі сенсорлар температура мен ылғалдылықты жоғары дәлдікпен өлшеу үшін жетілдірілген жабындармен біріктіріліп, сезімталдығының едәуір артқаны көрсетілді. Бұл жұмыстар FBG құрылымын модификациялау арқылы жаңа функционалдық мүмкіндіктерге қол жеткізуге болатынын дәлелдейді [3,4].

Инфрақұрылымдық объектілерде FBG сенсорлары көпқабатты ғимараттар мен азаматтық құрылымдарды ұзақ мерзімді мониторингтеуде табысты қолданылып, деформация мен температура өзгерістерін сенімді тіркей алатыны көрсетілген. Мұндай нәтижелер FBG жүйелерінің практикалық іске асырылуын негіздейді [1,5].

Аэроғарыш саласында FBG сенсорлары композиттік авиациялық құрылымдарда деформацияны бақылау үшін тиімді екені дәлелденген [2], ал көміртекті-оптикалық платформаларда температура мен термоэластикалық әсерлерді өлшеуге қолданылған кірістірілген шешімдер олардың ғарыштық құрылымдар үшін жарамдылығын көрсетеді [6]. Сонымен қатар, жерсеріктік күн панельдерінде FBG сенсорларын оңтайлы орналастыру арқылы өлшеу дәлдігін арттыруға және құрылымның шаршауға төзімділік мерзімін ұзартуға мүмкіндік беретіні көрсетілген. Бұл зерттеулер FBG технологиясының ғарыш аппараттарындағы практикалық әлеуетін айқындайды [7].

Ғарыштық ортаға жақын жағдайларда жүргізілген тәжірибелерде көппараметрлі FBG сенсорлары вакуум мен термоциклдер әсерінде күн батареяларының адгезив қабаттардың күйін бақылауға жарамды екені дәлелденген. Алайда бұл жұмыстар көбіне нақты бір қолдану жағдайымен шектеледі [8]. Осыған қарамастан, қолданыстағы әдебиеттерде FBG сенсорларының температураға [3], механикалық деформацияға [2] немесе инфрақұрылымдық ортаға [1] реакциясы жеке зерттелгенімен, олардың ғарышқа тән нақты қатал ортада кешенді түрде бағалануының жетіспеуі және сенсорды «сенсор–құрылым–өлшеу» тізбегі аясында жүйелік деңгейде қарастырылмауы айқын байқалады. Бұл жағдай FBG технологиясының ғарыштық SHM жүйелеріндегі шынайы сенімділігін толық бағалауға мүмкіндік бермейді [6,8]. Сондықтан бұл мақала FBG сенсорларының жоғары температура, вакуум, термоциклдер және көппараметрлі мониторинг жағдайларындағы жұмыс қабілетін біртұтас жүйе ретінде қарастырып, әдебиетте қалыптасқан кешенді және жүйелік деңгейдегі бағалаудың жоқтығы мәселесін қамтамасыз етуге бағытталған [2,7]. Жұмыстың негізгі мақсаты — FBG сенсорларын ғарыштық SHM жүйелері үшін сенімді өлшеу платформасы ретінде ғылыми тұрғыдан негіздеу [6,8].

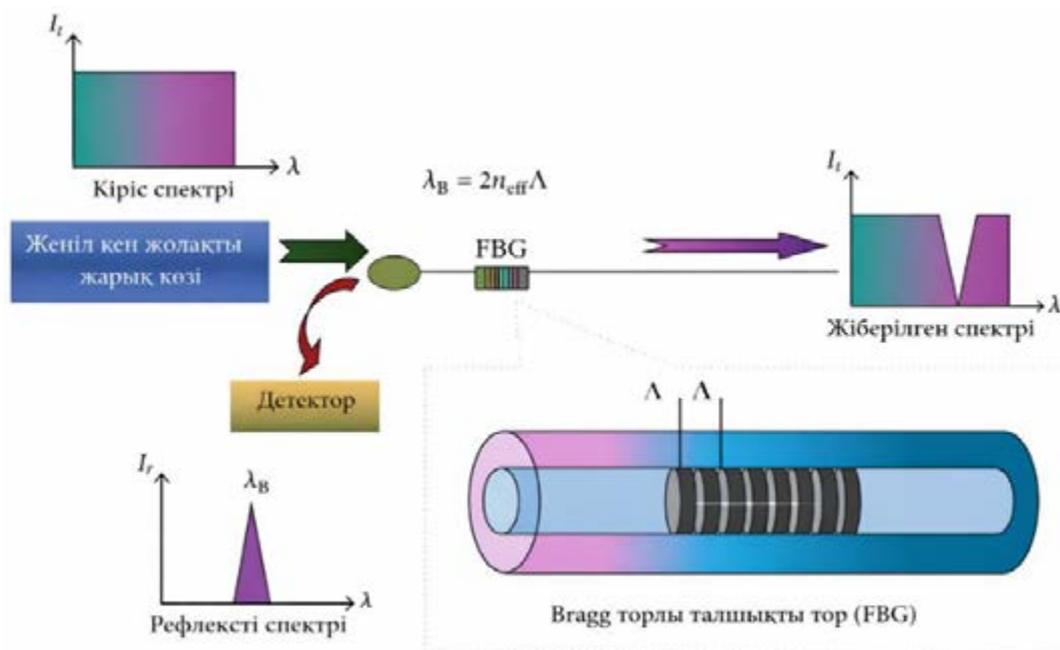
### Әдіснама

FBG сенсорлары өлшеуді талшық ішіндегі Брэгг торының арқылы жүзеге асырады. Талшық өзегіндегі сыну көрсеткішінің периодты өзгерістері белгілі бір Брэгг толқын ұзындығына сәйкес келеді, ол кең жолақты жарық көзінен шағылып кері қайтады, ал қалған толқын ұзындықтары тор арқылы өтіп кетеді. Осы шағылған спектр өлшеніп, температура мен деформация сияқты факторлардың тор ұзындығына әсерінен туындайтын физикалық өзгерістерге байланысты толқын ұзындығының ығысуы арқылы физикалық параметрлер есептеледі.  $\lambda_B = 1550$  нм болған жағдайда салыстырмалы деформацияның 1%-ға өзгеруі  $\Delta\lambda_B = 12$  нм толқын ұзындығының ығысуына сәйкес келеді. Брэгг толқын ұзындығы тиімді сыну көрсеткішінің есептеу 1-формулада көрсетілген [9,10]:

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

Түскен жарықтың ішінен тек белгілі бір толқын ұзындығындағы сәуле ғана FBG арқылы шағылып, кері қайтарылады. 1-суретте FBG сенсорлық жүйесінің құрылымы мен өлшеу принципі көрсетілген. Яғни қалай толық жүзеге асатынын көруге болады. Брэгг торының орталық толқын ұзындығы сыртқы температураға, деформацияға және басқа да әсерлерге жақсы жауап береді және 1- формула бойынша сипатталады [11].

$$\frac{\Delta\lambda_B}{\lambda_B} = \left[ \frac{1}{n} \xi + \alpha_f \right] \Delta T + (1 - P_c) \Delta \epsilon \quad (2)$$



Сурет 1. FBG сенсорының жұмыс принципі

*Зерттелген материалдар:*

FBG сенсорлары әртүрлі құрылымдарға кірістірілген күйде қарастырылды: көміртекті композиттер [9,10] және көпқабатты жылу оқшаулағыш жабындар (MLI) [12,13], ракеталық қозғалтқыш корпустары [10,14], сондай-ақ сенсордың өз технологиялық түрлері – regenerated FBG [16]. Сенсорлар әдетте телекоммуникациялық диапазонда,  $\lambda_B \approx 1550$  нм маңында жұмыс істейтіні көрсетілген [10,12].

*Эксперименттік орта және жүктемелер:* LEO ортасын модельдеу мақсатында вакуум, ультракүлгін сәуле және термоциклдер қолданылған. Кірістірілген FBG сенсорлары CFRP үлгілерінде осы әсерлерден кейін де спектралдық жауаптың сақталуын дәлелдеген [9].

Термо-вакуумдық камерада қысымды  $1 \times 10^{-81}$  мбарға дейін төмендетіп, температураны  $-190$  °C пен  $+160$  °C аралығында өзгерту арқылы жүргізілген сынақтар ғарышқа тән жылуөткізгіштіктің болмауын және сәулелік жылуалмасудың басым болуын модельдеуге мүмкіндік береді. Мұндай жағдайда FBG сенсорының шағылысқан Bragg толқын ұзындығының өзгерісі тек сыртқы ортаның экстремалды температуралық әсеріне ғана емес, сонымен қатар құрылымда туындайтын механикалық деформацияға да тәуелді болады. Сондықтан 3-формуладағы  $\Delta\lambda_B$  өлшемі екі құрамдастан температуралық және деформациялық үлестен тұратынын көрсету сенсор сигналын ғарыштық ортада дұрыс интерпретациялау үшін шешуші мәнге ие [13].

$$\Delta\lambda_B = K_\epsilon \Delta\epsilon + K_T \Delta T \quad (3)$$



**Сурет 2. Картон тірегіндегі FBG сенсорын орналастыру және вакуум жағдайындағы эксперименттік қондырғы**

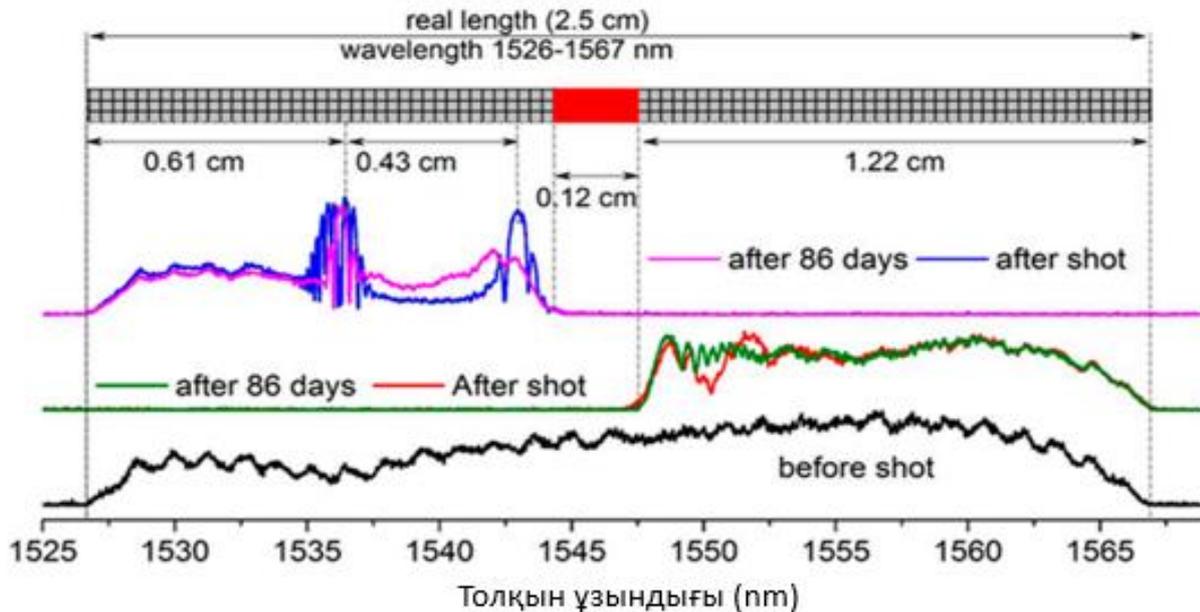
Ракета қозғалтқышының сақина тәрізді композит қаптамасында жүргізілген зерттеулерде үлгінің орташа көлденең қимасы  $20.0 \pm 0.1 \text{ мм}^2$ , ішкі диаметрі  $150 \pm 0.2 \text{ мм}$  болған, ал жүктеме 30 кН-ға дейін арттырылған. Деформация шамамен 1% деңгейіне жеткенде сенсорлардың істен шығуы байқалған [10]. Ұқсас зерттеуде қатты отынды ракеталық моторларында FBG желілері 10–40 кН аралығындағы жүктемелерде сынақтан өткізілгені анықталған [12].

*Өлшеу жүйесі және дәлдік:* FBG сенсорларынан шағылған толқын ұзындығының өзгерісі жоғары жылдамдықта тіркелген. Мысалы, композит қаптамадағы өлшеулерде дискреттеу жиілігі 500 кГц құраған. FBG нәтижелері дәстүрлі тензодатчиктермен салыстырылып, жоғары жүктемелерде айырмашылық  $\leq 2 \%$ , ал төмен жүктемелерде  $\approx 0.01 \%$  деңгейінде болған [10], бұл FBG өлшеулерінің жоғары дәлдігін көрсетеді. Авиациялық қолдануларға арналған шолуда деформацияны өлшеу дәлдігі  $\pm 1-5 \text{ мк}$  деңгейінде екені және мультиплекстеу арқылы бір талшық бойында ондаған сенсорды орналастыру мүмкіндігі көрсетілген [15].

*Ұзақ мерзімді тұрақтылық пен сенімділік:* Regenerated FBG сенсорлары жоғары температурада ұзақ уақыт тұрақты жұмыс істейтіні көрсетілген: эксперименттерде олар 800–1000 °С диапазонында бірнеше сағаттан тәуліктерге дейін спектралдық дрейфсіз сақталған. Бұл көрсеткіштер стандартты FBG-мен салыстырғанда айтарлықтай жоғары термотұрақтылықты білдіреді [16]. Сенсорлардың сенімділігін арттыру бойынша ұсынылған әдістерде діріл, термоцикл және радиация әсерлеріне төзімділікті арттыру үшін арнайы қаптама мен талшық құрылымын қолдану нақты қарастырылған [17].

*Сенсор-құрылым интерфейсі:* FBG температуралық сенсорларын әртүрлі адгезивтермен бекіту кезінде сезімталдық пен дрейфтің өзгеретіні анықталған. Термовакуум сынақтарында сезімталдықтың өзгерісі бірнеше пм/°С деңгейінде болып, адгезив түріне тәуелді айырмашылықтар тіркелген. Бұл ғарыштық құрылымдарға енгізу кезінде бекіту технологиясын әдістемелік фактор ретінде қарастыруды талап етеді [18].

*Жүйелік қолдану және деректерді біріктіру:* Ғарыш аппараттарындағы талшықты сенсорлар ұшу миссияларында температура мен деформацияны бақылауда қолданылып,  $-150...+120 \text{ }^\circ\text{C}$  диапазонда сенімді жұмыс істегені көрсетілген. Эксперименттік зерттеулерде диаметрі 2 мм алюминий пеллеттің 2 км/с жылдамдықпен соқтығысуы нәтижесінде талшықтың шамамен 1.2 мм бөлігі үзіліп, спектрдегі жетіспейтін аймақ арқылы зақымның нақты анықталғаны көрсетілген. Сонымен қатар, соққы әсерінің орталықтан шамамен 2 см радиус шегінде локалданатыны және 86 күннен кейін спектрдің жартылай қалпына келуі 3-суреттегідей байқалған. Бұл нәтижелер FBG сенсорларының микрометеороидтар мен орбиталық қоқыстың әсерінен туындайтын зақымдарды ғарыш аппараттарында *in situ* режимінде анықтауға жарамды екенін көрсетеді [19,20].



**Сурет 3. FBG спектрлері соққыға дейін және соққыдан кейін анығырақ көрсету үшін каскад түрінде берілген**

Жер асты тоннельдеріндегі *in situ* мониторингте FBG желілері көпжылдық бақылауда тұрақты жұмыс істеп, деформация өзгерістерін микродеңгейде тіркей алған, бұл ұзақ мерзімді сенімділікті дәлелдейді. Осылайша, қолданылған материалдар мен әдістер FBG сенсорларын жүктеме 30–40 кН, температура  $-190...+160$  °С, қысым  $10^{-8}$  мбар және жоғары температура 800–1000 °С сияқты кең ауқымды шарттарда сынақтан өткізуге негізделіп, олардың ғарыштық орта үшін жарамдылығын сандық тұрғыда бағалауға мүмкіндік береді [11].

Біздің жұмыста осы мәліметтер арқылы FBG сенсорларының ғарышқа тән нақты қатал ортада кешенді бағалануының жетіспеуін жою мақсатында тиімділігін қысқаша көрсететін бірнеше әдісті ұсынамыз:

1) LEO ортасын имитациялау арқылы эксперименттік бағалау әдісі

FBG сенсорларын вакуум, термоцикл, ультракүлгін сәуле және атомдық оттегі әсерінде сынап, Bragg толқын ұзындығының тұрақтылығын талдау. Мақсаты – орбиталық ортада өлшеу сенімділігін тікелей тексеру [9,13].

2) Кірістірілген FBG желілері негізіндегі SHM тиімділігін бағалау әдісі

Композитті ракета құрылымдары мен қатты отын моторларында деформация [10], температураны және зақымдарды үздіксіз бақылау қабілетін эксперименттік деректермен салыстыру. Мақсаты – FBG-нің ғарыштық SHM жүйелеріндегі практикалық артықшылығын көрсету [12,14].

3) Ұзақмерзімді тұрақтылық пен сенімділікті бағалау әдісі

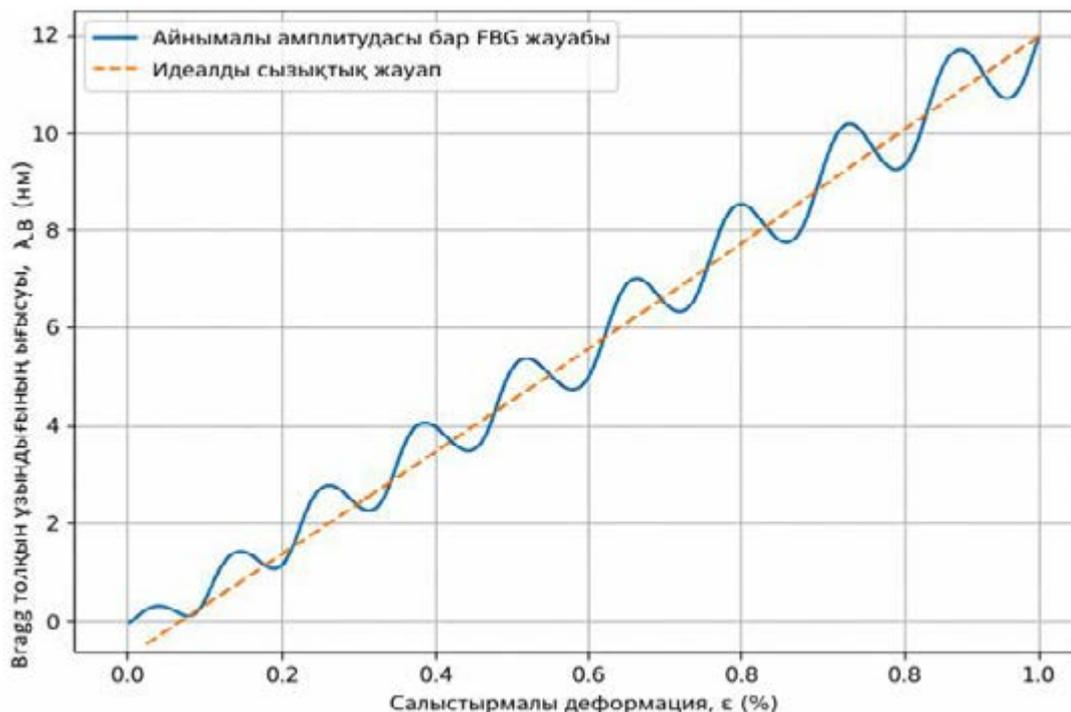
Regenerated FBG технологиясын және сенсор конструкциясын қолдана отырып,

уақыт және жоғары температура әсеріндегі спектралдық дрейфті талдау. Мақсаты – көпжылдық миссиялар үшін өлшеу тұрақтылығын негіздеу [16,17].

### Нәтижелер мен талқылау

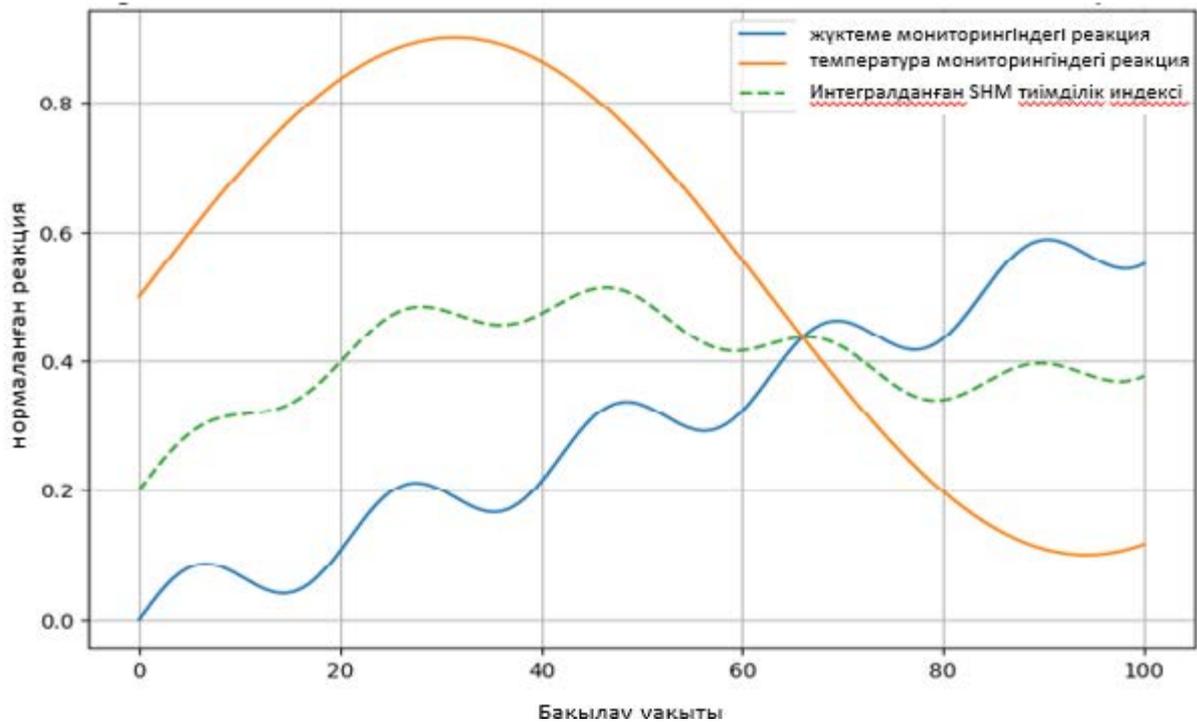
Бұл бөлімде regenerated Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорларының жоғары температуралы ортадағы ұзақ мерзімді тұрақтылығы мен сенімділігін сипаттайтын эксперименттік нәтижелер ұсынылады. 800–1000 °C диапазонында уақыт бойынша Bragg толқын ұзындығының дрейфін талдау арқылы сенсорлардың бастапқы термиялық тұрақтану кезеңінен кейін спектралдық жауабының тиімді тұрақтылық аймағына ауысатыны және өлшеулердің дрейфсіз режимде сақталатыны көрсетіледі. Алынған нәтижелер regenerated FBG технологиясының экстремалды температура әсерінде де өлшеу дәлдігін қамтамасыз ете алатынын және оны көп жылдық ғарыштық миссиялар мен қатал ортадағы SHM жүйелерінде қолданудың практикалық негізділігін айқындайды.

4-суретте берілген график FBG сенсоры үшін Bragg толқын ұзындығының салыстырмалы деформацияға тәуелділігін көрсетеді. Негізгі тренд ретінде  $\Delta\lambda_B = 12 \cdot \epsilon$  сызықтық қатынасы алынған, бұл деформацияның спектралдық жауапқа тікелей пропорционал екенін және сенсордың жоғары сезімталдығын көрсетеді.



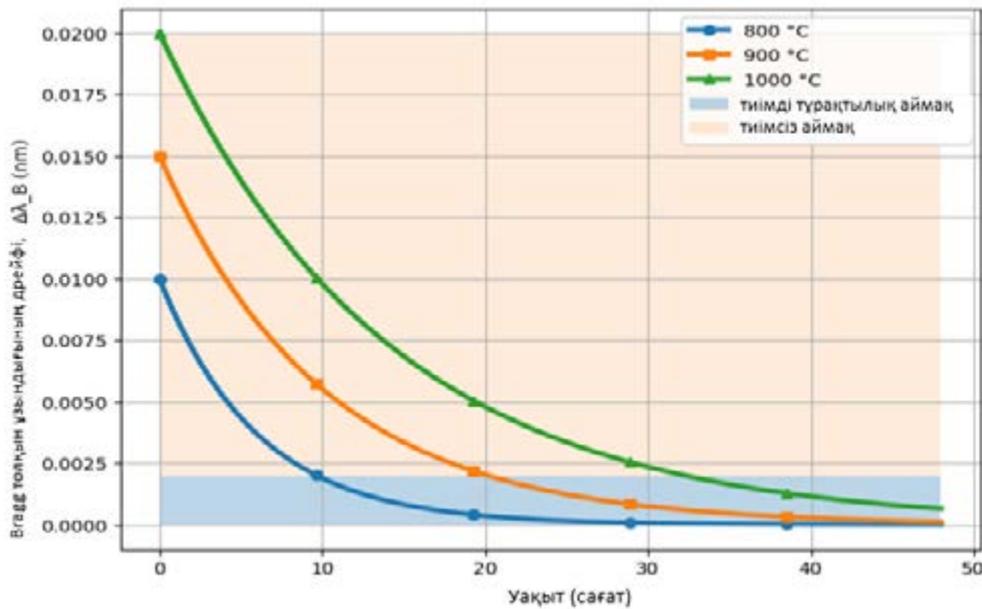
**Сурет 4. Амплитудасы өзгертін толқындық ауытқуы бар FBG сенсоры үшін Bragg толқын ұзындығының салыстырмалы деформацияға тәуелділігі**

Композитті ракета құрылымдары мен қатты отын моторларына кірістірілген FBG сенсор желісінің SHM жүйесіндегі көп параметрлі мониторинг қабілеті уақыт бойынша 5-суретте көрсетілген. Көлденең ось үздіксіз бақылау уақытын, ал тік ось өлшенетін параметрлердің нормаланған жауабын көрсетеді.



**Сурет 5. BG сенсор желісінің SHM жүйесіндегі көппараметрлі мониторинг қабілеті**

Берілген 6-суретте regenerated FBG сенсорларының 800, 900 және 1000°C жоғары температураларда уақыт бойынша Bragg толқын ұзындығының спектралдық дрейфін көрсетеді. Уақыттың бастапқы кезеңінде барлық температура режимдерінде  $\Delta\lambda_B$  мәнінің салыстырмалы түрде жоғары болуы сенсордың термиялық қайта құрылымдану процесіне байланысты өтпелі күйін сипаттайды. Температура артқан сайын бастапқы дрейф деңгейі өсіп, тұрақтану уақытының ұзаруы байқалады: 800°C-та сенсор тезірек тұрақтанса, 1000°C-та бұл процесс баяуырақ жүреді. Дегенмен, уақыт өте келе барлық қисықтар төменгі тиімді тұрақтылық аймағына еніп,  $\Delta\lambda_B$  шамасының нөлге жақындауын көрсетеді.



**Сурет 6. Уақыт бойынша Bragg толқын ұзындығының спектралдық дрейфі**

Берілген нәтижелер regenerated Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорларының 800–1000°C аралығындағы жоғары температуралы ортада Bragg толқын ұзындығының уақыт бойынша дрейфін, деформацияға сызықтық сезімталдығын ( $\Delta\lambda_B = 12 \cdot \varepsilon$ ) және композитті құрылымдарға кірістірілген желі түрінде көп параметрлі мониторинг жүргізу қабілетін біртұтас түрде сипаттайды. Эксперименттер сенсордың бастапқы термиялық қайта құрылымдану кезеңінен кейін спектралдық жауабының тиімді тұрақтылық аймағына ауысатынын және ұзақ уақыт бойы дрейфсіз режимде сақталатынын көрсетіп, regenerated FBG технологиясының экстремалды жағдайларда да өлшеу дәлдігі мен сенімділігін қамтамасыз ете алатынын дәлелдейді. Бұл деректер сенсордың материалдық және спектралдық деңгейдегі тұрақтылығын сандық тұрғыда негіздеп, көпжылдық миссиялар үшін қолданудың практикалық мүмкіндігін айқындайды.

### Қорытынды

Бұл мақалада Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорларының ғарышқа тән қатал орта жағдайларында қолданылу мүмкіндігі кешенді түрде қарастырылып, олардың жоғары температура, вакуум, термоциклдер, механикалық жүктемелер және радиациялық факторлар әсерінде өлшеу тұрақтылығы мен дәлдігін сақтай алатыны жүйелік деңгейде негізделеді. Regenerated FBG технологиясының спектралдық дрейфсіз режимге өтуі және кірістірілген сенсор желілерінің көп параметрлі мониторинг қабілеті FBG-нің көп жылдық миссиялар үшін жарамдылығын дәлелдейді. Ең бастысы, бұл мақалада әдебиетте жеткіліксіз қамтылған олқылық – FBG сенсорларын ғарыштық ортада тек жекелеген әсерлер тұрғысынан емес, толық сенсор-құрылым-өлшеу тізбегі аясында жүйелік түрде бағалаудың болмауы – толтырылып, FBG технологиясы ғарыштық SHM жүйелері

үшін сенімді әрі кешенді өлшеу платформасы ретінде ұсынылған. Осылайша, алынған қорытындылар болашақ ғарыштық құрылымдарды мониторингтеу жүйелерін жобалау мен оңтайландыруда FBG технологиясының стратегиялық маңызын айқындайды.

Болашақ зерттеулер бұл мақалада ұсынылған кешенді және жүйелік бағалау тәсілін одан әрі дамытуға бағытталып, FBG сенсорларының ғарышқа тән көпфакторлы әсерлер (радиация–термоцикл–механикалық жүктеме) бір мезгілде әрекет ететін ұзақ мерзімді сынақтардағы мінез-құлқын зерттеуді, сенсор–интеррогация–деректерді өңдеу тізбегінің бірлескен тұрақтылығын талдауды және нақты орбиталық ұшу эксперименттері арқылы валидациялауды қамтуы тиіс.

### **Қаржыландыру**

Мақала AP26197431 «Талшықты Брэгг торларын пайдалана отырып, ғарыштық инфрақұрылымдағы деформацияларды жоғары дәлдікпен бақылауға арналған құрылымдар мен технологияларды әзірлеу» жобасы бойынша орындалды.

### **Авторлардың қосқан үлесі**

**Көшкінбаев С.Ж.** – зерттеудің ғылыми тұжырымдамасын қалыптастыруға, жұмыстың жалпы әдіснамасын әзірлеуге және зерттеу бағытын анықтауға елеулі үлес қосты, сондай-ақ мақаланың мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарап, ғылыми редакциялауға қатысты.

**Сейтханова А.К.** – ғылыми әдебиеттерге талдау жүргізуге, зерттеу нәтижелерін жүйелеуге және мақаланың кіріспе мен теориялық бөлімдерін дайындауға қатысып, мәтінді ғылыми тұрғыдан редакциялауға үлес қосты.

**Смайлов Н.К.** – зерттеу әдістемесін әзірлеуге, алынған нәтижелерді талдауға және интерпретациялауға жетекшілік етті, мақаланың негізгі ғылыми мазмұнын қалыптастыруға қатысып, жариялауға арналған соңғы нұсқасын бекітті.

**Ысырайыл Қ.М.** – эксперименттік және аналитикалық зерттеу материалдарын жинауға, нәтижелерді өңдеуге, графиктер мен иллюстрациялық материалдарды дайындауға және мақаланың негізгі мәтінін жазуға қатысты.

**Куттыбаева А.Е.** – зерттеу нәтижелерін ғылыми тұрғыдан талдауға, мақаланың құрылымын жетілдіруге және мәтінді ғылыми редакциялауға үлес қосты.

Барлық авторлар мақаланың соңғы нұсқасын оқып, жариялауға келісім берді және жұмыстың барлық аспектілерінің дұрыстығы мен ғылыми тұтастығы үшін жауапкершілікті өз мойнына алады.

### **Әдебиеттер тізімі**

1. O. G. Morozov, Fiber Bragg grating-based sensors and systems, Sensors 21, 8225 (2021).<https://doi.org/10.3390/s21248225>

2. R. Di Sante, Fibre optic sensors for structural health monitoring of aircraft composite structures: Recent advances and applications, Sensors 15(8), 18666-18713 (2015). <https://doi.org/10.3390/s150818666>.

3. S. Ju, P. R. Watekar, and W.-T. Han, Highly sensitive temperature sensor using fiber Bragg grating on Pb/Ge-codoped fiber, in Optical Fiber Communication Conference and National Fiber Optic Engineers Conference, OSA Technical Digest (CD) (Optica Publishing Group, 2009). <https://doi.org/10.1364/NFOEC.2009.JWA10>.
4. B. Liu, Z. Gao, R. Yao, L. Ding, and X. Xia, Development of a high-sensitivity humidity sensor using fiber Bragg grating coated with LiCl@UIO-66-doped hydrogel, *Materials* 18, 5587 (2025), <https://doi.org/10.3390/ma18245587>.
5. A. Sivasuriyan, D. S. Vijayan, W. Górski, Ł. Wodzyński, M. D. Vaverková, and E. Koda, Practical implementation of structural health monitoring in multi-story buildings, *Buildings* 11, 263 (2021), <https://doi.org/10.3390/buildings11060263>.
6. A. Fernández-Medina and M. Frövel et al., Embedded fiber Bragg grating sensors for monitoring temperature and thermo-elastic deformations in a carbon fiber optical bench, *Sensors* 23, 6499 (2023), <https://doi.org/10.3390/s23146499>.
7. M. Kumari and S. K. Mishra, Transmission of LG modes in high-capacity 16 × 10 Gbps FSO system using FBG sensors under different channel scenarios, *Micromachines* 16, 738 (2025). <https://doi.org/10.3390/mi16070738>
8. L. Fazzi, N. Dias, M. Holynska, A. Tighe, R. Rampini, and R. M. Groves, Monitoring of silicone adhesive in space solar cells with an embedded multi-parameter TFBG sensor in a simulated space environment, *Meas. Sci. Technol.* 33, 085108 (2022), <https://doi.org/10.1088/1361-6501/ac6d45>.
9. Y. Deng, W. Ren, and X. Wang, Scientometric analysis and research trends in optical fiber grating sensors: A review, *Photonics* 12, 349 (2025). <https://doi.org/10.3390/photonics12040349>
10. A. Kalizhanova, A. Kozbakova, M. Kunelbayev, T. Kartbayev, and G. Kashaganova, Research on the relative displacement distribution of a composite plate with built-in FBG sensors, *J. Compos. Sci.* 9, 198 (2025). <https://doi.org/10.3390/jcs9050198>
11. Y. Park, H. Kwon, P. Shrestha, and C. Kim, Investigation of LEO environment exposure monitoring potential using embedded FBG sensors, *Proc. SPIE* 10323, 103239E (2017). <https://doi.org/10.1117/12.2267564>
12. J. Wang and J. Tang, Feasibility of fiber Bragg grating and long-period fiber grating sensors under different environmental conditions, *Sensors* 10, 10105–10127 (2010). <https://doi.org/10.3390/s101110105>
13. A. Aimasso, C. G. Ferro, M. Bertone, M. D. L. Dalla Vedova, and P. Maggiore, Fiber Bragg grating sensor networks enhance the in situ real-time monitoring capabilities of MLI thermal blankets for space applications, *Micromachines* 14, 926 (2023), <https://doi.org/10.3390/mi14050926>.
14. G. Korompili, G. Mußbach, and C. Riziotis, Structural health monitoring of solid rocket motors: From destructive testing to perspectives of photonic-based sensing, *Instruments* 8, 16 (2024), <https://doi.org/10.3390/instruments8010016>.
15. D. Kiesewetter, S. Krivosheev, S. Magazinov, V. Malyugin, S. Varzhel, E. Loseva, S. Koshkinbayev, and N. K. Smailov, Application of fiber Bragg gratings as a sensor of pulsed mechanical action, *Sensors* 22, 7289 (2022). <https://doi.org/10.3390/s22197289>
16. M. Celikin, D. Barba, B. Bastola, A. Ruediger, and F. Rosei, Development of regenerated fiber Bragg grating sensors with long-term stability, *Opt. Express*, <https://doi.org/10.1364/OE.24.021897>.

17. M. Tomsia et al., Long-term space missions' effects on the human organism: What we do know and what requires further research, *Front. Physiol.* (2024). <https://doi.org/10.3389/fphys.2024.1284644>
18. S. J. Mihailov, Fiber Bragg grating sensors for harsh environments, *Sensors* 12, 1898–1918 (2012). <https://doi.org/10.3390/s120201898>
19. I. McKenzie, S. Ibrahim, E. Haddad, S. Abad, A. Hurni, and L. K. Cheng, Fiber optic sensing in spacecraft engineering: An historical perspective from the European Space Agency, *Front. Phys.* 9, 719441 (2021), <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.719441>.
20. W. Liu, M. Wu, G. Wan, and M. Xu, Digital twin of space environment: Development, challenges, applications, and future outlook, *Remote Sens.* 16, 3023 (2024), <https://doi.org/10.3390/rs16163023>.

**С.Ж.Көшкінбаев<sup>1,2</sup>, А.К.Сейтханова<sup>3</sup>, Н.К.Смайлов\*<sup>1</sup>, Қ.М.Ысырайыл<sup>1</sup>, А.Е.Куттыбаева<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева,  
Алматы, Казахстан

<sup>2</sup>Университет Мирас, Шымкент, Казахстан

<sup>3</sup>Павлодарский педагогический университет имени Әлкей Марғұлан, Павлодар, Казахстан  
(E-mail: [koshkinbaev\\_s@miras.edu.kz](mailto:koshkinbaev_s@miras.edu.kz), [ainur1179@mail.ru](mailto:ainur1179@mail.ru), [n.smailov@satbayev.university](mailto:n.smailov@satbayev.university),  
[kidir200091@gmail.com](mailto:kidir200091@gmail.com), [a.kuttybayeva@satbayev.university](mailto:a.kuttybayeva@satbayev.university))

### Применение FBG-сенсоров в мониторинге космических конструкций

**Аннотация.** Данная статья посвящена комплексной оценке возможности применения сенсоров Fiber Bragg Grating (FBG) в жестких условиях, характерных для космической среды. В ходе исследования анализируется работоспособность сенсоров в условиях вакуума, при воздействии термоциклов, механических нагрузок, а также при экстремальных температурах в диапазоне 800–1000 °С. Показано, что технология Regenerated FBG обеспечивает долговременную стабильность при высоких температурах и сохранение длины волны Брэгга без спектрального дрейфа. Кроме того, линейная зависимость длины волны Брэгга от деформации обосновывает высокую точность измерений сенсоров. Возможность одновременного контроля нескольких параметров встроенными сетями FBG в одном оптическом волокне подтверждает эффективность их применения в системах структурного мониторинга состояния (SHM). Анализ научной литературы показал, что комплексная оценка FBG-сенсоров в условиях космической среды исследована недостаточно, а также отсутствует системный подход к анализу взаимодействия в цепочке «сенсор – конструкция – измерительная система». Для устранения данного пробела предложена комплексная экспериментальная методика, учитывающая воздействие вакуума, термоциклов и ультрафиолетового излучения. Моделирование условий низкой околоземной орбиты (LEO) позволило проанализировать долговременную стабильность и надежность сенсоров. Полученные результаты показывают, что FBG-сенсоры могут быть использованы в качестве надежной измерительной платформы для мониторинга структурного состояния космических аппаратов.

**Ключевые слова:** сенсоры Fiber Bragg Grating (FBG), космическая среда, жесткие условия, структурный мониторинг состояния (SHM), долговременная стабильность, спектральный дрейф, термовакуумные испытания.

**S.Zh. Koshkinbayev<sup>1,2</sup>, A.K. Seytkhanova<sup>3</sup>, N.K. Smailov\*<sup>1</sup>,  
K.M. Yssyraiyl<sup>1</sup>, A.E. Kuttybayeva<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Kazakh National Research Technical University after K.I. Satbayev, Almaty, Kazakhstan,*

<sup>2</sup>*Miras University, Shymkent, Kazakhstan*

<sup>3</sup>*Pavlodar Pedagogical University named after Alkey Margulan, Pavlodar, Kazakhstan*  
(E-mail: *koshkinbaev\_s@miras.edu.kz, ainur1179@mail.ru, n.smailov@satbayev.university,*  
*kidir200091@gmail.com, a.kuttybayeva@satbayev.university*)

### **Application of FBG Sensors in monitoring of space structures**

**Abstract.** This paper presents a comprehensive assessment of the applicability of Fiber Bragg Grating (FBG) sensors under harsh conditions characteristic of space environments. The study analyzes the operational performance of the sensors under vacuum conditions, thermal cycling, mechanical loading, and extreme temperatures in the range of 800–1000 °C. It is demonstrated that regenerated FBG technology provides long-term stability at high temperatures and ensures the preservation of the Bragg wavelength without spectral drift. In addition, the linear dependence of the Bragg wavelength on strain confirms the high measurement accuracy of the sensors. The capability of embedded FBG sensor networks to simultaneously monitor multiple parameters within a single optical fiber proves their effectiveness in structural health monitoring (SHM) systems. A review of the literature reveals that comprehensive evaluations of FBG sensors in space environments remain limited, and a system-level analysis of the “sensor–structure–measurement system” chain is insufficiently addressed. To fill this gap, a comprehensive experimental methodology considering the effects of vacuum, thermal cycling, and ultraviolet radiation is proposed. Simulation of the low Earth orbit (LEO) environment is performed to analyze the long-term stability and reliability of the sensors. The obtained results demonstrate that FBG sensors can serve as a reliable measurement platform for monitoring the structural condition of spacecraft.

**Keywords:** Fiber Bragg Grating (FBG) sensors, space environment, harsh conditions, structural health monitoring (SHM), long-term stability, spectral drift, thermo-vacuum testing.

### **References**

1. O. G. Morozov, Fiber Bragg grating-based sensors and systems, *Sensors* 21, 8225 (2021). <https://doi.org/10.3390/s21248225>
2. R. Di Sante, Fibre optic sensors for structural health monitoring of aircraft composite structures: Recent advances and applications, *Sensors* 15(8), 18666-18713 (2015). <https://doi.org/10.3390/s150818666>.
3. S. Ju, P. R. Watekar, and W.-T. Han, Highly sensitive temperature sensor using fiber Bragg grating on Pb/Ge-codoped fiber, in *Optical Fiber Communication Conference and National Fiber Optic Engineers Conference, OSA Technical Digest (CD) (Optica Publishing Group, 2009)*. <https://doi.org/10.1364/NFOEC.2009.JWA10>.
4. B. Liu, Z. Gao, R. Yao, L. Ding, and X. Xia, Development of a high-sensitivity humidity sensor using fiber Bragg grating coated with LiCl@UIO-66-doped hydrogel, *Materials* 18, 5587 (2025), <https://doi.org/10.3390/ma18245587>.

5. A. Sivasuriyan, D. S. Vijayan, W. Górski, Ł. Wodzyński, M. D. Vaverková, and E. Koda, Practical implementation of structural health monitoring in multi-story buildings, *Buildings* 11, 263 (2021), <https://doi.org/10.3390/buildings11060263>.
6. A. Fernández-Medina and M. Frövel et al., Embedded fiber Bragg grating sensors for monitoring temperature and thermo-elastic deformations in a carbon fiber optical bench, *Sensors* 23, 6499 (2023), <https://doi.org/10.3390/s23146499>.
7. M. Kumari and S. K. Mishra, Transmission of LG modes in high-capacity 16 × 10 Gbps FSO system using FBG sensors under different channel scenarios, *Micromachines* 16, 738 (2025). <https://doi.org/10.3390/mi16070738>
8. L. Fazzi, N. Dias, M. Holynska, A. Tighe, R. Rampini, and R. M. Groves, Monitoring of silicone adhesive in space solar cells with an embedded multi-parameter TFBG sensor in a simulated space environment, *Meas. Sci. Technol.* 33, 085108 (2022), <https://doi.org/10.1088/1361-6501/ac6d45>.
9. Y. Deng, W. Ren, and X. Wang, Scientometric analysis and research trends in optical fiber grating sensors: A review, *Photonics* 12, 349 (2025). <https://doi.org/10.3390/photonics12040349>
10. A. Kalizhanova, A. Kozbakova, M. Kunelbayev, T. Kartbayev, and G. Kashaganova, Research on the relative displacement distribution of a composite plate with built-in FBG sensors, *J. Compos. Sci.* 9, 198 (2025). <https://doi.org/10.3390/jcs9050198>
11. Y. Park, H. Kwon, P. Shrestha, and C. Kim, Investigation of LEO environment exposure monitoring potential using embedded FBG sensors, *Proc. SPIE* 10323, 103239E (2017). <https://doi.org/10.1117/12.2267564>
12. J. Wang and J. Tang, Feasibility of fiber Bragg grating and long-period fiber grating sensors under different environmental conditions, *Sensors* 10, 10105–10127 (2010). <https://doi.org/10.3390/s101110105>
13. A. Aimasso, C. G. Ferro, M. Bertone, M. D. L. Dalla Vedova, and P. Maggiore, Fiber Bragg grating sensor networks enhance the in situ real-time monitoring capabilities of MLI thermal blankets for space applications, *Micromachines* 14, 926 (2023), <https://doi.org/10.3390/mi14050926>.
14. G. Korompili, G. Mußbach, and C. Riziotis, Structural health monitoring of solid rocket motors: From destructive testing to perspectives of photonic-based sensing, *Instruments* 8, 16 (2024), <https://doi.org/10.3390/instruments8010016>.
15. D. Kiesewetter, S. Krivosheev, S. Magazinov, V. Malyugin, S. Varzhel, E. Loseva, S. Koshkinbayev, and N. K. Smailov, Application of fiber Bragg gratings as a sensor of pulsed mechanical action, *Sensors* 22, 7289 (2022). <https://doi.org/10.3390/s22197289>
16. M. Celikin, D. Barba, B. Bastola, A. Ruediger, and F. Rosei, Development of regenerated fiber Bragg grating sensors with long-term stability, *Opt. Express*, <https://doi.org/10.1364/OE.24.021897>.
17. M. Tomsia et al., Long-term space missions' effects on the human organism: What we do know and what requires further research, *Front. Physiol.* (2024). <https://doi.org/10.3389/fphys.2024.1284644>
18. S. J. Mihailov, Fiber Bragg grating sensors for harsh environments, *Sensors* 12, 1898–1918 (2012). <https://doi.org/10.3390/s120201898>
19. I. McKenzie, S. Ibrahim, E. Haddad, S. Abad, A. Hurni, and L. K. Cheng, Fiber optic sensing in spacecraft engineering: An historical perspective from the European Space Agency, *Front. Phys.* 9, 719441 (2021), <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.719441>.

20. W. Liu, M. Wu, G. Wan, and M. Xu, Digital twin of space environment: Development, challenges, applications, and future outlook, Remote Sens. 16, 3023 (2024), <https://doi.org/10.3390/rs16163023>.

**Авторлар туралы мәлімет:**

**Көшкінбаев Сәулетбек Жолдықараұлы** – PhD докторы, қауымдастырылған профессоры, Қ.Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық университеті, Алматы, Қазақстан, «Мирас» университеті, 050013, Шымкент, Қазақстан.

**Сейтханова Айнура Кусбековна** – PhD докторы, қауымдастырылған профессоры, Ә.Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, Павлодар, Қазақстан.

**Смайлов Нуржигит Куралбаевич** – хат-хабар авторы, «Электроника, телекоммуникация және ғарыштық технологиялар» кафедрасының профессоры, PhD доктор, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті университеті, 050013, Алматы, Қазақстан.

**Ысырайыл Қыдырәлі Мұсаханұлы** – «Электроника, телекоммуникация және ғарыштық технологиялар» кафедрасының докторанты, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті университеті, 050013, Алматы, Қазақстан.

**Куттыбаева Айнура Ермеккалиевна** – «Электроника, телекоммуникация және ғарыштық технологиялар» кафедрасының қауым. профессоры, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті университеті, 050013, Алматы, Қазақстан.

**Көшкінбаев Сәулетбек Жолдықараұлы** – доктор PhD., ассоциированный профессор, Казахский национальный технический университет имени К.Сатпаева, г. Алматы, Казахстан, Университет «Мирас», 050013, г. Шымкент, Казахстан

**Сейтханова Айнура Кусбековна** – доктор PhD, ассоц. проф., Павлодарский педагогический университет имени Ә. Марғұлан, г. Павлодар, Казахстан

**Смайлов Нуржигит Куралбаевич** – автор для корреспонденции, профессор, доктор PhD кафедры «Электроники, телекоммуникации и космических технологий», Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, 050013, г. Алматы, Республика Казахстан

**Ысырайыл Қыдырәлі Мұсаханұлы** – докторант кафедры «Электроники, телекоммуникации и космических технологий», Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, 050013, г. Алматы, Республика Казахстан

**Куттыбаева Айнура Ермеккалиевна** – ассоц. проф. кафедры «Электроники, телекоммуникации и космических технологий», Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, 050013, г. Алматы, Республика Казахстан

**Koshkinbayev Sauletbek Zholdykarauy** – PhD, Associate Professor, K. Satpayev Kazakh National Technical University, Almaty, Republic of Kazakhstan, Miras University, 050013, Shymkent, Republic of Kazakhstan.

**Seitkhanova Ainur Kusbekovna** – PhD, Associate Professor, A. Margulan Pavlodar Pedagogical University, Pavlodar, Republic of Kazakhstan

**Smailov Nurzhigit Kuralbaevich** – the corresponding author, professor, PhD, Department of Electronics, Telecommunications and Space Technologies, Kazakh National Research Technical University after K.I. Satbayev, 050013, Almaty, Republic of Kazakhstan

**Yssyraiyl Kydyrali Musakhanuly** – doctoral student, Department of Electronics, Telecommunications and Space Technologies, Kazakh National Research Technical University after K.I. Satbayev, 050013, Almaty, Republic of Kazakhstan.

**Kuttybayeva Ainur Ermekkalievna** – Associate Professor, Department of Electronics, Telecommunications and Space Technologies, Kazakh National Research Technical University after K.I. Satbayev, 050013, Almaty, Republic of Kazakhstan



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



IRSTI 47.09.48  
Scientific article

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-170-181>

## Controlled hydrothermal synthesis of ZnO nanorods for high-performance gas sensors

Abylay Tangirbergen\*<sup>1</sup>, Yernar Shynybekov<sup>1</sup>, Almagul Mentabyeva<sup>2</sup>,  
Baktiyar Soltabayev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Advanced Sensors Laboratory, National Laboratory Astana, Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan

<sup>2</sup>Department of Chemical and Materials Engineering, School of Engineering and Digital Sciences, Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan

(E-mail: [abylay.tangirbergen@nu.edu.kz](mailto:abylay.tangirbergen@nu.edu.kz), [yernar.shynybekov@nu.edu.kz](mailto:yernar.shynybekov@nu.edu.kz), [almagul.mentabyeva@nu.edu.kz](mailto:almagul.mentabyeva@nu.edu.kz), [baktiyar.soltabayev@nu.edu.kz](mailto:baktiyar.soltabayev@nu.edu.kz))

**Abstract.** Controlled synthesis of ZnO nanorods with tailored crystallinity and morphology is of great importance for the development of high-performance gas sensors. In this study, ZnO seed layers were deposited on glass substrates by RF magnetron sputtering and subsequently annealed at 400 °C to improve crystallinity and surface uniformity. Hydrothermal growth of ZnO nanorods was then carried out under different precursor concentrations (0.01 M:0.01 M and 1 M:1 M zinc acetate/HMTA) to investigate the effects of solution chemistry on nanorod formation. X-ray diffraction (XRD) revealed a dominant (002) peak in all samples, confirming c-axis oriented growth, while scanning electron microscopy (SEM) demonstrated that higher precursor concentrations yielded longer, densely packed nanorods with well-defined hexagonal cross-sections. The results highlight that both seed layer annealing and precursor concentration strongly influence the structural and morphological evolution of ZnO nanorods. Optimized synthesis conditions lead to vertically aligned, highly crystalline nanorods with increased aspect ratios, which are expected to enhance gas adsorption and electron transport, making them highly suitable for resistive-type gas sensing applications.

**Keywords:** ZnO, nanorods, gas sensor, MOS, hydrothermal method

## Introduction

The demand for efficient, selective, and low-cost gas sensors has grown significantly in recent years due to increasing concerns over environmental pollution, industrial safety, and public health monitoring [1–3]. Among the different sensing platforms, metal oxide semiconductor (MOS)-based sensors are particularly attractive because of their simple device architecture, low fabrication cost, high sensitivity, and compatibility with microelectronic integration [4–6].

Within this class, zinc oxide (ZnO) has emerged as one of the most promising materials owing to its wide direct band gap ( $\sim 3.37$  eV), high electron mobility, chemical and thermal stability, and ease of tailoring into diverse nanostructures [7,8]. ZnO nanorods (NRs), in particular, offer unique advantages for gas sensing applications due to their one-dimensional (1D) morphology, high aspect ratio, and large surface-to-volume ratio, which enhance surface reactivity and adsorption/desorption kinetics [9,10]. The direct electron transport pathways along the c-axis of ZnO nanorods further minimize grain boundary resistance, resulting in faster charge carrier mobility and, consequently, improved response and recovery characteristics in resistive-type gas sensors [11].

Various approaches have been developed to synthesize ZnO nanorods, including chemical vapor deposition (CVD), pulsed laser deposition (PLD), sol-gel, and hydrothermal growth [12–14]. Among these, the hydrothermal method stands out as a low-temperature, scalable, and cost-effective route that enables the growth of vertically aligned, single-crystalline ZnO nanorods with well-controlled morphology [15,16]. Importantly, the hydrothermal process allows precise control over synthesis parameters such as precursor concentration, pH, temperature, and reaction time, all of which strongly influence the crystallinity, aspect ratio, and surface activity of ZnO nanorods [17,18]. Such tunability makes the hydrothermal route highly suitable for tailoring ZnO nanostructures toward enhanced gas sensor performance.

Therefore, this work focuses on the controlled synthesis of ZnO nanorods via the hydrothermal method and evaluates their structural, morphological, and gas-sensing properties. The insights obtained here contribute to the design of cost-effective, scalable ZnO nanostructures optimized for next-generation gas sensor applications.

## Methodology

ZnO seed layers were deposited onto pre-cleaned glass substrates via radio-frequency (RF) magnetron sputtering using a high-purity ZnO target. The deposition was performed under a working pressure of 10 mTorr with a mixed argon/oxygen gas flow of 15/15 sccm and an RF power of 60 W, yielding a film thickness of approximately 100 nm. To enhance the crystallinity and adhesion of the seed layer, the as-deposited films were subsequently annealed in air at 400 °C for 2 hours. For the hydrothermal growth process, precursor solutions of different concentrations were prepared. In the low-concentration case (0.01 M:0.01 M), 73.3 mg of zinc acetate dihydrate ( $\text{Zn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) and 56.1 mg of hexamethylenetetramine (HMTA,  $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4$ ) were dissolved in 40 mL of deionized (DI) water and stirred for 45 minutes to achieve a homogeneous mixture. For the high-concentration solution (1 M:1 M), 7.46 g of zinc acetate

dihydrate and 5.55 g of HMTA were used under identical preparation conditions. The annealed, seed-layer-coated substrates were vertically immersed in the precursor solution and placed in a Teflon-lined stainless-steel autoclave, where hydrothermal growth was conducted at 100 °C for 3 hours. Upon completion, the samples were removed, rinsed thoroughly with DI water to eliminate residual precursors, and dried at room temperature. The crystallographic characteristics of the seed layers and nanorods were examined using XRD and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS), while SEM was employed to investigate surface morphology and cross-sectional features. These analyses provided insights into the crystallinity, orientation, and morphology of the ZnO nanorods synthesized under the described conditions.

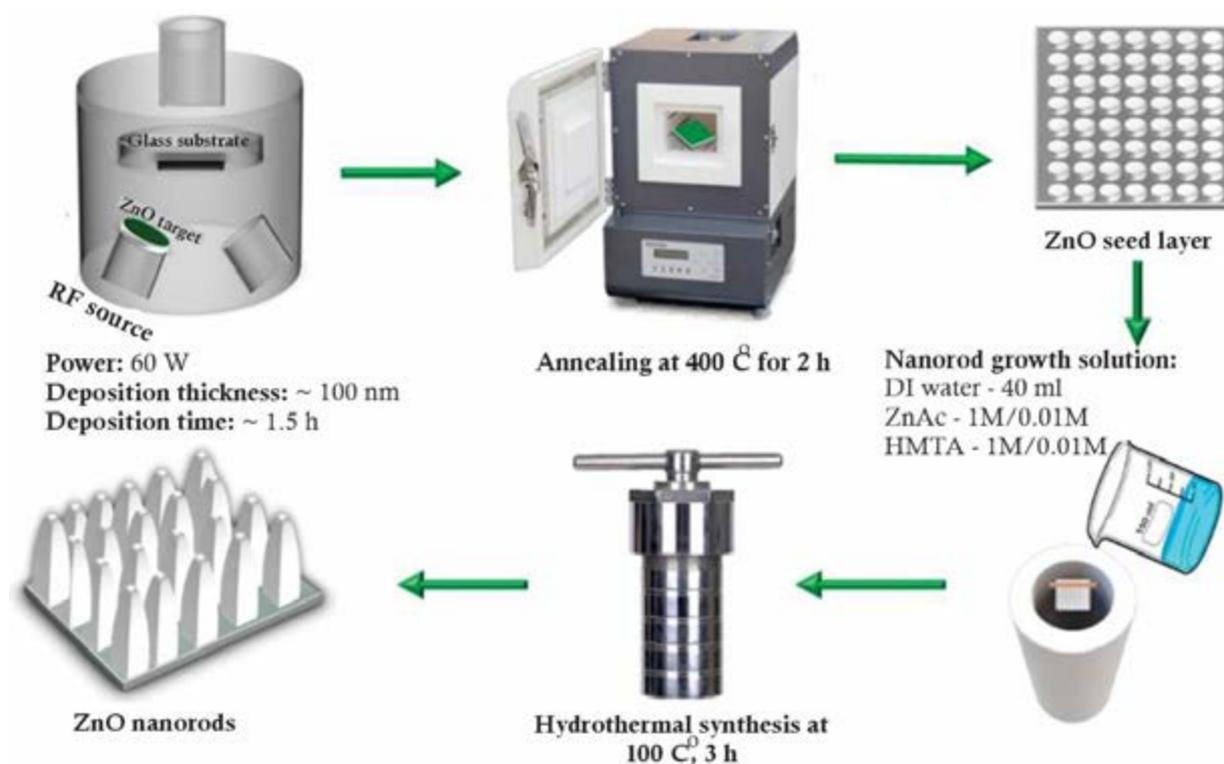
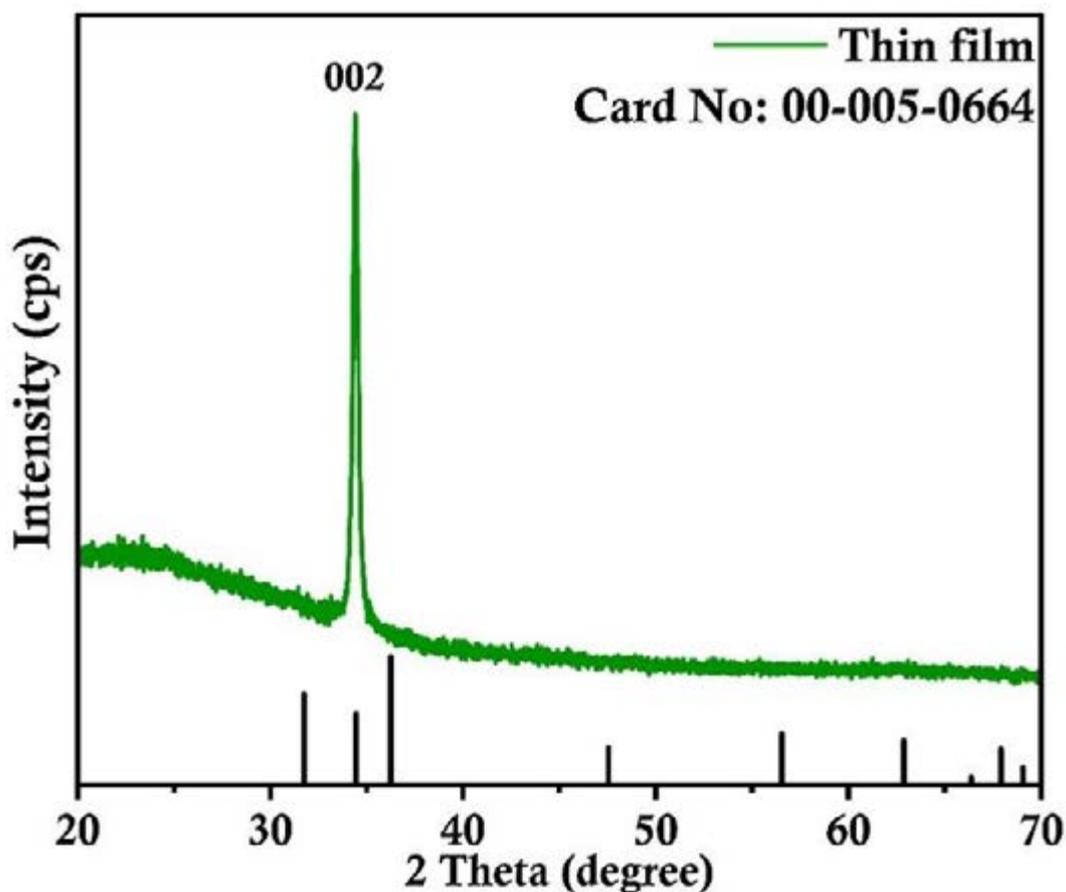


Figure 1. Schematic illustration of synthesis procedure

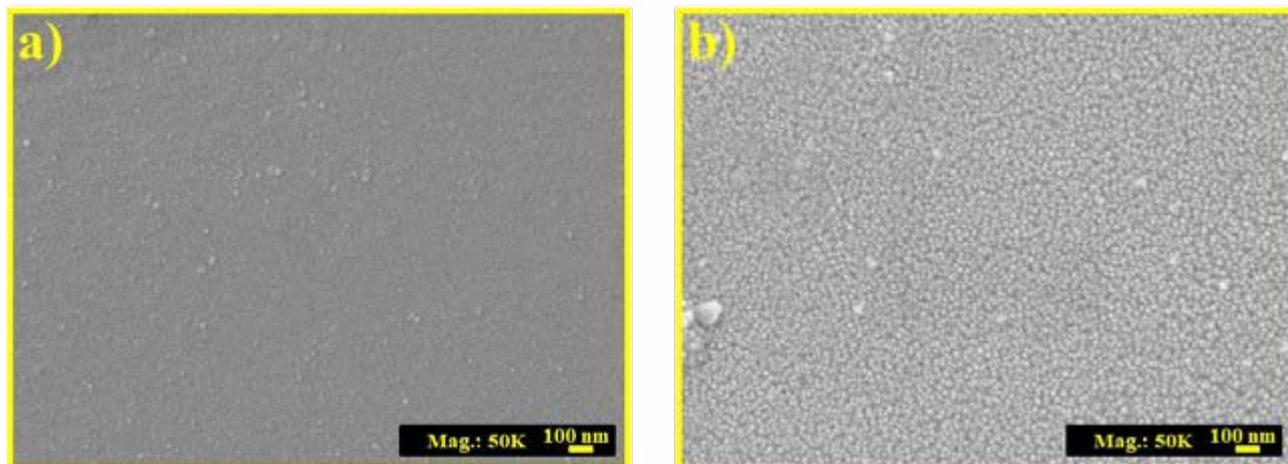
## Results and discussions

The crystallinity and orientation of the ZnO seed layer were first examined by XRD, as illustrated in Figure 1. The pattern revealed a sharp and intense diffraction peak at (002), characteristic of the hexagonal wurtzite ZnO structure (JCPDS Card No. 00-005-0664). The dominance of the (002) reflection indicates strong preferential orientation along the c-axis, which is known to promote the vertical alignment of ZnO nanorods during hydrothermal growth [19]. Such orientation is particularly beneficial for gas sensing applications, as c-axis aligned structures provide direct electron pathways and minimize grain boundary scattering.



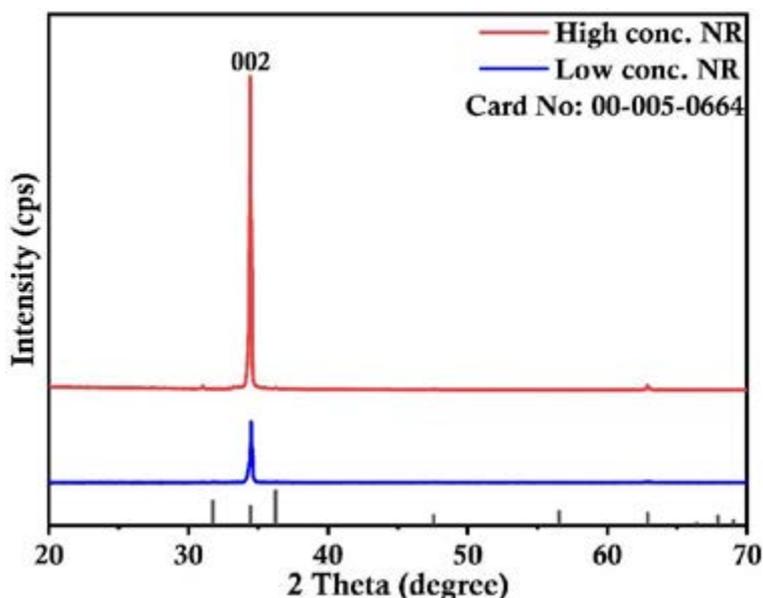
**Figure 2. XRD pattern of ZnO thin film seed layer deposited by RF magnetron sputtering, showing a dominant (002) diffraction peak corresponding to hexagonal wurtzite ZnO (JCPDS Card No. 00-005-0664)**

The surface morphology of the seed layer, observed by SEM in Figure 2, further highlights the effect of annealing. The as-deposited seed layer exhibited a relatively smooth surface with poorly defined grains, whereas the film annealed at 400 °C for 2 h showed more distinct and uniformly distributed grains. Thermal treatment is known to reduce lattice defects and enhance surface uniformity, thereby providing favorable nucleation sites for subsequent nanorod growth [7,8]. These improvements in seed layer quality are consistent with reports that annealing significantly enhances the alignment and density of ZnO nanorods produced by hydrothermal methods.



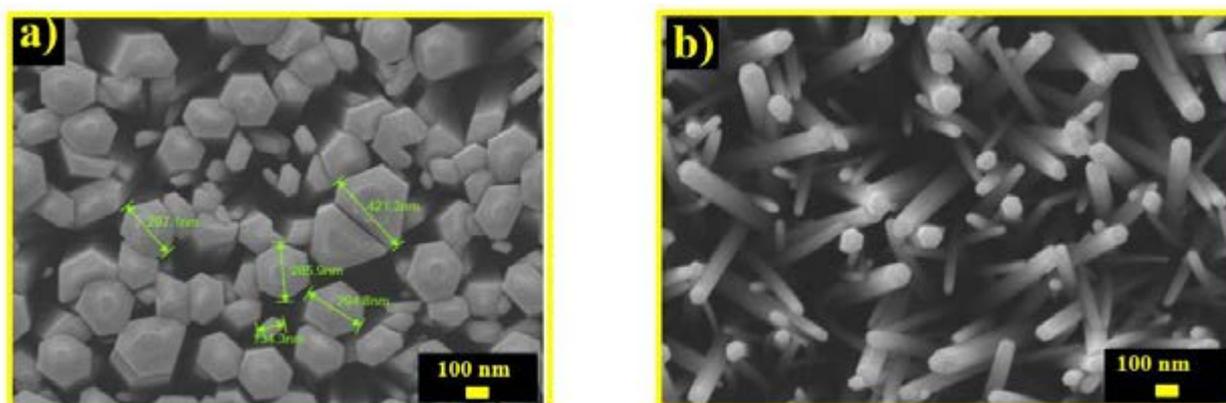
**Figure 3. SEM images of ZnO seed layers deposited by RF magnetron sputtering: (a) as-deposited (without annealing) and (b) annealed at 400 °C for 2 h**

The influence of precursor concentration on ZnO nanorod crystallinity is evident from the XRD results shown in Figure 3. Both low (0.01 M:0.01 M) and high (1 M:1 M) precursor concentrations produced nanorods with a dominant (002) peak, confirming that c-axis growth was maintained in both cases. However, the high-concentration sample displayed a much stronger and sharper (002) peak, indicating superior crystallinity and larger crystallite size. This suggests that higher precursor concentrations increase the availability of Zn<sup>2+</sup> ions, thereby enhancing nucleation rates and promoting anisotropic crystal growth along the c-axis.



**Figure 4. XRD patterns of ZnO nanorods grown under different precursor concentrations: (blue) low concentration (0.01 M:0.01 M) and (red) high concentration (1 M:1 M)**

These structural differences are corroborated by SEM images, as depicted in Figure 4. At low precursor concentration, the nanorods appeared short, sparsely distributed, and irregular in shape. In contrast, nanorods synthesized from the high-concentration solution were vertically aligned, densely packed, and exhibited well-defined hexagonal cross-sections with higher aspect ratios. The observed morphology can be attributed to increased supersaturation of Zn<sup>2+</sup> ions in the growth solution, which accelerates unidirectional growth and yields longer, more uniform nanorods [20]. Such vertically aligned and high-aspect-ratio nanorod arrays are highly desirable for resistive-type gas sensors, as they maximize the active surface area for gas adsorption and provide efficient electron transport pathways [21].



**Figure 5. SEM images of ZnO nanorods synthesized by the hydrothermal method at different precursor concentrations: (a) low concentration (0.01 M:0.01 M), showing shorter and less densely packed nanorods with hexagonal facets, and (b) high concentration (1 M:1 M)**

Taken together, these findings demonstrate that both the annealing of the ZnO seed layer and the adjustment of precursor concentration critically influence the structural and morphological evolution of hydrothermally grown ZnO nanorods. Optimized processing conditions lead to vertically aligned, highly crystalline nanorods with dense packing and enhanced aspect ratios, properties that are directly linked to improved sensing performance in gas sensor applications.

### Conclusion

In conclusion, ZnO nanorods were successfully synthesized by a hydrothermal method using sputtered ZnO seed layers, and the effects of seed layer annealing and precursor concentration were systematically investigated. The XRD results confirmed preferential c-axis orientation in all samples, while SEM analysis revealed significant improvements in nanorod alignment, density, and aspect ratio under optimized conditions. Annealing of the seed layer at 400 °C enhanced grain uniformity and provided well-defined nucleation sites, whereas higher precursor concentrations promoted anisotropic crystal growth, resulting in vertically aligned nanorods with superior crystallinity. These findings demonstrate that precise control over seed layer

properties and growth solution parameters is crucial for tailoring ZnO nanorod morphology. The optimized nanostructures are particularly promising for gas sensor applications, where high crystallinity, vertical alignment, and large surface area-to-volume ratios are essential for achieving high sensitivity, fast response, and stable performance.

### Funding

This research is funded by the Science Committee of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (Grant No. AP23484950), PI: Bakhtiyar Soltabayev.

### Authorship contribution statement

**A.Tanirbergen:** Conceptualization, Methodology, Investigation, Data curation, Formal analysis, Visualization, Writing – original draft. **Y.Shynybekov:** Investigation, Methodology, Data curation, Writing – review & editing. **A.Mentabyeva:** Methodology, Resources, Supervision, Writing – review & editing. **B.Soltabayev:** Conceptualization, Supervision, Project administration, Funding acquisition, Writing – review & editing.

### References

1. G.F. Fine, L.M. Cavanagh, A. Afonja, R. Binions, Metal Oxide Semi-Conductor Gas Sensors in Environmental Monitoring, *Sensors* 10, p. 5469–5502 (2010). <https://doi.org/10.3390/s100605469>
2. G. Korotcenkov, Metal oxides for solid-state gas sensors: What determines our choice?, *Materials Science and Engineering: B*, 139, p. 1–23 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2007.01.044>
3. A. Mirzaei, S.G. Leonardi, G. Neri, Detection of hazardous volatile organic compounds (VOCs) by metal oxide nanostructures-based gas sensors: A review, *Ceramics International*, 42, p. 15119–15141 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.06.145>
4. E. Comini, C. Baratto, G. Faglia, M. Ferroni, A. Vomiero, G. Sberveglieri, Quasi-one dimensional metal oxide semiconductors: Preparation, characterization and application as chemical sensors, *Progress in Materials Science*, 54, p. 1–67 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2008.06.003>
5. R.C. Singh, M.P. Singh, O. Singh, P.S. Chandi, Influence of synthesis and calcination temperatures on particle size and ethanol sensing behaviour of chemically synthesized SnO<sub>2</sub> nanostructures, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 143, p. 226–232 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.snb.2009.09.032>
6. Z.L. Wang, Zinc oxide nanostructures: growth, properties and applications, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 16, R829–R858 (2004). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/25/R01>
7. S. Baruah, J. Dutta, Hydrothermal growth of ZnO nanostructures, *Science and Technology of Advanced Materials*, 10, №013001 (2009). <https://doi.org/10.1088/1468-6996/10/1/013001>
8. L.E. Greene, M. Law, J. Goldberger, F. Kim, J.C. Johnson, Y. Zhang, R.J. Saykally, P. Yang, Low-Temperature Wafer-Scale Production of ZnO Nanowire Arrays, *Angewandte Chemie International Edition*, 42, p. 3031–3034 (2003). <https://doi.org/10.1002/anie.200351461>
9. S.B. Jagadale, V.L. Patil, S.A. Vanalakar, P.S. Patil, H.P. Deshmukh, Preparation, characterization of 1D ZnO nanorods and their gas sensing properties, *Ceramics International*, 44, p. 3333–3340 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.11.116>
10. J. Ding, Z. Zheng, Z. Song, S. Ding, J. Wen, K. Liu, C. Zhang, H. Li, Recent progress in chemiresistive

gas sensors with 1D nanostructured sensing materials: Insights into the structure-morphology-performance relationship, *Materials and Design*, 234, №112360 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.112360>

11. A. Kolmakov, M. Moskovits, CHEMICAL SENSING AND CATALYSIS BY ONE-DIMENSIONAL METAL-OXIDE NANOSTRUCTURES, *Annual Review of Materials Research*, 34, p. 151–180 (2004). <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.34.040203.112141>

12. C. Wang, L. Yin, L. Zhang, D. Xiang, R. Gao, Metal Oxide Gas Sensors: Sensitivity and Influencing Factors, *Sensors*, 10, p. 2088–2106 (2010). <https://doi.org/10.3390/s100302088>

13. FTZ. Toma, M.S. Rahman, K.H. Maria, A review of recent advances in ZnO nanostructured thin films by various deposition techniques, *Discover Materials*, 5, №60 (2025). <https://doi.org/10.1007/s43939-025-00201-1>

14. D.P. Singh, Synthesis and Growth of ZnO Nanowires, *Science of Advanced Materials*, 2, p. 245–272 (2010). <https://doi.org/10.1166/sam.2010.1093>

15. B. Zhang, J. Sun, U. Salahuddin, P.-X. Gao, Hierarchical and scalable integration of nanostructures for energy and environmental applications: a review of processing, devices, and economic analyses, *Nano Futures*, 4, №012002 (2020). <https://doi.org/10.1088/2399-1984/ab75ad>

16. S. Majumder, Nanostructured Thin Films by Hydrothermal Method, in: *Simple Chemical Methods for Thin Film Deposition*, Springer Nature Singapore, Singapore, p. 305–345 (2023). [https://doi.org/10.1007/978-981-99-0961-2\\_7](https://doi.org/10.1007/978-981-99-0961-2_7)

17. Ejsmont, J. Goscianska, Hydrothermal Synthesis of ZnO Superstructures with Controlled Morphology via Temperature and pH Optimization, *Materials*, 16 №1641 (2023). <https://doi.org/10.3390/ma16041641>

18. L. Liu, S. Wang, W. Liu, J. Wang, B. Zhang, J. Yang, H. Liu, Y. Li, Supercritical hydrothermal synthesis of nano-ZnO: Effects of key parameters and reaction mechanism, *Ceramics International*, 49 p. 31313–31324 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.07.079>

19. Z.L. Wang, Zinc oxide nanostructures: growth, properties and applications, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 16, R829–R858 (2004). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/25/R01>

20. S.-J. Young, Y.-H. Liu, M.D.N.I. Shiblee, K. Ahmed, L.-T. Lai, L. Nagahara, T. Thundat, T. Yoshida, S. Arya, H. Furukawa, A. Khosla, Flexible Ultraviolet Photodetectors Based on One-Dimensional Gallium-Doped Zinc Oxide Nanostructures, *ACS Applied Electronic Materials*, 2, p. 3522–3529 (2020). <https://doi.org/10.1021/acsaelm.0c00556>

21. S. Zhao, Y. Shen, X. Yan, P. Zhou, Y. Yin, R. Lu, C. Han, B. Cui, D. Wei, Complex-surfactant-assisted hydrothermal synthesis of one-dimensional ZnO nanorods for high-performance ethanol gas sensor, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 286, p. 501–511 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.snb.2019.01.127>

**Абылай Тәңірберген<sup>1,\*</sup>, Ернар Шыныбеков<sup>1</sup>, Алмагүл Ментбаева<sup>3</sup>, Бақтияр Солтабаев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Озық сенсорлар зертханасы, «Астана» Ұлттық зертханасы,  
Назарбаев Университеті, Астана, Қазақстан

<sup>2</sup>Назарбаев Университеті, Инженерия және цифрлық ғылымдар мектебі, Химиялық және  
материалтану инженериясы кафедрасы, Астана, Қазақстан

(E-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz, yernar.shynybekov@nu.edu.kz, almagul.mentabyeva@nu.edu.kz,  
baktiyar.soltabayev@nu.edu.kz)

### **Жоғары өнімді газ сенсорлары үшін ZnO нанотаяқшаларын бақыланатын гидротермиялық синтездеу**

**Андатпа.** Кристалдық құрылымы мен морфологиясы реттелген ZnO нанотаяқшаларын синтездеу жоғары өнімді газ сенсорларын дамыту үшін аса маңызды. Бұл зерттеуде ZnO тұқымдық қабаты шыны астарға RF-магнетронды бүрку әдісімен өсіріліп, кейін 400 °C-та аннелденіп, кристаллдық сапасы мен беткі біркелкілігі арттырылды. Кейін ZnO нанотаяқшалары гидротермиялық әдіспен әртүрлі прекурсор концентрацияларында (0.01 M:0.01 M және 1 M:1 M мырыш ацетаты/ГМТА) синтезделді. Рентгендік дифракция әдісі (XRD) барлық үлгілерде (002) доминантты шыңды көрсетті, бұл с-ось бойымен бағытталған өсуді дәлелдеді. Сканирлеуші электрондық микроскопия (SEM) прекурсор концентрациясы артқан сайын ұзағырақ, тығыз орналасқан және жақсы анықталған алтыбұрышты қимасы бар нанотаяқшалардың түзілетінін көрсетті. Нәтижелер тұқымдық қабатты аннелдеу мен прекурсор концентрациясының ZnO нанотаяқшаларының құрылымдық және морфологиялық эволюциясына айтарлықтай әсер ететінін көрсетті. Оптималды синтездеу жағдайлары жоғары кристаллды, тік бағытталған және жоғары аспектілік қатынасқа ие нанотаяқшаларды алуға мүмкіндік береді. Мұндай қасиеттер газ адсорбциясын және электрон тасымалдауды күшейтіп, оларды резистивті типті газ сенсорларына қолдануға өте қолайлы етеді.

**Түйін сөздер:** ZnO, нанотаяқшалар, газ сенсоры, металл оксиді жартылай өткізгіштері (MOS), гидротермиялық әдіс

**Абылай Тәңірберген<sup>1,2\*</sup>, Ернар Шыныбеков<sup>1</sup>, Алмагүл Ментбаева<sup>3</sup>, Бақтияр Солтабаев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Лаборатория передовых сенсоров, Национальная лаборатория Астана,  
Назарбаев Университет, Астана, Казахстан

<sup>2</sup>Кафедра химической и материаловедческой инженерии, Школа инженерии и цифровых наук,  
Назарбаев Университет, Астана, Казахстан

(E-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz, yernar.shynybekov@nu.edu.kz,  
almagul.mentabyeva@nu.edu.kz, baktiyar.soltabayev@nu.edu.kz)

### **Контролируемый гидротермальный синтез наностержней ZnO для высокоэффективных газовых сенсоров**

**Аннотация.** Контролируемый синтез наностержней ZnO с регулируемой кристалличностью и морфологией имеет ключевое значение для разработки высокоэффективных газовых сенсоров. В данной работе зародышевые слои ZnO были осаждены на стеклянные подложки методом

РФ-магнетронного распыления и затем отожжены при 400 °С для улучшения кристалличности и однородности поверхности. Далее проводился гидротермальный рост наностержней ZnO при различных концентрациях прекурсоров (0.01 М:0.01 М и 1 М:1 М ацетат цинка/ГМТА) для изучения влияния химии раствора на формирование наноструктур. Рентгеновская дифракция (XRD) выявила доминирующий пик (002) во всех образцах, что подтверждает рост вдоль с-оси. Сканирующая электронная микроскопия (SEM) показала, что более высокие концентрации прекурсоров приводят к формированию длинных, плотно упакованных наностержней с чётко выраженным гексагональным сечением. Полученные результаты демонстрируют, что как отжиг зародышевого слоя, так и концентрация прекурсоров существенно влияют на структурную и морфологическую эволюцию наностержней ZnO. Оптимизированные условия синтеза позволяют получать вертикально ориентированные, высококристаллические наностержни с увеличенным аспектным отношением, что усиливает адсорбцию газа и транспорт электронов, делая их перспективными для применения в резистивных газовых сенсорах.

**Ключевые слова:** ZnO, наностержни, газовый сенсор, МОП (металлооксидные полупроводники), гидротермальный метод

## References

1. G.F. Fine, L.M. Cavanagh, A. Afonja, R. Binions, Metal Oxide Semi-Conductor Gas Sensors in Environmental Monitoring, *Sensors* 10, p. 5469–5502 (2010). <https://doi.org/10.3390/s100605469>
2. G. Korotcenkov, Metal oxides for solid-state gas sensors: What determines our choice?, *Materials Science and Engineering: B*, 139, p. 1–23 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2007.01.044>
3. A. Mirzaei, S.G. Leonardi, G. Neri, Detection of hazardous volatile organic compounds (VOCs) by metal oxide nanostructures-based gas sensors: A review, *Ceramics International*, 42, p. 15119–15141 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.06.145>
4. E. Comini, C. Baratto, G. Faglia, M. Ferroni, A. Vomiero, G. Sberveglieri, Quasi-one dimensional metal oxide semiconductors: Preparation, characterization and application as chemical sensors, *Progress in Materials Science*, 54, p. 1–67 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2008.06.003>
5. R.C. Singh, M.P. Singh, O. Singh, P.S. Chandi, Influence of synthesis and calcination temperatures on particle size and ethanol sensing behaviour of chemically synthesized SnO<sub>2</sub> nanostructures, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 143, p. 226–232 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.snb.2009.09.032>
6. Z.L. Wang, Zinc oxide nanostructures: growth, properties and applications, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 16, R829–R858 (2004). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/25/R01>
7. S. Baruah, J. Dutta, Hydrothermal growth of ZnO nanostructures, *Science and Technology of Advanced Materials*, 10, №013001 (2009). <https://doi.org/10.1088/1468-6996/10/1/013001>
8. L.E. Greene, M. Law, J. Goldberger, F. Kim, J.C. Johnson, Y. Zhang, R.J. Saykally, P. Yang, Low-Temperature Wafer-Scale Production of ZnO Nanowire Arrays, *Angewandte Chemie International Edition*, 42, p. 3031–3034 (2003). <https://doi.org/10.1002/anie.200351461>
9. S.B. Jagadale, V.L. Patil, S.A. Vanalakar, P.S. Patil, H.P. Deshmukh, Preparation, characterization of 1D ZnO nanorods and their gas sensing properties, *Ceramics International*, 44, p. 3333–3340 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.11.116>
10. J. Ding, Z. Zheng, Z. Song, S. Ding, J. Wen, K. Liu, C. Zhang, H. Li, Recent progress in chemiresistive gas sensors with 1D nanostructured sensing materials: Insights into the structure-morphology-

performance relationship, *Materials and Design*, 234, №112360 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.112360>

11. A. Kolmakov, M. Moskovits, CHEMICAL SENSING AND CATALYSIS BY ONE-DIMENSIONAL METAL-OXIDE NANOSTRUCTURES, *Annual Review of Materials Research*, 34, p. 151–180 (2004). <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.34.040203.112141>

12. C. Wang, L. Yin, L. Zhang, D. Xiang, R. Gao, Metal Oxide Gas Sensors: Sensitivity and Influencing Factors, *Sensors*, 10, p. 2088–2106 (2010). <https://doi.org/10.3390/s100302088>

13. F.T.Z. Toma, M.S. Rahman, K.H. Maria, A review of recent advances in ZnO nanostructured thin films by various deposition techniques, *Discover Materials*, 5, №60 (2025). <https://doi.org/10.1007/s43939-025-00201-1>

14. D.P. Singh, Synthesis and Growth of ZnO Nanowires, *Science of Advanced Materials*, 2, p. 245–272 (2010). <https://doi.org/10.1166/sam.2010.1093>

15. B. Zhang, J. Sun, U. Salahuddin, P.-X. Gao, Hierarchical and scalable integration of nanostructures for energy and environmental applications: a review of processing, devices, and economic analyses, *Nano Futures*, 4, №012002 (2020). <https://doi.org/10.1088/2399-1984/ab75ad>

16. S. Majumder, Nanostructured Thin Films by Hydrothermal Method, in: *Simple Chemical Methods for Thin Film Deposition*, Springer Nature Singapore, Singapore, p. 305–345 (2023). [https://doi.org/10.1007/978-981-99-0961-2\\_7](https://doi.org/10.1007/978-981-99-0961-2_7)

17. Ejsmont, J. Goscianska, Hydrothermal Synthesis of ZnO Superstructures with Controlled Morphology via Temperature and pH Optimization, *Materials*, 16 №1641 (2023). <https://doi.org/10.3390/ma16041641>

18. L. Liu, S. Wang, W. Liu, J. Wang, B. Zhang, J. Yang, H. Liu, Y. Li, Supercritical hydrothermal synthesis of nano-ZnO: Effects of key parameters and reaction mechanism, *Ceramics International*, 49 p. 31313–31324 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.07.079>

19. Z.L. Wang, Zinc oxide nanostructures: growth, properties and applications, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 16, R829–R858 (2004). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/25/R01>

20. S.-J. Young, Y.-H. Liu, M.D.N.I. Shiblee, K. Ahmed, L.-T. Lai, L. Nagahara, T. Thundat, T. Yoshida, S. Arya, H. Furukawa, A. Khosla, Flexible Ultraviolet Photodetectors Based on One-Dimensional Gallium-Doped Zinc Oxide Nanostructures, *ACS Applied Electronic Materials*, 2, p. 3522–3529 (2020). <https://doi.org/10.1021/acsaelm.0c00556>

21. S. Zhao, Y. Shen, X. Yan, P. Zhou, Y. Yin, R. Lu, C. Han, B. Cui, D. Wei, Complex-surfactant-assisted hydrothermal synthesis of one-dimensional ZnO nanorods for high-performance ethanol gas sensor, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 286, p. 501–511 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.snb.2019.01.127>

### **Information about the authors**

**Abylay Tangirbergen** – the corresponding author, PhD student in Nuclear Physics, Research Assistant, Advanced Sensors Laboratory, National Laboratory Astana, Nazarbayev University, Astana, Republic of Kazakhstan.

**Yernar Shynybekov** – researcher, Advanced Sensors Laboratory, National Laboratory Astana, Nazarbayev University, Astana, Republic of Kazakhstan.

**Almagul Mentabyeva** – PhD, Associate Professor, Department of Chemical and Materials Engineering, School of Engineering and Digital Sciences, Nazarbayev University, Astana, Republic of Kazakhstan.

**Baktiyar Soltabayev** – PhD, Head of the Advanced Sensors Laboratory, National Laboratory Astana, Nazarbayev University, Astana, Republic of Kazakhstan.

**Абылай Тәңірберген** – хат-хабар авторы, PhD докторанты («Ядролық физика»), ғылыми қызметкер, Advanced Sensors Laboratory, National Laboratory Astana, Назарбаев Университеті, Астана, Қазақстан Республикасы.

**Ернар Шыныбеков** – ғылыми қызметкер, Advanced Sensors Laboratory, National Laboratory Astana, Назарбаев Университеті, Астана, Қазақстан Республикасы.

**Алмагүл Ментбаева** – PhD, қауымдастырылған профессор, Назарбаев Университеті, Инженерия және цифрлық ғылымдар мектебі, Химиялық және материалтану инженериясы кафедрасы, Астана, Қазақстан Республикасы.

**Бақтияр Солтабаев** – PhD, Advanced Sensors Laboratory зертхана жетекшісі, National Laboratory Astana, Назарбаев Университеті, Астана, Қазақстан Республикасы.

**Абылай Тәңірберген** – автор для корреспонденции, докторант PhD по специальности «Ядерная физика», научный сотрудник лаборатории передовых сенсоров, Национальная лаборатория Астана, Назарбаев Университет, Астана, Республика Казахстан.

**Ернар Шыныбеков** – научный сотрудник лаборатории передовых сенсоров, Национальная лаборатория Астана, Назарбаев Университет, Астана, Республика Казахстан.

**Алмагүл Ментбаева** – PhD, ассоциированный профессор кафедры химической и материаловедческой инженерии, Школа инженерии и цифровых наук, Назарбаев Университет, Астана, Республика Казахстан.

**Бақтияр Солтабаев** – PhD, руководитель лаборатории передовых сенсоров, Национальная лаборатория Астана, Назарбаев Университет, Астана, Республика Казахстан.



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



МРНТИ 29.19.03

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-182-198>

Научная статья

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

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

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

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

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

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

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

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

\*автор для корреспонденции

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

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

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

---

## 1. Введение

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

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

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

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

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

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

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

## 2. Методы

### 2.1. Теоретические подходы

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

#### 2.1.1. Электронная структура основного состояния

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

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

#### 2.1.2. Линейное оптическое поглощение

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

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

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

На основе дипольных матричных элементов рассчитывается сила осциллятора перехода:

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

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

### 2.1.3. Тепловое движение атомных ядер

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

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

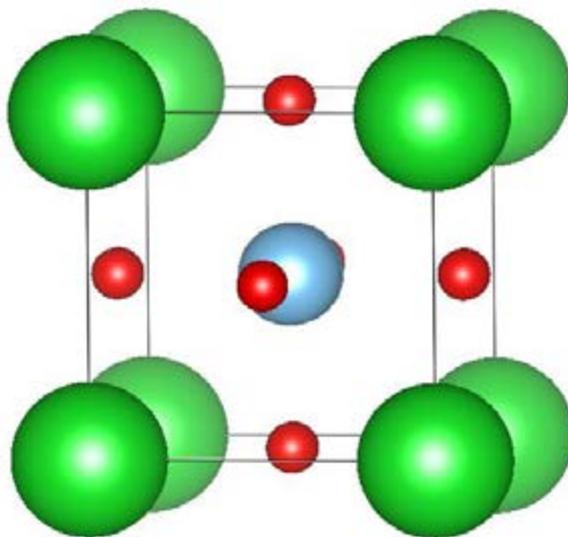
## 2.2. Вычислительные детали

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

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

Моделирование, проведённое в данной работе, было выполнено для тетрагональной фазы  $\text{BaTiO}_3$  (пространственная группа  $P4mm$ , #99), которая не является энергетически выгодной при нулевой температуре и существует при комнатных условиях. Атом бария

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



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

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

### 3. Результаты и обсуждение

#### 3.1. Электронные свойства статической решётки

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

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

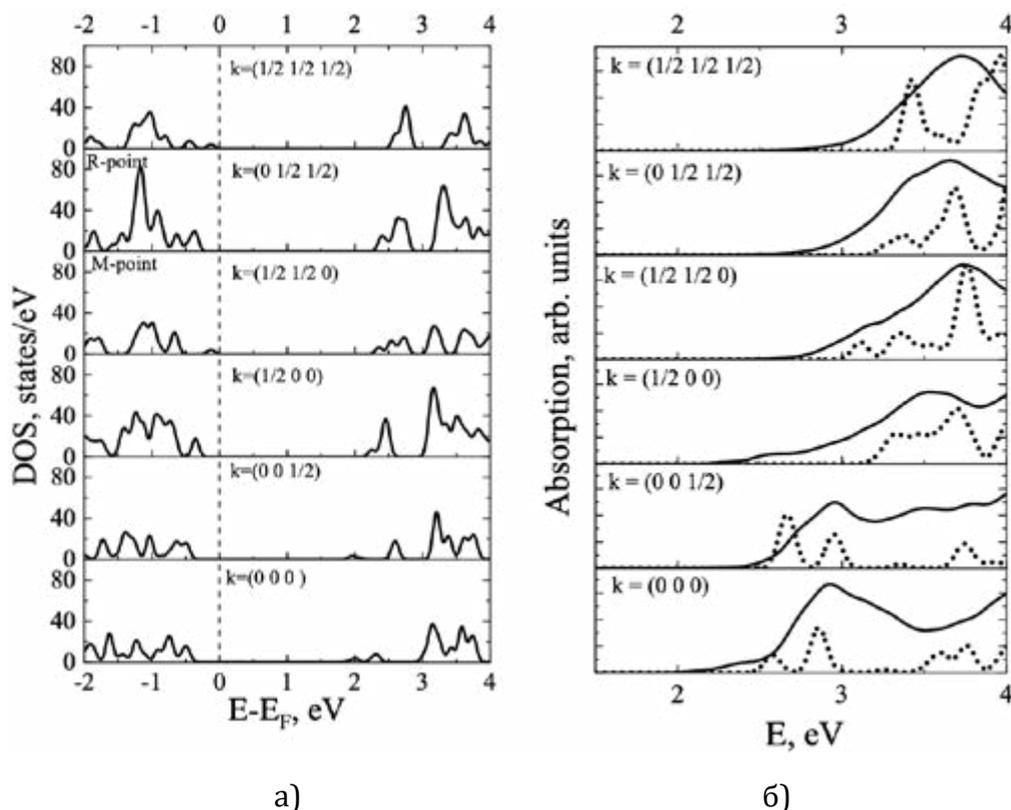
$k$ -точка	$E^{\text{CBM-VBM}}$ , эВ		$E_{\text{optic}}$ , эВ	
	PBE+U	HSE06	PBE+U	HSE06
$\Gamma=(0\ 0\ 0)$	2.40	3.56	2.58	3.70
$Z=(0\ 0\ \frac{1}{2})$	2.46	3.62	2.67	3.79
$X=(\frac{1}{2}\ 00)$	2.69	3.89	3.23	4.33
$M=(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0)$	2.51	3.73	3.11	4.34
$R=(0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$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

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

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

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

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

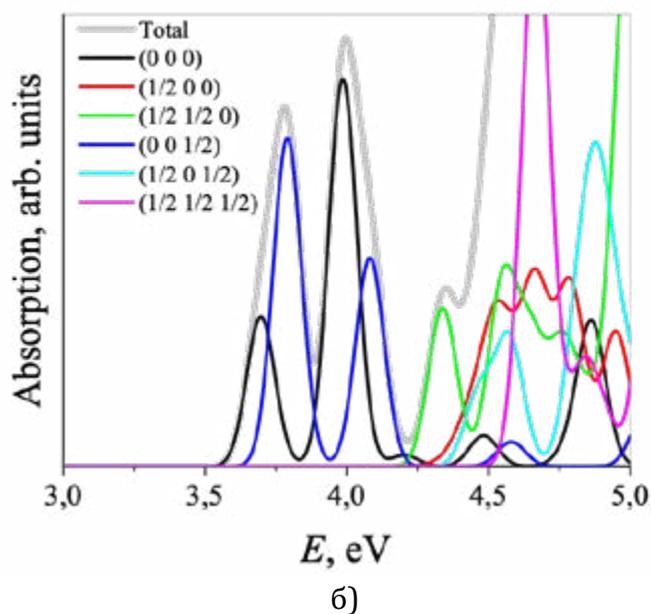
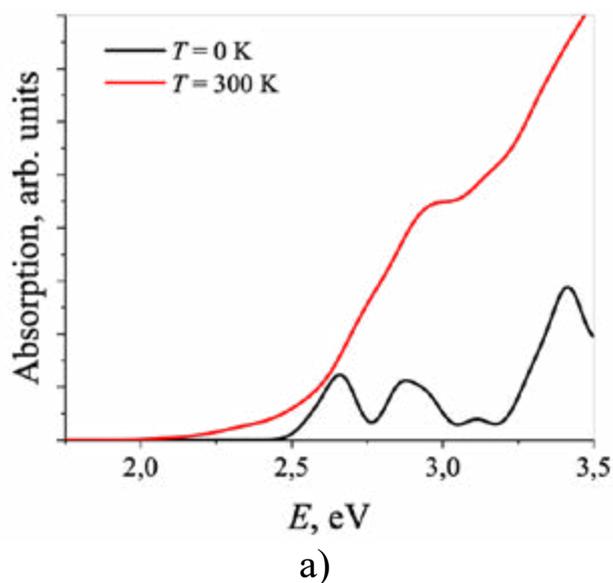


**Рисунок 2. (а) Плотность электронных состояний (DOS). (б) Спектры оптического поглощения, рассчитанные для статической кристаллической решётки (пунктирные линии) и при температуре  $T = 300$  К (сплошные линии) в различных  $k$ -точках зоны Бриллюэна.**

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

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

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



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

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

### 3.2. Оптические свойства при температуре 300 К

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

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

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

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

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

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

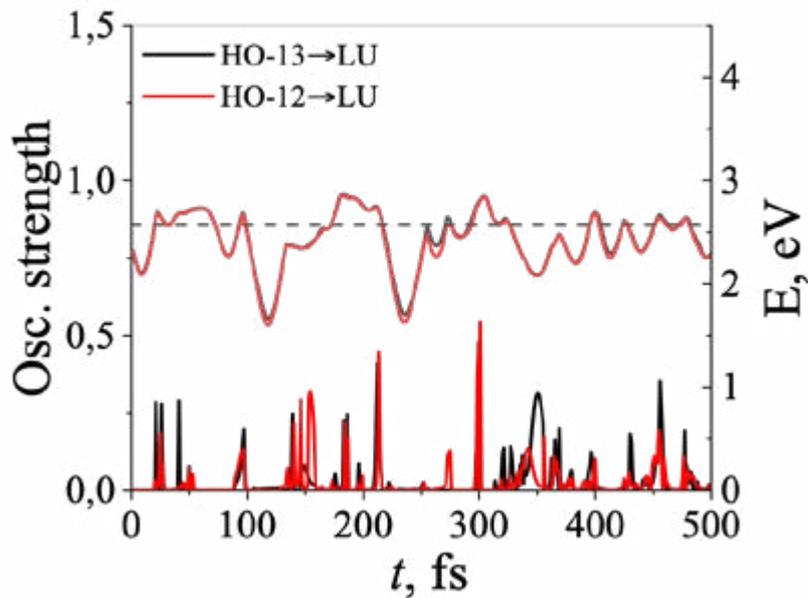


Рисунок 4. Силы осцилляторов (левая ось) и энергии электронных переходов (правая ось) рассчитанные вдоль траектории молекулярной динамики при температуре  $T = 300$  К. Горизонтальные чёрные штриховые линии соответствуют энергиям переходов, рассчитанным для статической решётки.

#### 4. Заключение

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

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

Выявлены два механизма формирования низкоэнергетического поглощения:

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

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

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

### **Вклад авторов:**

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

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

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

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

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

### **Список литературы**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## References

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

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

#### **Сведения об авторах:**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).



ХҒТАР 29.05.15

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2025-154-1-199-211>

Ғылыми мақала

## Қозғалыс және өріс теңдеулерін энергияның сақталу заңынан шығарып алу туралы

Г. Әлімбекова<sup>✉</sup>, С.М. Кенесбаев<sup>✉</sup>, Г.Т. Тугелбаева\*<sup>✉</sup>,  
Э.О. Құткелдиева<sup>✉</sup>, Ә.М. Сандыбаева<sup>✉</sup>, Д.А. Оңдақанов<sup>✉</sup>

Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

(E-mail: [alimbek50@mail.ru](mailto:alimbek50@mail.ru), [kenesbaev-sm@mail.ru](mailto:kenesbaev-sm@mail.ru), [tugelbaevagul5@gmail.com](mailto:tugelbaevagul5@gmail.com), [elzira.kutkeldieva@gmail.com](mailto:elzira.kutkeldieva@gmail.com), [adema.sandybaeva@bk.ru](mailto:adema.sandybaeva@bk.ru), [dastan\\_vko99@mail.ru](mailto:dastan_vko99@mail.ru))

**Аңдатпа.** Аналитикалық механикадағы өзімізге белгілі қозғалыс теңдеулері мен электромагниттік өрістер теориясындағы теңдеулер Лагранж функциясына ең аз принципін қолдану арқылы шығарылып алынған. Ал, ұсынылып отырған мақалада Гамильтон және Лагранж теңдеулерін вариациялық принциптерді қолданбай-ақ алуға болатындығы көрсетілген, яғни жұмыстың мақсаты – қозғалыс және өріс теңдеулерін энергияның сақталу заңынан вариациялық принциптерді қолданбай шығару. Жүйенің энергиясын жалпылама координаталар мен жылдамдықтардың функциясы деп алып жалпылама импульстерді анықтайтын теңдеулер қорытылып шығарылды және де жүйенің кез-келген еркіндік дәрежелерінің өзгерістері кезінде энергияның сақталатындығы дәлелденді. Осы жағдайларды пайдалана отырып толыққанды анықталмаған гамильтонианы бар Гамильтон теңдеулері де шығарылып алынғандығын айта кету керек. Импульстердің координаталар мен жылдамдықтарға тәуелділіктерін сипаттайтын қатынастарды табу үшін алдымен жүйенің энергиясына белгілі шама ретінде қарап, осы арқылы Лагранж функциясы табуға болатындығы да көрсетілді. Осы алынған нәтижелердің барлығы да еркіндік дәрежелері бір-біріне мейлінше тәуелсіз болатын фазалық кеңістік үшін орындалатындығын айтып өту қажет. Аналитикалық механика үшін қолданылған осы тәсілдер электродинамикадағы өрістер теориясының теңдеулерін алу үшін де сәтті қолданылды. Дәлірек айтқанда, электромагниттік өрістегі зарядталған бөлшектің энергиясы векторлық өріс потенциалының қолайлы мәндері үшін анықталды. Қолайлы мәндер ретінде бойлық электр өрісі мен бөлшек тұрған жерлерге сәйкес келетін векторлық потенциалдар қарастырылды.

**Түйін сөздер:** қозғалыс теңдеулері, электромагниттік өріс теңдеулері, Гамильтон және Лагранж функциялары, жалпылама координаталар, импульстер және жылдамдықтар, энергияның сақталуы, дербес туындылы теңдеу

## Кіріспе

Жарық жылдамдығымен салыстырғанда өте аз жылдамдықтармен қозғалатын денелер механикасының физикалық негіздерін түсіну үшін Ньютон, Лагранж және Гамильтон ұсынған теориялық зерттеу тәсілдерін білу жеткілікті. Бұл көзқарастар математикалық аппарат тұрғысынан алғанда аса күрделі есептеулерден тұрғанымен, олардың нәтижелері мәселені түбегейлі, әрі талассыз шешіп бере алады. Сондықтан да, олар теориялық (аналитикалық) механиканың негізгі діңгегі болып табылады. Лагранждық механика  $N$  материалдық нүктеден құрылған механикалық жүйенің қозғалысын үш өлшемді евклидтік кеңістікте қарастыруға арналған. Жүйедегі барлық оқиғалар Лагранж функциясы арқылы сипатталып, уақыт пен кеңістіктің қасиеттерінен жалпылама сақталу заңдары (қозғалыс интегралдары) шығады. Бұл тәсіл әсіресе дененің мардымсыз тербелістері мен қатты дененің динамикасын зерттеуге өте ыңғайлы.

Ал, Гамильтондық механика болса  $6N$  өлшемді фазалық кеңістікке геометрияны, Пуанкаренің интегралдық инварианттары мен Гамильтон функциясын қолдана отырып бөлшектердің координаталары мен импульстерінің өзара байланыстарын сипаттай алады. Лагранждық механикасына Гамильтондық механиканың дербес жағдайы ретінде қарау қажет, яғни Лагранж функциясына Лежандр түрлендірулерін қолдану арқылы Гамильтон функциясын алуға болады. Гамильтондық механика эргодикалық теория, статистикалық механика, оптика және кванттық механика секілді математикалық физиканың салаларымен тығыз байланысты. Қарастырылып отырған осы екі тәсілдің зерттеу нысандары соншалықты ауқымы болуына қарамастан оларды жарық жылдамдығына жуық жылдамдықтармен қозғалатын денелерге қолдануға болмайды. Себебі, салыстырмалылық теориясында бөлшектер жүйесінің потенциалдық энергиясы деген ұғым жоқ. Потенциалдық энергия әсерлесуші денелердің орналасу жағдайларына ғана тәуелді болғандықтан, ол өте аз жылдамдықтарға арналған алыстан әсерлесу теориясында ғана жүзеге асатын ұғым.

Электродинамикадағы Максвелл теңдеулері классикалық механикадағы Ньютон заңдары немесе салыстырмалылық теориясындағы Эйнштейн постулаттары іспетті, яғни олар кез-келген электромагниттік өрістерді, белгілі бір ортадағы токтар мен электрлік зарядтарды байланыстыра сипаттайтын интегралдық және дифференциалдық түрдегі теңдеулер жүйесі болып табылады. Максвеллден бұрын өмір сүрген Эрстед, Ампер және Фарадей секілді ғұлама ғалымдарды электродинамиканың негізін қалаушылар ретінде білеміз, олар тәжірибелер арқылы индукциялық тоқты, магниттік күш сызықтарын, өздік индукция құбылысын және т.с.с. ашып электродинамиканың негізгі заңдылықтарын тағайындап берді. Алайда, физиканың осы бөліміндегі ең көрнекті жетістік-өріс ұғымының енуі екендігі даусыз. Мәселе электр мен магниттің бүкіл кеңістікке жайыла енуі жөнінде болып отыр, яғни Максвеллдің тұжырымы бойынша электр және магнит өрістері токтар пен зарядтар жоқ жерлерде (кеңістікте) де байқала береді, олар кеңістіктің нүктесі мен уақытқа тәуелді. Максвелл жүргізілген барлық тәжірибелердің нәтижелерін ескере отырып екі өріс бағынатын теңдеулер жүйесін жаса-

ды. Бұл жүйе кеңістіктің әрбір нүктесінде бір-біріне перпендикуляр бағыттала отырып бірдей жиіліктегі гармоникалық тербелістер жасайтын электр және магнит өрістерін математикалық тұрғыдан сипаттауға арналған, олардың қарапайым дербес шешімдері-түзу сызық бойымен жарық жылдамдығы бойынша тарайтын электромагниттік толқын. Осылайша жарықтың толқындық табиғаты белгілі болды. Максвелл теңдеулерінің астарын зерттеген Лоренц, Эйнштейн, Пуанкаре және Минковский секілді физиктер мен математиктердің қажырлы еңбектерінің арқасында дүниеге релятивистік механика келді.

Механикалық жүйелер мен өрістерге арналған теңдеулер вариациялық принциптер арқылы шығарып алынғандығы белгілі [1–3]. Вариациялық принциптер мен оларға сәйкес келетін дифференциалдық теңдеулер кванттық теорияның негізін құрайтынын да білеміз. Мәселеге осындай көзқараста қарайтын болсақ, онда энергияның сақталу заңы Лагранж функциясының уақытқа айқын түрде тәуелді болмауымен түсіндірілетін болады. Бұл мақалада біз басқаша жолмен жүретін боламыз, яғни энергияның сақталу заңынан жалпылама импульстерді қорытып шығарамыз, содан кейін Лагранж функциясының және координаталар мен жылдамдықтар арқылы жазылатын импульстердің өрнектерін анықтайтын боламыз. Осылар арқылы каноникалық түрлендірулер мен энергияның сақталу заңының өзара үйлесімділігін орнату арқылы дифференциалдық теңдеулер және олардағы функционалдық тәуелділіктерді қарастыратын боламыз. Міне, жоғарыда келтірілген мәліметтерді келтіре келе мақала тақырыбының проблемалық жағдай мен зерттеудің өзектілігі, объекті мен пәні, мақсат пен міндеттері туралы қысқа әрі нақты тұжырымдармен айқындау үшін мыналарды айтуды жөн санап отырмыз: аналитикалық механикадағы Лагранж және Гамильтон теңдеулерін сақталу заңдары негізінде де алуға болатындығын көрсету, ол осы теңдеулердің маңызы мен құндылығын арттыра отырып оның математикалық аппаратын кеңейтеді. Зерттеу объекті ретінде көп өлшемді жүйенің айнымалыларын түрлендіруге қатысты аналитикалық пәнге деген зерттеу ынтасын арттырады. Бұл бағытта жасалынып жатқан зерттеулер дербес импатта болғандықтан, оларға нақтылы бір сипаттамалар жасалмады. Әрине, мақаланың мақсаты белгілі бір ғылыми олқылықтың орнын толтыру емес, қайта аналитикалық механиканың негізгі деген теңдеулерінің алыну жолдарының бірін насихаттау болып табылады.

### **Әдіснама**

Аналитикалық механиканың материалдары (негізгі концепциялары) қатарына дененің қозғалыстары мен оның себептерін, денелердің қасиеттерін, денелер жүйесінің тепе-теңділік заңдылықтарын, сақталу заңдары мен қозғалыс теңдеулерін жатқызуға болады. Қозғалыс себептері ретінде барлық ішкі және сыртқы күштер, әсерлесу күштері алынады. Зерттеу әдістеріне жалпылама координаталар мен жүйенің лагранжианына негізделген Лагранж формализмі, жалпылама координаталарға, жылдамдықтарға және жүйенің гамильтонианына негізделген Гамильтон формализмін, функциялардың

экстремумдері мен функционалдарды анықтауға арналған вариациялық есептеулерді жатқызамыз. Мақаладағы қолданылатын әдіс тікелей энергияның сақталу заңын Лагранждық түрлендірулермен ұштастыру болып табылады. Сол арқылы каноникалық теңдеулер мен олардың айнымалыларымен жүргізілетін аналитикалық есептеулерді жүйелі жүргізуге мүмкіндік береді.

Классикалық электродинамикадағы электромагниттік өрістер теориясының материалдарына (өрістің қасиеттеріне) біртұтас сипатта қарастырылатын электр және магнит өрістерін, өрістің материялығын және электромагниттік толқынды жатқызуға болады. Теорияның зерттеу, сипаттау және есептеу әдістеріне Максвелл теориясы мен ондағы теңдеулер және жарықтың электромагниттік қасиеті жатады.

### Нәтижелер мен талқылау

Жалпылама  $q^i (i=1, \dots, N)$  координаталар мен жалпылама  $\vartheta^i = \frac{dq^i}{dt}$  жылдамдықтарға тәуелді болатын жүйенің энергиясы  $E(q, \vartheta)$  болсын. Жүйенің күйі  $2N$  өлшемді кеңістіктегі координаталары  $(q, \vartheta)$  болатын нүкте арқылы кескінделеді. Траектория бойындағы энергияның сақталуын сипаттайтын математикалық өрнек мына түрде жазылады:

$$dE(q, \vartheta) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial E}{\partial q^i} dq^i + \frac{\partial E}{\partial \vartheta^i} d\vartheta^i \right) = 0 \quad (1)$$

Бұл теңдіктің оң жақ бөлігіндегі қосынды нөлге тең болғанымен, қосылғыштардың әрқайсысы нөлден өзге болатын мәндерді қабылдайды. Тәуелсіз еркіндік дәрежелерінің өзгерістері кезінде энергияның сақталуын қамтамасыз ету үшін жылдамдықтардың орнына  $E(q, \vartheta) = H(q, p)$  түрлендіруі орындалатындай  $p^i$  айнымалыларын енгіземіз. Себебі, жүйе  $(p, q)$  фазалық кеңістікте қарастырылып отырғандықтан, Гамильтон теңдеулерінде жылдамдықтар импульстермен алмастырылады. Ал импульстер тәуелсіз айнымалылар ретінде тек координаталардың туындысы ғана емес, олар қозғалыс энергиясын білдіреді Дж/(м/с) кеңістіктің  $2N$  өлшемділігіне байланысты  $p^i$  болуы заңды. Осыған сәйкес:

$$0 = \frac{\partial H}{\partial q^1} dq^1 + \frac{\partial H}{\partial p_1} dp_1 = \frac{\partial H}{\partial q^2} dq^2 + \frac{\partial H}{\partial p_2} dp_2 = \dots = \frac{\partial H}{\partial q^N} dq^N + \frac{\partial H}{\partial p_N} dp_N \quad (2)$$

Егер жүйе өзара тәуелсіз (әсерлеспейтін) бөліктерден құралған болса, онда осы бөліктердің әрқайсысындағы энергия өзгеріссіз қалады (сақталады). Бұл барлық түрдегі еркіндік дәрежелері бір-біріне мейлінше тәуелсіз болатын өлшемі  $2N$ -ге тең  $(q, \vartheta)$  түрдегі фазалық кеңістікте жұмыс жасап жатқандығымыздың айғағы болып табылады. (2)-теңдеуді  $N$  пропорция түрінде де жазуға болады:

$$\frac{dq^1}{\frac{\partial H}{\partial p_1}} = - \frac{dp_1}{\frac{\partial H}{\partial q^1}} = dt_1, \dots, \frac{dq^N}{\frac{\partial H}{\partial p_N}} = - \frac{dp_N}{\frac{\partial H}{\partial q^N}} = dt_N \quad (3)$$

(2) және (3)-теңдеулер жалпы саны  $N$  өзара тәуелсіз  $dq^i$  орын ауыстыруларды сипаттап бере алады. Шынында да,  $dq^i = \vartheta^i dt$  қозғалыстары кезінде (3)-гі барлық мүшелерді

тең дәрежеде ұстау үшін  $\vartheta^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$  деп алуға болады, басқаша айтқанда  $dt_i = \dots = dt_N = dt$  деп санау керек. Осыдан төмендегі Гамильтон теңдеулеріне оңай өтеміз:

$$\frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q^i} \quad (4)$$

Байқап отырсаңыздар, (2)-теңдеуді жазған кезде әзірге толықтай анықталмаған және  $\vartheta^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$  шартын қанағаттандыратын  $p^i$  айнымалылары мен  $H$  функциясы енгізілген. Ондағы мақсатымыз – (1)-түрдегі энергияның сақталу заңын қанағаттандыратын (4) дифференциалдық теңдеулерді (қозғалыс теңдеулерін) табу.  $\vartheta^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$  болғандықтан, Донкин теоремасына сәйкес [4], Гамильтон функциясымен қосарлана жүретін

$$L(q, \vartheta) = p_i \vartheta^i - H(p, q) \quad (5)$$

түрдегі жылдамдықтардың функциясы мен  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \vartheta^i}$  қатынасын пайдаланып Лагранж функциясына арналған төмендегі дербес туындылы теңдеуді аламыз:

$$\vartheta^i \frac{\partial L}{\partial \vartheta^i} = L + E(q, \vartheta) \quad (6)$$

Бұл теңдеу жылдамдық айнымалысына тәуелді болатын екі түрлі функцияны байланыстырады және оның шешімі – Лагранж функциясы ( $L$ ):

$$L = L_1(q, \vartheta) + a_i(q) \vartheta^i \quad (7)$$

Мұндағы  $L_1$ -функциясы (6)-ның дербес шешімі, ал  $a_i(q) \vartheta^i$  – біртекті теңдеудің толық шешімі болып табылатын энергияға үлесі жоқ гироскоптық күштер [5, 6],  $a_i$ -саны  $N$ -ге тең тұрақтылар.  $L_1$ -ді Тейлор қатарына жіктеу арқылы анықтауға болады, яғни

$$E(q, \vartheta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_{ik\dots l}^{(n)} \vartheta^i \vartheta^k \dots \vartheta^l \quad (8)$$

Олай болса

$$L_1(\vartheta) = -A^{(0)} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n-1} A_{ik\dots l}^{(n)} \vartheta^i \vartheta^k \dots \vartheta^l = -E(q, 0) + \int_1^{\infty} [E(q, \frac{\vartheta}{x}) - E(q, 0)] dx \quad (9)$$

Бұл теңдеудің шешімі тек  $A_i^1=0$  шарты үшін ғана орындалады. Егер, (8)-қатар  $n=2$  кейін бұзылатын болса, онда энергия потенциалдық ( $U$ ) және кинетикалық ( $T$ ) энергия

лардың қосындысынан тұратын болады:  $E = A^{(0)} + A_{ik}^{(2)}\vartheta^i\vartheta^k = U(q) + T(q, \vartheta)$  және (9)-дан:

$L_1 = T - U$  шығады. (7) мен (9)-ды пайдалансақ, онда

$$p_i = a_i + \int_1^\infty \frac{\partial}{\partial \vartheta^i} E\left(\frac{\vartheta}{x}\right) dx \quad (10)$$

түрдегі жалпылама импульстер мен  $H = E[q, \vartheta(p)]$ -Гамильтон функциясын анықтаймыз. (4)-гі Гамильтон функцияларының екіншісін Лагранж теңдеуіне түрлендірсе болады. (7)-ден:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L_1}{\partial \vartheta^i} = \frac{\partial L_1}{\partial q^i} + \vartheta^j \left( \frac{\partial a_j}{\partial q^i} - \frac{\partial a_i}{\partial q^j} \right) \quad (11)$$

(6)-теңдеудегі  $E(q, \vartheta)$  энергияның орнына оның кез-келген  $F[E(q, \vartheta)]$  түрдегі функциясын қолдануға болады, олай болса (7) мен (9)-дан Лагранж функциясының басқа да түрлерін табуға болады [7-9]:  $E = A^{(0)} + A_{ik}^{(2)}\vartheta^i\vartheta^k = U(q) + T(q, \vartheta)$  және  $F(E) = E^2$ . Бұл жағдайда (9)-теңдіктен:  $L_1 = \frac{T^2}{3} + 2UT - U^2$ . Егер, тек қана энергияның сақталу заңын ғана қолданар болсақ, онда Лагранж функциясын (6)-дан тауып алып, Лагранж теңдеуінің жалпыланған нұсқасына қол жеткізуге болады:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \vartheta^i} - \frac{\partial L}{\partial q^i} = G_{ij}(q, \vartheta, \dot{\vartheta}) \vartheta^j \quad (12)$$

Мұндағы  $G_{ij} = -G_{ji}$ -антисимметриялық тензор.

Осы тәсілдің өрістерге қолданылуын қарастырамыз. Электромагниттік өрістегі зарядталған бөлшектің энергиясы

$$E = \frac{1}{8\pi} \iiint \left[ \left( \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right)^2 + (\text{rot} \vec{A})^2 \right] d^3 \vec{r} + \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha} c^2}{\sqrt{1 - \frac{\vartheta_{\alpha}^2}{c^2}}} + \sum_{\alpha, \beta} \frac{Q_{\alpha} Q_{\beta}}{|\vec{r}_{\alpha} - \vec{r}_{\beta}|} \quad (13)$$

Мұндағы  $\vec{A}$ -векторлық потенциал,  $m_{\alpha}$ ,  $Q_{\alpha}$ ,  $\vec{r}_{\alpha}$ ,  $\vec{\vartheta}_{\alpha}$ -рет саны  $\alpha$  зарядтың массасы, заряды, координатасы және жылдамдығы,  $c$ -жарық жылдамдығы. (7), (9) және (13)-өрнектерден:

$$L = \frac{1}{8\pi} \iiint \left[ \left( \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right)^2 - (\text{rot} \vec{A})^2 \right] d^3 \vec{r} - \sum_{\alpha} m_{\alpha} c^2 \sqrt{1 - \frac{\vartheta_{\alpha}^2}{c^2}} - \sum_{\alpha, \beta} \frac{Q_{\alpha} Q_{\beta}}{|\vec{r}_{\alpha} - \vec{r}_{\beta}|} + \sum_{\alpha} \vec{a}_{\alpha} \vec{\vartheta}_{\alpha} + \iiint \vec{a} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} d^3 \vec{r} \quad (14)$$

Сонда:

$$\left(\vec{r}, t\right) = \frac{\delta L}{\delta\left(\frac{\partial A_i}{\partial t}\right)} = \frac{1}{4\pi c^2} \frac{\partial A_i}{\partial t} + a_i\left(\left\{\vec{A}\right\},\left\{\vec{r}_\alpha\right\},\vec{r}\right) \quad (15)$$

Мұндағы  $i = 1,2,3$

$$\vec{p}_\alpha(t) = \frac{\partial L}{\partial \vec{v}_\alpha} = \frac{m_\alpha \vec{v}_\alpha}{\sqrt{1-\frac{v_\alpha^2}{c^2}}} + \vec{a}_\alpha\left(\left\{\vec{A}\right\},\left\{\vec{r}_\alpha\right\}\right) \quad (16)$$

(15)-гі фигуралы жақшалар  $\vec{a}$  векторлық өрісі мен  $\vec{a}_\alpha$  векторлары үш өлшемді кеңістіктің барлық нүктелеріндегі векторлық потенциал мен барлық бөлшектердің координаталарына тәуелді екендігін көрсетеді, яғни олар  $\vec{A}$  бойынша функционал және координаталарға тәуелді функция болып табылады екен. (14)-түрдегі Лагранж функциясы  $\vec{a} = \vec{a}_\alpha = 0$  шартында өрістің көлденен бөлігіндегі бөлшектер мен өрістің өзара әсерлеспеуіне сәйкес келетін теңдеулерге алып келеді. Сондықтан да, өріс пен бөлшектерді байланыстыру үшін бізгі  $\vec{a}$ -ның қолайлы мәндері керек. Дәл айтсақ,  $\vec{a}$  векторлық өрісі бөлшектердің  $\vec{r}_\alpha$  координаталарына, ал  $\vec{a}_\alpha$  векторлары  $\vec{A}$  потенциалға тәуелді болуы керек.  $\vec{a}$  үшін ең қарапайым таңдау  $k$  коэффициентті бойлық электр өрісі болмақ:

$$\vec{a} = k \text{grad} \varphi, \varphi = \sum_\alpha \varphi_\alpha = \sum_\alpha \frac{Q_\alpha}{|\vec{r} - \vec{r}_\alpha|} \quad (17)$$

Ал,  $\vec{a}_\alpha$  үшін қарапайым таңдау  $\vec{a}_\alpha = k_\alpha \vec{A}(\vec{r}_\alpha, t)$  болады. Осы жағдайларды ескеріп, (14)-тен Лагранж теңдеулерін алуға болады [10]:

$$\frac{4}{4\pi c} \frac{\partial^2 \vec{A}_i}{\partial t^2} - k \sum_\alpha v_{\alpha j} \partial_j (\partial_i \varphi_\alpha) = \frac{1}{4\pi} \Delta A_i + \sum_\alpha k_\alpha v_{\alpha i} \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) \quad (18)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{m_\alpha (\vec{v})^2}{\sqrt{1-\frac{v_\alpha^2}{c^2}}} + k_\alpha \left( \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{v}_\alpha \times \text{rot} \vec{A} \right) = Q_\alpha \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{Q_\beta (\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)}{|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|^3} \quad (19)$$

Кулондық калибрлеуіш шарт орындалу үшін (18)-ғы көлденең токтың нөлдік дивергенциясы қажет:

$$\partial_i \sum_\alpha (k_\alpha v_{\alpha i} \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) + k v_{\alpha j} \partial_j \varphi_\alpha) \quad (20)$$

Осыдан  $\frac{\kappa_\alpha}{k} 4\pi Q_\alpha \cdot \frac{1}{k} = 4\pi c$  болған жағдай үшін (18) және (19)-теңдеулер төмендегіше жазылады:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} - \Delta \vec{A} = \frac{4\pi}{c} \sum_\alpha Q_\alpha \vec{\vartheta}_\alpha \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) - \frac{1}{c} \text{grad} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (21)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{m_\alpha (\vec{\vartheta})^2}{\sqrt{1 - \frac{(\vartheta_\alpha)^2}{c^2}}} = Q_\alpha \left[ \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{Q_\beta (\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta)}{|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_\beta|^3} - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right] + \left[ \frac{Q_\alpha}{c} \vec{\vartheta}_\alpha \times \text{rot} \vec{A} \right] \quad (22)$$

Сонымен,  $k$  тұрақтысын осы тәсілдегідей қатынаста таңдап алу негізсіз болып табылады. Себебі, электромагниттік өрістің көлденең және бойлық бөліктерінің сипатталу ерекшеліктері бірдей емес, яғни көлденең құраушысы еркіндік дәрежелері бойынша сипатталса, бойлық құраушысы олай сипатталмайды. Екі құраушы арасындағы байланыс тек теңдеулердің релятивистік инварианттылығы арқылы ғана іске асады.

### Қорытынды

Гамильтон теңдеулері  $S=W-E_0 t$  және  $W$  әсерлеріне арналған

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = 0 \quad (23)$$

$$H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) = E_0 \quad (24)$$

дербес туындылы Гамильтон–Якоби теңдеулеріне және вариациялық принциптерге эквивалент. Импульстерді (2) – түрдегі энергияның сақталу заңының егжей–тегжейлі принципіне сәйкес таңдап алу фазалық көлем мен фазалық тығыздықтың (Лиувилл теоремасы) сақталуын қамтамасыз етеді. Соңғысы статистикалық механикада қолданылады. Жалпылама импульстерді (2)–бойынша анықтау тәсілі термодинамиканың негізгі теңдеуі арқылы энтропияны анықтау секілді.

Сонымен, бұл мақалада энергияның егжей–тегжейлі сақталу принципі туралы баяндалды, ол еркіндік дәрежелердің мейлінше өзара тәуелсіздігін қамтамасыз ететін және арнайы айнымалылар ретінде жүретін жалпылама импульстерді анықтап береді. Энергияның жалпылама координаталар мен жылдамдықтарға тәуелділігі арқылы (7) және (9)–дан Лагранж функциясы табылды. Оны жылдамдықтар бойынша дифференциалдап жалпылама импульстерді анықтадық. Соңғыларды энергияның өрнегіне қойып Гамильтон функциясын тауып алдық. Мақалада қолданылған тәсіл ең алдымен жалпылама импульстердің мағынасын ашуға мүмкіндік береді. мақалада алынған нәтижелер мен келтірілген теориялық тұжырымдамалар күрделі техникалық жүйелерді модельдеу барысында, тербелістерді есептеу кезінде, роботтар техникасында және аспан денелері механикасының өзекті зерттеулерінде қолданыс таба алады. Сонымен бірге, олар траек-

торияларды, күштердің моменттері мен орнықтылық параметрлерін анықтауға жағдай жасайды. Энергияның сақталу заңы консервативті жүйелердің қозғалысын қозғалыс теңдеулерін интегралдамай-ақ жылдамдық пен координатаны анықтауды оңтайландырады. Мақала нәтижелері мен ондағы әдістер бойынша жүргізілген есептеулерді аналитикалық механиканың дамуына қосылған үлес деп қабылдауға болады. Каноникалық теңдеулерге қол жеткізудің қарапайым да ықшамды тәсілі ұсынылып, энергияның сақталу заңының маңызы мен қолданылу аясын кеңейтуге ұмтылыс жасалды.

Гамильтон және Лагранж теңдеулерін вариациялық принциптер арқылы алу әдісіне қарағанда сақталу заңын пайдаланудың артықшылығы мұнда белгілі шарттар, ұғымдар мен заңдылықтарды қажет етуінде, яғни математикалық аппараттың мол жиынының қолданылу аясының кеңдігінде және өрнектердің ықшамдылығында. Мысалы, калибрлеуші шарт, Донкин теоремасы, антисимметриялық тензор және Лиувилл теоремасы арқылы есептеулер өте оңтайлы түрде жүргізіледі.

Мақала мәтінінде келтірілген бірнеше ұғымдарға түсініктеме беріп өтуді жөн санап отырмыз.

1. *Калибрлеуші шарт* – қозғалыс теңдеулеріндегі артық еркіндік дәрежелерін жою мақсатында калибрлік өрістерге (мысалы, электромагниттік потенциалға) қойылатын қосымша шектеулер. Олар Максвелл теңдеулері секілді теңдеулердің шешімдерін теорияның инварианттылығын сақтай отырып жалғыз деп тануға жағдай жасайды.

2. *Донкин теоремасы* – егер координаталар мен импульстердің түрлендіруі потенциалды болса (өндіргіш функциялар арқылы жүргізілсе), онда кері түрлендірулер де потенциалды болады. Бұл Лагранж түрлендірулері мен каноникалық түрлендірулер теориясында потенциалдылық симметриясын көрсетеді.

3. *Антисимметриялық тензор* – өзінің ковариантты немесе контрвариантты жұп индекстерінің орындары ауысқан кезде таңбасын өзгертетін тензор. Оның барлық диагоналды құраушылары нөлге тең болғандықтан айналулар мен электромагниттік өрістерді сипаттауға өте қолайлы болып табылады.

4. *Лиувилл теоремасы* – жүйенің нүктелер ансамблінің фазалық көлемі (ықтималдылық тығыздығы) уақытқа сәйкес қозғалысы кезінде өзгеріссіз қалады деген гамильтондық механика мен статистикалық физиканың заңы. Фазалық кеңістікте, фазалық нүктелер жоғалмайды және қайта пайда бола алмайды.

### **Авторлардың қосқан үлесі**

**Әлімбекова Г.** – мақаланың аналитикалық механикаға қатысты есептеулердің ішіндегі қозғалыс теңдеулерін және алғашқы үш өрнекке келтірілетін амалдар бойынша нәтижелер алды. Тақырыпқа сай зерттеулерді сұрыптап, әдебиеттер тізімін жасауға үлес қосқан.

**Кенесбаев С.М.** – барлық есептеу, талдау және қорытындылау жұмыстарына басшылық жасап, есептеулердің математикалық бірізділігін қадағалады. Он үшінші және он жетінші теңдіктерді есептеп шығарды. Әдебиеттерге саралау жасап, тақырыпқа сәйкес келетіндерін іріктеп, оларға сілтемелер жасады.

**Тугелбаева Г.Т.** – толыққанды анықталмаған гамильтонианы бар Гамильтон теңдеу-

лерін шығарып алуға атсалысты. Импульстердің координаталар мен жылдамдықтарға тәуелділіктерін сипаттайтын қатынастарды тауып, жүйенің энергиясына белгілі шама ретінде қарау, осы арқылы Лагранж функциясы табуға болатындығын есептеулер арқылы көрсетті. Ілеспе-хатты дайындап, мақаланы редакцияға жолдауды да іске асырды.

**Құткелдиева Э.О.** – математикалық есептеулердің ішінде төртінші және жетінші формулалар аралығындағы операцияларды орындап шықты. Жалпылама импульстерді анықтайтын теңдеулерді қорытылып шығарды және жүйенің кез-келген еркіндік дәрежелерінің өзгерістері кезінде энергияның сақталатындығын дәлелдеуге атсалысты.

**Сандыбаева Ә.М.** – мақалада жүргізілген математикалық есептеулерді тексеріп шықты және мақаланың мәтінін компьютерде теріп шықты. Әдебиеттерді жинақтауға қатысты.

**Оңдақанов Д.А.** – аналитикалық механика үшін қолданылған мақала мәтініндегі тәсілдерді электродинамикадағы өрістер теориясының теңдеулерін алу үшін қолдануға қатысты он бесінші және жиырмамыншы формулаларды алуды орындады. Электромагниттік өрістегі зарядталған бөлшектің энергиясы үшін векторлық өріс потенциалының қолайлы мәндерін табуға атсалысты.

#### Әдебиеттер тізімі

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика. Механика (Наука, Мәскеу, 1988), 216 б.
2. Г. Гольдштейн, Классическая механика (УРСС, Мәскеу, 2012), 828 б.
3. М.А. Айзерман, Классическая механика (Физматлит, Мәскеу, 2005), 384 б.
4. Ф.Р. Гантмахер, Лекции по аналитической механике (Физматлит, Мәскеу, 2005), 264 б.
5. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теоретическая физика. Теория поля (Наука, Мәскеу, 1988), 512 б.
6. М.В. Давидович, Законы сохранения и плотности энергии и импульса электромагнитного поля в диспергирующей среде., Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика, № 1, 46–54 б. (2012). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2012-12-1-46-54>
7. А.А. Власов, Макроскопическая электродинамика (КД Либроком, Мәскеу, 2019), 232 б.
8. В.М. Журавлев, Принцип материальности пространства и фундаментальные поля. Пространство, время и фундаментальные взаимодействия, № 3, 37–57 б. (2020). <https://doi.org/10.17238/issn2226-8812.2020.3.37-57>
9. A. Stephane, B. Florence, Electron mass predicted from substructure stability in electrodynamic model, *Frontiers in Physics*, 213 (8), 222–229 б. (2020). <https://doi.org/10.3389/fphy.2020.00213>
10. L. Galvagni, M. Guido, L. Matteo, Einstein's elevator and the principle of equivalence, *Physics Education*, 60 (5), 177–190 б. (2025). <https://doi.org/10.1088/1361-6552/aded61>

**Г. Алимбекова, С.М. Кенесбаев, Г.Т. Тугелбаева\*,  
Э.О. Куткелдиева, А.М. Сандибаева, Д.А. Ондаканов**  
*Казахский национальный женский педагогический университет,  
Алматы, Казахстан*

*(E-mail: alimbek50@mail.ru, kenesbaev-sm@mail.ru, tugelbaevagul5@gmail.com, elzira.kutkeldieva@gmail.com, adema.sandybaeva@bk.ru, dastan\_vko99@mail.ru)*

### **О выводе уравнений движения и поля из закона сохранения энергии**

**Аннотация.** Уравнения движения в аналитической механике и уравнения в теории электромагнитных полей выводятся с использованием принципа наименьшего действия к функции Лагранжа. В данной статье уравнения Гамильтона и Лагранжа получены без использования вариационных принципов. Выведены уравнения, определяющие обобщённые импульсы с условием, что энергия является функцией обобщённых координат и скоростей, а также доказано сохранение энергии системы при изменении любых степеней свободы. На основе этих предположений, были получены уравнения Гамильтона с полностью неопределённым гамильтонианом. Чтобы найти соотношения, описывающие зависимость импульсов от координат и скоростей, показано, что нужно определить функцию Лагранжа, рассматривая энергию системы как известную величину. Необходимо отметить, что все полученные результаты справедливы для фазового пространства, в котором степени свободы являются максимально независимыми друг от друга. Методы, применённые в аналитической механике, были успешно использованы и для получения уравнений теории полей в электродинамике. Точнее, энергия заряженной частицы в электромагнитном поле была определена для подходящих значений векторного потенциала поля. В качестве подходящих значений рассматривались продольное электрическое поле и векторные потенциалы, соответствующие положениям частицы.

**Ключевые слова:** уравнения движения, уравнения электромагнитного поля, функции Гамильтона и Лагранжа, обобщённые координаты, импульсы и скорости, сохранение энергии, дифференциальное уравнение в частных производных

**G. Alimbekova, S.M. Kenesbayev, G.T. Tugelbaeva\*,  
E.O. Kutkeldiyeva, A.M. Sandybayeva, D.A. Ongdakanov**

*Kazakh National Women's Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan*

*(E-mail: alimbek50@mail.ru, kenesbaev-sm@mail.ru, tugelbaevagul5@gmail.com, elzira.kutkeldieva@gmail.com, adema.sandybaeva@bk.ru, dastan\_vko99@mail.ru)*

### **On the derivation of the equations of motion and field from the law of conservation of energy**

**Abstract.** The equations of motion in analytical mechanics and the equations in the theory of electromagnetic fields are derived using the principle of least action applied to the Lagrangian function. This article obtains Hamilton's and Lagrange's equations without using variational principles. The equations determining generalized momenta are derived under the condition that the energy is a function of the generalized coordinates and velocities. The conservation of the system's energy under

changes in any degrees of freedom is also proven. It should be noted that, based on these assumptions, Hamilton's equations were obtained with a completely undetermined Hamiltonian. To find the relations describing the dependence of momenta on coordinates and velocities, it is shown that the Lagrangian function must be determined by considering the system's energy as a known quantity. It should be emphasized that all obtained results are valid for a phase space in which the degrees of freedom are maximally independent of each other. The methods applied in analytical mechanics were successfully used to derive the field theory equations in electrodynamics. More precisely, the energy of a charged particle in an electromagnetic field was determined for suitable values of the vector potential of the field. As suitable values, the longitudinal electric field and vector potentials corresponding to the positions of the particle were considered.

**Keywords:** equations of motion, electromagnetic field equations, Hamiltonian and Lagrangian functions, generalized coordinates, momenta and velocities, energy conservation, partial differential equation

### References

1. L.D. Landau, E.M. Lifshic, Teoreticheskaja fizika. Mehanika [Theoretical physics. Mechanics], (Nauka, Moscow, 1988), p. 216 [in Russian]
2. G. Gol'dstejn, Klassicheskaja mehanika [Classical mechanics], (URSS, Moscow, 2012), p. 828 [in Russian]
3. M.A. Ajzerman, Klassicheskaja mehanika [Classical mechanics], (Fizmatlit, Moscow, 2005), p. 384 [in Russian]
4. F.R. Gantmaher, Lekcii po analiticheskoj mehanike [Lectures on Analytical Mechanics], (Fizmatlit, Moscow, 2005), p. 264 [in Russian]
5. LD. Landau, E. M. Lifshic, Teoreticheskaja fizika. Teorija polja [Theoretical physics. Field theory], (Nauka, Moscow, 1988), p. 512 [in Russian]
6. M.V. Davidovich, Zakony sohraneniya i plotnosti jenergii i impul'sa jelektromagnitnogo polja v dispergirujushhej srede [Conservation and Density of Energy and Momentum of an Electromagnetic Field in a Dispersing Medium], Izvestija Saratovskogo universiteta. Novaja serija. Serija Fizika [Izvestiya of Saratov University. New Series. Physics Series], № 1, p. 46-54 (2012). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2012-12-1-46-54> [in Russian]
7. A.A. Vlasov, Makroskopicheskaja jelektrodinamika [Macroscopic Electrodynamics], (KD Librokom, Moscow, 2019), p. 232 [in Russian]
8. V.M. Zhuravlev, Princip material'nosti prostranstva i fundamental'nye polja [The Principle of Materiality of Space and Fundamental Fields], Prostranstvo, vremja i fundamental'nye vzaimodejstvija [Space, time, and fundamental interactions], № 3, p. 37-57 (2020). <https://doi.org/10.17238/issn2226-8812.2020.3.37-57> [in Russian]
9. A. Stephane, B. Florence, Electron mass predicted from substructure stability in electrodinamical model, *Frontiers in Physics*, 8 (213), p. 222-229 (2020). <https://doi.org/10.3389/fphy.2020.00213>
10. L. Galvagni, M. Guido, L. Matteo, Einstein's elevator and the principle of equivalence, *Physics Education*, 60 (5), p. 177-190 (2025). <https://doi.org/10.1088/1361-6552/aded61>

### Авторлар туралы мәлімет:

**Әлімбекова Г.** – п.ғ.д., доцент, физика кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Қазақстан, Алматы, Әйтеке би көшесі, 99.

**Кенесбаев С.М.** – п.ғ.д., профессор, физика кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Қазақстан, Алматы, Әйтеке би көшесі, 99.

**Тугелбаева Г.Т.** – хат-хабар авторы, х.ғ.к., доцент, физика кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Қазақстан, Алматы, Әйтеке би көшесі, 99.

**Қүткелдиева Э.О.** – п.ғ.м., аға оқытушы, физика кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Қазақстан, Алматы, Әйтеке би көшесі, 99.

**Сандыбаева Ә.М.** – п.ғ.м., оқытушы, физика кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Қазақстан, Алматы, Әйтеке би көшесі, 99.

**Ондақанов Д.А.** – п.ғ.м., оқытушы, физика кафедрасы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Қазақстан, Алматы, Әйтеке би көшесі, 99.

**Алимбекова Г.** – д.п.н., доцент, кафедра физики, Казахский национальный женский педагогический университет, Казахстан, Алматы, ул. Айтеке би, 99.

**Кенесбаев С.М.** – д.п.н., профессор, кафедра физики, Казахский национальный женский педагогический университет, Казахстан, Алматы, ул. Айтеке би, 99.

**Тугелбаева Г.Т.** – автор для корреспонденции, к.х.н., доцент, кафедра физики, Казахский национальный женский педагогический университет, Казахстан, Алматы, ул. Айтеке би, 99.

**Күткелдиева Э.О.** – м.п.н., старший преподаватель, кафедра физики, Казахский национальный женский педагогический университет, Казахстан, Алматы, ул. Айтеке би, 99.

**Сандыбаева А.М.** – м.п.н., преподаватель, кафедра физики, Казахский национальный женский педагогический университет, Казахстан, Алматы, ул. Айтеке би, 99.

**Ондақанов Д.А.** – м.п.н., преподаватель, кафедра физики, Казахский национальный женский педагогический университет, Казахстан, Алматы, ул. Айтеке би, 99.

**Alimbekova G.** – Doctor of Pedagogical Sciences, Associate Professor, Physics Department, Kazakh National Women's Pedagogical University, Kazakhstan, Almaty, Aiteke bi str., 99.

**Kenesbayev S.M.** – Doctor of Pedagogical Sciences, Professor, Physics Department, Kazakh National Women's Pedagogical University, Kazakhstan, Almaty, Aiteke bi str., 99.

**Tugelbaeva G.T.** – the corresponding author, candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, Physics Department, Kazakh National Women's Pedagogical University, Kazakhstan, Almaty, Aiteke bi str., 99.

**Kutkeldiyeva E.O.** – Master of Pedagogical Sciences, senior lecturer, Physics Department, Kazakh National Women's Pedagogical University, Kazakhstan, Almaty, Aiteke bi str., 99.

**Sandybayeva A.M.** – master of Pedagogical Sciences, lecturer, Physics Department, Kazakh National Women's Pedagogical University, Kazakhstan, Almaty, Aiteke bi str., 99.

**Ongdakanov D.A.** – master of Pedagogical Sciences, lecturer, Physics Department, Kazakh National Women's Pedagogical University, Kazakhstan, Almaty, Aiteke bi str., 99.



**Copyright:** © 2026 by the authors. Submitted for possible open access publication under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY NC) license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

Бас редакторы: К.Ш. Жумадилов  
Компьютерде беттеген: А. Елешева

Авторларға арналған нұсқаулықтар,  
жарияланым этикасы журнал сайтында берілген: <http://bulphysast.enu.kz>

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.  
Физика. Астрономия сериясы.  
№1(154)/2026 – Астана: ЕҰУ. – 212 б.  
Шартты б.т. – 11,18. Таралымы – сұраныс бойынша  
Басуға қол қойылды: 30.03.2026 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.