

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

№2(155)/ 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 Усеновна**, 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:

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

Редакцияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Астана қ., Қажымұқан Муңайтпасов көш., 13,
Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Оқу корпусы - ЦИСИ ғимараты, 300 және
301 кеңсе. Тел: +77172709500 (ішкі 33-303 (бас редактор), 33-318 (жауапты және техникалық хатшы)).
E-mail: vest_phys@enu.kz. Веб-сайт: www.bulphysast.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 31-118). 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:

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

Editorial address: 010008, Kazakhstan, Astana, Kazhymukan Munaitpasov str., 13, L.N. Gumilyov Eurasian National University (TsISI building), Rooms 300 and 301. Tel.: +77172709-500 (ext. 33-303 (editor-in-chief), 33-318 (executive and technical secretary)). E-mail: vest_phys@enu.kz. Website: www.bulphysast.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.31-118). 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:

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

Адрес редакции: 010008, Казахстан, г. Астана, ул. К. Мунайтпасова, 13, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева (Учебный корпус № 3 - ЦИСИ), каб. 300, 301. Телефон коммутатор: +77172709-500 (вн. 33-303 (главный редактор), 33-318 (ответственный и технический секретарь)).
E-mail: vest_phys@enu.kz. Веб-сайт: www.bulphysast.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.31-118). Сайт: <http://bulphysast.enu.kz>

© Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева

МАЗМҰНЫ / CONTENTS / СОДЕРЖАНИЕ

Астрономия сериясы – Astronomy series – серия Астрономия

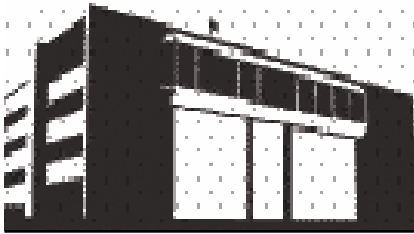
Yogesh, Abolhassan Mohammadi, M. Sami Инфляция және АСТ DR6.....	
Yogesh, Abolhassan Mohammadi, M. Sami Inflation and АСТ DR6.....	
Yogesh, Abolhassan Mohammadi, M. Sami Инфляция и АСТ DR6	8
Ержанов Қ.К., Бауыржан Г.Б., Нұрлан Э., Зарлыков Д.Б. F(R,T,X,φ) гравитациялық моделінің космологиялық параметрлері	
К.К. Yerzhanov, G.B. Bauyrzhan, E. Nurlan, D.B. Zarlykov Cosmological Parameters of the F(R,T,X,φ) Gravitational Model	
Ержанов К.К., Бауыржан Г., Нурлан Э., Зарлыков Д.Б. Космологические параметры F(R,T,X,φ) - гравитационной модели	25

Физика сериясы – Physics series – серия Физика

Блынский П.А., Углов В.В. Жылу оқшаулау сипаттамалары жоғары және γ -сәулеленуден тиімді қорғанысты қамтамасыз ететін көп-компонентті керамикалық композиттік жүйелерді жобалау	
Blynskiy P.A., Uglov V.V. Engineering Multicomposite Ceramic Systems with Improved Thermal Insulation and γ -Ray Shielding Performance	
Блынский П.А., Углов В.В. Проектирование многокомпонентных керамических композитных систем с повышенными теплоизоляционными характеристиками и эффективной защитой от γ -излучения	36
Б.С. Сайлаубеков, А.И. Свирихин, М.С. Тезекбаева, Х.М. Девараджа, А.В. Исаев, Р.С. Мухин, Ю.А. Попов Трансуран ядроларының спонтанды бөліну қасиеттерін зерттеу үшін газ толтырылған GRAND сепараторының фокальді жазықтығында SFiNx детекторлық жүйесін қолдану	
B.S. Sailaubekov, A.I. Svirikhin, M.S. Tezekbayeva, H.M. Devaraja, A.V. Isaev, R.S. Mukhin, Yu.A. Popov Application of the SFiNx detection system in the focal plane of the gas-filled separator GRAND for studying the spontaneous fission properties of transuranium nuclei	
Б.С. Сайлаубеков, А.И. Свирихин, М.С. Тезекбаева, Х.М. Девараджа, А.В. Исаев, Р.С. Мухин, Ю.А. Попов Применение детектирующей системы SFiNx в фокальной плоскости газонаполненного сепаратора GRAND для изучения свойств спонтанного деления трансураниевых ядер	53

Шлимас Д.И., Хаметова А.А. Li ₂ TiO ₃ , Li ₂ ZrO ₃ , Li ₂ MoO ₄ негізіндегі көпфазалы литийқұрамды керамикалар: синтез, құрылым және беріктену	
D.I. Shlimas, A.A. Khametova Multiphase lithium-containing ceramics based on Li ₂ TiO ₃ , Li ₂ ZrO ₃ , Li ₂ MoO ₄ : synthesis, structure, and strengthening.....	
Шлимас Д.И., Хаметова А.А. Многофазные литийсодержащие керамики на основе Li ₂ TiO ₃ , Li ₂ ZrO ₃ , Li ₂ MoO ₄ : синтез, структура и упрочнение.....	69
Т.Б. Қоштыбаев, Г. Әлімбаева, Е.К. Жаменкеев, А.Т. Жавлиева, Э.О. Құткелдиева, М.Е. Алиева Өрістегі бөлшектердің периодты соқтығысусыз қозғалыстарының гамильтондық формализмі.....	
T.B. Koshtybayev, G. Alimbekova, E.K. Zhamenkeev, A.T. Zhavliyeva, E.O. Kutkeldiyeva, M.E. Aliyeva Hamiltonian formalism of periodic collisionless motion of particles in a field.....	
Т.Б. Қоштыбаев, Г. Алімбаева, Е.К. Жаменкеев, А.Т. Жавлиева, Э.О. Құткелдиева, М.Е. Алиева Гамильтонов формализм периодического бесстолкновительного движения частиц в поле	82
Е.В. Шевченко, Н.Б. Бакранов, Б.Ж. Сейтов, А.С. Серикканов, Д.И. Бакранова, С.А. Пазылбек Жасыл сутек алудың фотоэлектрохимиялық жолдары: талдау, шолу және форсайт.....	
Ye.V. Shevchenko, N.B. Bakranov, B. Zh. Seitov, A.S. Serikkanov, D.I. Bakranova, S.A. Pazylbek Photoelectrochemical Pathways to Green Hydrogen: Analysis, Review, and Foresigh.....	
Е.В. Шевченко, Н.Б. Бакранов, Б.Ж. Сейтов, А.С. Серикканов, Д.И. Бакранова, С.А. Пазылбек Фотоэлектрохимические пути к зелёному водороду: анализ, обзор и форсайт.....	92
С.Ж. Көшкінбаев, А.К. Сейтханова, Н.К. Смайлов, Қ.М. Ысырайыл, А.Е. Қуттыбаева Ғарыш инфрақұрылымында FBG сенсоры қамтамасыз ететін заманауи талаптарды зерттеу	
S.Zh. Koshkinbayev, A.K. Seytkhanova, N.K. Smailov, K.M. Yssyraiyl, A.E. Kuttybayeva Analysis of modern requirements supported by Fiber Bragg Grating (FBG) sensors in space infrastructure	
С.Ж.Көшкінбаев, А.К.Сейтханова, Н.К.Смайлов, Қ.М.Ысырайыл, А.Е.Қуттыбаева Исследование современных требований, обеспечиваемых FBG-сенсорами в космической инфраструктуре..	106
Г.Б. Байрбаева, М.Ю. Доломатов, Т.И. Шарипов, Ж.М. Салиходжа CaO және Y ₂ O ₃ -пен тұрақтандырылған c-ZrO ₂ -нің иондық өткізгіштігін тығыздық теориясы функционалы әдісімен зерттеу	
G.V. Bairbayeva, M.Yu. Dolomatov, T.I. Sharipov, Zh.M. Salikhodzha DFT study of the ionic conductivity of CaO- and Y ₂ O ₃ -stabilized c-ZrO ₂	
Г.Б. Байрбаева, Доломатов М.Ю, Т.И. Шарипов, Ж.М. Салиходжа Исследование ионной проводимости c-ZrO ₂ стабилизированного CaO и Y ₂ O ₃ методом ТФП	118
А.А.Темирбаева, А.Қырықбаева, Г.Кабдрахимова MOF-5/полимер/терең эвтектикалық еріткіш негізіндегі композиттік мембраналардағы протон тасымалының теориялық шолуы: құрылым мен қасиеттердің өзара байланысы	
A.A. Temirbayeva, A. Kurykbaeva, G.Kabdrakhimova Theoretical review of proton transport in MOF-5/ polymer/ deep eutectic solvent composite membranes: structure–property relationships	
А.А.Темирбаева, А.Қырықбаева, Г. Кабдрахимова Теоретический обзор переноса протонов в композитных мембранах MOF-5/полимер/глубокоэвтектический растворитель: взаимосвязь структуры и свойств.....	134
Байкадамова Л.С, Қаптағай Г.Ә., Көпенбаева А.С., Дәлелханқызы А., Қойлық Н.О., Сандибаева Н.А., Мұратбек Т. BaTiO ₃ /g-C ₃ N ₄ гибриді құрылымын DFT зерттеу	
Baikadamova L., Kaptagay G., Kopenbaeva A., Dalelkhankyzy A., Koylyk N., Sandibaeva N., Muratbek T. DFT research hybrid structure BaTiO ₃ /g-C ₃ N ₄	
Байкадамова Л.С.¹, Қаптағай Г.А., Көпенбаева А.С., Далелханқызы А., Койлық Н.О., Сандибаева Н.А., Мұратбек Т. DFT исследование гибридной структуры BaTiO ₃ /g-C ₃ N ₄	152

<p>Т. Бижигитов, Э. Мадалиева, Л. Бижигитова III-ші және V-ші мұз күйлерінің серпімділік қасиеттеріне температура мен қысымның әсерін зерттеу</p> <p>T. Bizhigitov, E. Madaliyeva, L. Bizhigitova Study of the Influence of Temperature and Pressure on the Elastic Properties of Ice III and Ice V</p> <p>Т. Бижигитов, Э. Мадалиева, Л. Бижигитова Исследование влияния температуры и давления на упругие свойства III-й и V-й фаз льда</p>	166
<p>К.О. Мендибаев, А.К. Әжібеков, К.С. Дюсебаева, Т.Ф. Исатаев, С.М. Лукьянов, Т.К. Жолдыбаев, Ә.Ә. Теміржанов 35 МэВ энергиясы кезінде ^{12}C ядрода дейтронның серпімді шашырауы</p> <p>K.O. Mendibayev, A.K. Azhibekov, K.S. Dyussebayeva, T.G. Issatayev, S.M. Lukyanov, T.K. Zholdybayev, A.A. Temirzhanov Elastic scattering of a deuteron on a ^{12}C nucleus at an energy of 35 MeV</p> <p>К.О. Мендибаев, А.К. Әжібеков, К.С. Дюсебаева, Т.Ф. Исатаев, С.М. Лукьянов, Т.К. Жолдыбаев, Ә.Ә. Теміржанов Упругое рассеяние дейтрона на ядре ^{12}C при энергии 35 МэВ</p>	177
<p>Н. Амангелді, Ф. Ергалиұлы, Б.Б. Балабеков, А. Жумадил ^7Li ядросының ^{12}C ядросымен серпімді әсерлесуінің эксперименттік нәтижелері мен теориялық талдау жолдарына шолу</p> <p>N. Amangeldi, G. Yergaliuly, B.B. Balabekov, A. Zhumadil A Review of Experimental Results and Theoretical Approaches to the Elastic Interaction between ^7Li and ^{12}C Nuclei</p> <p>Н. Амангелди, Г. Ергалиулы, Б.Б. Балабеков, А. Жумадил Обзор экспериментальных результатов и методов теоретического анализа упругого взаимодействия ядра ^7Li с ядром ^{12}C</p>	191
<p>М.А. Сайдұллаева $\text{WO}_3\text{-NiO}$ жүйесінің құрылымы мен морфологиясына механохимиялық активация және күйдірудің әсері</p> <p>M.A. Saidullaeva The effect of mechanochemical activation and annealing on the structure and morphology of the $\text{WO}_3\text{-NiO}$ system</p> <p>М.А. Сайдұллаева Влияние механохимической активации и отжига на структуру и морфологию системы $\text{WO}_3\text{-NiO}$</p>	205
<p>Зикирина А., Кенжина И., Заурбекова З., Ильяшева К., Сейтмаганбет Г., Козловский А. $\text{ZrO}_2\text{-CeO}_2$ керамикасының құрамындағы фазалық түрленулерге тұрақтандырушы магний оксиді қоспасының мөлшерінің әсері</p> <p>Zikirina A., Kenzhina I., Zaurbekova Z., Pyasheva K., Seitmaganbet G., Kozlovskiy A. The role of variation of the stabilizing magnesium oxide dopant on phase transformations in the composition of $\text{ZrO}_2\text{-CeO}_2$ ceramics</p> <p>Зикирина А., Кенжина И., Заурбекова З., Ильяшева К., Сейтмаганбет Г., Козловский А. Роль изменения содержания стабилизирующей добавки оксида магния в фазовых превращениях состава керамики $\text{ZrO}_2\text{-CeO}_2$</p>	216
<p>А.С. Муса, К.Ш. Жумадилов, М.Т. Касымжанов, А.А. Баграмова, Ф.В. Степаненко, А. Сакагучи, М. Хоши Қазақстанның қоршаған ортасындағы қорғасынның радиоактивті изотоптарын анықтау</p> <p>A.S. Musa, K.Sh. Zhumadilov, M.T. Kassymzhanov, A.A. Bagramova, V.F. Stepanenko, A. Sakaguchi, M. Hoshi Assessment of Radioactive Lead Isotopes in the Environment of Kazakhstan</p> <p>А.С. Муса, К.Ш. Жумадилов, М.Т. Касымжанов, А.А. Баграмова, Ф.В. Степаненко, А. Сакагучи, М. Хоши Определение радиоактивных изотопов свинца в окружающей среде Казахстана</p>	230



Inflation and ACT DR6

Yogesh^{1*}, Abolhassan Mohammadi², M. Sami³

¹Zhejiang University of Technology, Hangzhou, China

²Hunan Institute of Technology, Hengyang, China

³SGT University, Gurugram, Haryana, India

E-mail: yogeshjmi@gmail.com, abolhassann@hnit.edu.cn, samijamia@gmail.com

Abstract. The recent results from the Atacama Cosmology Telescope (ACT DR6) have shifted the preferred value of the scalar spectral index to $n_s=0.9743\pm 0.0034$, placing several well-established inflationary models, including the Starobinsky model, close to the 2σ boundary in the r - n_s plane. Motivated by this tension, we investigate two different approaches to reconcile inflationary predictions with the latest ACT observations. First, we study the power-law plateau inflationary potential within the framework of standard Einstein gravity and demonstrate that it naturally predicts values of n_s and r that lie within the 1σ ACT confidence region across a broad range of model parameters. Second, we embed the Starobinsky potential in Einstein–Gauss–Bonnet gravity, where the non-minimal coupling between the inflaton and the Gauss-Bonnet invariant significantly modifies the inflationary dynamics. We show that both hyperbolic tangent and exponential coupling functions successfully shift the model predictions into the 1σ ACT allowed region. Furthermore, in both scenarios, the predicted running of the scalar spectral index remains fully consistent with the ACT n_s - α_s constraints, providing viable alternatives compatible with current cosmological observations.

Keywords: cosmology, Einstein–Gauss–Bonnet gravity, Starobinsky potential, inflationary model, inflaton.

Introduction

Inflation is a very short, accelerated phase of expansion in the very early universe, during which the universe undergoes extreme expansion. The scenario was originally proposed to address problems with the hot big bang theory, such as the horizon and flatness problems [1–4]. In addition to successfully addressing these shortcomings, the inflationary scenario provides a mechanism for generating the primordial quantum fluctuations that seed the large-scale structure of the universe [5]. During this phase, a scalar field, known as the inflaton, slowly rolls down its potential, sustaining a quasi-de Sitter expansion. The scenario has been studied and extended in many directions, including non-canonical scalar field [6, 7], warm inflation [8–10], constant-roll inflation [11, 12], and so on.

Received 3.06.2026. Revised 9.06.2026. Accepted 9.06.2026. Available online 30.06.2026.

*the corresponding author

Over the past two decades, there has been enormous observational support for inflation. Successive Planck releases [13–15] confirmed the near scale-invariance of the primordial scalar power spectrum and constrained the scalar spectral index n_s and tensor-to-scalar ratio r . The most recent data from the Atacama Cosmology Telescope (ACT) has sharpened these constraints considerably [16, 17]. A joint analysis of Planck and ACT DR6 data yields $n_s = 0.9743 \pm 0.0034$, which shows a shift in the scalar spectral index [16, 17]. The upward shift in n_s relative to the Planck 2018 central value has direct consequences for the selection of inflationary models. The Starobinsky model [18], which predicts $n_s \approx 1 - 2/N_k$ for $N_k \approx 60$ e-folds, now lies near the 2σ boundary of the ACT r - n_s plane and is effectively disfavoured. The broader class of α -attractor models at large α and the natural inflation potential face similar pressure. This has prompted a broad re-examination of inflationary potentials in the light of ACT data.

In the general category, there are two distinct approaches for building models consistent with ACT. The first is to work within standard Einstein gravity and identify potentials whose predictions naturally fall in the higher n_s region preferred by ACT. In this regard, the Power-Law Plateau (PLP) potential,

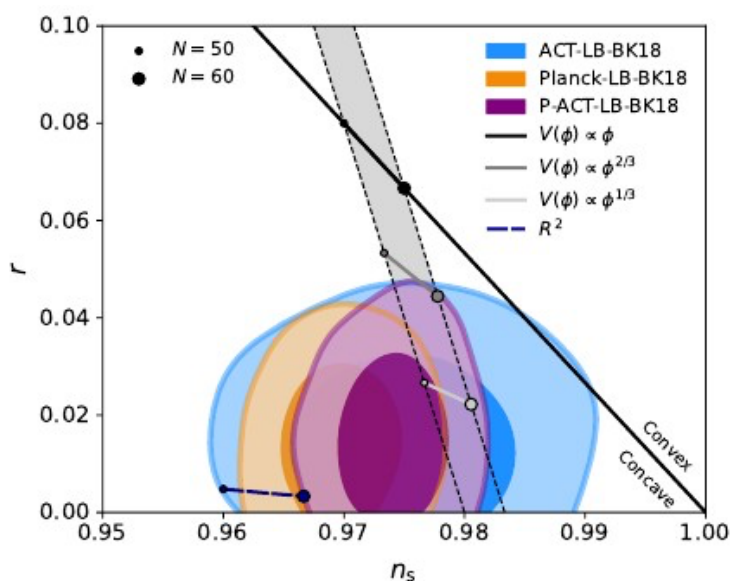
$$V(\phi) = V_0 \left(\frac{\phi^n}{\phi^n + m^n} \right)^q,$$

motivated by supersymmetry [19–21], can be addressed as such a potential. Its free parameters n and q allow the prediction n_s and r to fall within the preferred range, and for many combinations they lie within the 1σ ACT contour. The second approach is to examine a potential disfavored in standard gravity within a modified gravity framework. Einstein–Gauss–Bonnet (EGB) gravity is a well-motivated example: rooted in string theory, it extends the Einstein–Hilbert action with a quadratic Gauss–Bonnet (GB) curvature term that couples non-minimally to the inflaton field via a coupling function $\xi(\phi)$ [22–26]. Such modifications alter the inflationary dynamics and can shift model predictions into the observationally preferred region, even for potentials that fail in standard gravity.

In this paper, we combine both approaches, drawing on two of our recent studies [21, 27]. In the first, we investigate the PLP potential in standard gravity and demonstrate its agreement with ACT DR6 data across a wide range of the parameters n and q [21]. In the second, we embed the Starobinsky potential within EGB gravity and show that the resulting r - n_s predictions fall within the 1σ region of the ACT plane for two distinct GB coupling functions of the form [28]

$$\xi(\phi) \propto \tanh(\xi_2 \phi) \quad \text{and} \quad \xi(\phi) \propto \exp(\xi_2 \phi)$$

The paper is organized as follows. Sect. III covers the PLP inflation in Einstein gravity, and Sect. IV presents the EGB framework and the Starobinsky potential results. Sect. V summarises the main findings.



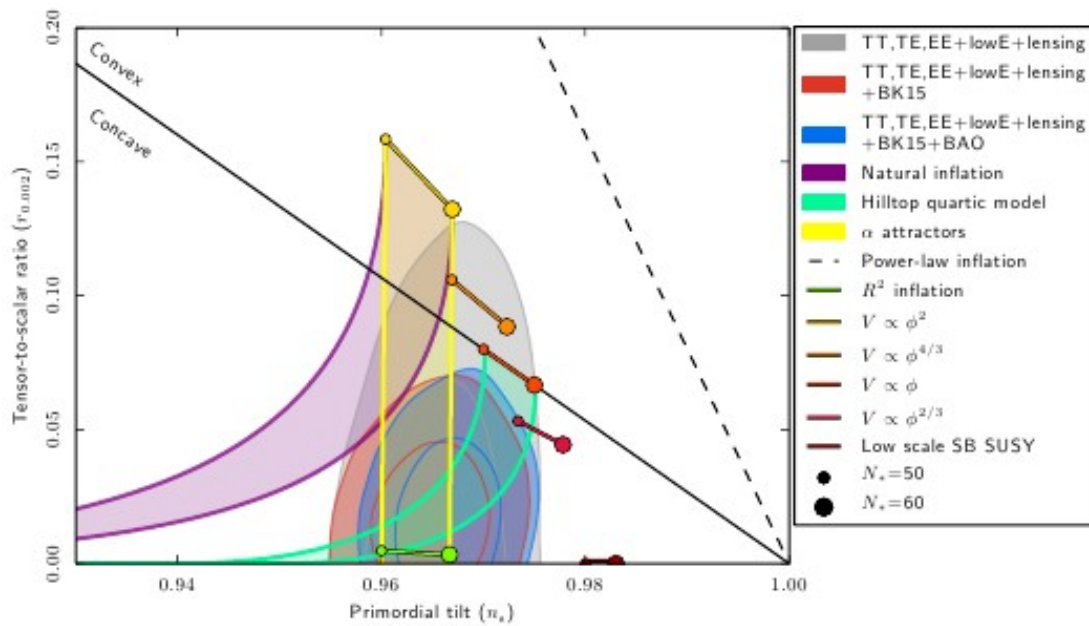


Figure 1. Planck vs ACT, figures taken from [16, 17, 29]

Planck vs ACT: Observational Landscape

The Planck mission has made significant contributions to primordial cosmology over the last few decades as one of the most dependable and accurate probes of the early cosmology. The Planck 2018 results set an upper limit on the tensor-to-scalar ratio $r < 0.056$ at the pivot scale $k_* = 0.05 \text{ Mpc}^{-1}$ [15] and limited the scalar spectral index to $n_s = 0.9649 \pm 0.0042$. For intensity and polarisation scales of $\ell \geq 2000$ and $\ell \geq 800$, respectively, the Planck measurement is dominated by noise, leaving a sizeable chunk of the primordial power spectrum entirely unexplored. ACT has both technical and physical observational advantages over Planck. In terms of sensitivity and resolution, the ACT DR6 data represent a substantial advancement over the Planck legacy dataset. The improved noise performance in polarisation, combined with finer angular resolution, allows the E -mode power spectrum to be measured within the cosmic variance limit up to $\ell = 1700$ [16, 17], opening a window into small-scale primordial physics inaccessible to Planck. Additionally, as a ground-based telescope, ACT may be updated in the future. The constraints on the tensor-to-scalar and scalar spectral index from the Planck 1σ observational area are displayed in the left panel of Fig. 1. Additionally, it shows the various inflationary models and how well they match the data.

The Starobinsky model has taken centre stage among all the models depicted in the illustration. In addition to satisfying the observational limitations, the model's origin has been validated. Similar to the Starobinsky model, α -attractors are a similar class of models that have been consistent with the previous CMB observations. The landscape of inflationary models has been significantly altered by recent developments in observational cosmology, especially the revelation of the ACT DR6 data [16]. After striking an agreement with Planck [15], models that were earlier considered the community consensus now face significant observational problems. One notable example is the Starobinsky model [18], which is currently in significant conflict with the ACT DR6 constraints [17], despite being the most well-known inflationary scenario for many years. However, certain models that were inconsistent with the Planck results are now observationally plausible, at least in the 2σ range, e.g., $V \propto \phi^{2/3}$. Only a small number of models remain compatible with the ACT data; for instance, the PLP model remains in the observationally viable range. If we move away from the standard Einstein gravity to some higher-order modified gravity, such as EGB, it is rather natural to achieve a higher value of the scalar spectral index. In the following sections, we review our previous works on PLP and Starobinsky in EGB gravity.

POWER-LAW PLATEAU INFLATION IN STANDARD GRAVITY

We consider a scalar field ϕ minimally coupled to gravity in standard Einstein gravity. The action is

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} \left(\frac{M_p^2}{2} R - \frac{1}{2} g^{\mu\nu} \nabla_\mu \phi \nabla_\nu \phi - V(\phi) \right) \quad (1)$$

where g is the determinant of the metric $g_{\mu\nu}$, R is the Ricci scalar, ϕ is the inflaton, $V(\phi)$ is its potential, and $M_p = 1/8\pi G$ is the reduced Planck mass. Varying the action in a spatially flat FLRW background yields the following Friedmann equations

$$H^2 = \frac{1}{3M_p^2} \left(\frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + V \right), \dot{H} = -\frac{\dot{\phi}^2}{2M_p^2}, \quad (2)$$

and the Klein–Gordon equation for the inflaton,

$$\ddot{\phi} + 3H\dot{\phi} + V'(\phi) = 0, \quad (3)$$

where dots denote time derivatives and primes denote derivatives with respect to ϕ .

The inflationary phase requires the inflaton to roll slowly along its potential, keeping the kinetic energy well below the potential energy. This slow-roll condition is encoded in the parameters

$$\epsilon = -\frac{\dot{H}}{H^2}, \eta = \frac{\ddot{\phi}}{H\dot{\phi}}$$

both of which must be small during inflation. Under the slow-roll approximation ($\epsilon, \eta \ll 1$), the dynamical equations simplify to

$$3M_p^2 H^2 \simeq V(\phi), 3H\dot{\phi} \simeq -V'(\phi). \quad (4)$$

For successful inflation and solving the horizon and flatness problems, the universe must undergo about 55-65e-folds of expansion. The amount of inflation is measured by the number of e-folds

$$N_k = \int_{t_e}^{t_*} H dt = \int_{\phi_e}^{\phi_*} \frac{H}{\dot{\phi}} d\phi, \quad (5)$$

where the subscript e marks the end of inflation and $*$ marks the moment the pivot scale $k_* = 0.05 \text{ Mpc}^{-1}$ exits the Hubble horizon.

The key inflationary observables are the scalar spectral index n_s and the tensor-to-scalar ratio r , expressed in terms of the potential slow-roll parameters

$$\epsilon_V = M_p^2 \frac{V'^2}{2V^2}, \eta_V = M_p^2 \frac{V''}{V},$$

as [1, 21]

$$n_s - 1 = -6\epsilon_V + 2\eta_V, r = 16\epsilon_V. \quad (6)$$

Inflation ends when $\epsilon_V(\phi_e) = 1$. Using Eqs. (4) and (5), the field value at horizon crossing ϕ_* is determined by integrating back $N_k \approx 60$ e-folds from ϕ_e after which Eq. (6) gives n_s and r at the pivot scale.

Supersymmetry (SUSY) is the last space-time symmetry beyond Poincaré symmetry permitted by the Coleman–Mandula no-go theorem [30]. From a SUSY-motivated construction [19, 20], one arrives at the Power-Law Plateau (PLP) potential

$$V(\phi) = V_0 \left(\frac{\phi^n}{\phi^n + m^n} \right)^q, \quad (7)$$

where $V_0 > 0$ is a constant, m is a mass scale taken here as $m = M_p$, and n, q are real free parameters. The specific case $n = 2, q = 1$ is the original SUSY-motivated choice [19]; here we treat both n and q as continuous free parameters to explore the broader model landscape.

For the potential to retain its plateau shape, one requires $\phi \gg m$; otherwise Eq. (7) reduces to the monomial form $V \propto \phi^n$, which is observationally excluded [19].

Substituting Eq. (7) into the slow-roll expressions (6), using the relation $\epsilon_1(\phi_e) = 1$ to find the scalar field at the end of inflation. Then, integrating the e-fold equation (5), one can determine the field at horizon crossing time. Utilizing the result, we obtain n_s and r at horizon crossing as a function of n, q , and N_k . Fig. 2 shows the resulting $r - n_s$ predictions compared against the ACT DR6 observational contours for $N_k = 55$ and $N_k = 65$ and for several representative choices of the parameters n and q .

STAROBINSKY IN EGB

EGB gravity extends the Einstein–Hilbert action with a quadratic curvature correction, GB term, non-minimally coupled to the inflaton field through a coupling function $\xi(\phi)$. Higher-order curvature terms and their couplings to scalar fields naturally emerge as quantum corrections to the gravitational action in string theory, which serves as the motivation for this modified theory of gravity [22, 31–33]. Models with non-minimal coupling of this type can yield small values of the tensor-to-scalar ratio and, crucially, can reconcile inflationary potentials that are disfavoured in standard gravity with the latest observational data. One of the distinguishing features of EGB gravity is its inherent tendency to produce a slightly higher spectral index n_s . This behaviour originates from the geometric nature of the GB coupling, which modifies the inflationary slow-roll dynamics without requiring any additional fine-tuning of the model parameters [34–39].

The action of the model reads [40]

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} \left[\frac{1}{2}R - \frac{1}{2}g^{\mu\nu} \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi - V(\phi) - \frac{1}{2}\xi(\phi) \mathcal{G} \right] \tag{8}$$

where

$$\mathcal{G} = R_{\mu\nu\rho\sigma}R^{\mu\nu\rho\sigma} - 4R_{\mu\nu}R^{\mu\nu} + R^2$$

is the GB invariant. In a spatially flat FLRW background, using the reduced Planck units

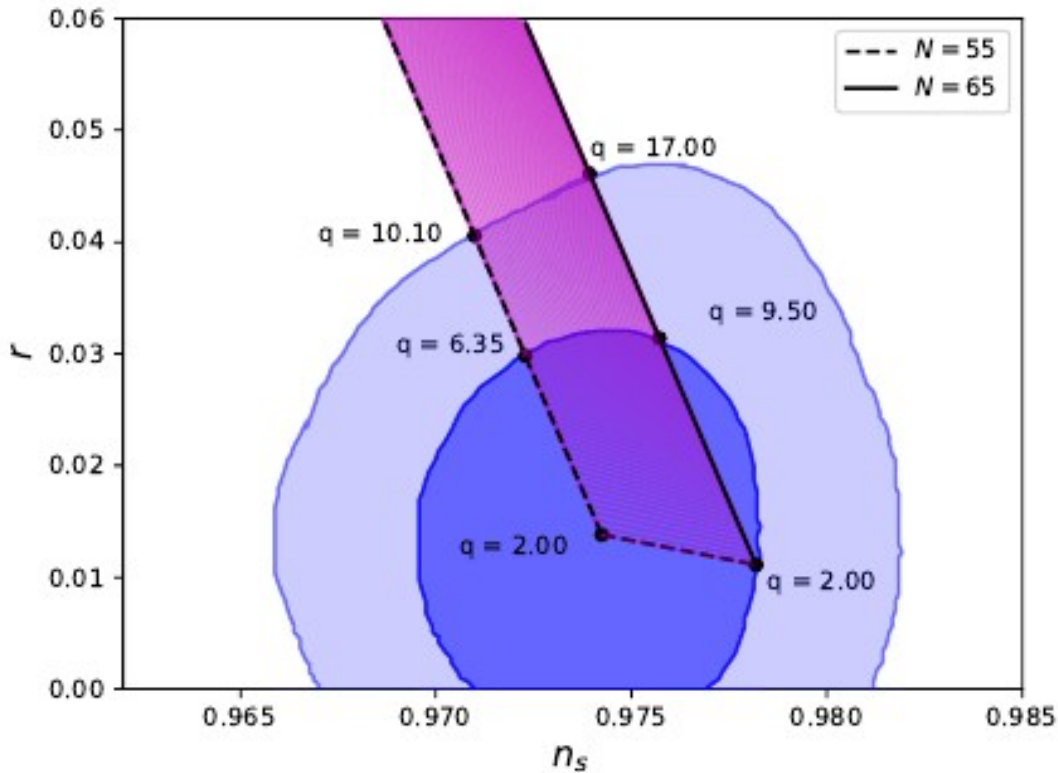
$$M_p^2 = (8\pi G)^{-1} = 1,$$

the modified Friedmann equations can be written as

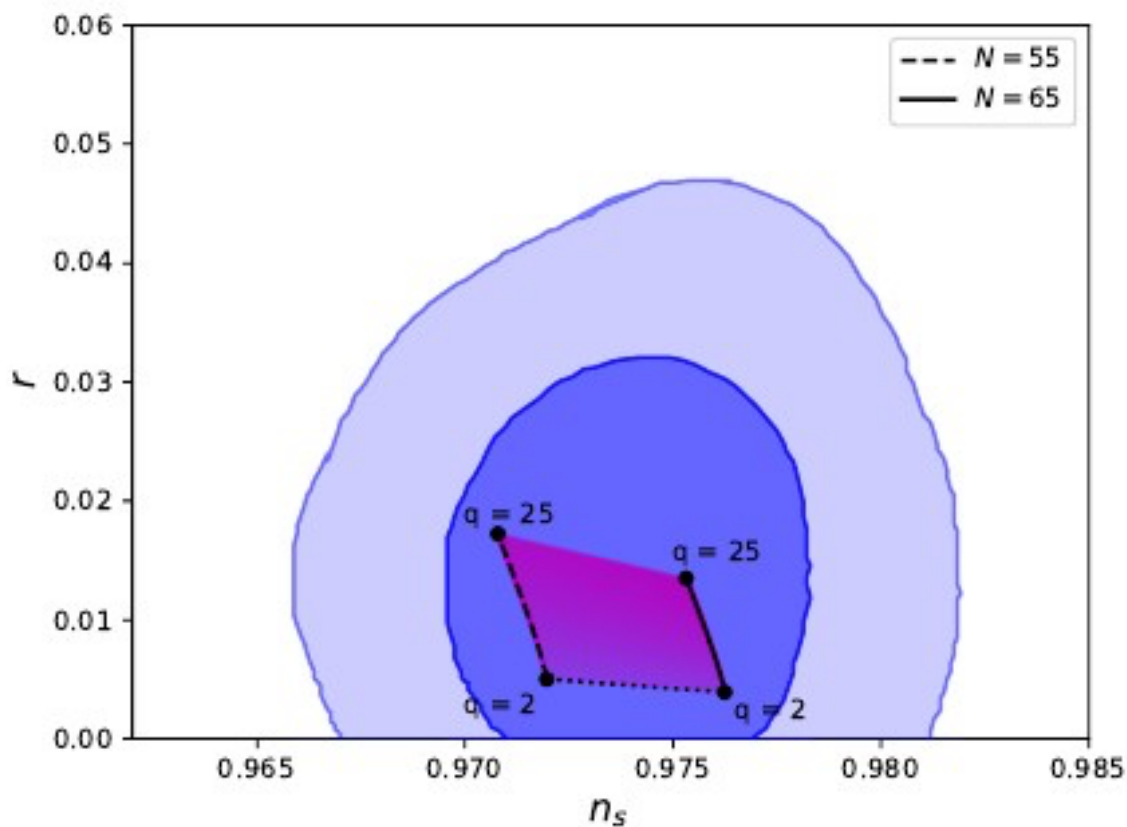
$$6H^2 \left(1 - 4\xi_{,\phi} \dot{\phi} H \right) = \dot{\phi}^2 + 2V \tag{9}$$

$$2\dot{H} \left(1 - 4\xi_{,\phi} \dot{\phi} H \right) = -\dot{\phi}^2 + 4H^2\Psi, \tag{10}$$

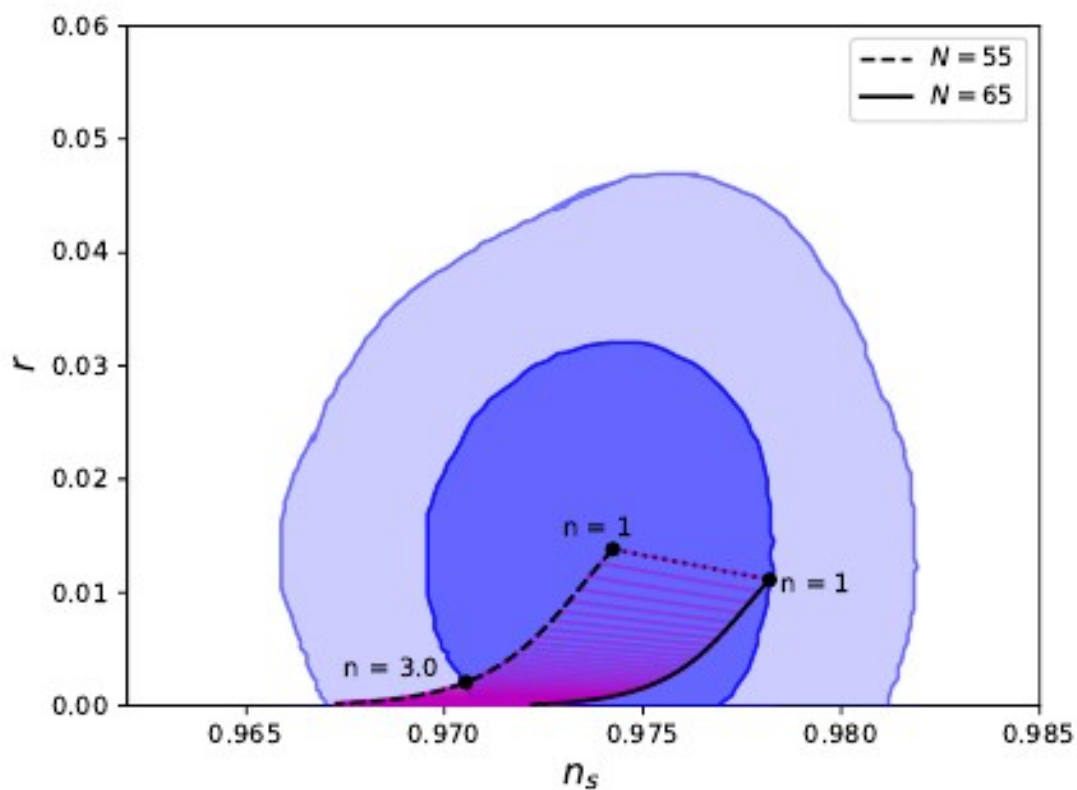
where Ψ is defined in the subsequent equations of the model.



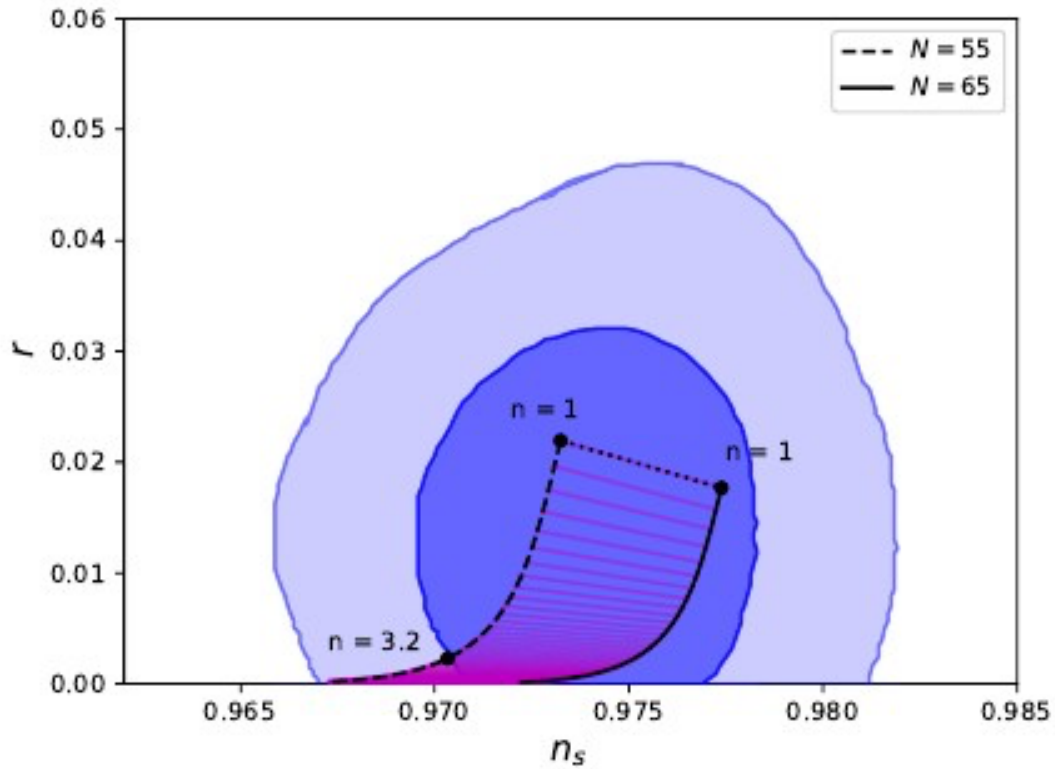
(a) $n=1$



(b) $n=2$



(c) $n=3$



(d)n=4

Figure 2. Predicted $r-n_s$ values of the PLP model compared with ACT DR6 contours, for $m=M_p$. Solid (dashed) black lines correspond to $N_k=65(N_k=55)$. Panels (a) and (b) show fixed values of n while q varies; panels (c) and (d) show fixed values of q while n varies.

The model remains well within the 1σ ACT contour for a broad range of parameters. and the inflaton equation of motion is

$$\ddot{\phi} + 3H\dot{\phi} = -V_{,\phi} - 12H^2\xi_{,\phi} \left(\dot{H} | H^2 \right), \tag{11}$$

where

$$\Psi = \xi_{,\phi\phi} \dot{\phi}^2 + \xi_{,\phi} \ddot{\phi} - H \xi_{,\phi} \dot{\phi}.$$

Switching to the number of e-folds N via $dN=Hdt$, the exact dynamical system is [41]

$$\begin{aligned} \frac{d\phi}{dN} &= \chi, \\ \frac{d\chi}{dN} &= \frac{3[3-4\xi_{,\phi\phi}H^2]\xi_{,\phi}H^4\chi^2 + [3B + 2\xi_{,\phi}V_{,\phi} - 3]H^2\chi}{H^2(B-2\xi_{,\phi}H^2\chi)} - \frac{4V^2X}{H^2(B-2\xi_{,\phi}H^2\chi)} \\ &\quad - \frac{\chi}{2H^2} \frac{dH^2}{dN}, \\ \frac{dH^2}{dN} &= \frac{H^2[(4\xi_{,\phi\phi}H^2-1)\chi^2 - 16\xi_{,\phi}H^2\chi - 16V^2\xi_{,\phi}X]}{2(B-2\xi_{,\phi}H^2\chi)}, \end{aligned} \tag{12}$$

with

$$\chi = \frac{\dot{\phi}}{H}, B = 12\xi_{,\phi}^2H^4 + \frac{1}{2},$$

and

$$X = \frac{12\xi_{,\phi}H^4 + V_{,\phi}}{4V^2}.$$

The inflationary phase is characterized by the standard slow-roll hierarchy

$$\epsilon_1 = -\frac{\dot{H}}{H^2}, \epsilon_{i+1} = \frac{d \ln |\epsilon_i|}{dN}, \quad (13)$$

and an additional GB-induced hierarchy,

$$\delta_1 = 4\xi_{,\phi} H^2 \chi, \delta_{i+1} = \frac{d \ln |\delta_i|}{dN}. \quad (14)$$

The scalar spectral index and tensor-to-scalar ratio are [41]

$$n_s = 1 - 2\epsilon_1 - \frac{2\epsilon_1\epsilon_2 - \delta_1\delta_2}{2\epsilon_1 - \delta_1}, r = 8 |\epsilon_1 - \delta_1|. \quad (15)$$

The inflaton potential is the Starobinsky potential [18]

$$V(\phi) = V_0 \left(1 + e^{-\sqrt{\frac{2}{3}}\phi} \right)^2, \quad (16)$$

which also arises in R^2 gravity and the α -attractor framework. Here, we employ two distinct kinds of EGB couplings, as

$$\xi(\phi) = \frac{\xi_1}{V_0} \tanh(\xi_2 \phi), \quad \xi(\phi) = \frac{\xi_1}{V_0} e^{-\xi_2 \phi}, \quad (17)$$

where ξ_1 and ξ_2 are constant free parameters. Several other types of couplings have also been considered in the past [42–49]. To apply the slow-roll approximation, one introduces the effective potential [40, 50, 51]

$$V_{\text{eff}}(\phi) = -\frac{1}{4V(\phi)} + \frac{1}{3}\xi(\phi), \quad (18)$$

which reduces the e-fold integral to

$$\frac{dN}{d\phi} \simeq -\frac{1}{4V V_{\text{eff},\phi}}, H^2 \simeq \frac{V}{3}, \chi \simeq -4V_{\text{eff},\phi}. \quad (19)$$

The observables are then obtained by evaluating Eqs. (13)–(15) at the pivot-scale crossing. Exact results are obtained by numerically integrating the full system.

Results: hyperbolic (tanh) coupling

Fig. 3 shows the $r-n_s$ predictions for the tanh coupling with fixed and varying ξ_2 , compared against the ACT $r-n_s$ contours. In the absence of GB coupling, the Starobinsky potential falls in the 2σ ACT region. Activating the coupling shifts the predictions toward larger n_s and smaller r . For $\xi_2=0.006$ and $N_k=60$, the model gives $n_s=0.974$ and $r=0.0044$, well within the 1σ ACT contour. Reducing or increasing ξ_2 beyond this range moves the predictions outside the 1σ boundary. The slow-roll and exact numerical results are in close agreement, confirming the validity of the approximation.

The parametric space of (ξ_1, ξ_2) is explored in Fig. 4. Blue dots mark all pairs consistent with the 1σ ACT contour. The combination of blue and red dots covers the 2σ region. For $\xi_1=1$, the acceptable range is

$$0.002 < \xi_2 < 0.01,$$

this interval narrows as ξ_1 increases. The parametric space also exhibits a sign-flip symmetry, namely, the model predictions are unchanged under

$$(\xi_1, \xi_2) \rightarrow (-\xi_1, -\xi_2).$$

Results: exponential coupling

For the exponential coupling, the $r-n_s$ results are shown in Fig. 5, for fixed $\xi_2=1$ and varying ξ_1 . Increasing ξ_1 raises n_s and lowers r , drawing the predictions into the 1σ ACT region. The range

$$1.3 < \xi_1 < 2.1$$

satisfies the 1σ constraint. Again, the slow-roll and numerical approaches agree well.

The parametric space for the exponential coupling is shown in Fig. 6. Unlike the tanh case, no sign-flip symmetry exists, and the exponential coupling does not vanish at $\xi_2=0$. For $\xi_1=1.8$, the acceptable range is

$$0.85 < \xi_2 < 1.1$$

narrowing to

$$1.25 < \xi_2 < 1.3$$

at $\xi_1=3.8$. The 2σ -compatible region in ξ_2 is wider than for the tanh coupling.

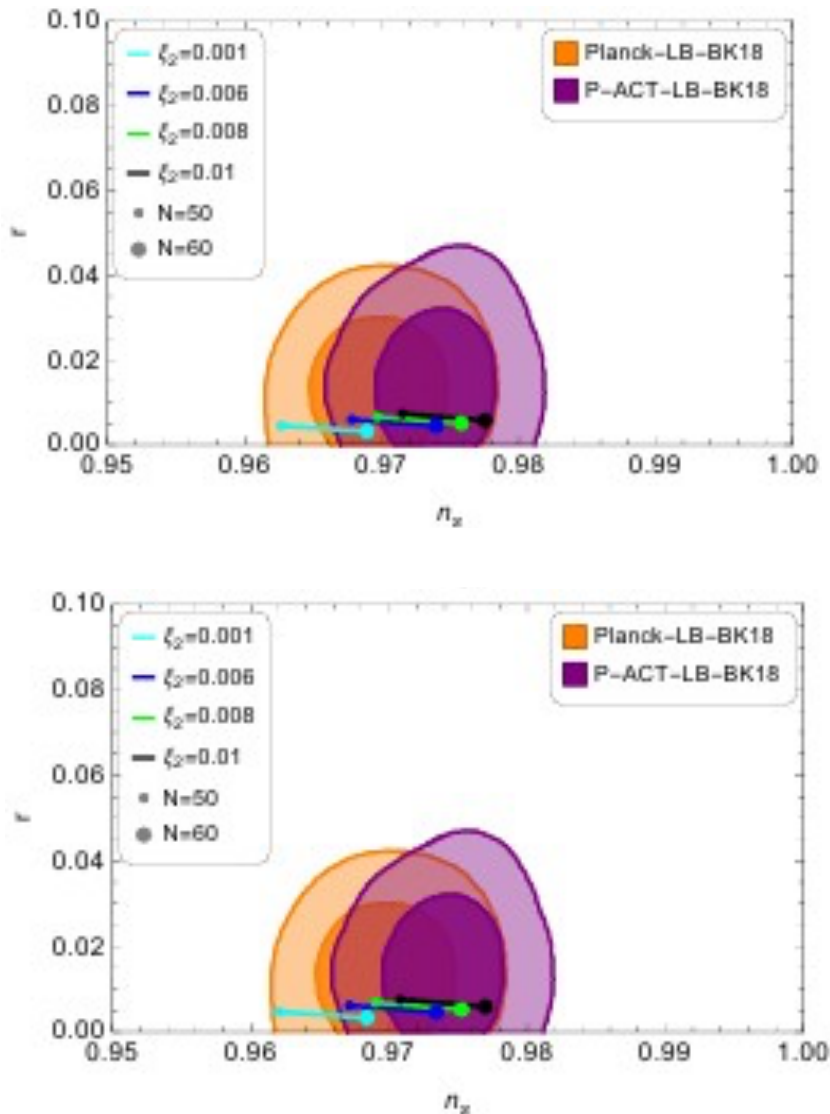


Figure 3. Predicted $r-n_s$ values for the Starobinsky potential with tanh GB coupling ($\xi_1=1$, varying ξ_2) from (a) the standard slow-roll approximation and (b) exact numerical integration. Large (small) markers correspond to $N_k=60(N_k=50)$. The black point marks the no-coupling limit, which falls in the 2σ ACT region.

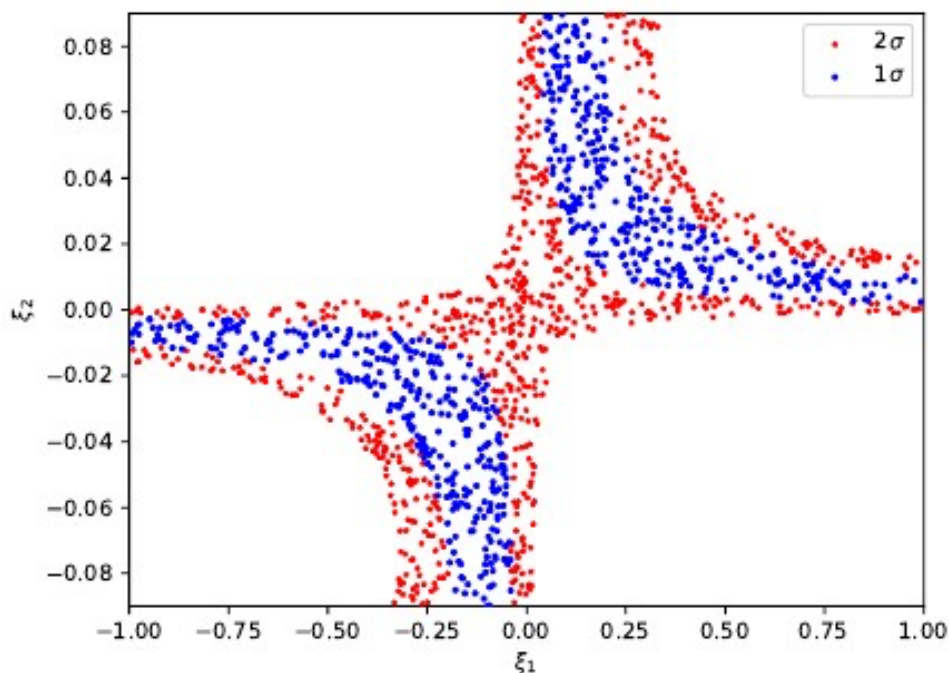


Figure 4. Parametric space of (ξ_1, ξ_2) for the tanh coupling. Blue (blue + red) dots mark pairs within the $1\sigma(2\sigma)$ ACT region for $N_k=60$.

Both coupling functions confirm that the Starobinsky potential, while disfavoured in standard gravity, is fully consistent with ACT data when embedded in EGB gravity. As an additional check, the running of the scalar spectral index

$$\alpha_s = \frac{dn_s}{dlnk}$$

was computed. For the tanh coupling ($\xi_1=1, \xi_2=0.006, N_k=60$), one obtains

$$\alpha_s = -5 \times 10^{-3},$$

and for the exponential coupling ($\xi_1=1.8, \xi_2=1$), one finds

$$\alpha_s = -3.85 \times 10^{-3}.$$

Both values are within the $1\sigma n_s-\alpha_s$ contour reported by ACT.

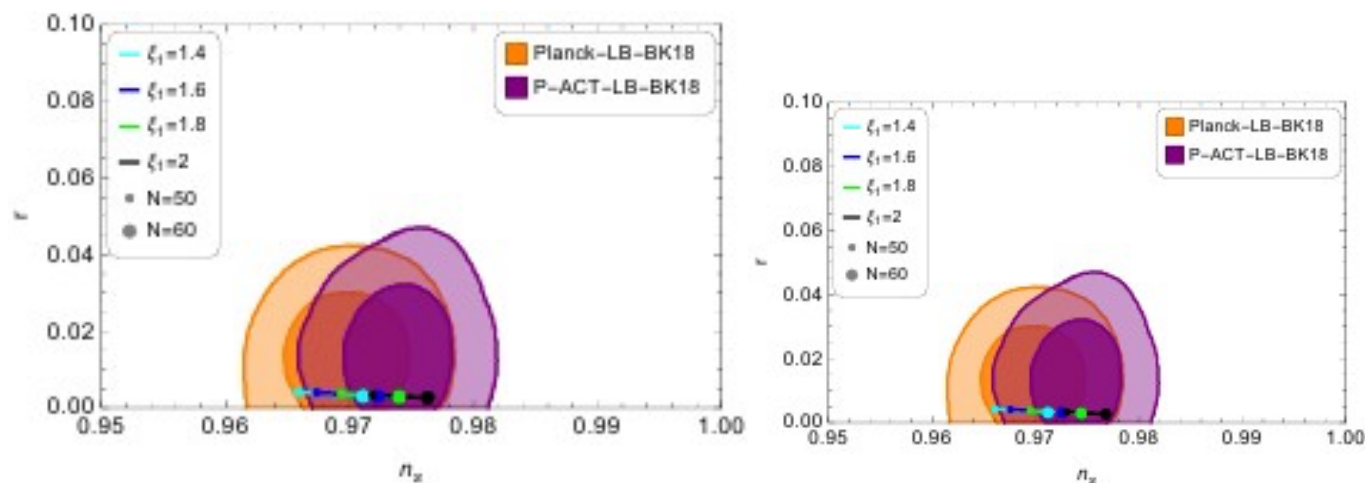


Figure 5. Predicted $r-n_s$ values for the Starobinsky potential with exponential GB coupling ($\xi_2=1$, varying ξ_1) from (a) the standard slow-roll approximation and (b) exact numerical integration.

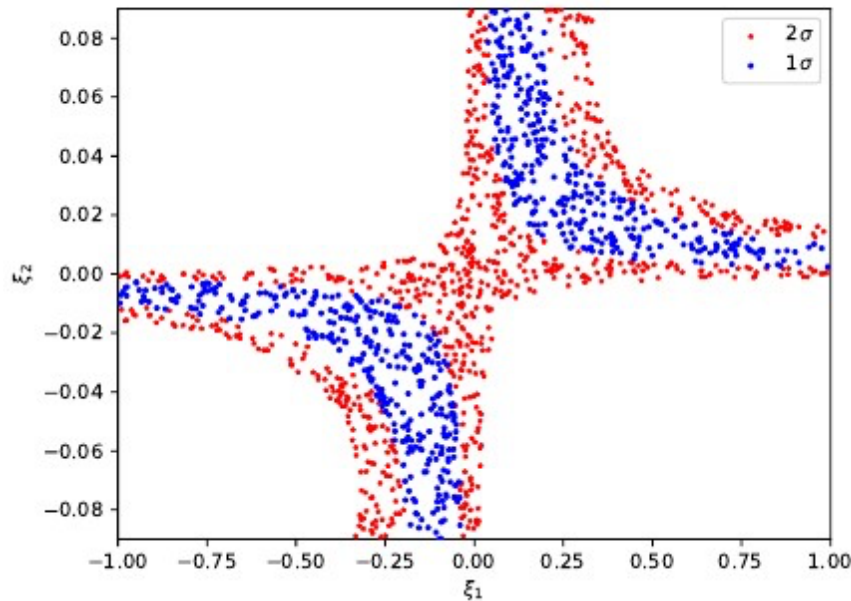


Figure 6. Parametric space of (ξ_1, ξ_2) for the exponential coupling. Blue (blue + red) dots mark pairs within the $1\sigma(2\sigma)$ ACT region for $N_k=60$.

Conclusion

The ACT DR6 data release has significantly shifted the observational landscape of inflationary cosmology. The joint Planck + ACT analysis yields

$$n_s = 0.9743 \pm 0.0034$$

a value notably higher than the Planck 2018 central value of

$$n_s = 0.9649 \pm 0.0042.$$

This upward shift has pushed several long-favoured inflationary models to or beyond the 2σ boundary of the $r - n_s$ plane. The Starobinsky model and the wider class of α -attractor potentials, which had been in excellent agreement with Planck, are now effectively disfavoured by ACT. The situation calls for either identifying potentials that naturally accommodate the higher n_s within standard gravity or embedding known potentials in modified-gravity frameworks in which the additional dynamics can reconcile the predictions with the new data.

We have pursued both routes. In the first, the Power-Law Plateau (PLP) potential was studied within standard Einstein gravity. The model predictions fall within the 1σ ACT contour across a wide range of the free parameters n and q . In particular, for $n=2$ the model remains inside the 1σ boundary across the entire range

$$q \in [2, 25]$$

for both $N_k=55$ and $N_k=65$, while for $n=1$ the 1σ -compatible range extends up to

$$q = 9.5(N_k = 65)$$

and

$$q = 6.35(N_k = 55).$$

Higher e-folds consistently widen the allowed parameter space, and the SUSY-motivated case $n=2$ proves particularly robust. In the second approach, the Starobinsky potential was embedded within EGB gravity using two distinct GB coupling functions. For the tanh coupling with

$$\xi_1 = 1, \xi_2 = 0.006$$

the model gives

$$n_s = 0.974, r = 0.0044$$

for $N_k=60$, well within the 1σ ACT contour, with the acceptable range

$$0.002 < \xi_2 < 0.01$$

for $\xi_1=1$. For the exponential coupling, the 1σ constraint is satisfied in the range

$$1.3 < \xi_1 < 2.1$$

at fixed $\xi_2=1$. The running of the spectral index was also computed,

$$\alpha_s \simeq -5 \times 10^{-3}$$

for the tanh coupling and

$$\alpha_s \simeq -3.85 \times 10^{-3}$$

for the exponential coupling, both consistent with the ACT n_s - α_s contour. The GB coupling thus rescues the Starobinsky potential from observational exclusion without any fine-tuning of the potential itself.

Taken together, the results confirm that the tension between standard plateau-type models and ACT data can be resolved through careful model building, either by choosing a potential with sufficient parameter freedom in standard gravity or by embedding a disfavoured potential within a well-motivated modified-gravity framework.

Acknowledgments

MS is supported by the Science and Engineering Research Board (SERB), DST, Government of India, under the grant agreement number CRG/2022/004120 (Core Research Grant). MS is also partially supported by the Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan, Grant No. 0118RK00935.

The contribution of the authors

Yogesh performed the analytical and numerical investigations, prepared the figures, and wrote the manuscript.

Abolhassan Mohammadi contributed to the theoretical development of the inflationary models, analysis of the results, and manuscript revision.

M. Sami conceived and supervised the research project, coordinated the study, contributed to the interpretation of the results.

All authors discussed the results and approved the final version of the manuscript.

References

1. D. Baumann, Inflation, in Theoretical Advanced Study Institute in Elementary Particle Physics: Physics of the Large and the Small, pp. 523–686 (2011). arXiv:0907.5424
2. A. H. Guth and S. Y. Pi, Fluctuations in the New Inflationary Universe, Phys. Rev. Lett. 49, 1110 (1982).
3. A. D. Linde, Chaotic Inflation, Phys. Lett. B 129, 177 (1983).
4. A. A. Starobinsky, Dynamics of Phase Transition in the New Inflationary Universe Scenario and Generation of Perturbations, Phys. Lett. B 117, 175 (1982).
5. V. F. Mukhanov and G. V. Chibisov, Quantum Fluctuations and a Nonsingular Universe, JETP Lett. 33, 532 (1981).
6. P. Franche, R. Gwyn, B. Underwood, and A. Wissanji, Initial Conditions for Non-Canonical Inflation, Phys. Rev. D82, 063528 (2010). arXiv:1002.2639.
7. D. Bessada, W. H. Kinney, and K. Tzirakis, Inflationary potentials in DBI models, JCAP 0909, 031. arXiv:0907.1311.
8. A. Berera, Warm inflation, Physical Review Letters 75, 3218 (1995).
9. H. Sheikhahmadi, A. Mohammadi, A. Aghamohammadi, T. Harko, R. Herrera, C. Corda, A. Abebe, and K. Saaidi, Constraining chameleon field driven warm inflation with Planck 2018 data, Eur. Phys. J. C79, 1038 (2019). arXiv:1907.10966 [gr-qc].
10. A. Mohammadi, K. Saaidi, and T. Golanbari, Tachyon constant-roll inflation, Phys. Rev. D 97, 083006 (2018). arXiv:1801.03487 [hep-ph].
11. H. Motohashi, A. A. Starobinsky, and J. Yokoyama, Inflation with a constant rate of roll, JCAP 1509, 018. arXiv:1411.5021 [astro-ph.CO].

12. A. Mohammadi, T. Golanbari, and K. Saaidi, Betafunction formalism for k-essence constant-roll inflation, *Phys. Dark Univ.* 28, 100505 (2020). arXiv:1912.0700[gr-qc].
13. P. A. R. Ade et al. (Planck), Planck 2015 results. XX. Constraints on inflation, *Astron. Astrophys.* 594, A20 (2016). arXiv:1502.02114 [astro-ph.CO].
14. Y. Akrami et al. (Planck), Planck 2018 results. X. Constraints on inflation, *Astron. Astrophys.* 641, A10 (2020). arXiv:1807.06211 [astro-ph.CO].
15. Y. Akrami et al. (Planck), Planck 2018 results. X. Constraints on inflation, *Astron. Astrophys.* 641, A10 (2020). arXiv:1807.06211 [astro-ph.CO].
16. T. Louis et al. (ACT), The Atacama Cosmology Telescope: DR6 Power Spectra, Likelihoods and Λ CDM Parameters, arXiv preprint (2025). arXiv:2503.14452 [astro-ph.CO].
17. E. Calabrese et al. (ACT), The Atacama Cosmology Telescope: DR6 Constraints on Extended Cosmological Models, arXiv preprint N/A, N/A (2025). arXiv:2503.14454 [astro-ph.CO].
18. A. A. Starobinsky, A New Type of Isotropic Cosmological Models Without Singularity, *Phys. Lett. B* 91, 99 (1980).
19. K. Dimopoulos, Shaft Inflation, *Phys. Lett. B* 735, 75 (2014). arXiv:1403.4071 [hep-ph].
20. K. Dimopoulos and C. Owen, Modelling inflation with a power-law approach to the inflationary plateau, *Phys. Rev. D* 94, 063518 (2016). arXiv:1607.02469 [hep-ph].
21. A. Mohammadi, Yogesh, and A. Wang, Power law plateau inflation and primordial gravitational waves in the light of ACT, *Phys. Lett. B* 872, 140054 (2026). arXiv:2507.06544 [astro-ph.CO].
22. S. Kawai and J. Soda, Evolution of fluctuations during graceful exit in string cosmology, *Phys. Lett. B* 460, 41 (1999). arXiv:gr-qc/9903017.
23. S. Tsujikawa and M. Sami, String-inspired cosmology: Late time transition from scaling matter era to dark energy universe caused by a Gauss-Bonnet coupling, *JCAP* 01, 006. arXiv:hep-th/0608178.
24. Z.-K. Guo and D. J. Schwarz, Power spectra from aninflaton coupled to the Gauss-Bonnet term, *Phys. Rev. D* 80, 063523 (2009). arXiv:0907.0427 [hep-th].
25. Z.-K. Guo and D. J. Schwarz, Slow-roll inflation with a Gauss-Bonnet correction, *Phys. Rev. D* 81, 123520 (2010). arXiv:1001.1897 [hep-th].
26. S. Koh, B.-H. Lee, and G. Tumurtushaa, Reconstruction of the Scalar Field Potential in Inflationary Models with a Gauss-Bonnet term, *Phys. Rev. D* 95, 123509 (2017). arXiv:1610.04360 [gr-qc]; Yogesh, A. Mohammadi, Q. Wu, and T. Zhu, Starobinsky like inflation and EGB Gravity in the light of ACT, (2025). arXiv:2505.05363 [astro-ph.CO].
27. Yogesh and A. Mohammadi, Nonstandard Thermal History and Formation of Primordial Black Holes and SIGWs in Einstein–Gauss–Bonnet Gravity, *Astrophys. J.* 986, 35 (2025). arXiv:2501.01867 [gr-qc].
28. P. A. R. Ade et al. (Planck), Planck 2013 results. XXII. Constraints on inflation, *Astron. Astrophys.* 571, A22 (2014). arXiv:1303.5082 [astro-ph.CO].
29. S. Coleman and J. Mandula, All possible symmetries of the s matrix, *Phys. Rev.* 159, 1251 (1967).
30. I. Antoniadis, J. Rizos, and K. Tamvakis, Singularity - free cosmological solutions of the superstring effective action, *Nucl. Phys. B* 415, 497 (1994). arXiv:hep-th/9305025.
31. S. Kawai, M.-a. Sakagami, and J. Soda, Instability of one loop superstring cosmology, *Phys. Lett. B* 437, 284 (1998). arXiv:gr-qc/9802033.
32. G. Cognola, E. Elizalde, S. Nojiri, S. Odintsov, and S. Zerbini, String-inspired Gauss-Bonnet gravity reconstructed from the universe expansion history and yielding the transition from matter dominance to dark energy, *Phys. Rev. D* 75, 086002 (2007). arXiv:hep-th/0611198.
33. R. Kallosh and A. Linde, Superconformal generalization of the chaotic inflation model $\lambda^4 \phi^4 - 2 \xi \phi^2 R$, *JCAP* 06, 027. arXiv:1306.3211 [hep-th].
34. F. L. Bezrukov and M. Shaposhnikov, The Standard Model Higgs boson as the inflaton, *Phys. Lett. B* 659, 703 (2008). arXiv:0710.3755 [hep-th].
35. I. D. Gialamas, A. Karam, A. Lykkas, and T. D. Pappas, Palatini-Higgs inflation with nonminimal derivative coupling, *Phys. Rev. D* 102, 063522 (2020). arXiv:2008.06371 [gr-qc].
36. I. D. Gialamas, A. Karam, T. D. Pappas, and E. Tomberg, Implications of Palatini gravity for inflation and beyond, *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* 20, 2330007 (2023). arXiv:2303.14148 [gr-qc].
37. J. Kim, Z. Yang, and Y.-l. Zhang, Gravitational wave signatures of preheating in Higgs-R2 inflation, *Phys. Rev. D* 112, 043534 (2025). arXiv:2503.16907 [astro-ph.CO].

38. Q. Wu, T. Zhu, and A. Wang, Primordial Spectra of slow-roll inflation at second-order with the GaussBonnet correction, Phys. Rev. D 97, 103502 (2018). arXiv:1707.08020 [gr-qc].
39. E. O. Pozdeeva, M. R. Gangopadhyay, M. Sami, A. V. Toporensky, and S. Y. Vernov, Inflation with a quartic potential in the framework of Einstein-GaussBonnet gravity, Phys. Rev. D 102, 043525 (2020). arXiv:2006.08027 [gr-qc].
40. E. O. Pozdeeva, M. A. Skugoreva, A. V. Toporensky, and S. Y. Vernov, New slow-roll approximations for inflation in Einstein-Gauss-Bonnet gravity, JCAP 09, 050. arXiv:2403.06147 [gr-qc].
41. E. O. Pozdeeva, Generalization of cosmological attractor approach to Einstein–Gauss–Bonnet gravity, Eur. Phys. J. C 80, 612 (2020). arXiv:2005.10133 [gr-qc].
42. P.-X. Jiang, J.-W. Hu, and Z.-K. Guo, Inflation coupled to a Gauss-Bonnet term, Phys. Rev. D 88, 123508 (2013). arXiv:1310.5579 [hep-th].
43. Z. Yi, Y. Gong, and M. Sabir, Inflation with GaussBonnet coupling, Phys. Rev. D 98, 083521 (2018). arXiv:1804.09116 [gr-qc].
44. S. D. Odintsov and V. K. Oikonomou, Viable Inflation in Scalar-Gauss-Bonnet Gravity and Reconstruction from Observational Indices, Phys. Rev. D 98, 044039 (2018). arXiv:1808.05045 [gr-qc].
45. K. Kleidis and V. K. Oikonomou, A Study of an Einstein Gauss-Bonnet Quintessential Inflationary Model, Nucl. Phys. B 948, 114765 (2019). arXiv:1909.05318 [gr-qc].
46. N. Rashidi and K. Nozari, Gauss-Bonnet Inflation after Planck2018, Astrophys. J. 890, 58 (2020). arXiv:2001.07012 [astro-ph.CO].
47. S. Kawai and J. Kim, Primordial black holes from GaussBonnet-corrected single field inflation, Phys. Rev. D 104, 083545 (2021). arXiv:2108.01340 [astro-ph.CO].
48. A. Ashrafzadeh and K. Karami, Primordial Black Holes in Scalar Field Inflation Coupled to the Gauss–Bonnet Term with Fractional Power-law Potentials, Astrophys. J. 965, 11 (2024). arXiv:2309.16356 [astro-ph.CO].
49. E. O. Pozdeeva, M. Sami, A. V. Toporensky, and S. Y. Vernov, Stability analysis of de Sitter solutions in models with the Gauss-Bonnet term, Phys. Rev. D 100, 083527 (2019). arXiv:1905.05085 [gr-qc].
50. S. Vernov and E. Pozdeeva, De Sitter Solutions in Einstein–Gauss–Bonnet Gravity, Universe 7, 149 (2021). arXiv:2104.11111 [gr-qc].

Yogesh^{1*}, Abolhassan Mohammadi², M. Sami³

¹Чжэцзянский технологический университет, Ханчжоу, Китай

²Хунаньский технологический институт, Хэнъян, Китай

³Университета SGT, Гуруграм, Харьяна, Индия

(E-mail: yogeshjmi@gmail.com, abolhassann@hnit.edu.cn, samijamia@gmail.com)

Инфляция и АСТ DR6

Аннотация. Недавние результаты, полученные с помощью Atacama Cosmology Telescope (ACT DR6), сместили предпочтительное значение скалярного спектрального индекса до $n_s = 0.9743 \pm 0.0034$, что привело к тому, что несколько хорошо известных инфляционных моделей, включая модель Старобинского, оказались близки к границе 2σ на плоскости $r - n_s$. Мотивированные данным противоречием, мы исследуем два различных подхода для согласования инфляционных предсказаний с последними наблюдательными данными АСТ. Во-первых, мы изучаем инфляционный потенциал степенного плато (power-law plateau) в рамках стандартной гравитации Эйнштейна и показываем, что он естественным образом предсказывает значения n_s и r , лежащие в пределах области доверия АСТ уровня 1σ для широкого диапазона параметров модели. Во-вторых, мы рассматриваем потенциал Старобинского в рамках гравитации Эйнштейна–Гаусса–Бонне, где неминимальная связь между инфлатоном и инвариантом Гаусса–Бонне существенно изменяет инфляционную динамику. Мы показываем, что как гиперболическая тангенциальная, так и экспоненциальная функции связи успешно смещают предсказания модели в допустимую область АСТ уровня 1σ . Кроме того, в обоих сценариях предсказанное значение бегущего скалярного спектрального индекса полностью согласуется с ограничениями АСТ на плоскости $n_s - \alpha_s$, обеспечивая жизнеспособные альтернативы, совместимые с современными космологическими наблюдениями.

Ключевые слова: космология, гравитация Эйнштейна–Гаусса–Бонне, потенциал Старобинского, инфляционная модель, инфлатон.

Yogesh^{1*}, Abolhassan Mohammadi², M. Sami³

¹Чжэцзян технологиялық университеті, Ханчжоу, Қытай

²Хунань технологиялық институты, Хэнъян, Қытай

³SGT университеті, Гуруграм, Харьяна, Үндістан

(E-mail: yogeshjmi@gmail.com, abolhassann@hnit.edu.cn, samijamia@gmail.com)

Инфляция және АСТ DR6

Аңдатпа. Atacama Cosmology Telescope (АСТ DR6) телескопының соңғы нәтижелері скалярлық спектрлік индекстің қолайлы мәнін $n_s = 0.9743 \pm 0.0034$ деңгейіне дейін ығыстырды, нәтижесінде Старобинский моделі сияқты кеңінен танылған бірнеше инфляциялық модельдер $r - n_s$ жазықтығындағы 2σ шекарасына жақындады. Осы қайшылыққа байланысты біз инфляциялық болжамдарды АСТ-тің соңғы бақылау деректерімен сәйкестендірудің екі түрлі тәсілін зерттейміз. Біріншіден, біз стандартты Эйнштейн гравитациясы аясындағы дәрежелік плато (power-law plateau) инфляциялық потенциалын қарастырамыз және оның модель параметрлерінің кең ауқымы үшін АСТ-тің 1σ сенімділік аймағында орналасқан n_s және r мәндерін табиғи түрде болжайтынын көрсетеміз. Екіншіден, біз Старобинский потенциалын Эйнштейн–Гаусс–Бонне гравитациясы аясында қарастырамыз, мұнда инфлатон мен Гаусс–Бонне инварианты арасындағы бейминималды байланыс инфляциялық динамиканы елеулі түрде өзгертеді. Біз гиперболалық тангенс те, экспоненциалдық байланыс функциялары да модель болжамдарын АСТ-тің рұқсат етілген 1σ аймағына сәтті жылжытатынын көрсетеміз. Сонымен қатар, екі сценарийде де скалярлық спектрлік индекстің жүгіруінің болжанған мәні АСТ-тің $n_s - \alpha_s$ шектеулерімен толық сәйкес келеді, осылайша қазіргі космологиялық бақылаулармен үйлесетін өміршең балама модельдерді ұсынады.

Түйін сөздер: космология, Эйнштейн–Гаусс–Бонне гравитациясы, Старобинский потенциалы, инфляциялық модель, инфлатон.

References

1. D. Baumann, Inflation, in Theoretical Advanced Study Institute in Elementary Particle Physics: Physics of the Large and the Small, pp. 523–686 (2011). arXiv:0907.5424
2. A. H. Guth and S. Y. Pi, Fluctuations in the New Inflationary Universe, Phys. Rev. Lett. 49, 1110 (1982).
3. A. D. Linde, Chaotic Inflation, Phys. Lett. B 129, 177 (1983).
4. A. A. Starobinsky, Dynamics of Phase Transition in the New Inflationary Universe Scenario and Generation of Perturbations, Phys. Lett. B 117, 175 (1982).
5. V. F. Mukhanov and G. V. Chibisov, Quantum Fluctuations and a Nonsingular Universe, JETP Lett. 33, 532 (1981).
6. P. Franche, R. Gwyn, B. Underwood, and A. Wissanji, Initial Conditions for Non-Canonical Inflation, Phys. Rev. D 82, 063528 (2010). arXiv:1002.2639.
7. D. Bessada, W. H. Kinney, and K. Tzirakis, Inflationary potentials in DBI models, JCAP 0909, 031. arXiv:0907.1311.
8. A. Berera, Warm inflation, Physical Review Letters 75, 3218 (1995).
9. H. Sheikahmadi, A. Mohammadi, A. Aghamohammadi, T. Harko, R. Herrera, C. Corda, A. Abebe, and K. Saaidi, Constraining chameleon field driven warm inflation with Planck 2018 data, Eur. Phys. J. C 79, 1038 (2019). arXiv:1907.10966 [gr-qc].
10. A. Mohammadi, K. Saaidi, and T. Golanbari, Tachyon constant-roll inflation, Phys. Rev. D 97, 083006 (2018). arXiv:1801.03487 [hep-ph].
11. H. Motohashi, A. A. Starobinsky, and J. Yokoyama, Inflation with a constant rate of roll, JCAP 1509, 018. arXiv:1411.5021 [astro-ph.CO].
12. A. Mohammadi, T. Golanbari, and K. Saaidi, Betafunction formalism for k-essence constant-roll inflation, Phys. Dark Univ. 28, 100505 (2020). arXiv:1912.0700[gr-qc].
13. P. A. R. Ade et al. (Planck), Planck 2015 results. XX. Constraints on inflation, Astron. Astrophys. 594, A20 (2016). arXiv:1502.02114 [astro-ph.CO].

14. Y. Akrami et al. (Planck), Planck 2018 results. X. Constraints on inflation, *Astron. Astrophys.* 641, A10 (2020). arXiv:1807.06211 [astro-ph.CO].
15. Y. Akrami et al. (Planck), Planck 2018 results. X. Constraints on inflation, *Astron. Astrophys.* 641, A10 (2020). arXiv:1807.06211 [astro-ph.CO].
16. T. Louis et al. (ACT), The Atacama Cosmology Telescope: DR6 Power Spectra, Likelihoods and Λ CDM Parameters, arXiv preprint (2025). arXiv:2503.14452 [astro-ph.CO].
17. E. Calabrese et al. (ACT), The Atacama Cosmology Telescope: DR6 Constraints on Extended Cosmological Models, arXiv preprint N/A, N/A (2025). arXiv:2503.14454 [astro-ph.CO].
18. A. A. Starobinsky, A New Type of Isotropic Cosmological Models Without Singularity, *Phys. Lett. B* 91, 99 (1980).
19. K. Dimopoulos, Shaft Inflation, *Phys. Lett. B* 735, 75 (2014). arXiv:1403.4071 [hep-ph].
20. K. Dimopoulos and C. Owen, Modelling inflation with a power-law approach to the inflationary plateau, *Phys. Rev. D* 94, 063518 (2016). arXiv:1607.02469 [hep-ph].
21. A. Mohammadi, Yogesh, and A. Wang, Power law plateau inflation and primordial gravitational waves in the light of ACT, *Phys. Lett. B* 872, 140054 (2026). arXiv:2507.06544 [astro-ph.CO].
22. S. Kawai and J. Soda, Evolution of fluctuations during graceful exit in string cosmology, *Phys. Lett. B* 460, 41 (1999). arXiv:gr-qc/9903017.
23. S. Tsujikawa and M. Sami, String-inspired cosmology: Late time transition from scaling matter era to dark energy universe caused by a Gauss-Bonnet coupling, *JCAP* 01, 006. arXiv:hep-th/0608178.
24. Z.-K. Guo and D. J. Schwarz, Power spectra from an inflaton coupled to the Gauss-Bonnet term, *Phys. Rev. D* 80, 063523 (2009). arXiv:0907.0427 [hep-th].
25. Z.-K. Guo and D. J. Schwarz, Slow-roll inflation with a Gauss-Bonnet correction, *Phys. Rev. D* 81, 123520 (2010). arXiv:1001.1897 [hep-th].
26. S. Koh, B.-H. Lee, and G. Tumurtushaa, Reconstruction of the Scalar Field Potential in Inflationary Models with a Gauss-Bonnet term, *Phys. Rev. D* 95, 123509 (2017). arXiv:1610.04360 [gr-qc]; Yogesh, A. Mohammadi, Q. Wu, and T. Zhu, Starobinsky like inflation and EGB Gravity in the light of ACT, (2025). arXiv:2505.05363 [astro-ph.CO].
27. Yogesh and A. Mohammadi, Nonstandard Thermal History and Formation of Primordial Black Holes and SIGWs in Einstein-Gauss-Bonnet Gravity, *Astrophys. J.* 986, 35 (2025). arXiv:2501.01867 [gr-qc].
28. P. A. R. Ade et al. (Planck), Planck 2013 results. XXII. Constraints on inflation, *Astron. Astrophys.* 571, A22 (2014). arXiv:1303.5082 [astro-ph.CO].
29. S. Coleman and J. Mandula, All possible symmetries of the s matrix, *Phys. Rev.* 159, 1251 (1967).
30. I. Antoniadis, J. Rizos, and K. Tamvakis, Singularity - free cosmological solutions of the superstring effective action, *Nucl. Phys. B* 415, 497 (1994). arXiv:hep-th/9305025.
31. S. Kawai, M.-a. Sakagami, and J. Soda, Instability of one loop superstring cosmology, *Phys. Lett. B* 437, 284 (1998). arXiv:gr-qc/9802033.
32. G. Cognola, E. Elizalde, S. Nojiri, S. Odintsov, and S. Zerbini, String-inspired Gauss-Bonnet gravity reconstructed from the universe expansion history and yielding the transition from matter dominance to dark energy, *Phys. Rev. D* 75, 086002 (2007). arXiv:hep-th/0611198.
33. R. Kallosh and A. Linde, Superconformal generalization of the chaotic inflation model $\lambda^4 \phi^4 - 2 \xi \phi^2 R$, *JCAP* 06, 027. arXiv:1306.3211 [hep-th].
34. F. L. Bezrukov and M. Shaposhnikov, The Standard Model Higgs boson as the inflaton, *Phys. Lett. B* 659, 703 (2008). arXiv:0710.3755 [hep-th].
35. I. D. Gialamas, A. Karam, A. Lykkas, and T. D. Pappas, Palatini-Higgs inflation with nonminimal derivative coupling, *Phys. Rev. D* 102, 063522 (2020). arXiv:2008.06371 [gr-qc].
36. I. D. Gialamas, A. Karam, T. D. Pappas, and E. Tomberg, Implications of Palatini gravity for inflation and beyond, *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* 20, 2330007 (2023). arXiv:2303.14148 [gr-qc].
37. J. Kim, Z. Yang, and Y.-l. Zhang, Gravitational wave signatures of preheating in Higgs-R2 inflation, *Phys. Rev. D* 112, 043534 (2025). arXiv:2503.16907 [astro-ph.CO].
38. Q. Wu, T. Zhu, and A. Wang, Primordial Spectra of slow-roll inflation at second-order with the GaussBonnet correction, *Phys. Rev. D* 97, 103502 (2018). arXiv:1707.08020 [gr-qc].

39. E. O. Pozdeeva, M. R. Gangopadhyay, M. Sami, A. V. Toporensky, and S. Y. Vernov, Inflation with a quartic potential in the framework of Einstein-GaussBonnet gravity, *Phys. Rev. D* 102, 043525 (2020). arXiv:2006.08027 [gr-qc].
40. E. O. Pozdeeva, M. A. Skugoreva, A. V. Toporensky, and S. Y. Vernov, New slow-roll approximations for inflation in Einstein-Gauss-Bonnet gravity, *JCAP* 09, 050. arXiv:2403.06147 [gr-qc].
41. E. O. Pozdeeva, Generalization of cosmological attractor approach to Einstein-Gauss-Bonnet gravity, *Eur. Phys. J. C* 80, 612 (2020). arXiv:2005.10133 [gr-qc].
42. P.-X. Jiang, J.-W. Hu, and Z.-K. Guo, Inflation coupled to a Gauss-Bonnet term, *Phys. Rev. D* 88, 123508 (2013). arXiv:1310.5579 [hep-th].
43. Z. Yi, Y. Gong, and M. Sabir, Inflation with GaussBonnet coupling, *Phys. Rev. D* 98, 083521 (2018). arXiv:1804.09116 [gr-qc].
44. S. D. Odintsov and V. K. Oikonomou, Viable Inflation in Scalar-Gauss-Bonnet Gravity and Reconstruction from Observational Indices, *Phys. Rev. D* 98, 044039 (2018). arXiv:1808.05045 [gr-qc].
45. K. Kleidis and V. K. Oikonomou, A Study of an Einstein Gauss-Bonnet Quintessential Inflationary Model, *Nucl. Phys. B* 948, 114765 (2019). arXiv:1909.05318 [gr-qc].
46. N. Rashidi and K. Nozari, Gauss-Bonnet Inflation after Planck2018, *Astrophys. J.* 890, 58 (2020). arXiv:2001.07012 [astro-ph.CO].
47. S. Kawai and J. Kim, Primordial black holes from GaussBonnet-corrected single field inflation, *Phys. Rev. D* 104, 083545 (2021). arXiv:2108.01340 [astro-ph.CO].
48. A. Ashrafzadeh and K. Karami, Primordial Black Holes in Scalar Field Inflation Coupled to the Gauss-Bonnet Term with Fractional Power-law Potentials, *Astrophys. J.* 965, 11 (2024). arXiv:2309.16356 [astro-ph.CO].
49. E. O. Pozdeeva, M. Sami, A. V. Toporensky, and S. Y. Vernov, Stability analysis of de Sitter solutions in models with the Gauss-Bonnet term, *Phys. Rev. D* 100, 083527 (2019). arXiv:1905.05085 [gr-qc].
50. S. Vernov and E. Pozdeeva, De Sitter Solutions in Einstein-Gauss-Bonnet Gravity, *Universe* 7, 149 (2021). arXiv:2104.11111 [gr-qc].

Information about the authors:

Yogesh — PhD, Institute for Theoretical Physics and Cosmology, Zhejiang University of Technology, Hangzhou, China.

Abolhassan Mohammadi — PhD, Professor, School of Physics, Hunan Institute of Technology, Hengyang, China.

M. Sami — Professor, Director of the Centre for Cosmology and Science Popularization (CCSP), SGT University, Gurugram, Haryana, India.

Yogesh — PhD, Институт теоретической физики и космологии, Чжэцзянский технологический университет, Ханчжоу, Китай.

Abolhassan Mohammadi — PhD, Профессор, Школа физики, Хунаньский технологический институт, Хэнъян, Китай.

M. Sami — директор Центра космологии и популяризации науки (CCSP) Университета SGT, Гуруграм, Харьяна, Индия.

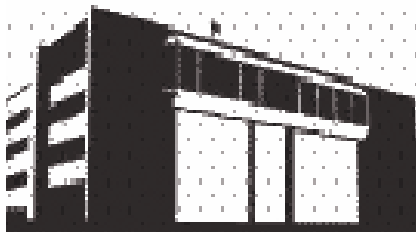
Yogesh — PhD, Теориялық физика және космология институты, Чжэцзян технологиялық университеті, Ханчжоу, Қытай.

Abolhassan Mohammadi — PhD, Физика мектебінің профессоры, Хунань технологиялық институты, Хэнъян, Қытай.

M. Sami — профессор, Космология және ғылымды дәріптеу орталығының (CCSP) директоры, SGT университеті, Гуруграм, Харьяна, Үндістан.



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 41.29.25
Научная статья

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2026-155-2-25-35>

Космологические параметры $F(R, X, \phi)$ - гравитационной модели

Ержанов К.К , **Бауыржан Г.*** , **Нурлан Э.** , **Зарлыков Д.Б.**

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

E-mail: yerzhanovkk@gmail.com, bauyrzhan.g.b@gmail.com, enurlan.edu@gmail.com, daniyal210406@gmail.com

Аннотация. В данной работе исследуется расширенная модифицированная теория гравитации типа $F(R, X, \phi)$, применённая к однородно-изотропной метрике Фридмана–Робертсона–Уокера. На основе полученных полевых уравнений выполнен анализ космологической динамики модели, учитывающей вклад скалярного поля и дополнительных геометрических инвариантов. Для поиска аналитических решений использованы методы симметрий и дополнительные условия типа уравнения Монжа–Ампера, позволяющие существенно упростить систему нелинейных дифференциальных уравнений. Получены решения для различных классов лагранжианов, включая случаи, приводящие к инфляционным режимам расширения Вселенной. Показано, что при определённых значениях параметров модель допускает режим ($\dot{H}=0$), соответствующий квазиде-ситтеровскому расширению и устойчивому инфляционному аттрактору. Для исследования динамики применено приближение медленного скатывания Хаббла, позволяющее избежать ограничений стандартного потенциального подхода. Проведён численный анализ эволюции параметров модели и получена система обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающая поведение скалярного поля и параметра Хаббла. Выполнено сравнение теоретических результатов с наблюдательными данными миссии Planck 2018, включая постоянную Хаббла (H_0), параметры плотности материи и тёмной энергии (Ω_m) и (Ω_Λ), спектральный индекс (n_s), амплитуду первичных скалярных возмущений (A_s), а также отношение тензорных и скалярных мод (r). Показано, что модель $F(R, X, \phi)$ обеспечивает согласие с современными космологическими наблюдениями, воспроизводит наблюдаемый наклон спектра первичных флуктуаций и приводит к подавлению тензорных возмущений. Полученные результаты подтверждают физическую состоятельность и наблюдательную совместимость рассматриваемой модифицированной гравитационной модели.

Ключевые слова: модифицированная теория гравитации, уравнение Монжа–Ампера, инфляция, постоянная Хаббла, тёмная энергия, спектральный индекс.

Поступила 3.06.2026. После доработки 9.06.2026. Принята к печати 9.06.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

*автор для корреспонденции

Введение

Комплексным описанием является включение в космологическую модель различных полей, например скалярного поля ϕ . В данной работе для обобщения влияния скалярного поля используется модель k -эссенции с плотностью Лагранжиана в общей форме $L=F(\phi, X)$ [Copeland et al. 2006, De Putter et al. 2007], основанная на модели k -инфляции [1-5].

Исторически для анализа инфляционной динамики использовалось "приближение медленного скатывания по потенциалу" (PSRA). Такой подход жестко привязан к форме потенциала $V(\phi)$ и теряет точность при завершении инфляции. Это создает неопределенность при расчете спектральных характеристик, измеряемых спутниками Planck. В качестве альтернативы используется "приближение медленного скатывания Хаббла" (HSRA), основанное на уравнениях Гамильтона — Якоби. В этом формализме параметр Хаббла H рассматривается как функция от ϕ , что делает условия инфляции независимыми от вида потенциала. Центральным элементом здесь является концепция инфляционного аттрактора — режима, при котором система выходит на устойчивую траекторию. Это позволяет построить строгую иерархию параметров для описания эволюции Вселенной через точные динамические переменные.

Непосредственно сама динамика фонового расширения в пространственно-плоской метрике Фридмана — Леметра — Робертсона — Уокера (FLRW) задается системой уравнений Клейна — Гордона и Фридмана:

$$\ddot{\phi} + 3H\dot{\phi} + V_{\phi} = 0, \quad \frac{1}{2}\dot{\phi}^2 + V(\phi) = 3H^2 \tag{1.1}$$

Доминирование потенциальной энергии инфлатона $V(\phi)$ над кинетической энергией $\frac{1}{2}\dot{\phi}^2$ обеспечивает режим квази-де-ситтеровского расширения. Переход к строгой динамической иерархии параметров Хаббла позволяет исключить упрощения потенциального приближения (PSRA), такие как

$$\frac{1}{2}\dot{\phi}^2 \ll V(\phi), \quad |\ddot{\phi}| \ll |3H\dot{\phi}| \tag{1.2}$$

которые перестают быть точными к моменту завершения инфляции. Вместо этого вводится последовательность безразмерных величин ϵ_n , определяющих эволюцию расширения через временные производные функции Хаббла. Первый параметр этой иерархии ϵ_1 связан с кинетической энергией поля и скоростью изменения H :

$$\epsilon_1 = -\frac{\dot{H}}{H^2} = \frac{\dot{\phi}^2}{2H^2} \tag{2}$$

Для описания эволюции инфляционной траектории используется рекуррентное соотношение, определяющее каждый последующий параметр через производную предыдущего по числу N -фолдов:

$$\epsilon_{n+1} = \frac{\dot{\epsilon}_n}{H\epsilon_n} = \frac{d \ln \epsilon_n}{dN} \tag{3}$$

Модель $F(R, T, X, \phi)$

$$S = \int d^4x \sqrt{-g} [F(R, T, X) + L_m] \tag{4}$$

$$R = 6 \left(\dot{H} \middle| 2H^2 \right) \tag{5}$$

$$T = 6H^2 \tag{6}$$

Решение для случаев $F(R, T, X, \phi)$ и $F(R, X, \phi)$ выглядит одинаково. Таким образом, из системы уравнений для R^2 , T^2 и X^2 имеем два решения. Первое решение — линейное уравнение

$$F = s_1(\phi)R s_2(\phi)T s_3(\phi)X s_4(\phi),$$

при условии

$$F_{RR} = F_{RT} = F_{RX} = 0.$$

Кроме того, для второго варианта нелинейного решения мы нашли, что

$$\alpha_R = \alpha_T = \alpha_X = 0.$$

Из уравнений для \dot{R} , \dot{T} и \dot{X} имеем следующую систему уравнений:

$$\frac{\varepsilon_R}{F_{RR}} = \frac{\varepsilon_T}{F_{RT}} = \frac{\varepsilon_X}{F_{RX}} = \frac{6a\phi}{aF_X} \quad (7)$$

Последнюю систему уравнений можно преобразовать в другую форму для $F(R, T, X, \phi)$ как

$$\begin{aligned} F_{RR}R_{XT} &= F_{RT}R_{RX}, \\ F_{TT}R_{XX} &= F_{TX}R_{XT}, \\ F_{RR}R_{XX} &= F_{RX}^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Последнее уравнение здесь — однородное уравнение Монжа–Ампера, но без зависимости от T . Теперь объединим уравнения для \dot{R} , \dot{T} и \dot{X} как:

$$Z(a, \phi)_R + Z(a, \phi)_T + Z(a, \phi)_X = 0 \quad (9)$$

где

$$\left(a, \phi\right)_R = \left(2a \left| a \frac{\partial \phi}{\partial a} \right)\right) F_R + \beta \phi F_{RR} + \gamma a F_{RT} + \delta a F_{RX} + \varepsilon a F_{R\phi} \quad (10)$$

С использованием (a^2) можно вывести дополнительное уравнение Монжа–Ампера

$$F_{RR}F_{TT} = F_{RT}^2.$$

Результат решения уравнений Монжа–Ампера с единственной произвольной функцией следующий:

$$\begin{aligned} F &= f((C_1(\phi)R + C_2(\phi)T + C_3(\phi)X)\phi) + C_4(\phi)R + C_5(\phi)T + \\ &+ C_6(\phi)X + C_7(\phi) \end{aligned} \quad (11)$$

где $(C_1', C_2', C_3', C_4', C_5', C_6', C_7')$ являются функциями ϕ . Другое решение — это решение, включающее произвольные константы:

$$F = f((C_1(\phi)R + C_2(\phi)T + C_3(\phi)X)\phi) + C_4(\phi)R + C_5(\phi)T + C_6(\phi)X + C_7(\phi) \quad (12)$$

Данное решение воспроизводит те же результаты, что и последние наблюдения ранней инфляции, также известной как модель Старобинского. Решение для модели $F(R, X, \phi)$ может быть найдено аналогичным образом с использованием более простого метода. При этом уравнение Монжа–Ампера выводится непосредственно и предоставляет достаточные условия для нахождения решения следующего уравнения:

$$F_{RR}F_{XX} = F_{RX}^2 \quad (13)$$

В этом случае решение с произвольными константами выглядит как

$$F = (C_8(\phi)R + C_9(\phi)X)^2 + C_{10}(\phi)R + C_{11}(\phi)X + C_{12}(\phi) \quad (14)$$

где $(C_8', C_9', C_{10}', C_{11}', C_{12}')$ являются функциями ϕ . При подстановке решения симметрий в уравнение, то уравнение примет следующий вид:

$$2C_8 \left(C_8 R + C_9 X \right) \left(a \frac{du}{da} \Big|_{6H^2} \Big|_R \Big|_u \right) + 6H \left(2_s^2 \dot{R} + 2_s \dot{X} \right) \tag{15}$$

$$+ \phi \left(2C_{8\phi} R + C_{9\phi} X \right) + 2C_{8\phi} \left(C_8 R + C_9 X \right) = 0$$

Если подставить приведённые выше выражения для R, X, то energy condition изменится следующим образом:

$$E_L = a^3 \left[\left(12C_9 C_8 \Big|_{24C_9 C_8 H^2} \Big|_{\frac{C_9}{2}} \Big|_{C_{11}} \right) \dot{\phi}^2 - \left(6C_8 H \Big|_{12C_8^2 \dot{H}} \Big|_{\frac{C_9 \dot{\phi}^2}{2}} \right)^2 - 6C_{10} \dot{H} \right.$$

$$- 12C_{10} H^2 - \frac{C_{11} \dot{\phi}^2}{2} - C_{12} + \left(12C_8^2 \dot{H} \Big|_{24C_8^2 H^2} \Big|_{C_9 C_8 \dot{\phi}^2} \Big|_{C_{10}} \right) \left(18H^2 + 6\dot{H} \right)$$

$$\left. + 72C_8^2 \ddot{H} + 288C_8^2 H^2 \dot{H} + 12C_8 C_9 \ddot{\phi} \right] \tag{16}$$

Отсюда его можно вывести через систему ОДУ, как:

$$\ddot{H} = \frac{1}{72HC_8^2} \left[18C_8 C_9 H \dot{\phi} + 42C_8 C_9 H^2 \dot{\phi}^2 + C_9^2 \dot{\phi}^4 - \frac{C_9^2 \dot{\phi}^4}{4} - \frac{C_9 \dot{\phi}^2}{2} + \frac{C_{11} \dot{\phi}^2}{2} + \right.$$

$$\left. - 6C_8 \dot{H} - 12C_8 H^2 + 36C_8^2 H^2 + 576C_8^2 H^2 \dot{H} + 288C_8^2 H^4 + 12C_8 C_9 \dot{\phi} \phi - \ddot{C}_{12} \right] \tag{17}$$

Запишем систему как

$$\ddot{H} = -\frac{1}{72C_8^2 H} \left(36C_8^2 \dot{H}^2 + 504C_8^2 H^2 \dot{H} + 288C_8^2 H^4 + 12C_8 C_9 H \dot{\phi} \ddot{\phi} + 12C_8 C_9 H \dot{\phi}^2 \right.$$

$$\left. + 30C_8 C_9 H^2 \dot{\phi}^2 + \frac{3}{4} C_9^2 \dot{\phi}^4 + 6C_{10} H^2 + \frac{1}{2} C_{11} \dot{\phi}^2 - C_{12} \right) = 0 \tag{18}$$

Используем следующие замены:

$$C(H, \phi) = 504C_8^2 H^2 + 12C_8 C_9 \dot{\phi}^2 \tag{19}$$

$$A(H, \phi) = 288C_8^2 H^4 + 12C_8 C_9 H \dot{\phi} \ddot{\phi} + 30C_8 C_9 H^2 \dot{\phi}^2 + \frac{3}{4} C_9^2 \dot{\phi}^4 + 6C_{10} H^2$$

$$+ \frac{1}{2} C_{11} \dot{\phi}^2 - C_{12} \tag{20}$$

$$\ddot{H} = -\frac{1}{72C_8^2 H} \left(36C_8^2 \dot{H}^2 + C(H, \phi) \dot{H} + A(H, \phi) \right) = 0 \tag{21}$$

Используя подстановку

$$\dot{H} = \varepsilon H^2$$

получим

$$36C_8^2 H^4 \varepsilon^2 + C(H, \phi) H^2 \varepsilon + A(H, \phi) = 0 \quad (22)$$

$$\dot{H} = \frac{-\left(504C_8^2 H^2 \mid 12C_8 C_9 \dot{\phi}^2\right) \pm \sqrt{\left(504C_8^2 H^2 \mid 12C_8 C_9 \dot{\phi}^2\right)^2 - 144C_8^2 A}}{72C_8^2} \quad (23)$$

$$\dot{\phi} = H\sqrt{2\varepsilon} \quad (24)$$

Получаем систему дифференциальных уравнений, заданных неявно:

$$\begin{aligned} \dot{\phi} &= \frac{1}{6C_8} \sqrt{-504C_8^2 H^2 + 12C_8 C_9 \dot{\phi}^2 \pm \sqrt{\left(504C_8^2 H^2 \mid 12C_8 C_9 \dot{\phi}^2\right)^2 - 144C_8^2 A}} \\ \dot{H} &= \frac{-\left(504C_8^2 H^2 \mid 12C_8 C_9 \dot{\phi}^2\right) \pm \sqrt{\left(504C_8^2 H^2 \mid 12C_8 C_9 \dot{\phi}^2\right)^2 - 144C_8^2 A}}{72C_8^2} \end{aligned} \quad (25)$$

Для корректного перехода к динамической системе первого порядка, а также с точки зрения физики ранней Вселенной, необходимо применить стандартное космологическое приближение медленного скатывания. Математически это можно выразить с помощью двух строгих неравенств:

1. Доминирование потенциальной энергии над кинетической энергией:

$$\frac{1}{2} \dot{\phi}^2 \ll V(\phi) \Rightarrow \dot{\phi}^2 \approx 0, \dot{\phi}^4 \approx 0$$

2. Пренебрежимо малое ускорение инфлатона:

$$\mid \ddot{\phi} \mid \ll \mid 3H\dot{\phi} \mid \Rightarrow \ddot{\phi} \approx 0$$

3. Введение скалярного потенциала:

$$C_{12} \rightarrow V(\phi)$$

Применение сформулированных выше условий позволяет провести асимптотическое разложение коэффициентов C и A , отбрасывая кинетические члены высших порядков как пренебрежимо малые поправки. В конечном счёте происходит упрощение функций до вида, зависящего лишь от параметра H и поля ϕ :

$$C_{SR}(H) \approx 504C_8^2 H^2, A_{SR}(H, \phi) \approx 288C_8^2 H^4 + 6C_{10} H^2 - C_{12} \quad (26)$$

Следующим шагом будет явное введение скалярного потенциала инфлатона. Свободный член C_{12} , отвечающий за статическую плотность энергии вакуума, заменяется на динамический потенциал $V(\phi)$, что позволяет исследовать эволюцию поля:

$$C_{12} \rightarrow V(\phi) = \lambda\phi^n \tag{27}$$

В рамках данной работы для численного анализа выбран классический потенциал хаотической инфляции массивного поля ($n = 2$), где $\lambda = \frac{1}{2} m^2$:

$$A_{SR}(H, \phi) \approx 288C_8^2 H^4 + 6C_{10} H^2 - \frac{1}{2} m^2 \phi^2 \tag{28}$$

С учётом проведённой трансформации исходная структура сводится к явно заданной системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \dot{\phi} &= \frac{1}{6C_8} \sqrt{-C_{SR}(H) + \sqrt{C_{SR}(H)^2 - 144C_8^2 A_{SR}(H, \phi)}} \\ \dot{H} &= \frac{-C_{SR}(H) + \sqrt{C_{SR}(H)^2 - 144C_8^2 A_{SR}(H, \phi)}}{72C_8^2} \end{aligned} \tag{29}$$

Для подтверждения физической состоятельности полученной модели $F(R, X, \phi)$ необходимо показать её согласованность с современными космологическими наблюдениями. Наиболее точные ограничения на фундаментальные параметры Вселенной были установлены в рамках миссии *Planck* 2018, представленной в работе. Одним из ключевых параметров, с которым необходимо сопоставить любую модифицированную теорию гравитации, является постоянная Хаббла H_0 — современное значение скорости расширения Вселенной.

Как видно из уравнений, функция $H(t)$ в модели описывает и мгновенное состояние расширения, и динамический процесс, зависящий от эволюции скалярного поля $\phi(t)$ и комбинации констант $C_i(\phi)$, отражающих нелинейные связи между кривизной R и инвариантами X . Сопоставление этого асимптотического режима с данными показывает полную согласованность модели с наблюдаемыми параметрами

$$H_0 = (67.36 \pm 0.54)^{-1} \tag{30}$$

$$\Omega_m = 0.315 \pm 0.007, \Omega_\Lambda = 0.6847 \pm 0.0073 \tag{31}$$

Форма первичного спектра плотностных возмущений наилучшим образом описывается степенной зависимостью:

$$\mathcal{P}_R(k) = A_s \left(\frac{k}{k_*} \right)^{n_s - 1} \tag{32}$$

где A_s — амплитуда скалярных флуктуаций при опорной частоте $k^* = 0.05 \text{ Мpc}^{-1}$, а n_s — спектральный индекс. Эти параметры равны:

$$A_s = (2.10 \pm 0.03) \times 10^{-9}, n_s = 0.9649 \pm 0.0042 \tag{33}$$

Эти значения указывают на отклонение от $n_s = 1$, что свидетельствует о конечной продолжительности инфляции и наличии слабого наклона спектра в сторону больших масштабов.

Как следует из полученных результатов, наблюдаемое значение H_0 практически достигает предельного случая, при котором скорость расширения остаётся неизменной с течением времени. Этот особый режим реализуется в рамках нашей модели при $m = \nu = n = 1$ и при условии

$$\dot{H} = 0,$$

что означает установление равновесия между геометрическим и скалярным вкладом в эволюцию метрики.

Параметры Ω_m и Ω_Λ в контексте теории $F(R, X, \phi)$ имеют внутреннее, а не внешнее значение: они указывают на распределение энергии между степенями свободы кривизны и скалярного поля. В то время как в стандартной космологии параметр Ω_Λ традиционно рассматривается как часть вакуумной энергии с уравнением состояния $w = -1$, в модели $F(R, X, \phi)$ эта величина извлекается из геометрических поправок второго порядка относительно R и X , включённых в действие.

Такой подход особенно значим в контексте данных Planck 2018, где подчёркивается, что оцениваемая Ω_Λ — это не непосредственно измеряемая величина, а параметр модели, связанный через уравнение Фридмана с H_0

$$H_0^2 = \frac{8\pi G}{3} \rho_m + \frac{\Lambda}{3} \quad (34)$$

В данной теории аналогом этого выражения служит эффективное уравнение:

$$H^2 = \frac{8\pi G_{\text{eff}}}{3} \rho_m + f(\phi, R, X) \quad (35)$$

где $f(\phi, R, X)$ представляет геометрическую поправку, играющую роль динамической Λ -членоподобной функции.

В модели $F(R, X, \phi)$ форма спектра возмущений определяется не только потенциалом скалярного поля, но и производными функции F по кривизне и дополнительным инвариантам. Используя уравнение Монжа–Ампера, можно показать, что квадратичные члены вида $(C_8 R + C_9 X)^2$ вносят масштабозависимую поправку в эффективное уравнение движения поля ϕ , изменяя тем самым наклон спектра:

$$n_s - 1 \simeq -6\epsilon + 2\eta + \delta_F \quad (36)$$

где ϵ и η — стандартные инфляционные параметры замедления, а δ_F отражает вклад модифицированной геометрии. Для степенной зависимости $a(t) \sim t^n$ величины

$$\epsilon \sim \frac{1}{n}, \quad \eta \sim \frac{n-1}{n^2},$$

поэтому в пределе $n \gg 1$ получаем $n_s \approx 1 - \frac{2}{n}$, что $n_s \propto \left| \frac{\dot{H}}{H^2} \left(\frac{dF_R}{dR} \right) \right|^{-2}$ согласуется с наблюдаемым значением при $n \approx 60$. Тем самым модель $F(R, X, \phi)$ естественным образом воспроизводит наклон спектра, не требуя введения искусственного потенциала инфлатона.

Эффективное значение g в модели выражается как $g = \frac{2}{3} \frac{\dot{H}}{H^2}$. При приближении к асимптотическому режиму $\dot{H} \rightarrow 0$ тензорная компонента δg_{ij} подавляется до значений $g \lesssim 0.06$. Таким образом, структура лагранжиана гарантирует малость гравитационных волн без необходимости введения сверхплоских потенциалов или тонкой настройки параметров.

Заключение

В данной работе был проведён комплексный анализ обобщённой космологической модели в рамках модифицированной гравитации $F(R, T, X, \phi)$. Использование метода симметрий Нётер позволило свести динамику уравнений поля к системе, допускающей как аналитическое исследование, так и численную верификацию.

Теоретический анализ показал, что рассматриваемый лагранжиан является универсальным, так как при определённой параметризации констант C_i он естественным образом воспроизводит известные инфляционные сценарии — от модели Старобинского до моделей-эссенции. Особое внимание было уделено влиянию компоненты минимального связи RX , которая качественно трансформирует кинематику инфлатона. Хотя стандартные аналитические подходы в данной задаче сталкиваются с проблемой возникновения нефизических областей (отрицательный кинетический член X), переход к приближению медленного скатывания Хаббла (HSRA) позволил полностью преодолеть эти ограничения.

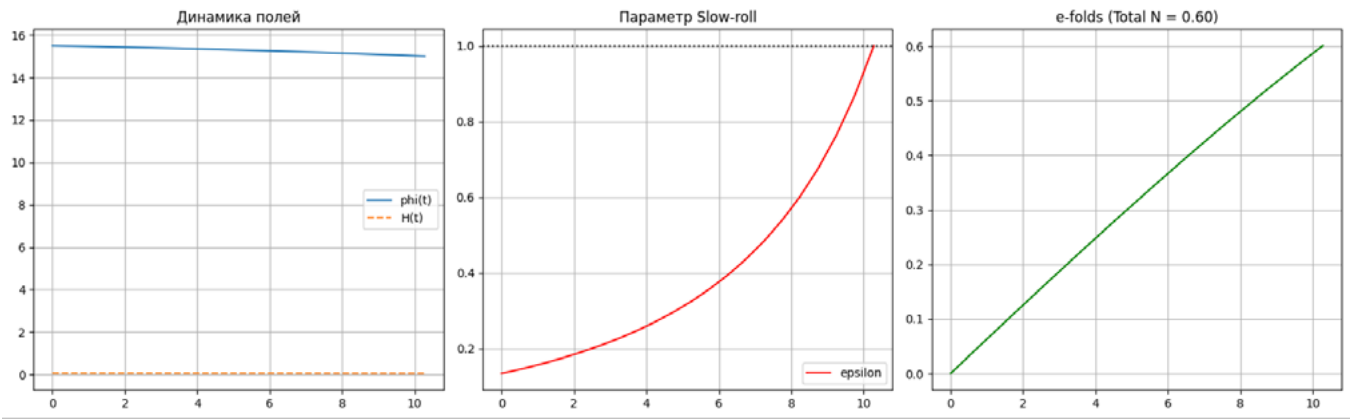


Рис. 1. Динамика инфляционного режима в модели $F(R, T, X, \phi)$: (а) эволюция параметра медленного скатывания $\epsilon(N)$ при $C_g = 14.5$; (б) зависимость длительно-сти инфляции N_{tot} константы связи C_g ; (с) эволюция кинетического члена $X(\phi)$ в окрестности аттрактора. Видно, что при $C_g \approx 14.5$ система достигает необходимого значения $N \approx 60$ и избегает нефизических областей $X < 0$.

Ключевым результатом работы является обнаружение устойчивого инфляционного аттрактора. Посредством численного моделирования установлено, что при критическом значении константы связи $C_g \approx 14.5$ динамика системы приводит к реализации необходимой длительности инфляции $N \approx 60$ e-folds. Это подтверждает физическую состоятельность модели и её соответствие наблюдательным данным миссии *Planck* 2018.

Таким образом, мы доказали, что включение механизма -эссенции в структуру гравитации Мирзакулова делает инфляционную стадию необходимым динамическим следствием фундаментальных симметрий системы. Установленная область устойчивости открывает перспективы для дальнейшей верификации модели через поиск специфических космологических сигнатур связи RX , объединяя теоретическую строгость симметрий с точностью современных астрофизических наблюдений.

Благодарности

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

Вклад авторов

Ержанов К.К. — постановка задачи исследования, разработка математической модели, анализ результатов, общее руководство работой и подготовка рукописи.

Бауыржан Г. — аналитические расчёты, численное моделирование, обработка результатов, подготовка текста статьи.

Нурлан Э. — участие в численных расчётах, обработка данных и подготовка иллюстративного материала.

Зарлыков Д.Б. — участие в обсуждении результатов исследования, проверка научного содержания и редактирование рукописи.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант статьи.

Заявление об использовании генеративного ИИ и технологий, использующих ИИ, в процессе подготовки рукописи

В процессе подготовки данной работы автор(ы) использовали ChatGPT для преобразования формул в необходимый формат. После использования этого инструмента/сервиса авторы проверили и отредактировали содержание по мере необходимости и несут полную ответственность за содержание опубликованной статьи.

Список литературы

1. S. Perlmutter, и др., Measurements of Ω and Λ from 42 High-Redshift Supernovae, *Astrophysical Journal* 517, с. 565–586 (1999).
2. A.G. Riess, и др., Observational Evidence from Supernovae for an Accelerating Universe and a Cosmological Constant, *Astronomical Journal* 116, с. 1009–1038 (1998).
3. E.J. Copeland, M. Sami, S. Tsujikawa, Dynamics of Dark Energy, *International Journal of Modern Physics D* 15, с. 1753–1936 (2006).
4. R. De Putter, E.V. Linder, Kinetic k-Essence and Quintessence, *Astroparticle Physics* 28(3), с. 263–272 (2007).
5. C. Armendariz-Picon, T. Damour, V. Mukhanov, k-Inflation, *Physics Letters B* 458, с. 209–218 (1999).
6. R. Myrzakulov, и др., g-Essence as the Cosmic Speed-Up, *Astrophysics and Space Science* 341, с. 681–688 (2012).
7. K. Bamba, R. Myrzakulov, O. Razina, K. Yerzhanov, Cosmological Evolution of Equation of State for Dark Energy in G-Essence Models, *International Journal of Modern Physics D* 22(13), статья 1350023 (2013).
8. R. Myrzakulov, Accelerating Universe from $F(T)$ Gravity, *European Physical Journal C*, 71, статья 1752 (2011).
9. R. Myrzakulov, Dark Energy in $F(R, T)$ Gravity, arXiv preprint, arXiv:1205.5206 [gr-qc] (2012).
10. N. Aghanim, Y. Akrami, M. Ashdown, и др., Planck 2018 Results. VI. Cosmological Parameters, arXiv preprint, arXiv:1807.06209 [astro-ph.CO] (2018).
11. A.R. Liddle, P. Parsons, J.D. Barrow, Formalising the Slow-Roll Approximation in Inflation, *Physical Review D*, 50(12), статья 7222 (1994).
12. Y.Y. Ye, B.M. Gu, Confronting Inflation and Reheating with Observations: Improved Predictions, arXiv preprint, arXiv:2507.20307v2 (2025).

Ержанов Қ.К., Бауыржан Г.Б.*, Нұрлан Э., Зарлыков Д.Б.

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

(E-mail: yerzhanovkk@gmail.com, bauyrzhan.g.b@gmail.com,
enurlan.edu@gmail.com, daniayl210406@gmail.com)

$F(R, X, \phi)$ гравитациялық моделінің космологиялық параметрлері

Аңдатпа. Бұл жұмыста Фридман–Робертсон–Уокердің біртекті-изотропты метрикасына қолданылған $F(R, X, \phi)$ типті кеңейтілген модификацияланған гравитация теориясы зерттеледі. Алынған өрістік теңдеулер негізінде скаляр өрістің және қосымша геометриялық инварианттардың үлесін ескеретін модельдің космологиялық динамикасына талдау жүргізілді. Аналитикалық шешімдерді табу үшін симметрия әдістері және Монж–Ампер теңдеуі типіндегі қосымша шарттар қолданылып, сызықтық емес дифференциалдық теңдеулер жүйесін едәуір жеңілдетуге мүмкіндік берілді. Лагранжиандардың әртүрлі кластары үшін шешімдер алынды, оның ішінде Әлемнің инфляциялық кеңею режимдеріне алып келетін жағдайлар қарастырылды. Параметрлердің белгілі бір мәндерінде модель квазиде-Ситтерлік кеңеюге және тұрақты инфляциялық аттракторға сәйкес келетін ($\dot{H} = 0$) режимін қамтамасыз ететіні көрсетілді. Динамиканы зерттеу үшін стандартты потенциалдық тәсілдің шектеулерін болдырмауға мүмкіндік беретін Хабблдың баяу домалау жуықтауы қолданылды. Модель параметрлерінің эволюциясына сандық талдау жүргізіліп, скаляр өріс пен Хаббл параметрінің мінез-құлқын сипаттайтын қарапайым дифференциалдық теңдеулер жүйесі алынды. Теориялық нәтижелер Planck 2018 миссиясының бақылау деректерімен салыстырылды, оның ішінде Хаббл тұрақтысы (H_0), зат пен қара энергия тығыздығының параметрлері (Ω_m) және (Ω_Λ), спектрлік индекс (n_s), бастапқы скалярлық ауытқулар амплитудасы (A_s), сондай-ақ тензорлық және скалярлық модалардың қатынасы (r) қарастырылды. $F(R, X, \phi)$ моделінің қазіргі космологиялық бақылаулармен жақсы сәйкес келетіні, бастапқы флуктуациялар спектрінің бақыланатын көлбеулігін қайта өндіретіні және тензорлық ауытқулардың басылуына алып келетіні көрсетілді. Алынған нәтижелер қарастырылып отырған модификацияланған гравитациялық модельдің физикалық негізділігі мен бақылаулық сәйкестігін растайды.

Түйін сөздер: модификацияланған гравитация теориясы, Монж–Ампер теңдеуі, инфляция, Хаббл тұрақтысы, қара энергия, спектрлік индекс.

K.K. Yerzhanov, G.B. Bauyrzhan*, E. Nurlan, D.B. Zarlykov

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

(E-mail: yerzhanovkk@gmail.com, bauyrzhan.g.b@gmail.com,
enurlan.edu@gmail.com, daniayl210406@gmail.com)

Cosmological Parameters of the $F(R,T,X,\phi)$ Gravitational Model

Abstract. This paper investigates an extended modified theory of gravity of the $F(R,X,\phi)$ type applied to the homogeneous and isotropic Friedmann–Robertson–Walker metric. Based on the obtained field equations, the cosmological dynamics of the model, taking into account the contribution of the scalar field and additional geometric invariants, is analyzed. To obtain analytical solutions, symmetry methods and additional conditions of the Monge–Ampère type are employed, making it possible to significantly simplify the system of nonlinear differential equations. Solutions are derived for various classes of Lagrangians, including cases leading to inflationary expansion regimes of the Universe. It is shown that for certain values of the model parameters the regime ($\dot{H} = 0$) is realized, corresponding to a quasi-de Sitter expansion and a stable inflationary attractor. To investigate the dynamics, the Hubble slow-roll approximation is applied, allowing one to avoid the limitations of the standard potential approach. A numerical analysis of the evolution of the model parameters is carried out, and a system of ordinary differential equations describing the behavior of the scalar field and the Hubble parameter is obtained. The theoretical results are compared with the observational data of the Planck 2018 mission, including the Hubble constant (H_0), the matter and dark energy density parameters (Ω_m) and (Ω_Λ), the scalar spectral index (n_s), the amplitude of primordial scalar perturbations (A_s), and the tensor-to-scalar ratio (r). It is shown that the $F(R,X,\phi)$ model is consistent with modern cosmological observations, reproduces the observed tilt of the primordial fluctuation spectrum, and leads to the suppression of tensor perturbations. The obtained results confirm the physical viability and observational consistency of the considered modified gravity model.

Keywords: modified gravity theory, Monge–Ampère equation, inflation, Hubble constant, dark energy, spectral index.

References

1. S. Perlmutter, и др., Measurements of Ω and Λ from 42 High-Redshift Supernovae, *Astrophysical Journal* 517, p. 565–586 (1999).
2. A.G. Riess, и др., Observational Evidence from Supernovae for an Accelerating Universe and a Cosmological Constant, *Astronomical Journal* 116, p. 1009–1038 (1998).
3. E.J. Copeland, M. Sami, S. Tsujikawa, Dynamics of Dark Energy, *International Journal of Modern Physics D* 15, p. 1753–1936 (2006).
4. R. De Putter, E.V. Linder, Kinetic k-Essence and Quintessence, *Astroparticle Physics* 28(3), p. 263–272 (2007).
5. C. Armendariz-Picon, T. Damour, V. Mukhanov, k-Inflation, *Physics Letters B* 458, p. 209–218 (1999).
6. R. Myrzakulov, и др., g-Essence as the Cosmic Speed-Up, *Astrophysics and Space Science* 341, p. 681–688 (2012).
7. K. Bamba, R. Myrzakulov, O. Razina, K. Yerzhanov, Cosmological Evolution of Equation of State for Dark Energy in G-Essence Models, *International Journal of Modern Physics D* 22(13), Article 1350023 (2013).
8. R. Myrzakulov, Accelerating Universe from $F(T)$ Gravity, *European Physical Journal C*. 71, Article 1752 (2011).
9. R. Myrzakulov, Dark Energy in $F(R,T)$ Gravity, arXiv preprint, arXiv:1205.5206 [gr-qc] (2012).
10. N. Aghanim, Y. Akrami, M. Ashdown, и др., Planck 2018 Results. VI. Cosmological Parameters, arXiv preprint, arXiv:1807.06209 [astro-ph.CO] (2018).
11. A.R. Liddle, P. Parsons, J.D. Barrow, Formalising the Slow-Roll Approximation in Inflation, *Physical Review D*, 50(12), Article 7222 (1994).
12. Y.Y. Ye, B.M. Gu, Confronting Inflation and Reheating with Observations: Improved Predictions, arXiv preprint, arXiv:2507.20307v2 (2025).

Сведения об авторах:

Ержанов К.К. — кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Бауыржан Г.Б. — автор для корреспонденции, PhD, старший преподаватель кафедры космической техники и технологий, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Нурлан Э. — докторант кафедры общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Зарлыков Д.Б. — бакалавр, кафедра общей и теоретической физики, Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

Ержанов К.К. — физика-математика ғылымдарының кандидаты, жалпы және теориялық физика кафедрасының меңгерушісі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Бауыржан Г.Б. — хат-хабар авторы, PhD, Ғарыштық техника және технологиялар кафедрасының аға оқытушысы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Нұрлан Э. — жалпы және теориялық физика кафедрасының докторанты, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

Зарлыков Д.Б. — бакалавр, жалпы және теориялық физика кафедрасы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

K.K. Yerzhanov — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Department of General and Theoretical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

G. Bauyrzhan — the corresponding author, PhD, Senior Lecturer, Department of Space Engineering and Technology, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

E. Nurlan — PhD Student, Department of General and Theoretical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

B. Zarlykov — Bachelor, Department of General and Theoretical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, 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/>).



Engineering Multicomposite Ceramic Systems with Improved Thermal Insulation and γ -Ray Shielding Performance

Blynskiy P.A.^{1*}, *Uglov V.V.*²

¹*Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

²*Belarusian State University, Minsk, Belarus*

E-mail: blynskiy@physics.kz, uglov@bsu.by

Abstract. The article presents the results of complex studies of the assessment of alterations in thermal insulation and shielding characteristics in $1-x(\text{TeO}_2 - \text{CeO}_2 - \text{WO}_3 - \text{ZnO}_2 - \text{Bi}_2\text{O}_3) - x\text{ZrO}_2$ ceramics with variations in the ratio of components during their sintering, which leads to a change in the phase composition. It is determined that the addition of zirconium dioxide to the composition of the main $\text{TeO}_2 - \text{CeO}_2 - \text{WO}_3 - \text{ZnO}_2 - \text{Bi}_2\text{O}_3$ matrix leads to the formation of a monoclinic phase ZrCeO_2 , the increase in the contribution of which is directly proportional to the observed hardening effect, expressed in an elevation in hardness and bending strength. Thermal insulation properties of composite $1-x(\text{TeO}_2 - \text{CeO}_2 - \text{WO}_3 - \text{ZnO}_2 - \text{Bi}_2\text{O}_3) - x\text{ZrO}_2$ ceramics were studied depending on the variation of the zirconium dioxide component in the composition, the addition of which changes the strength and thermal insulation properties. During the experiments, it was established that a growth in the monoclinic ZrCeO_2 substitution phase in the composition of ceramics leads to a rise in the difference in temperatures on the front and back sides, which indicates an enhancement in thermal insulation properties, a growth in the temperature difference, which is due to the low thermal conductivity of zirconium dioxide. A general analysis of the shielding characteristics showed a positive effect of the formation of the ZrCeO_2 phase on the shielding efficiency, allowing the absorption capacity of ceramics to be increased by 10 – 15 %, while the resulting ceramics have high strength and thermal insulation properties

Keywords: composite ceramics, thermal insulation materials, protective shielding ceramics, absorption, shielding, radiation exposure.

Introduction

The expansion of the use of ionizing radiation for peaceful purposes, including in medicine, industry, energy and security, requires increased attention not only to the issues of use and application, but also protection from the negative impact of ionizing radiation on living organisms [1,2]. Also, significant attention should be paid not only to artificial sources of radiation that arise when using sources of ionizing radiation, but also to natural sources that can also have a negative impact. The main negative impact of ionizing radiation, especially gamma quanta, which have a high penetrating ability, is the possible damage to cells [3,4], which can cause mutations or diseases in the case of living organisms, and in the case of electronic devices, lead to destabilization of their performance or complete failure, which can be very critical, especially in

Received 11.06.2026. Revised 12.06.2026. Accepted 12.06.2026. Available online 30.06.2026.

*the corresponding author

cases where rapid replacement of failed equipment is not possible or is very difficult [5,6]. In this regard, in recent years, active research aimed at finding and creating new protective materials capable of containing the negative impact of ionizing radiation, as well as combining the possibilities of using shielding materials in various industries, including the possibility of operation in extreme conditions, has been carried out [7-10].

One of the potential solutions in this direction is the use of composite ceramics based on tellurium, cerium, zinc, tungsten and bismuth oxides, which have fairly high shielding efficiency for gamma and neutron radiation [11-14]. The consideration of the prospects for using these types of composite ceramics as materials for protection against the negative effects of ionizing radiation is primarily due to the content of heavy elements such as tungsten and bismuth, the use of which allows for an elevation in the effective atomic number (Z_{eff}) [15,16], which in turn allows for an increase in the value of the interaction (absorption) cross-section of gamma and neutron radiation. At the same time, the use of zinc or tellurium oxides allows obtaining optically active materials, opening up the possibility of using them as materials that have the ability to transmit light in a certain range while maintaining the stability of shielding [17,18]. The addition of bismuth, tungsten, or tellurium to the composition leads not only to an increase in absorption capacity due to large atomic numbers but also, in some cases, to an increase in strength due to the reinforcing properties of these elements.

An important role in the assessment of the applicability of composite ceramics and glass-like ceramics with good shielding efficiency indicators has recently been given to studies aimed at studying the possibility of combining high shielding indicators with mechanical strength and thermal barrier properties of ceramics, which play a very important role in the determining the applicability potential [19-21]. In this area, much attention is paid to the possibility of modification of composite ceramics with oxides that have low thermal conductivity and high strength and mechanical parameters, the addition of which will not only reduce thermal conductivity, but also increase the hardness and strength of composite ceramics. In this case, the most promising oxide for modification is zirconium dioxide, the chemical nature of which allows it to be combined with other types of materials, and its structural features provide high strength indicators and fairly low thermal conductivity values in comparison with other oxides of refractory elements used to modify materials [22-25].

The main aim of this work is to determine the effect of addition of zirconium dioxide in various concentrations (from 5 to 25 wt. %) to multicomponent ceramics based on $\text{WO}_3\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-ZnO-TeO}_2\text{-CeO}_2$, in order to determine the possibility of enhancement of the strength and thermal barrier characteristics of ceramics, the variation of which, in combination with changes in the parameters of the shielding characteristics, will make it possible to obtain a new class of materials that can be considered as one of the promising materials for protection against the negative effects of ionizing radiation. In this work, special attention is paid to the possibility of a combination of the strength, thermal insulation, and shielding properties of ceramics, with the aim of obtaining optimal compositions of multicomponent ceramics that have the potential for use in cases where a combination of thermal insulation properties, mechanical strength, and resistance to cracking, as well as shielding of ionizing radiation, is required.

Materials and methods

For the synthesis of multicomponent ceramics considered as heat-insulating and shielding materials, the method of solid-phase grinding with subsequent thermal sintering was used. The influence of stoichiometry variation due to the addition of a stabilizing component in the form of zirconium dioxide (ZrO_2) to the ceramic composition, selected for the purpose of enhancing strength characteristics, as well as elevation of thermal insulation, was determined by alteration of the stoichiometry of the components in the composition. The following refractory metal oxides were chosen as the basis (matrix): WO_3 ($T_{\text{melt}}=1473^\circ\text{C}$), Bi_2O_3 ($T_{\text{melt}}=817^\circ\text{C}$), ZnO ($T_{\text{melt}}=1975^\circ\text{C}$), TeO_2 ($T_{\text{melt}}=733^\circ\text{C}$), CeO_2 ($T_{\text{melt}}=2400^\circ\text{C}$); zirconium (IV) oxide ZrO_2 ($T_{\text{melt}}=2700^\circ\text{C}$) was chosen as the dopant. The dopant content in the total mass was 0%, 5%, 10%, 15%, 20%, 25%. Table 1 presents the stoichiometric compositions of the studied ceramics.

Table 1 – Stoichiometric compositions of the studied ceramics

Concentration of elements		Stoichiometric formula
WO ₃ -Bi ₂ O ₃ -ZnO-TeO ₂ -CeO ₂	ZrO ₂	
20 %	0 %	0.2WO ₃ -0.2Bi ₂ O ₃ -0.2ZnO-0.2TeO ₂ -0.2CeO ₂
19 %	5 %	0.19WO ₃ -0.19Bi ₂ O ₃ -0.19ZnO-0.19TeO ₂ -0.19CeO ₂ -5ZrO ₂
18 %	10 %	0.18WO ₃ -0.18Bi ₂ O ₃ -0.18ZnO-0.18TeO ₂ -0.18CeO ₂ -10ZrO ₂
17 %	15 %	0.17WO ₃ -0.17Bi ₂ O ₃ -0.17ZnO-0.17TeO ₂ -0.17CeO ₂ -0.15ZrO ₂
16 %	20 %	0.16WO ₃ -0.16Bi ₂ O ₃ -0.16ZnO-0.16TeO ₂ -0.16CeO ₂ -0.2ZrO ₂
15 %	25 %	0.15WO ₃ -0.15Bi ₂ O ₃ -0.15ZnO-0.15TeO ₂ -0.15CeO ₂ -0.25ZrO ₂

The main technological method for obtaining composite ceramic materials included the use of a mechanochemical solid-phase synthesis process, during which the initial components of refractory oxides were ground using a PULVERISETTE 6 classic line planetary mill (Fritsch, Berlin, Germany). Mechanochemical grinding was carried out in a tungsten carbide (WC) beaker with a capacity of 80 ml, using tungsten carbide grinding balls with a diameter of 10 mm. The ratio of the number of grinding bodies and the components to be ground was 2:1. The grinding rate was 250 rpm, and grinding was carried out for 30 minutes. Thermal annealing of the samples was performed by placing all the samples in special corundum crucibles placed in a SNOL muffle furnace (SNOL/Umega group, Utena, Lithuania), after which the furnace chamber was heated to a temperature of 1000 °C, at a heating rate of about 20 °C/min. Upon reaching the set temperature of 1000 °C, the temperature in the chamber was stabilized, followed by holding the samples inside the chamber for 5 hours, after which the heating was switched off and the samples were cooled together with the furnace until reaching a temperature that allowed the samples to be removed (room temperature).

The phase composition of the studied ceramics was determined depending on the variation of the components in the composition using the X-ray phase analysis method implemented on a D8 Advance ECO powder diffractometer (Bruker, Germany). X-ray diffraction patterns were recorded in the Bragg-Brentano geometry at an angular range of 2θ from 20 to 100 °, and the Rietveld method was used to assess the weight contributions and the presence of phases in the composition.

Determination of optical properties related to changes in optical transmittance over a wide wavelength range from 200 to 1000 nm was accomplished by obtaining transmittance spectra and their subsequent processing to calculate the transmittance at a wavelength of 500 nm. Measurements were performed using a SPECORD 200/210/250 PLUS spectrophotometer (Analytik Jena, Jena, Germany).

The strength properties were studied using the indentation method, and the Duroline M1 microhardness tester (Metkon, Bursa, Turkey) was used for measurements. The Vickers pyramid was used as an indenter; the load on the indenter was about 100 N. The bending strength was determined using the three-point bending method, implemented on the Duroline M1 testing machine (Metkon, Bursa, Turkey).

The thermal insulation properties of multicomponent ceramics were assessed by measuring the temperature difference of samples from both sides during 24 hours of sequential heating of one side of the samples on a heater. Based on the results of the temperature difference, the insulation temperature parameter was assessed, which determines the containment of temperature heating during operation. The measurements were carried out at a heating temperature of the front side of the sample to a temperature of 1000 °C, and the temperature change was monitored using thermocouples.

The determination of the efficiency of using the proposed ceramics as shielding protective materials to reduce the negative impact of gamma radiation was carried out in two stages. The first stage consisted of the simulation of the effects of gamma radiation interaction in a wide energy range with the ceramic material, with a variation in the ratio of

oxides used to obtain the samples. Simulation was carried out using the XCOM program code [26], freely available on the platform [27]. The calculations were performed using a code in which the materials are used as a mixture (Compound), the materials were oxides in a given ratio of components used for synthesis. The second stage of the efficiency assessment consisted of conducting experimental work related to determining changes in the intensity of gamma radiation created by the Cs^{137} source generating gamma quanta with an energy of 662 keV ($T_{1/2} = 30.08$ years). The experiments were carried out by placing the gamma-quantum source in a special container with a 3 mm diameter hole, into which the shielding sample was placed. A detection system was placed at a distance of 10 cm, allowing the intensity of gamma radiation to be estimated before and after using the shielding material. Using the Lambert-Beer law, the linear attenuation coefficient (LAC) was determined, on the basis of which such quantities as the mass attenuation coefficient (MAC), half-value layer (HVL) and mean free path (MFP) were calculated. These parameters made it possible to evaluate the efficiency of using the proposed ceramic compositions as shielding protective materials, as well as to determine the influence of composition variations due to the addition of zirconium dioxide to them on the change in absorption and shielding abilities.

Results and discussion

Figure 1 demonstrates the results of X-ray phase analysis of the studied ceramic samples depending on the variation of the component ratio in the ceramic composition with variation of the zirconium dioxide concentration. The general appearance of the presented X-ray diffraction patterns in the case of the initial sample without a dopant indicates that under the selected thermal annealing conditions, multicomponent ceramics are formed, represented by the presence of at least four main phases in the structure, with the dominance of the CeO_2 phase with a cubic type of crystal lattice and spatial syngony $\text{Fm-}3\text{m}(225)$ (PDF-00-064-0737), the contribution of which is more than 60 wt. % (see the data presented in Figure 1b). Also in the composition of ceramics, the formation of ZnTeO_3 phases with an orthorhombic type of crystal lattice and spatial syngony $\text{Pbca}(61)$ (PDF-01-072-1410), the weight contribution of which is about 20 wt.%, as well as two phases, one of which is the ZnWO_4 tungstate phase with a monoclinic type of crystal lattice and spatial syngony $\text{P2}/\text{c}(13)$ (PDF-01-088-0251) and the $\text{Bi}_2\text{Te}_4\text{O}_{11}$ phase with a monoclinic type of crystal lattice and spatial syngony $\text{P21}/\text{n}(14)$ (PDF-01-081-1330) is observed. Thus, the matrix of the initial ceramics is represented by a mixture of four phases, the distribution of which in the sample composition is equally probable and isotropic. When zirconium dioxide with a monoclinic crystal lattice type is added to the composition of ceramics, according to X-ray diffraction data, characteristic reflections appear (the presence of which was demonstrated by decomposition of reflections in the region of $2\theta = 25 - 35^\circ$ using the Rietveld method) for the presence of the monoclinic phase ZrCeO_2 (PDF-01-088-2391) in the composition, the formation of which occurs during mechanical mixing of powders with subsequent partial cationic substitution of zirconium by cerium. It should be noted that at the selected annealing temperatures of 1000 °C, as well as the presence of various components in the composition capable of initiating processes of polymorphic transformations in zirconium dioxide, these effects were not observed in the studied samples. For all selected compositions, the main diffraction reflections for all established phases are preserved, undergoing only changes in intensities characterizing the change in phase contributions in the samples (see data in Figure 1b).

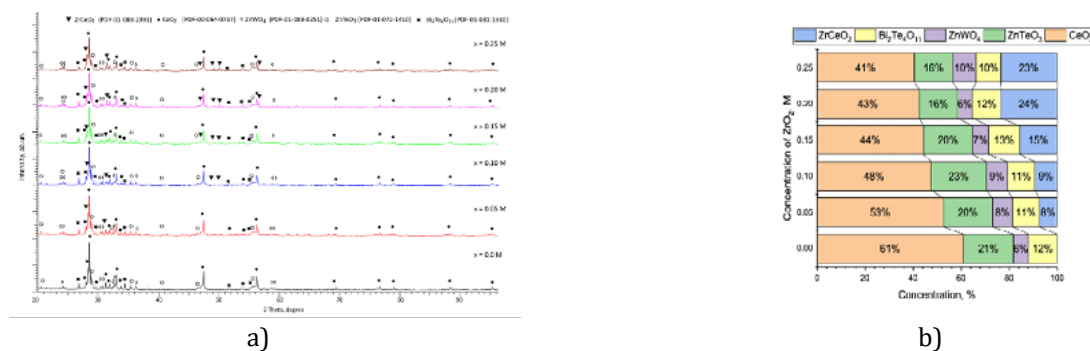


Figure 1. a) Results of X-ray diffraction of the studied samples of multicomponent ceramics depending on the addition of a stabilizing component in the form of ZrO_2 (The following symbols were used to designate the phases on the diffraction patterns): \blacktriangledown - ZrCeO_2 (PDF-01-088-2391), \bullet - CeO_2 (PDF-00-064-0737), \diamond - ZnWO_4 (PDF-01-088-0251), \star - ZnTeO_3 (PDF-01-072-1410), \blacksquare - $\text{Bi}_2\text{Te}_4\text{O}_{11}$ (PDF-01-081-1330)); b) Results of changes in the phase composition of multicomponent ceramics with variations in the ratio of components in the case of addition of ZrO_2

Figure 2 demonstrates the results of measurements of the optical properties of the studied multicomponent ceramics with a variation in the ratio of components in the case of addition of ZrO_2 to the composition, leading to the formation of the $ZrCeO_2$ phase, as well as, according to the data presented in Figure 1b, a change in the ratio of the main established phases while maintaining the dominance of the cubic phase CeO_2 in the composition. According to the assessment of the fundamental absorption edge values, which is determined by the dominant phase of CeO_2 , the change in the phase composition due to the formation of inclusions in the form of $ZrCeO_2$ leads to a slight shift, which is due to the formation of effects of local electronic states while maintaining the dominance of the cubic phase in the composition of ceramics.

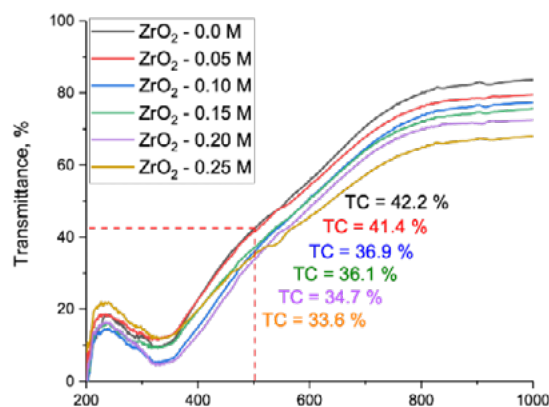


Figure 2. Evaluation results of optical properties of multicomposite ceramics with variation of concentration of zirconium dioxide in the composition

According to the obtained data, the addition of ZrO_2 to the composition of multicomposite ceramics leads to a decrease in the optical transmittance coefficient in the visible (380 – 780 nm) and near IR (above 780 nm) range by approximately 8 – 10 %. At the same time, in the case of the visible light wavelength range, the change in the optical transmittance coefficient depending on the concentration is non-linear, which indicates a direct effect of changes in the phase composition on the optical parameters of the ceramics. The observed decrease in the optical transmittance coefficient in this case can be explained by the effects of the emergence of additional scattering centers in the form of grain boundaries, the proportion of which increases due to a change in the phase ratio in the composition of the ceramics, while an increase in the weight contribution of the $ZrCeO_2$ phase in the composition of the ceramics can lead to an increase in stresses near the boundaries, which further enhances the scattering effect and, as a consequence, a decrease in the transparency of the ceramics in the visible and near IR range. The presence of a local maximum in the wavelength range from 200 to 310 nm is due to the presence of oxygen vacancies in the ceramic structure, the change in the concentration of which (by the change in the area and intensity of the peak) indicates the influence of changes in the phase composition on the structural effects associated with the formation of vacancy defects. In this case, the presence of oxygen vacancies leads to the creation of additional energy levels inside the band gap, which leads to an increase in absorption, which manifests itself as an absorption band in the UV region, which is quite clearly manifested at a zirconium dioxide concentration of 25 %. It should also be noted that the presence and subsequent change in the concentration of oxygen vacancies in the composition of ceramics can cause changes not only in optical properties, but also in thermophysical ones, since the presence of oxygen vacancies makes it possible to change the heat transfer rate by inhibiting the phonon mechanisms of heat exchange in ceramics, thereby increasing thermal insulation properties.

Figure 3 reveals the evaluation results of the strength characteristics of ceramics, presented in the form of dependencies of the change in the parameters of hardness and bending strength with a change in the concentration of ZrO_2 in the composition of ceramics. The general trend of changes in the values of hardness and bending strength indicates a positive effect of zirconium dioxide addition to the composition of WO_3 - Bi_2O_3 - ZnO - TeO_2 - CeO_2 ceramics, resulting in an increase in strength characteristics from 3 – 7 to 39 – 40 % compared to unmodified samples. At the same time, the trend of changes in strength characteristics has differences depending on the concentration of zirconium dioxide, from which it can be concluded that the change in strength characteristics is influenced by the change in the phase ratio, associated not only with the formation of the $ZrCeO_2$ phase in the composition of ceramics, but also by the general trend of changes in the weight contributions of the phases, the results of which are shown in Figure 1b.

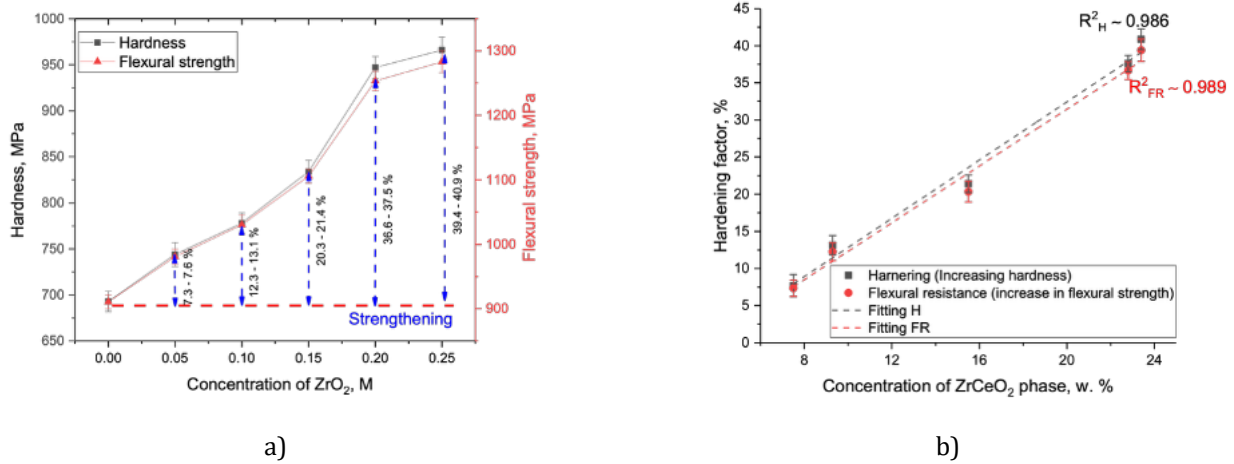


Figure 3. Results of the strength characteristics of the studied ceramics: a) Results of changes in the values of hardness and bending strength from variations in the concentration of components in the composition; b) Comparative analysis of the values of hardening and changes in the concentration of the $ZrCeO_2$ phase in the composition of ceramics

The dependence between the change in the weight contribution of the $ZrCeO_2$ phase in the composition of ceramics and the hardening factors (increase in hardness and bending strength) shown in Figure 3b reflects a direct relationship between these parameters, which in turn can be explained by changes in the structural features of ceramics associated with the formation of inclusions in the form of $ZrCeO_2$. Moreover, the observed changes in strength characteristics (hardness and bending strength) due to changes in the phase composition of ceramics are in good agreement with the results of a number of studies [28,29], in which the strengthening effect is associated with the formation of additional barrier obstacles caused by the presence of interphase boundaries and their contributions to restraining the propagation of microcracks and chips in the case of external mechanical loads [30,31]. The mechanism of microcrack containment in this case is due to the fact that the presence of interphase or intergranular boundaries leads to a change in the direction of microcrack growth or their complete inhibition in the case of a large number of barriers. At the same time, the presence of additional interphase boundaries leads to an increase in energy dissipation under mechanical loads and deformations, which in turn increases the resistance of the material, as well as an increase in crack resistance under external mechanical loads. Also, an important role in enhancement of resistance to softening under mechanical influences is played by local stresses near grain boundaries, arising due to a change in the weight contribution of the $ZrCeO_2$ phase in the main matrix, the presence of which can cause not only the formation of local stresses, but also the formation of the effect of transformation hardening, resulting from a change in the weight ratio of the cubic phase CeO_2 and the monoclinic phase $ZrCeO_2$, which is accompanied by an increase in volume, and as a consequence, the creation of compressive stresses, the presence of which can restrain the propagation of cracks under external mechanical loads (in the case of indentation or assessment of strength in three-point bending).

The effect of phase composition variation on the change in thermal insulation properties is one of the important criteria for the applicability of ceramics as thermal barrier materials used in microelectronics, allowing protection against overheating of the main elements during operation in extreme conditions, including exposure to high temperatures and radiation. The efficiency of thermal insulation during the operation of materials under high temperatures determines the resistance of not only the protective material to thermal expansion and oxidation processes, but also, in the case of protecting microelectronic devices, preventing or reducing to a minimum the effect of thermally induced deformations arising as a result of thermal expansion of the crystalline structure under prolonged thermal exposure.

Figure 4a-b shows the results of experiments reflecting the change in temperature on the front and back sides of ceramics during high-temperature heating (at a temperature of 1000 °C) over a long period of exposure, the difference between which reflects the temperature of the thermal insulation. As is known, in ceramics in the case of high-temperature exposure, the heat transfer mechanisms are associated with phonon processes consisting of changes in the vibrations of the crystal lattice, as a result of which energy is transferred from one area to another. In this case, the formation of heterogeneities in the structure, including those associated with changes in the concentration of point defects, grain

boundaries or interphase boundaries acting as dissipating centers, makes heat transfer difficult, resulting in a decrease in thermal conductivity.

As can be seen from the data presented, the change in phase composition due to the formation of the $ZrCeO_2$ phase in the ceramics leads to a growth in the difference between the temperatures on the front and back sides of the ceramics, which indicates an increase in the thermal insulation properties of the ceramics, which in this case can be due to the effects of inhibiting phonon heat transfer mechanisms. In this case, the formation of the monoclinic phase of $ZrCeO_2$ in the composition of ceramics leads to the creation of additional barrier boundaries (the presence of which, in the case of strength parameters, plays a key role in strengthening), as well as a change in the structural features associated with the volumes of crystal lattices with partial substitution of Ce^{4+} ions for Zr^{4+} ions in the composition of $ZrCeO_2$, as well as possible reverse substitution in the cubic phase of CeO_2 , in the case of differences in ionic radii (for Ce^{4+} , the value of $r_{Ce^{4+}} \sim 0.97 \text{ \AA}$, for Zr^{4+} , the value of $r_{Zr^{4+}} \sim 0.84 \text{ \AA}$), causing the formation of additional defects, including oxygen vacancies (a change in the concentration of which was established during the analysis of the optical transmission spectra). These defects lead to an increase in phonon scattering, which reduces the effective thermal conductivity and leads to an increase in thermal insulation, as evidenced by the results of the temperature difference (ΔT), as well as the data presented in Figure 4b. It should be noted that the formation of the $ZrCeO_2$ phase in the composition of ceramics leads not only to an increase in thermal insulation properties, but also to an increase in the stability of maintaining the temperature difference under prolonged exposure to high temperatures, which is clearly visible when comparing the curves of the back side of the ceramics after 20 hours of testing, for which in the case of unmodified ceramics there is an insignificant growth in temperature, indicating a loss of thermal insulation properties.

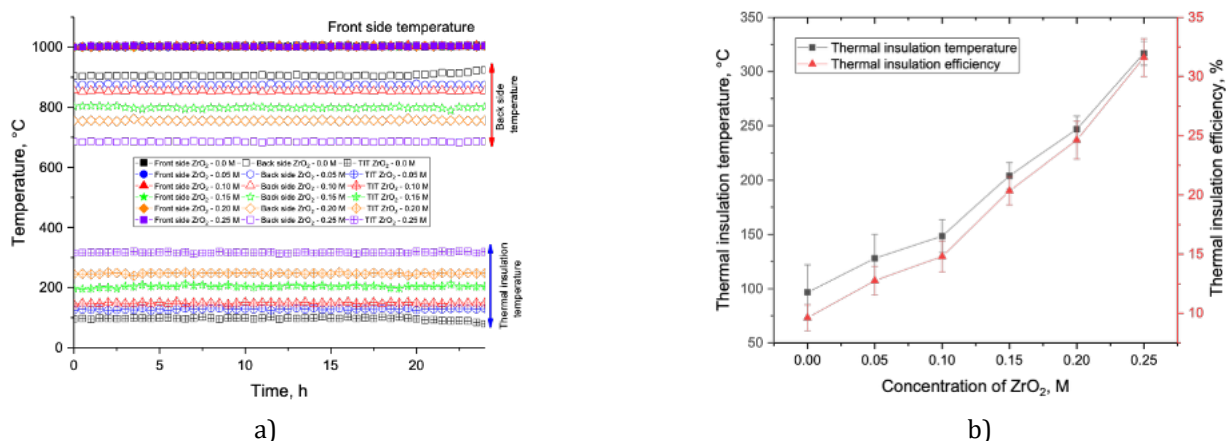


Figure 4. a) Results of experiments aimed at the identification of the thermal insulation properties of multicomponent ceramics; b) Results of a comparative analysis of changes in the ΔT value and thermal insulation efficiency with changes in the concentration of ZrO_2 in the composition of ceramics

The results of a comparative analysis of changes in the values characterizing the thermophysical parameters of ceramics when changing the components in the composition of ceramics are shown in Figure 5. The parameters chosen to determine the thermal physical properties were the thermal conductivity coefficient, which was measured using the longitudinal heat flow method, thermal conductivity losses, reflecting the change in the thermal conductivity coefficient with variations in the composition of the ceramics, as well as the efficiency of thermal insulation, calculated on the basis of changes in the temperature difference during heating tests of the samples. The general trend of observed changes in thermophysical parameters confirms the positive effect of changing the phase composition of ceramics due to the formation of the $ZrCeO_2$ phase in the structure, the presence of which leads not only to a reduction in thermal conductivity, but also to an increase in thermal insulation parameters, opening up the possibility of using these ceramics as thermal barrier coatings comparable in efficiency to zirconates [32,33].

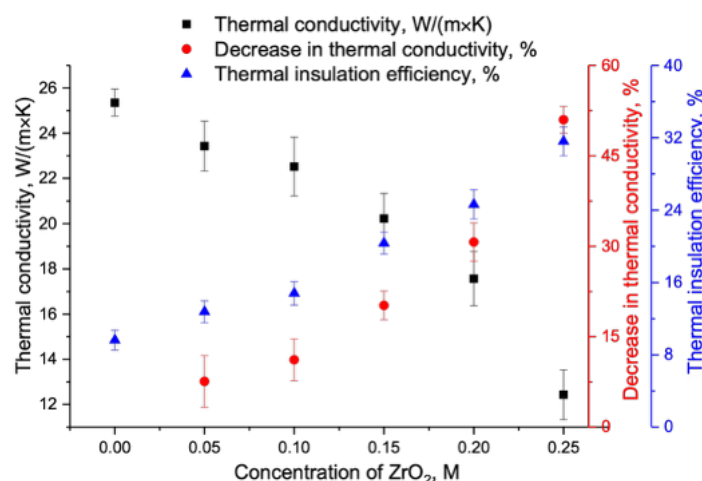


Figure 5. Results of a comparative analysis of changes in the values of the thermal conductivity coefficient, as well as changes in the decrease in thermal conductivity and increase in thermal insulation depending on the composition of ceramics with a change in the concentration of components

The possibility of creation of thermal barrier ceramics with high thermal insulation characteristics, which also combine high parameters of shielding gamma or neutron radiation, allows them to be considered not only as thermal barrier materials, but also as shielding materials, with the possibility of using them in extreme conditions. In this case, the combination of thermal insulation properties and shielding parameters opens up prospects for the use of these ceramics as protective materials for long-term storage of spent nuclear fuel, due to the need to keep it in conditions that do not allow overheating (high thermal insulation values), as well as shielding secondary radiation (electron, gamma) in combination with resistance to radiation damage. At the same time, as was shown in the works [34,35], the radiation damage accumulation leads to the destabilization of thermophysical parameters, causing a reduction in thermal conductivity, which in turn can be used to increase thermal insulation while maintaining a balance between the strength of the damaged layer during irradiation and the mechanisms of softening.

Figure 6 shows the results of the mass attenuation coefficient (MAC) estimation for all the ceramics under study, obtained by modeling the effects of the interaction of incident gamma quanta with energies in the range from 10^{-3} to 10^5 MeV. The results were obtained using the XCOM software code. The general form of the presented dependencies reflects small changes in the influence of variation in the ratio of oxide components in the composition of multicomponent ceramics. Based on the conducted simulation results, theoretical values of the shielding parameters were determined, which were compared with experimentally obtained data.

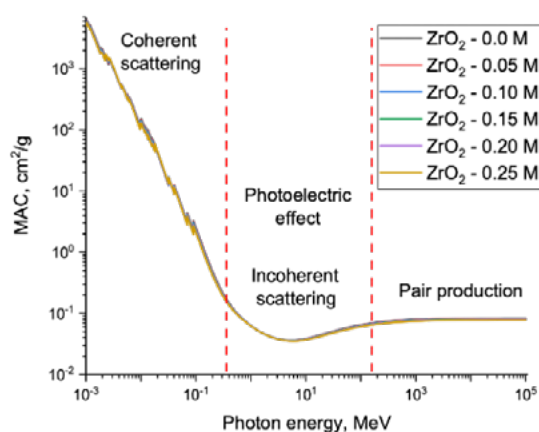


Figure 6. Evaluation results of the total cross-section value depending on the photon energy value obtained using the XCOM software code for multicomposite ceramics, depending on the concentration of the stabilizing component

Figures 7a-d reveal the evaluation results of the shielding efficiency of gamma quanta with an energy of 662 keV, reflecting the influence of the variation in the composition of multicomposite ceramics on the change in the shielding parameters. The data are presented in the form of comparative diagrams reflecting the comparison of the values obtained from the analysis of theoretical data obtained using the XCOM calculation code and experimentally obtained data that were obtained when evaluating the shielding of gamma quanta from the Cs^{137} source using the standard method for evaluating the change in intensity according to the Lambert-Beer law. The general trend of the observed changes between the theoretically obtained values of the shielding characteristics and the experimental data has a clearly expressed discrepancy, especially in the case of high concentrations of ZrO_2 in the composition, for which the magnitude of the difference in trends is about 10 – 12 % for cases of 20 – 25 wt. % ZrO_2 in the composition. This difference can be explained by the fact that in the case of simulation, the density values of the oxides used for calculations are taken into account, which, in the case of an increase in the proportion of ZrO_2 in the composition, results in total calculated density reduction from 6.9 g/cm^3 to 6.6 g/cm^2 , which is due to the fact that an elevation in the proportion of ZrO_2 with a density of 5.68 g/cm^3 leads to the substitution of weight fractions of oxides with higher density values (thus, the density of CeO_2 is about 7.22 g/cm^3 , and the densities of WO_3 and Bi_2O_3 are 7.16 and 8.9, respectively). In this case, the calculated data based on the density values reflect a slight decrease in the shielding values, which is about 2 – 3 %, which is quite acceptable for such compositions. However, the differences with the experimental data, especially in the case of large proportions of ZrO_2 in the composition, indicate a serious discrepancy between the theoretical and experimental data. The explanation for this difference may primarily be that the simulation did not consider the actual phase composition of the resulting ceramics, which has significant differences from the original oxides, which also causes changes in the density of the resulting ceramics. In this case, the shielding efficiency growth due to a change in the phase composition of ceramics indicates that in prediction and assessment of the applicability of multicomponent materials as protective shields, in the case where the composition of the obtained samples is a mixture of different phases, it is necessary to take into account not only the initial compositions, but also the phase composition, while for amorphous glass ceramics or glasses, the phase composition cannot be determined [36,37].

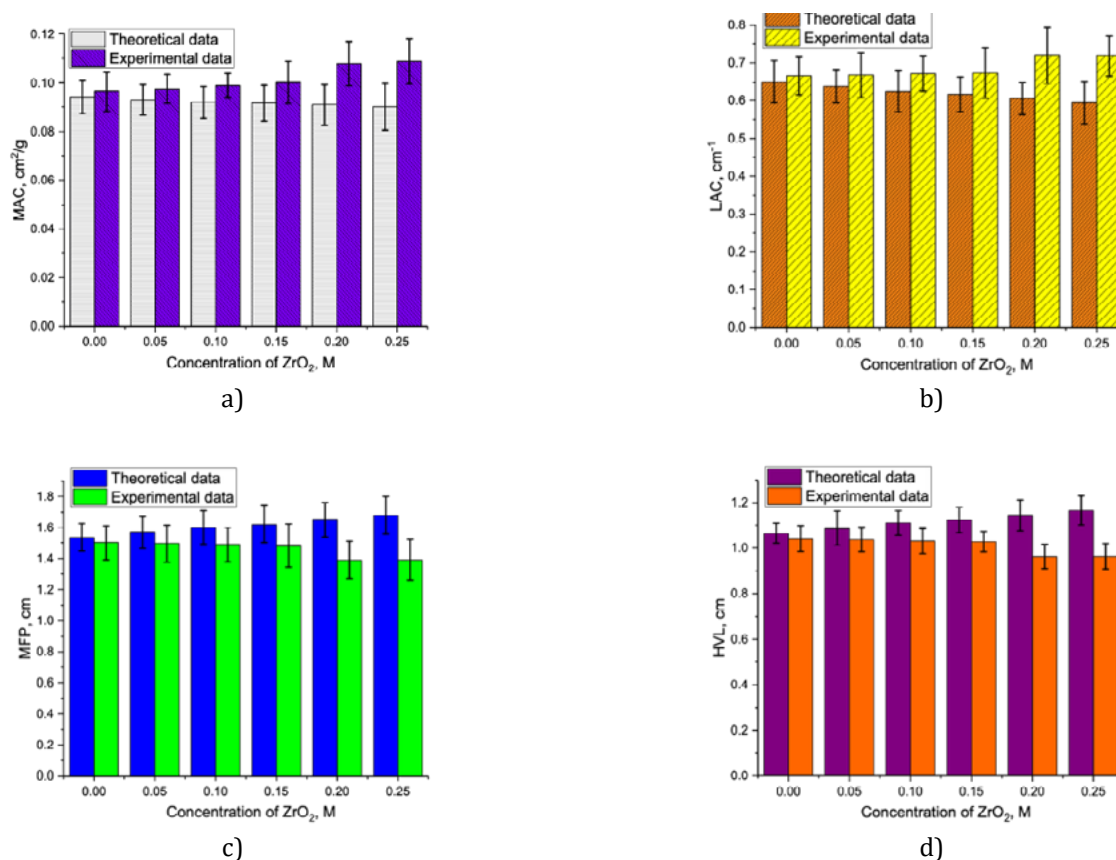


Figure 7. Evaluation results of the shielding characteristics of the studied ceramics depending on the variation in the concentration of the ZrO_2 component in the composition of the ceramics: a) MAC vs. concentration of ZrO_2 ; b) LAC vs. concentration of ZrO_2 ; c) MFP vs. concentration of ZrO_2 ; d) HVL vs. concentration of ZrO_2

It should be noted that the change in the phase composition of ceramics due to the formation of the $ZrCeO_2$ phase in the structure, as well as the general ratio of contributions, leads to an increase in the shielding efficiency, which is expressed in an increase in the MAC value, indicating an increase in the shielding efficiency. The results of the LAC value assessment for the studied ceramics show a trend towards a decrease in the value when the main components are replaced by zirconium dioxide, and the LAC value itself changes from 0.059 cm^{-1} to $0.63\text{-}0.65 \text{ cm}^{-1}$, which is a very good indicator, comparable to telluride glasses [38,39]. At the same time, the observed trend towards an increase in the LAC value indicates a positive effect of the influence of the formation of the $ZrCeO_2$ phase in the composition of ceramics on increasing the shielding efficiency. The obtained results indicate that changing the phase composition of ceramics allows not only the enhancement of the efficiency of thermal insulation and the strength of ceramics, but also the growth of shielding efficiency. Moreover, the inverse dependence of the LAC and MFP values shows that an increase in the zirconium dioxide concentration decreases the value from $\sim 1.6\text{-}1.7 \text{ cm}$ to $\sim 1.3\text{-}1.4 \text{ cm}$, which indicates that a change in the phase composition of ceramics leads to a reduction in the photon path length due to the presence of absorption centers, as well as additional structural features. The observed change in the HVL value from 1.2 cm to $1.0\text{-}1.1 \text{ cm}$ depending on the concentration of zirconium dioxide indicates that the addition of zirconium dioxide to the composition of ceramics, which leads to a change in the phase composition, leads to an increase in the ability of ceramics to absorb and scatter photon radiation, which leads to a decrease in the thickness of the material required to halve the intensity of gamma radiation, which can be used for practical applications.

Figure 8 shows the evaluation results of the shielding efficiency value determined on the basis of changes in the MAC value obtained experimentally during shielding of gamma quanta with an energy of 662 keV , when comparing it with the MAC value obtained for lead (Pb), which is a standard for shielding materials due to the highest shielding and absorption efficiency. Also shown for comparison are the results of the evaluation of the density values of multicomposite ceramics in comparison with the density value of lead. These parameters allow not only to evaluate the shielding efficiency of the proposed ceramic compositions in comparison with each other at the composition variation, but also to determine how promising the use of these ceramics for shielding is in comparison with the density values, which are one of the determining criteria in the assessment of the mass and dimensional parameters.

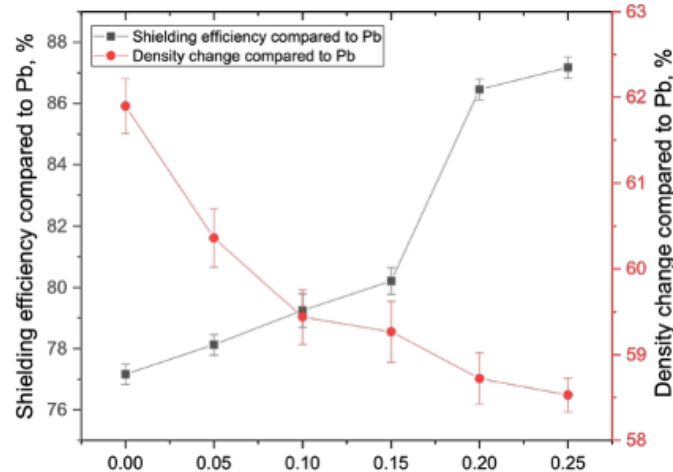


Figure 8. Results of comparative analysis of changes in the shielding efficiency parameter and density reduction when ZrO_2 is added to the composition of ceramics in comparison with the shielding parameters of the density of lead (reference sample for shielding)

As is evident from the data presented, alteration of the phase composition of ceramics by addition of zirconium dioxide to the composition allows the shielding efficiency growth from 77 to 86 % compared to the shielding efficiency of lead, while addition of more zirconium dioxide allows reduction of the density of ceramics from 62 % to 58.5 % compared to the density of lead at maintenance of shielding efficiency of more than 80 – 85 %.

Conclusion

The results of complex studies of the effect of the addition of zirconium dioxide to WO_3 - Bi_2O_3 - ZnO - TeO_2 - CeO_2 ceramics on the change in strength, thermal insulation and shielding characteristics were obtained.

According to the studies conducted, it was established that the formation of the $ZrCeO_2$ phase in the composition leads to an elevation in strength characteristics due to the formation of a hardening effect associated with the presence of interphase boundaries, the concentration of which increases with $ZrCeO_2$ phase growth in the composition.

During the studies conducted, it was determined that the addition of zirconium dioxide to the composition of multicomposite ceramics, which is accompanied by the formation of the $ZrCeO_2$ phase, an increase in the thermal insulation efficiency due to a decrease in the thermal conductivity of ceramics due to the thermal physical parameters of zirconium dioxide. The formation of this phase leads to an increase in scattering centers that prevent phonon heat transfer, which in turn leads to a slowdown in heat transfer.

Evaluation of the shielding efficiency with variations in the ratio of components in the composition of multicomposite ceramics in comparison with the reference values of shielding efficiency when using lead showed an increase from 77 to 86 % of shielding in comparison with the efficiency of lead at alteration of zirconium dioxide concentration in the composition, while substitution of heavy elements by zirconium dioxide makes it possible to reduce the density of ceramics to 58 – 60 % of the density of lead at maintenance of high shielding efficiency.

The general conclusion of the conducted research is that the addition of zirconium dioxide to the composition of multicomponent WO_3 - Bi_2O_3 - ZnO - TeO_2 - CeO_2 ceramics leads not only to an increase in strength and hardness, together with an increase in thermal insulation due to interphase boundaries and structural defects associated with oxygen vacancies, but also to an increase in the efficiency of gamma radiation absorption. The results of the comparative analysis indicate the prospects for using the proposed ceramic compositions as protective shielding materials combining high strength and thermal insulation indicators.

The contribution of the authors

Uglov V. and **Blynskiy P.** contributed equally to the research and preparation of the manuscript. The authors jointly developed the concept and design of the study, performed data collection, processing, and analysis, and carried out the discussion and interpretation of the results. Material synthesis and experimental investigations were also conducted jointly by the authors. Both authors have read and approved the final version of the manuscript.

References

1. H. Kilic, The Environmental and Ethical Issues of Nuclear Power and Ionizing Radiation, *Journal of Environmental Science and Engineering A*, 5, p.580-98 (2016). <http://doi.org/10.17265/2162-5298/2016.11.006>
2. D. K. Aswal, A. Chandra, Ionizing Radiation for Inclusive Growth, *Handbook on Radiation Environment 1: Sources, Applications and Policies* (Singapore: Springer Nature Singapore, 2024), p. 1-24.
3. A. Chaturvedi, V. Jain, Effect of ionizing radiation on human health, *International journal of plant and environment* 5(03), p. 200-205 (2019). <http://doi.org/10.18811/ijpen.v5i03.8>
4. N. I. Zakariya, M. T. Kahn, Benefits and biological effects of ionizing radiation, *Sch. Acad. J. Biosci* 2(9), p.583-591 (2014).
5. M. Tajstra, E. GADULA-GACEK, P. Buchta, S. Blamek, M. Gasior, J. Kosiuk, Effect of therapeutic ionizing radiation on implantable electronic devices: systematic review and practical guidance, *Journal of cardiovascular electrophysiology* 27(10), 1247-1251 (2016). <https://doi.org/10.1111/jce.13034>
6. M. Gaillardin, M. Martinez, S. Girard, V. Goiffon, P. Paillet, J. L. Leray, O. Faynot, High total ionizing dose and temperature effects on micro- and nano-electronic devices, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 62(3), p.1226-1232 (2015). <https://doi.org/10.1109/TNS.2015.2416975>
7. M. I. Sayyed, K. M. Kaky, E. Şakar, U. Akbaba, M. M. Taki, O. Agar. Gamma radiation shielding investigations for selected germanate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids* 512, p.33-40 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.02.014>
8. R. El-Mallawany, M. I. Sayyed, M. G. Dong, Y. S. Rammah, Simulation of radiation shielding properties of glasses contain PbO. *Radiation Physics and chemistry* 151, p.239-252 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2018.06.035>
9. N. Karpuz, Radiation shielding properties of glass composition. *Journal of Radiation Research and Applied Sciences* 16(4), p.100689 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jrras.2023.100689>

10. P. Kaur, D. Singh, T. Singh, Heavy metal oxide glasses as gamma rays shielding material, *Nuclear engineering and design* 307, p.364-376 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2016.07.029>
11. S. Yasmin, M. Saifuddin, S. R. Chakraborty, A. H. Meaze, B. S. Barua, Evaluation of TeO₂-WO₃-Bi₂O₃ glasses for their potential in radiation shielding with the utilization of the Phy-X software program, *Nexus of Future Materials* 1, p.584048 (2024). <https://doi.org/10.70128/584048>
12. M. I. Sayyed, M. Ç. Ersundu, A. E. Ersundu, G. Lakshminarayana, P. Kostka, Investigation of radiation shielding properties for MeO-PbCl₂-TeO₂ (MeO= Bi₂O₃, MoO₃, Sb₂O₃, WO₃, ZnO) glasses, *Radiation Physics and Chemistry* 144, p.419-425 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2017.10.005>
13. K. M. Kaky, M. I. Sayyed, M. H. A. Mhareb, H. H. Abbas, S. O. Baki, Physical, structural, mechanical, and various radiation shielding properties of TeO₂-GeO₂-ZnO-Al₂O₃-Li₂O-M (M= WO₃, MoO₃, PbO, and CuO) glasses, *Optical Materials* 145, p.114370 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114370>
14. A. Kozlovskiy, D. B. Borgekov, D. I. Shlimas, M. V. Zdorovets, Study of the efficiency of increasing the Bi₂O₃ concentration on the optical, radiation shielding and strength characteristics of 0.5 TeO₂-(0.5-x) WO₃-xBi₂O₃ glasses, *Optical Materials* 120, 111494 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111494>
15. J. S. Alzahrani, A. Sharma, S. N. Nazrin, Z. A. Alrowaili, M. S. Al-Buriahi, Optical and radiation shielding effectiveness of a newly fabricated WO₃ doped TeO₂-B₂O₃ glass system, *Radiation Physics and Chemistry* 193, p.109968 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2022.109968>
16. A. Temir, K. S. Zhumadilov, M. V. Zdorovets, I. V. Korolkov, A. Kozlovskiy, A. V. Trukhanov, Synthesis, phase transformations, optical properties and efficiency of gamma radiation shielding by Bi₂O₃-TeO₂-WO₃ ceramics, *Optical Materials* 113, p.110846 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.110846>
17. A. N. D'Souza, S. Yasmin, D. A. Aloraini, A. H. Almuqrin, M. Elsafi, M. I. Sayyed, S. D. Kamath, Experimental Study on the Radiation Shielding Performance of B₂O₃-SiO₂-TeO₂-Bi₂O₃-ZnO-BaO Glass Systems Containing Europium (III) Oxide, *ECS Journal of Solid State Science and Technology* 12(8), p.086002 (2023). <https://doi.org/10.1149/2162-8777/acec0f>
18. A. Nikrah, P. Taherparvar, A. Sadremomtaz, Effect of Ti, Bi, W, Zn, and Pb nanoparticles on the radiation shielding properties in transparent medium: a Monte Carlo study, *Journal of Instrumentation* 19(12), p.12021 (2024). <https://doi.org/10.1088/1748-0221/19/12/P12021>
19. J. G. Thakare, C. Pandey, M. M. Mahapatra, R. S. Mulik, Thermal barrier coatings – A state of the art review, *Metals and Materials International* 27, p.1947-1968 (2021). <https://doi.org/10.1007/s12540-020-00705-w>
20. X. Q. Cao, R. Vassen, D. Stöver, Ceramic materials for thermal barrier coatings, *Journal of the European Ceramic Society* 24(1), p.1-10 (2004). [https://doi.org/10.1016/S0955-2219\(03\)00129-8](https://doi.org/10.1016/S0955-2219(03)00129-8)
21. S. T. Vagge, S. Ghogare, Thermal barrier coatings, *Materials Today: Proceedings* 56, p.1201-1216 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.11.170>
22. Z. Zeng, Y. Liu, Y. Zhang, Z. Zhou, X. Liu, Ferroelastic domain switching toughening in Ce-Y-La co-stabilized zirconia ceramics obtained from coated starting powders, *Journal of Alloys and Compounds* 820, p.153177 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.153177>
23. S. Dudczig, D. Veres, C. G. Aneziris, E. Skiera, R. W. Steinbrech, Nano- and micrometre additions of SiO₂, ZrO₂ and TiO₂ in fine grained alumina refractory ceramics for improved thermal shock performance, *Ceramics International* 38(3), p.2011-2019 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2011.10.036>
24. L. Fu, B. Wang, Y. Zhu, T. Shen, Y. Deng, G. Xu, W. Xia, Structural integrity and damage of glass-ceramics after He ion irradiation: Insights from ZrO₂-SiO₂ nanocrystalline glass-ceramics, *Journal of the European Ceramic Society* 43(6), p.2624-2633 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2023.01.043>
25. S. Dey, J. W. Drazin, Y. Wang, J. A. Valdez, T. G. Holesinger, B. P. Uberuaga, R. H. Castro, Radiation tolerance of nanocrystalline ceramics: insights from yttria stabilized zirconia, *Scientific reports* 5(1), p.7746 (2015). <https://doi.org/10.1038/srep07746>
26. J. H. Hubbell, Tables of x-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/> (accessed 1996).
27. NIST, <https://physics.nist.gov> (accessed 1996).
28. N. A. Rejab, A. Z. A. Azhar, M. M. Ratnam, Z. A. Ahmad, The effects of CeO₂ addition on the physical, microstructural and mechanical properties of yttria stabilized zirconia toughened alumina (ZTA), *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials* 36, p.162-166 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2012.08.010>

29. C. Oses, C. Toher, S. Curtarolo, High-entropy ceramics, *Nature Reviews Materials* 5(4), p.295-309 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0170-8>
30. Y.Lakhdar, C. Tuck, J. Binner, A. Terry, R. Goodridge, Additive manufacturing of advanced ceramic materials, *Progress in Materials Science* 116, p.100736 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2020.100736>
31. M. H. Ghaemi, S. Reichert, A. Krupa, M. Sawczak, A. Zykova, K. Lobach, Y. Svitlychnyi, Zirconia ceramics with additions of Alumina for advanced tribological and biomedical applications, *Ceramics International* 43(13), p.9746-9752 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.04.150>
32. J. Zhang, X. Guo, Y. G. Jung, L. Li, J. Knapp, Lanthanum zirconate based thermal barrier coatings: A review, *Surface and Coatings Technology* 323, p.18-29. (2017). <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2016.10.019>
33. M. Mathanbabu, D. Thirumalaikumarasamy, P. Thirumal, M. J. M. T. P. Ashokkumar, Study on thermal, mechanical, microstructural properties and failure analyses of lanthanum zirconate based thermal barrier coatings: a review, *Materials Today: Proceedings* 46, p.7948-7954 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.02.672>
34. A. L. Kozlovskiy, M. B. Kabiev, D. I. Shlimas, V. V. Uglov, Study of the effect of the formation of two-phase ceramics based on neodymium zirconate due to doping with MgO and Y2O5 on the stability of strength and thermophysical parameters under irradiation, *Eurasian Physical Technical Journal*. 21(2), p.5-13 (2024). <https://doi.org/10.31489/2024No2/5-13>
35. A. L. Kozlovskiy, S. G. Giniyatova, D. I. Shlimas, D. B. Borgekov, R. M. Rspayev, M. V. Zdorovets, Study of the Influence of Doping Efficiency of CeO2 Ceramics with a Stabilizing Additive Y2O3 on Changes in the Strength and Thermophysical Parameters of Ceramics under High-Temperature Irradiation with Heavy Ions, *Crystals* 14(4), p.320 (2024). <https://doi.org/10.3390/cryst14040320>
36. P. Kaur, K. J. Singh, S. Thakur, P. Singh, B. S. Bajwa, Investigation of bismuth borate glass system modified with barium for structural and gamma-ray shielding properties, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 206, p.367-377 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.saa.2018.08.038>
37. S. A. Issa, Y. B. Saddeek, M. I. Sayyed, H. O. Tekin, O. Kilicoglu, Radiation shielding features using MCNPX code and mechanical properties of the PbONa2OB2O3CaOAl2O3SiO2 glass systems, *Composites Part B: Engineering* 167, p.231-240 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.12.029>
38. M. I. Sayyed, Modulation of optical, mechanical and radiation shielding characteristics in TeO2-B2O3-BaO-CeO2 glasses with varying CeO2 level. *Optical Materials*, 158, p.116492 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2024.116492>
39. M. H. A. Mhareb, M. I. Sayyed, R. I. Mahdi, K. M., Kaky, M. K. Hamad, A. J. Kadhim, Role of Nd (III) ions on B2O3-TeO2-GeO2-MgO glass composition for optical and ionizing protection application, *Nuclear Engineering and Technology* 57(1), p.103162 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.net.2024.08.031>

Блынский П.А.^{1*}, Углов В.В.²

¹ *Томск политехникалық университеті, Томск, Ресей*

² *Беларусь мемлекеттік университеті, Минск, Беларусь*

(E-mail: blynskiy@physics.kz, uglov@bsu.by)

Жылу оқшаулау сипаттамалары жоғары және ү-сәулеленуден тиімді қорғанысты қамтамасыз ететін көпкомпонентті керамикалық композиттік жүйелерді жобалау

Аңдатпа. Мақалада 1- x(TeO₂ – CeO₂ – WO₃ – ZnO₂ – Bi₂O₃) – xZrO₂ құрамды керамикалардың компоненттер арақатынасын өзгерту арқылы спектеу кезінде фазалық құрамының өзгеруіне байланысты жылуоқшаулағыш және ү-сәулеленуден қорғаныш қасиеттерінің өзгерістерін бағалау бойынша кешенді зерттеулердің нәтижелері ұсынылған. Негізгі TeO₂ – CeO₂ – WO₃ – ZnO₂ – Bi₂O₃ матрицасына цирконий диоксидін енгізу нәтижесінде моноклиндік ZrCeO₂ фазасының түзілетіні анықталды. Осы фазаның үлесінің артуы материалдың қаттылығы мен иілу кезіндегі беріктігінің жоғарылауымен сипатталатын беріктену әсерімен тікелей байланысты. 1- x(TeO₂ – CeO₂ – WO₃ – ZnO₂ – Bi₂O₃) – xZrO₂ композиттік керамикаларының жылуоқшаулағыш қасиеттері құрамдағы цирконий диоксиді мөлшерінің өзгеруіне байланысты зерттелді. Цирконий диоксидін қосу материалдың беріктік және жылуоқшаулағыш сипаттамаларын өзгертетіні анықталды. Тәжірибелер барысында керамика құрамындағы моноклиндік ZrCeO₂ орынбасушы фазасының үлесі артқан сайын үлгінің алдыңғы және артқы беттері арасындағы температура айырмасы өсетіні анықталды, бұл жылуоқшаулағыш қасиеттердің жақсарғанын көрсетеді.

Температура айырмасының артуы цирконий диоксидінің төмен жылуөткізгіштігімен түсіндіріледі. Экранирлеу қасиеттерінің жалпы талдауы $ZrCeO_2$ фазасының түзілуі радиациялық қорғаныс тиімділігіне оң әсер ететінін көрсетті. Нәтижесінде керамиканың сәулені жұту қабілеті 10 – 15 % артады. Сонымен қатар алынған керамикалар жоғары беріктікке және жақсартылған жылуоқшаулағыш қасиеттерге ие.

Түйін сөздер: композиттік керамика, жылуоқшаулағыш материалдар, қорғаныш экрандаушы керамика, жұту, экранирлеу, сәулелену әсері.

Блынский П.А.^{1*}, Углов В.В.²

¹ *Томский политехнический университет, Томск, Россия*

² *Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь*

(E-mail: blynskiy@physics.kz, uglov@bsu.by)

Проектирование многокомпонентных керамических композитных систем с повышенными теплоизоляционными характеристиками и эффективной защитой от γ -излучения

Аннотация. В статье представлены результаты комплексных исследований по оценке изменений теплоизоляционных и экранирующих характеристик керамики состава $1-x(\text{TeO}_2 - \text{CeO}_2 - \text{WO}_3 - \text{ZnO}_2 - \text{Bi}_2\text{O}_3) - x\text{ZrO}_2$ при варьировании соотношения компонентов в процессе спекания, что приводит к изменению фазового состава. Установлено, что введение диоксида циркония в состав основной матрицы $\text{TeO}_2 - \text{CeO}_2 - \text{WO}_3 - \text{ZnO}_2 - \text{Bi}_2\text{O}_3$ приводит к образованию моноклинной фазы $ZrCeO_2$, увеличение содержания которой прямо пропорционально наблюдаемому эффекту упрочнения, выражающемуся в повышении твёрдости и прочности при изгибе. Теплоизоляционные свойства композитной керамики $1-x(\text{TeO}_2 - \text{CeO}_2 - \text{WO}_3 - \text{ZnO}_2 - \text{Bi}_2\text{O}_3) - x\text{ZrO}_2$ были исследованы в зависимости от содержания диоксида циркония в составе, добавление которого изменяет прочностные и теплоизоляционные характеристики материала. В ходе экспериментов установлено, что увеличение доли моноклинной замещающей фазы $ZrCeO_2$ в составе керамики приводит к возрастанию разности температур между лицевой и тыльной сторонами образца, что свидетельствует об улучшении теплоизоляционных свойств. Рост температурного перепада обусловлен низкой теплопроводностью диоксида циркония. Общий анализ экранирующих характеристик показал положительное влияние образования фазы $ZrCeO_2$ на эффективность радиационной защиты, позволяя увеличить поглощающую способность керамики на 10 – 15 %. При этом полученная керамика характеризуется высокой прочностью и улучшенными теплоизоляционными свойствами.

Ключевые слова: композитная керамика, теплоизоляционные материалы, защитная экранирующая керамика, поглощение, экранирование, радиационное облучение.

References

1. H. Kilic, The Environmental and Ethical Issues of Nuclear Power and Ionizing Radiation, *Journal of Environmental Science and Engineering A*, 5, p.580-98 (2016). <http://doi.org/10.17265/2162-5298/2016.11.006>
2. D. K. Aswal, A. Chandra, Ionizing Radiation for Inclusive Growth, *Handbook on Radiation Environment 1: Sources, Applications and Policies* (Singapore: Springer Nature Singapore, 2024), p. 1-24.
3. A. Chaturvedi, V. Jain, Effect of ionizing radiation on human health, *International journal of plant and environment* 5(03), p. 200-205 (2019). <http://doi.org/10.18811/ijpen.v5i03.8>
4. N. I. Zakariya, M. T. Kahn, Benefits and biological effects of ionizing radiation, *Sch. Acad. J. Biosci* 2(9), p.583-591 (2014).
5. M. Tajstra, E. GADULA-GACEK, P. Buchta, S. Blamek, M. Gasior, J. Kosiuk, Effect of therapeutic ionizing radiation on implantable electronic devices: systematic review and practical guidance, *Journal of cardiovascular electrophysiology* 27(10), 1247-1251 (2016). <https://doi.org/10.1111/jce.13034>
6. M. Gaillardin, M. Martinez, S. Girard, V. Goiffon, P. Paillet, J. L. Leray, O. Faynot, High total ionizing dose and temperature effects on micro- and nano-electronic devices, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 62(3), p.1226-1232 (2015). <https://doi.org/10.1109/TNS.2015.2416975>

7. M. I. Sayyed, K. M. Kaky, E. Şakar, U. Akbaba, M. M. Taki, O. Agar. Gamma radiation shielding investigations for selected germanate glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids* 512, p.33-40 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2019.02.014>
8. R. El-Mallawany, M. I. Sayyed, M. G. Dong, Y. S. Rammah, Simulation of radiation shielding properties of glasses contain PbO. *Radiation Physics and chemistry* 151, p.239-252 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2018.06.035>
9. N. Karpuz, Radiation shielding properties of glass composition. *Journal of Radiation Research and Applied Sciences* 16(4), p.100689 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jrras.2023.100689>
10. P. Kaur, D. Singh, T. Singh, Heavy metal oxide glasses as gamma rays shielding material, *Nuclear engineering and design* 307, p.364-376 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2016.07.029>
11. S. Yasmin, M. Saifuddin, S. R. Chakraborty, A. H. Meaze, B. S. Barua, Evaluation of TeO₂-WO₃-Bi₂O₃ glasses for their potential in radiation shielding with the utilization of the Phy-X software program, *Nexus of Future Materials* 1, p.584048 (2024). <https://doi.org/10.70128/584048>
12. M. I. Sayyed, M. Ç. Ersundu, A. E. Ersundu, G. Lakshminarayana, P. Kostka, Investigation of radiation shielding properties for MeO-PbCl₂-TeO₂ (MeO= Bi₂O₃, MoO₃, Sb₂O₃, WO₃, ZnO) glasses, *Radiation Physics and Chemistry* 144, p.419-425 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2017.10.005>
13. K. M. Kaky, M. I. Sayyed, M. H. A. Mhareb, H. H. Abbas, S. O. Baki, Physical, structural, mechanical, and various radiation shielding properties of TeO₂-GeO₂-ZnO-Al₂O₃-Li₂O-M (M= WO₃, MoO₃, PbO, and CuO) glasses, *Optical Materials* 145, p.114370 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114370>
14. A. Kozlovskiy, D. B. Borgekov, D. I. Shlimas, M. V. Zdorovets, Study of the efficiency of increasing the Bi₂O₃ concentration on the optical, radiation shielding and strength characteristics of 0.5 TeO₂-(0.5-x) WO₃-xBi₂O₃ glasses, *Optical Materials* 120, 111494 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111494>
15. J. S. Alzahrani, A. Sharma, S. N. Nazrin, Z. A. Alrowaili, M. S. Al-Buriahi, Optical and radiation shielding effectiveness of a newly fabricated WO₃ doped TeO₂-B₂O₃ glass system, *Radiation Physics and Chemistry* 193, p.109968 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2022.109968>
16. A. Temir, K. S. Zhumadilov, M. V. Zdorovets, I. V. Korolkov, A. Kozlovskiy, A. V. Trukhanov, Synthesis, phase transformations, optical properties and efficiency of gamma radiation shielding by Bi₂O₃-TeO₂-WO₃ ceramics, *Optical Materials* 113, p.110846 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.110846>
17. A. N. D'Souza, S. Yasmin, D. A. Aloraini, A. H. Almuqrin, M. Elsafi, M. I. Sayyed, S. D. Kamath, Experimental Study on the Radiation Shielding Performance of B₂O₃-SiO₂-TeO₂-Bi₂O₃-ZnO-BaO Glass Systems Containing Europium (III) Oxide, *ECS Journal of Solid State Science and Technology* 12(8), p.086002 (2023). <https://doi.org/10.1149/2162-8777/acec0f>
18. A. Nikrah, P. Taherparvar, A. Sadremomtaz, Effect of Ti, Bi, W, Zn, and Pb nanoparticles on the radiation shielding properties in transparent medium: a Monte Carlo study, *Journal of Instrumentation* 19(12), p.12021 (2024). <https://doi.org/10.1088/1748-0221/19/12/P12021>
19. J. G. Thakare, C. Pandey, M. M. Mahapatra, R. S. Mulik, Thermal barrier coatings – A state of the art review, *Metals and Materials International* 27, p.1947-1968 (2021). <https://doi.org/10.1007/s12540-020-00705-w>
20. X. Q. Cao, R. Vassen, D. Stöver, Ceramic materials for thermal barrier coatings, *Journal of the European Ceramic Society* 24(1), p.1-10 (2004). [https://doi.org/10.1016/S0955-2219\(03\)00129-8](https://doi.org/10.1016/S0955-2219(03)00129-8)
21. S. T. Vagge, S. Ghogare, Thermal barrier coatings, *Materials Today: Proceedings* 56, p.1201-1216 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.11.170>
22. Z. Zeng, Y. Liu, Y. Zhang, Z. Zhou, X. Liu, Ferroelastic domain switching toughening in Ce-Y-La co-stabilized zirconia ceramics obtained from coated starting powders, *Journal of Alloys and Compounds* 820, p.153177 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.153177>
23. S. Dudczig, D. Veres, C. G. Aneziris, E. Skiera, R. W. Steinbrech, Nano- and micrometre additions of SiO₂, ZrO₂ and TiO₂ in fine grained alumina refractory ceramics for improved thermal shock performance, *Ceramics International* 38(3), p.2011-2019 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2011.10.036>
24. L. Fu, B. Wang, Y. Zhu, T. Shen, Y. Deng, G. Xu, W. Xia, Structural integrity and damage of glass-ceramics after He ion irradiation: Insights from ZrO₂-SiO₂ nanocrystalline glass-ceramics, *Journal of the European Ceramic Society* 43(6), p.2624-2633 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2023.01.043>
25. S. Dey, J. W. Drazin, Y. Wang, J. A. Valdez, T. G. Holesinger, B. P. Uberuaga, R. H. Castro, Radiation tolerance of nanocrystalline ceramics: insights from yttria stabilized zirconia, *Scientific reports* 5(1), p.7746 (2015). <https://doi.org/10.1038/srep07746>

26. J. H. Hubbell, Tables of x-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/> (accessed 1996).
27. NIST, <https://physics.nist.gov> (accessed 1996).
28. N. A. Rejab, A. Z. A. Azhar, M. M. Ratnam, Z. A. Ahmad, The effects of CeO₂ addition on the physical, microstructural and mechanical properties of yttria stabilized zirconia toughened alumina (ZTA), *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials* 36, p.162-166 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2012.08.010>
29. C. Oses, C. Toher, S. Curtarolo, High-entropy ceramics, *Nature Reviews Materials* 5(4), p.295-309 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41578-019-0170-8>
30. Y.Lakhdar, C. Tuck, J. Binner, A. Terry, R. Goodridge, Additive manufacturing of advanced ceramic materials, *Progress in Materials Science* 116, p.100736 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2020.100736>
31. M. H. Ghaemi, S. Reichert, A. Krupa, M. Sawczak, A. Zykova, K. Lobach, Y. Svitlychnyi, Zirconia ceramics with additions of Alumina for advanced tribological and biomedical applications, *Ceramics International* 43(13), p.9746-9752 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.04.150>
32. J. Zhang, X. Guo, Y. G. Jung, L. Li, J. Knapp, Lanthanum zirconate based thermal barrier coatings: A review, *Surface and Coatings Technology* 323, p.18-29. (2017). <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2016.10.019>
33. M. Mathanbabu, D. Thirumalaikumarasamy, P. Thirumal, M. J. M. T. P. Ashokkumar, Study on thermal, mechanical, microstructural properties and failure analyses of lanthanum zirconate based thermal barrier coatings: a review, *Materials Today: Proceedings* 46, p.7948-7954 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.02.672>
34. A. L. Kozlovskiy, M. B. Kabiev, D. I. Shlimas, V. V. Uglov, Study of the effect of the formation of two-phase ceramics based on neodymium zirconate due to doping with MgO and Y₂O₅ on the stability of strength and thermophysical parameters under irradiation, *Eurasian Physical Technical Journal*. 21(2), p.5-13 (2024). <https://doi.org/10.31489/2024No2/5-13>
35. A. L. Kozlovskiy, S. G. Giniyatova, D. I. Shlimas, D. B. Borgekov, R. M. Rspayev, M. V. Zdorovets, Study of the Influence of Doping Efficiency of CeO₂ Ceramics with a Stabilizing Additive Y₂O₃ on Changes in the Strength and Thermophysical Parameters of Ceramics under High-Temperature Irradiation with Heavy Ions, *Crystals* 14(4), p.320 (2024). <https://doi.org/10.3390/cryst14040320>
36. P. Kaur, K. J. Singh, S. Thakur, P. Singh, B. S. Bajwa, Investigation of bismuth borate glass system modified with barium for structural and gamma-ray shielding properties, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 206, p.367-377 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.saa.2018.08.038>
37. S. A. Issa, Y. B. Saddeek, M. I. Sayyed, H. O. Tekin, O. Kilicoglu, Radiation shielding features using MCNPX code and mechanical properties of the PbONa₂OB₂O₃CaOAl₂O₃SiO₂ glass systems, *Composites Part B: Engineering* 167, p.231-240 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2018.12.029>
38. M. I. Sayyed, Modulation of optical, mechanical and radiation shielding characteristics in TeO₂-B₂O₃-BaO-CeO₂ glasses with varying CeO₂ level. *Optical Materials*, 158, p.116492 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2024.116492>
39. M. H. A. Mhareb, M. I. Sayyed, R. I. Mahdi, K. M., Kaky, M. K. Hamad, A. J. Kadhim, Role of Nd (III) ions on B₂O₃-TeO₂-GeO₂-MgO glass composition for optical and ionizing protection application, *Nuclear Engineering and Technology* 57(1), p.103162 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.net.2024.08.031>

Information about the authors:

Blynskiy P.A. – the corresponding author, PhD, Tomsk Polytechnic University, 30 Lenin Avenue, 634050, Tomsk, Russia, blynskiy@physics.kz, +7 702 441 3368

Uglov V.V. – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Department of Solid State Physics, Professor of the Faculty of Physics, Belarusian State University, 4 Independence Avenue, 220030, Minsk, Belarus, uglov@bsu.by, +375293217177

Блынский П.А. – автор для корреспонденции, PhD, Томский политехнический университет, проспект Ленина, 30, 634050, г. Томск, Россия, blynskiy@physics.kz, +7 702 441 3368

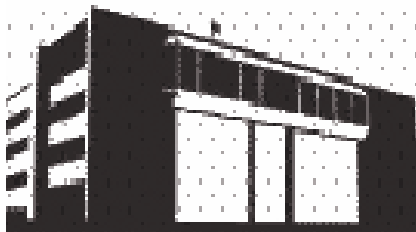
Углов В.В. – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики твердого тела, профессор физического факультета Белорусского государственного университета, проспект Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь, uglov@bsu.by, +375293217177

Блынский П.А. –хат-хабар авторы, PhD, Томск политехникалық университеті, Ленин даңғылы, 30, 634050, Томск қ., Ресей, blynskiy@physics.kz, +7 702 441 3368

Углов В.В. –физика-математика ғылымдарының докторы, қатты дене физикасы кафедрасының меңгерушісі, Беларусь мемлекеттік университеті физика факультетінің профессоры, Тәуелсіздік даңғылы, 4, 220030, Минск қ., Беларусь Республикасы, uglov@bsu.by, +375293217177



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/>).



Трансуран ядроларының спонтанды бөліну қасиеттерін зерттеу үшін газ толтырылған GRAND сепараторының фокальді жазықтығында SFiNx детекторлық жүйесін қолдану

**Б.С. Сайлаубеков^{1,2,3*}, А.И. Свирихин^{1,2,4}, М.С. Тезекбаева^{1,2,4},
Х.М. Девараджа^{1,2}, А.В. Исаев^{1,2,4}, Р.С. Мухин², Ю.А. Попов^{2,4}**

¹Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан

²Біріккен ядролық зерттеулер институты, Дубна, Ресей

³Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

⁴Дубна мемлекеттік университеті, Дубна Ресей

E-mail: *bsailaybekov@jinr.ru, asvirikhin@jinr.ru, tezekbaeva@jinr.ru, devaraja@jinr.ru, isaev@jinr.ru, rmukhin11@gmail.com, yarpopov8511@yandex.ru, zhumadilovk@gmail.com

Аңдатпа. Біріккен ядролық зерттеулер институтында (БЯЗИ) ауыр спонтанды бөлінетін ядролардың синтезі және олардың ыдырау сипаттамаларын зерттеу саласында көпжылдық тәжірибе жинақталған. Осы зерттеулердің мүмкіндіктерін кеңейту үшін Аса ауыр элементтер фабрикасы (ААЭФ) құрылды, оның негізгі элементі жоғары қарқынды сәулелермен жұмыс істеуге оңтайландырылған DGFERS-2 газ толтырылған сепараторы болып табылады. ДЦ-280 үдеткішін DGFERS-2 сепараторымен бірге қолдану соңғы жылдары трансурандық нысаналармен бірқатар сәтті тәжірибелер жүргізуге мүмкіндік берді. Қондырғының жоғары тиімділігі рекордтық қысқа мерзімде (шамамен бір ай) ААЭ изотоптарының ыдырауының 100 оқиғасына дейін тіркелуімен расталды, бұл өте аз қималар жағдайында айтарлықтай жетістік болып табылады.

DGFERS-2 сепараторының сәтті пайдаланылуы GRAND әмбебап газ толтырылған сепараторының жобасын әзірлеуге негіз болды, оның фокальді жазықтығына SFiNx детекторлық жүйесін орналастыру жоспарлануда.

Бұл мақалада негізгі назар трансурани ядроларының спонтанды бөліну қасиеттерін зерттеу үшін қолданылған тәжірибе әдістемесіне және GRAND сепараторында SFiNx жүйесін пайдалану перспективаларына аударылған. GRAND сепараторында жүргізілген сынақ тәжірибелерінің және SHELS сепараторында SFiNx детекторлық жүйесін қолдана отырып жүргізілген тәжірибелердің нәтижелері ұсынылған. Осы жүйені ААЭФ инфрақұрылымына енгізу мүмкіндіктері қарастырылуда. Ұсынылып отырған әдістеменің басты артықшылығы — бөлінудің лездік нейтрондарын тіркеу мүмкіндігі, бұл ауыр және аса ауыр ядролардың спонтанды бөліну нейтрондарының еселігін өлшеу бойынша тәжірибелерді жоспарлау үшін жаңа мүмкіндіктер ашады. Жасалған тәжірибелік әдістер осы саладағы болашақ зерттеулер үшін елеулі әлеуетке ие.

Түйін сөздер: газ толтырылған сепаратор, нейтронды детектор, лездік нейтрондар еселігі, спонтанды бөліну, трансурани ядролар.

Жіберілді 9.04.2023. Өзгертілді 12.05.2023. Қабылданды 01.06.2023. Онлайн қол жетімді 30.09.2023

*хат-хабар авторы

Кіріспе

Ауыр трансурани ядроларын тәжірибелік зерттеу қазіргі ядролық физиканың іргелі міндеттерінің бірі болып табылады және айтарлықтай әдістемелік қиындықтармен байланысты. Негізгі қиындықтар зерттелетін ядролардың түзілуінің өте төмен қималарымен және олардың қысқа өмір сүру уақыттарымен шартталған. Мұндай зерттеулерді жүргізу нысаналарды ұзақ уақыт бойы сәулелендіру циклдарын, содан кейін реакция өнімдерін бөліп алу мен тіркеудің жоғары тиімді әдістерін қолдануды талап етеді. Осы аймақтағы ядролардың көпшілігі үшін ыдыраудың басым арнасы спонтанды бөліну болып табылады – бұл химиялық элементтердің болу шекараларын түсінуге жақындататын, жан-жақты зерттеуді қажет ететін күрделі үдеріс.

Ядроның бөліну энергиясы басым түрде жарықшақтардың қозу энергиясына ауысады, бұл энергия лездік нейтрондардың булануы және γ -кванттардың шығарылуы арқылы бөсеңдетіледі. Осы тұрғыдан, $Z > 92$ ядролардың спонтанды бөліну сипаттамаларын зерттеу үдерістің тұтас теориясын құру үшін шешуші мәнге ие, өйткені қолданыстағы үлгілер оның барлық аспектілерін толыққанды сипаттай алмайды. Қазіргі уақытқа дейін жинақталған тәжірибелік мәліметтер массиві жартылай ыдырау мерзімдерінің парциалды өлшемдерін [1], бөліну жарықшақтарының массалық және энергетикалық үлестірімдерін [2] қамтиды. Лездік нейтрондардың еселігін өлшеу [3–4] ерекше маңызға ие, өйткені бұл өлшемдер бөліну динамикасы туралы ақпарат береді және реакцияның энергетикалық балансын қалпына келтіруге мүмкіндік береді. Нейтрондардың орташа шығымын және оның үлестірімдерін анықтау реактордың кризистік шарттарын бағалау үшін өте маңызды, бұл тізбекті ядролық реакцияны басқарудың қауіпсіздігі мен тиімділігі мәселелеріне тікелей әсер етеді.

БЯЗИ-дың Г. Н. Флёрв атындағы Ядролық реакциялар зертханасында (ЯРЗ) бөліну нейтрондарын зерттеу заманауи SFiNx (Spontaneous Fission, Neutrons and X-rays) детекторлық жүйесін [5-6] қолдану арқылы жүргізіледі. Бұл жұмыста осы жүйені жаңа газ толтырылған GRAND (Gas-filled Recoil Analyzer and Nuclei Detector) сепараторының [7] фокальді жазықтығында қолдану перспективалары қарастырылады. SFiNx пен GRAND комбинациясы ауыр және аса ауыр ядролардың қиын қолжетімді аймағында спонтанды бөліну нейтрондарының шығымдары туралы алғаш рет толық деректер алуға мүмкіндік береді. Бұл нәтижелер бөлінудің теориялық үлгілерін дамытуда айтарлықтай прогресті қамтамасыз етеді, жүздеген нуклондарды қамтитын үдеріс динамикасын түсінуді тереңдетеді және жекелеген изотоптарда бөлінудің жаңа модаларының ашылуына әкелуі мүмкін.

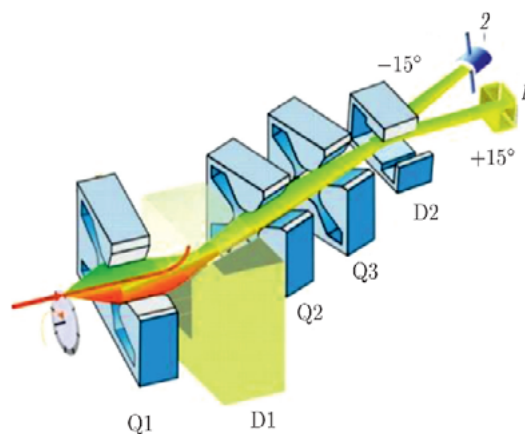
Әдіснама

1. Тәжірибелік қондырғы сипаттамасы

GRAND газ толтырылған сепараторы

ДЦ-280 үдеткішінің сәулелерінде DGFRS-2 (Dubna Gas-Filled Recoil Separator) [8] газ толтырылған кинематикалық сепараторын тиімді пайдалану ұқсас ион-оптикалық Q-D-QQ-D схемасын (Q — квадрупольдік линза, D — дипольдік магнит) қолданатын әмбебап газ толтырылған сепаратор жасау идеясына әкелді. Жаңа GRAND сепараторының схемасы 1-суретте көрсетілген.

Газ толтырылған сепаратордың жұмыс істеу принципі келесідей. ДЦ-280 үдеткішінен шыққан ^{48}Ca иондарының сәулесі дифференциалды сору жүйесі арқылы өтеді, бұл жүйе GRAND көлеміндегі газ бен ион өткізгіш көлеміндегі жоғары вакуумды (10^{-7} Торр) бөлуді қамтамасыз етеді, және нысанаға түсіп, онда нысана ядроларымен реакцияға түседі. Энергия мен импульстің сақталу заңдарына сәйкес, құрама ядродан бірнеше нейтронның булануы кезінде түзілетін қайтарма ядролар (ҚЯ) нысанадан ұшып шығады. Бұл ядролар жеткілікті жоғары зарядқа (актинидті нысаналармен реакциялар үшін $q \approx 19^+$) және кең зарядтық үлестірімге ие. ҚЯ-дың сепаратордағы газ атомдары мен молекулаларымен соқтығысуы, заряд алмасу процестерімен қатар жүріп, үлестірімнің тарылуына және оның орташа мәнінің шамамен 6^+ -ға дейін төмендеуіне әкеледі. ^{48}Ca сәуле иондары үшін заряд алмасу қимасы ҚЯ-мен салыстырғанда олардың жоғары жылдамдығына байланысты (3-4 есе) аз, бұл сәуледегі зарядтық күйлердің қатты денелік күйлерге жақын болуына мүмкіндік береді ($\approx 17^+$). Бірдей импульстер кезінде бір магнит өрісіндегі ҚЯ мен сәуле иондарының траекториялары зарядтардағы үш еселік айырмашылыққа байланысты әр түрлі болады, бұл ҚЯ-дың сәуле иондарынан тиімді сепарациясын қамтамасыз етеді.



**1, 2 – детекторлық жүйелер орналасатын фокальді жазықтық
1-сурет. GRAND газ толтырылған сепаратор схемасы**

Ескерту: деректер негізінде құрастырылған [7]

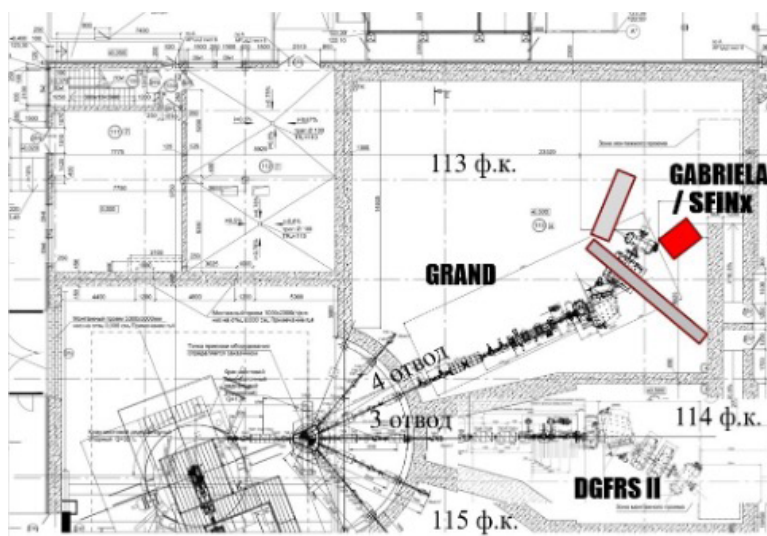
Әрі қарай ҚЯ алдымен қысымы 0.7 Торр гелиймен толтырылған бірінші квадрупольдік магнит Q1 камерасына түседі. Бұл камерада ядролар бірінші дипольдік магнит D1 полюстерінің арасында орналасқан қабырғалармен соқтығысу кезіндегі жоғалтуларды азайту үшін тігінен фокусталады. Мұнда ҚЯ-дың сәуле иондарынан негізгі сепарациясы жүреді. Содан кейін ҚЯ Q2-Q3 квадрупольдік линзалар дублетімен фокусталады, екінші дипольдік магнит D2 камерасына түседі, мұнда ҚЯ-дың жоғары энергиялы протондар мен α -бөлшектерден сепарациясы жүзеге асырылады. Осыдан кейін ядролар сәулесі сепаратордың гелиймен толтырылған көлемінен шығып, ұшып өту жүйесінен өтеді және детектор камерасына түседі.

Бұл сепаратордың DGFRS-2-ден басты айырмашылығы ҚЯ-ды D2 дипольдік магнитінде $\pm 15^\circ$ бұрышқа ауытқыту мүмкіндігі болып табылады (DGFRS-2-дегі $+10^\circ$ -қа қарағанда). Негізгі D1 дипольдік магнитінде ҚЯ DGFRS-2-дегідей бұрышқа бұрылады, бірақ қарама-қарсы бағытта. Бұл ДЦ-280 кешенінің тәжірибелік кабинетіндегі сәуле желілерінде физикалық қондырғылардың орналасуымен шартталған (2-суретті қараңыз). Көрнекілік үшін 1-кестеде ауыр элементтер изотоптарының синтезі және қасиеттерін зерттеу жөніндегі тәжірибелерде қолданылатын қолданыстағы газ толтырылған сепараторлардың параметрлері келтірілген.

1-Кесте. Ауыр элементтер изотоптарын синтездеу және зерттеу тәжірибелерінде қолданылатын газ толтырылған сепараторлардың салыстырмалы сипаттамалары [7]

Қондырғы	Конфигурация	Бұру бұрышы, °	Макс $B \cdot \rho$ Тл·м	Дисперсия, мм/% $B \cdot \rho$	Ұзындығы, м
DGFRS-1	$D_v Q_h Q_v$	23	3.1	7.5	4.07
DGFRS-2	$Q_v D_h Q_h Q_v D$	(32+10)	3.35	32.8	7.41
BGS	$Q_v D_h D$	(25+45)	2.5	20.2	4.6
GARIS-1	$D_{vh} Q_h Q_v D$	(45+10)	2.16	9.7	5.76
GARIS-2	$Q_v D_h Q_h Q_v D$	(30+7)	2.43	19.3	5.06
TASCA	$D Q_h Q_v$	30	2.4	9.0	3.5
RITU	$Q_v D Q_h Q_v$	25	2.2	10	4.8
SHANS-2	$Q_v D_h Q_h Q_v D$	(30+10)	2.5	21.7	5.85
GRAND	$Q_v D_h Q_v Q_h D$	(32±15)	3.35	32.8	7.95

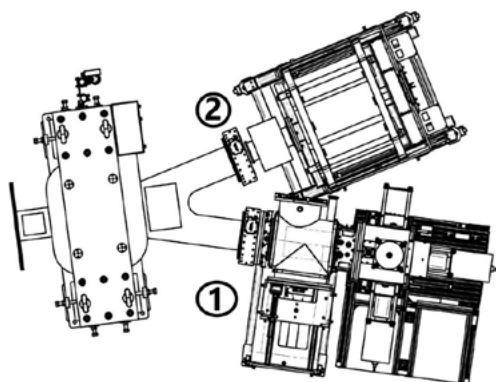
Ескерту: деректер негізінде құрастырылған [7]



2-сурет. GRAND және DGFRS-2 сепараторларының ДЦ-280 кешенінің тәжірибелік кабиналарында орналасу схемасы

Соның нәтижесінде, GRAND сепараторының фокальді жазықтығында екі детекторлық жүйені орнату жоспарлануда (3-суретті қараңыз):

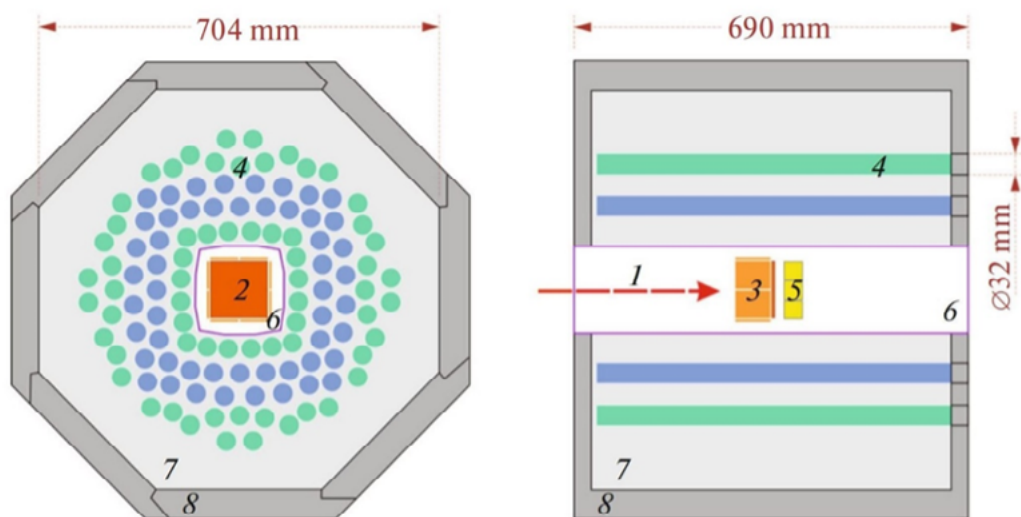
1. Трансуран ядролары изотоптарының α -, β -, γ - спектрометриясы бойынша тәжірибелер жүргізуге арналған GABRIELA (Gamma Alpha Beta Recoil Investigations with the Electromagnetic Analyzer) [9] детекторлық жүйесі.
2. Ауыр ядролардың спонтанды бөліну кезіндегі лездік нейтрондар спектрометриясы бойынша тәжірибелерді орындауға арналған SFiNx детекторлық жүйесі



3-сурет. Газ толтырылған GRAND сепараторының фокальді жазықтығында детекторлық жүйелердің ықтимал орналасу схемасы

SFiNx детекторлық жүйесі

2022 жылы «Нейтрондық бөшке» [10] детекторын жаңғырту нәтижесінде жетілдірілген SFiNx детекторлық жүйесі әзірленіп, пайдалануға енгізілді. Бұл жүйе (4-суретті қараңыз) DSSD (Double-Sided Silicon Strip Detector) құрастырылымымен жабдықталған вакуумдық камераның периметрі бойынша біркелкі орналасқан 116 нейтрондық ^3He -санауыштарды қамтиды.

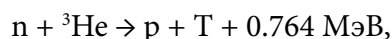


1 – ҚЯ; 2 – фокальді DSSD детектор; 3 – бүйірлік Si-детекторлары; 4 – ^3He -санауыштар; 5 – сцинтиллятор; 6 – вакуумдық камера; 7 – баяулатқыш; 8 – сыртқы фоннан қорғаныс

4-сурет. SFiNx схемасы (алдыңғы көрінісі – сол жақта; бүйір көрінісі – оң жақта)

Ескерту: деректер негізінде құрастырылған [6]

Спонтанды бөлінудің лездік (жылдам) нейтрондары полиэтилендік баяулатқышта термализацияға ұшырайды, нәтижесінде жылулық энергияларға ($\sim 0,025$ эВ) жетеді. Термализацияланған нейтрондар келесі ядролық реакция арқылы ^3He -санауыштармен тиімді тіркеледі:



жылулық нейтрондар үшін ерекше үлкен қармау қимасымен (5330 барн) сипатталады.

Нейтрондық санауыштар тот баспайтын болаттан жасалған (катод), сыртқы диаметрі шамамен 32 мм және ұзындығы 500 мм болатын, газбен (^3He) толтырылған цилиндрлік детекторлар болып табылады. Олардың ішінде анод қызметін атқаратын жұқа алтын жалатылған вольфрам жіпшесі орналасқан. Жылулық нейтрондар гелиймен әрекеттескенде, протон мен тритон бөлінетін ядролық реакция жүреді, олар детектордағы газды иондайды. Пайда болған зарядталған бөлшектер түсірілген электр өрісінің әсерінен электродтарда ток импульсін тудырады, бұл нейтрондарды тіркеуге мүмкіндік береді. Вольфрам жіпшесінің алтын жалатылуы электр өрісінің біркелкілігін және детектор жұмысының тұрақтылығын қамтамасыз етеді, ал корпусың берік болат конструкциясы тәжірибе жағдайында сенімділікке кепілдік береді.

Санауыштар 7 атмосфера қысымдағы ^3He -мен толтырылған, құрамында аргон қоспасы (10%-ға дейін) бар. Бұл протондар мен тритондардың төмен өту қашықтығын сақтай отырып, ядролық реакцияның зарядталған өнімдерінің энергиясын тиімді жұтуды қамтамасыз етеді. Зарядталған бөлшектер мен γ -фонынан болатын электрондардың өту қашықтықтарының әртүрлі болуының арқасында импульстердің амплитудалық спектрі нейтрондық оқиғаларды (тән шың) және фондық γ -сигналдарды (кіші амплитудалар облысы) нақты ажыратады. Нейтрондарды сұрыптау үшін сигналдардың табалдырықтық дискриминациясы қолданылады. Нейтрондық санауыштардың толық сипаттамалары 2-кестеде берілген.

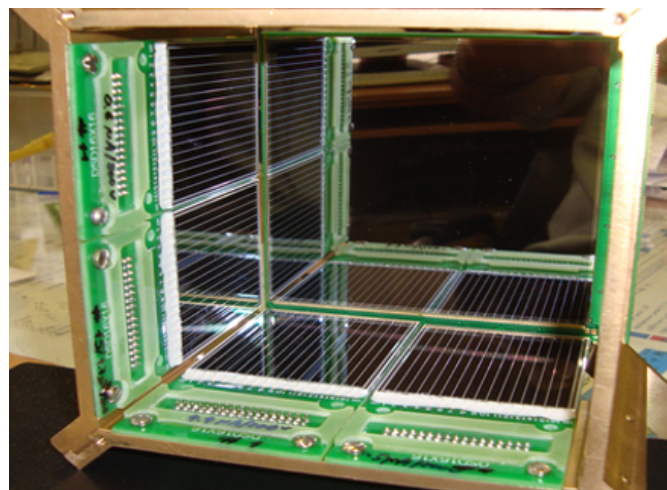
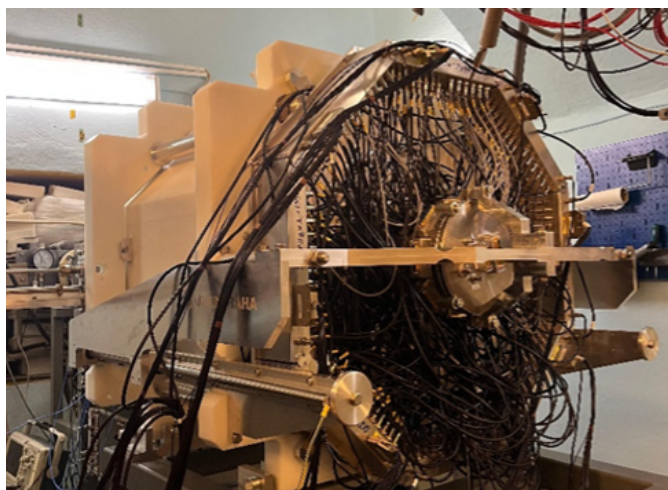
Нейтрондардың полиэтилендік баяулатқышы (5-сурет, сол панель) биіктігі 630 мм, сырттай сызылған шеңбердің диаметрі 762 мм болатын сегізбұрышты призма болып табылады. Фондық нейтрондарды азайту үшін конструкция бүйір қырлары бойынша қалыңдығы 50 мм, ал жоғарғы және төменгі табандарында 30 мм борленген полиэтиленмен (5% бор қоспасы) қорғалған. Мұндай конфигурация жылдам нейтрондардың тиімді баяулауын және сонымен бірге паразиттік нейтрондық фонның жұтылуын қамтамасыз етеді.

2-Кесте. Құрастырылымда қолданылатын нейтрондық санауыштардың сипаттамалары [6]

Өндіруші	Диаметрі, мм	Белсенді ұзындығы, мм	Жұмыс кернеуі, В	Қабат	Саны	³ He қысымы, атм
"Консенсус" ҒӨФ	32	530	1400	1	20	7
				4	44	
ЯРЗ БЯЗИ	460	1775	2	24		
			3	28		

Ескерту: деректер негізінде құрастырылған [6]

Нейтрондық санауыштар ішіне DSSD құрастырылымы орналастырылған вакуумдық камераны қоршайды. 128 × 128 стриптен тұратын фокальды кремний детекторының активті аймағы 100 × 100 мм² және қалыңдығы 500 мкм. Конфигурациясы 16 × 16 стрип, өлшемдері 50 × 60 мм² және қалыңдығы 700 мкм болатын сегіз кремнийлі жартылай өткізгіш детекторлары фокальді детекторға перпендикуляр орнатылып, "құдық" тәрізді құрастырылымды құрайды (5-сурет, оң панель).



5-сурет. SFiNx детекторлық жүйесі (сол панель), DSSD құрастырылымы (оң панель)

Ескерту: деректер негізінде құрастырылған [6]

Спонтанды бөліну кезінде пайда болатын γ -сәулені тіркеу үшін DSSD-детекторының артына CLLBC кристаллынан ($\text{Cs}_2\text{LiLaBr}_{4-8}\text{Cl}_{1-2}\text{:Ce}$) [11] жасалған сцинтиллятор орнатылған. Бұл детектор пайдалы сигналдарды фоннан импульстердің пішіні бойынша ажыратуға мүмкіндік береді. DSSD сигналдары мен CLLBC-дегі γ -жарқылдары арасындағы сәйкестіктер бөліну актілерін сенімді түрде сәйкестендіруге және деректерді фондық оқиғалардан тазартуға көмектеседі.

248Сm көзімен нейтрондық жүйені калибрлеу детектордың негізгі параметрлерін анықтауға мүмкіндік берді [5]: жеке нейтронды тіркеу тиімділігі $(55 \pm 1)\%$ және жүйедегі нейтрондардың орташа өмір сүру (нейтрондардың жылулық энергияларға дейін баяулау уақыты мен ^3He ядроларымен қармау сәтінге дейінгі диффузия уақытының қосындысымен анықталатын) уақыты (18 ± 1) мкс. Бұл параметр уақыттық талдау үшін өте маңызды, себебі нейтрондық оқиғаларды іздеудің оңтайлы терезесін

анықтайды – оның ұлғаюы фондық сәулеленумен кездейсоқ сәйкестіктер ықтималдығының артуына әкеледі. Фокальді DSSD-де бөліну жарықшақтарының тіркелуі нейтрондарды детекторлау үшін ұзақтығы 128 мкс болатын уақыт терезесінің ашылуын бастайды, бұл бөліну актісіне нейтрондық еселікті 8 нс қадаммен дәл өлшеуді қамтамасыз етеді.

Бұл құрастырылым α -бөлшектерін, спонтанды бөліну жарықшақтарын және фокальді DSSD детекторынан ұшып шығатын жарықшақтардың лездік нейтрондарын тіркеуге мүмкіндік береді. Осы құрастырылымдағы фокальді детектордың тіркеу тиімділігі α -бөлшектер үшін 50% және кем дегенде бір жарықшақты тіркеу үшін 100% құрайды.

2. Тәжірибе сипаттамасы

Г.Н. Флёров атындағы ЯРЗ-да изотоптарды синтездеу және олардың спонтанды бөліну қасиеттерін зерттеу бойынша тәжірибелер жүргізілді. ДЦ-280, У-400 үдеткіштерінен алынған ^{48}Ca , ^{40}Ar ауыр иондарының сәулелері айналмалы нысанаға бағытталды, онда толық бірігу реакциялары нәтижесінде ізделінген изотоптар түзілді. Сипатталып отырған тәжірибелерде жоғары байытылған $^{204,206,208}\text{PbS}$ айналмалы нысаналары, сондай-ақ детекторлық жүйені мөлшерлеу үшін ^{164}Dy , ^{174}Yb стационарлық (қозғалмайтын) нысаналары қолданылды. 3-кестеде пайдаланылған айналмалы нысаналардың сипаттамалары және түскен сәулелердің энергиясы (бұдан әрі барлық жерде сәуленің нысана ортасындағы энергиясы беріледі) келтірілген.

3-Кесте. Пайдаланылған нысаналардың сипаттамалары және түскен сәулелердің энергиясы

Толық бірігу реакциясы	$^{48}\text{Ca}+^{204}\text{Pb}$	$^{48}\text{Ca}+^{206}\text{Pb}$	$^{40}\text{Ar}+^{206}\text{Pb}$	$^{40}\text{Ar}+^{208}\text{Pb}$
$E_{1/2}$, МэВ	215 ± 2	215 ± 2	182 ± 2	183 ± 3
Нысана материалы	204PbS	206PbS	206PbS	208PbS
Нысана қалыңдығы, мкг/см ²	450 ± 45	350 ± 35	362 ± 36	450 ± 45
Қорғасын изотопының тазалық дәрежесі, %	99.94	~ 97	99.51	> 99

БЯЗИ ЯРЗ-да әлемдік тәжірибеде алғаш рет қорғасын сульфидіне (PbS) негізделген нысаналар сәтті әзірленіп, тәжірибелерге енгізілді. Бұл нысаналардың қалыңдығы $350\text{--}450$ мкг/см² аралығында өзгереді. Мұндай нысаналардың негізгі пайдалану артықшылығы олардың ыстыққа төзімділігіне байланысты. Таза қорғасынмен салыстырғанда, қорғасын сульфидінің балку температурасы шамамен 1114°C құрайды, бұл металдық қорғасынның көрсеткішінен (327.5°C) едәуір жоғары. Жылу бөлуді жақсартуға ықпал ететін қосымша фактор қосылыстың қара түсі болып табылады, бұл жылулық сәуле шығарудың жоғары коэффициентін қамтамасыз етеді. Осы қасиеттердің жиынтығының арқасында нысаналар жоғары радиациялық төзімділік көрсетеді және сәуленің 4×10^{12} бөлшек/с дейінгі қарқындылығына төтеп бере алады.

Көрнекті жылуфизикалық сипаттамаларға қарамастан, қорғасын сульфидінен жасалған нысаналарды пайдаланудың елеулі шектеуі бар. Маңызды кемшілік – сәуленің нысана құрамындағы күкірт ядроларында айтарлықтай энергия жоғалтуы. Бұл эффект нысананың қалыңдығына қатаң талаптар қояды: тым қалың үлгілерді қолдануға мүмкіндік бермейді. Тәжірибелердің максималды тиімділігіне қол жеткізу үшін, атап айтқанда, толық бірігу реакциялары өнімдерінің ең жоғары шығымын алу үшін, нысана қалыңдығы мен сәуле энергиясын мұқият таңдау қажет. Максималды шығым нысана қалыңдығының ортасындағы сәуле энергиясы ($E_{1/2}$) зерттелетін булану каналы үшін қозу функциясы максимумына сәйкес келгенде байқалады. Осылайша, бұл параметрлерді оңтайландыру PbS нысаналарымен тәжірибелерді жоспарлау кезінде негізгі міндет болып табылады.

Ізделініп отырған ҚЯ-ды жанама реакциялар өнімдерінен және шашыраған сәуле иондарынан бөліп алу GRAND, SHELS (Separator for Heavy Element Spectroscopy) [12] сепараторлары көмегімен жүзеге асырылды. Сепарациядан кейін ҚЯ ұшып өту жүйесі арқылы өтіп, фокальді DSSD-ге имплантацияланды. Фокальді детектордан ұшып шығатын α, β -бөлшектер мен бөліну жарықшақтары бүйірлік детекторларда тіркелді.

Нәтижелер мен талқылау

1. Газ толтырылған GRAND сепараторындағы сынақ тәжірибелері

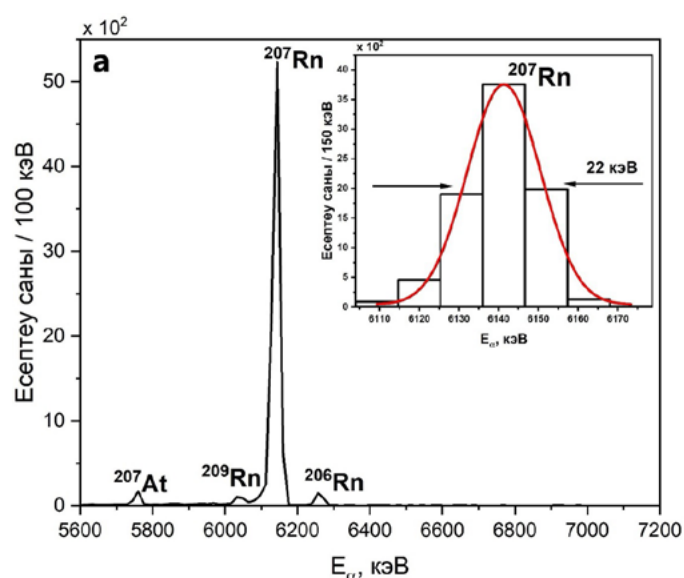
GRAND сепараторында $^{48}\text{Ca}^{+10}$ иондарының сәулелерімен $^{48}\text{Ca}+^{164}\text{Dy}$, $^{48}\text{Ca}+^{174}\text{Yb}$ реакцияларында жүргізілген сынақ тәжірибелері барысында детекторлық жүйенің мөлшерлеуі орындалды, оның энергетикалық ажыратымдылығы анықталды, сондай-ақ сепараторды баптаудың иондық-оптикалық схемасы пысықталды.

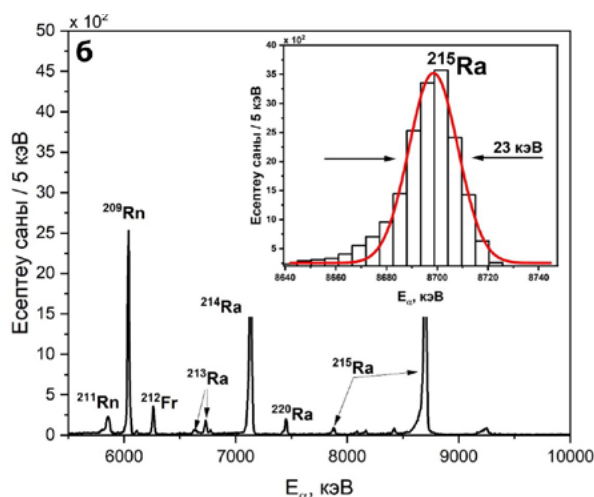
6-суретте $^{48}\text{Ca}+^{164}\text{Dy}$, $^{48}\text{Ca}+^{174}\text{Yb}$ сынақ реакциялары үшін фокальді DSSD детекторында тіркелген α -спектр көрсетілген, энергетикалық ажыратымдылық 6–10 МэВ аралығындағы α -бөлшектер үшін шамамен 20–25 кэВ құрайды.

Сонымен қатар, жаңа газ толтырылған GRAND сепараторындағы сынақ тәжірибелері [7] оның жұмысқа қабілеттілігін растады және негізгі параметрлерді оңтайландырды: ҚЯ тасымалдау тиімділігі $^{48}\text{Ca} + ^{208}\text{Pb} \rightarrow ^{254}\text{No} + 2n$ реакциясы үшін 54%-ға жетті, гелийдің оңтайлы қысымы 0.7 Торр құрады, ал $Q_v D_h Q_v Q_h D$ ион-оптикалық схемасы өнімдердің фокальді жазықтықта біркелкі таралуын қамтамасыз етті. ^{48}Ca сәулесімен реакцияларда қолданылатын GRAND сепараторының ион-оптикалық параметрлерінің сипаттамалары 4-кестеде көрсетілген. Сынақ тәжірибелерінің нәтижелері туралы толығырақ [7] жұмысынан табуға болады.

4-Кесте. ^{48}Ca сәулесімен реакцияларда қолданылатын GRAND сепараторының ион-оптикалық параметрлері

Ион-оптикалық элемент	$^{48}\text{Ca} + ^{164}\text{Dy}$	$^{48}\text{Ca} + ^{174}\text{Yb}$	$^{48}\text{Ca}+^{208}\text{Pb}$
Q1, A	145	145	200
Q2, A	165	165	234.5
Q3, A	125	125	176.2
D1, A	396	396	515
D2, A	-320	-320	-450





6-сурет. Фокальді DSSD детекторының бір стрипінде тіркелген $^{48}\text{Ca} + ^{164}\text{Dy}$ (а), $^{48}\text{Ca} + ^{174}\text{Yb}$ (б) сынақ реакцияларының α -бөлшектерінің энергетикалық спектрі

Ескерту: жоғары терезеде 6133 кэВ шыңы бар ^{207}Rn және 8700 кэВ шыңы бар ^{215}Ra талдауы көрсетілген, энергетикалық ажыратымдылық 22-23 кэВ құрады.

Осылайша, қысқа өмір сүретін ядроларды тіркеу және тасымалдау әдістемелерінің сәтті пысықталуы сепаратордың фокальді жазықтығына SFiNx детекторлық жүйесін енгізу арқылы ауыр және аса ауыр ядроларды зерттеудің көкжиегін кеңейтуге мүмкіндік береді.

2. SHELS сепараторында SFiNx детекторлық жүйесін қолдану арқылы жүргізілген тәжірибелер

SHELS сепараторында толық бірігу реакцияларында (3-кестені қараңыз) 2 нейтронның булану каналдары арқылы жүргізілген тәжірибелер барысында ^{244}Fm , ^{246}Fm , ^{250}No , ^{252}No изотоптары түзілді.

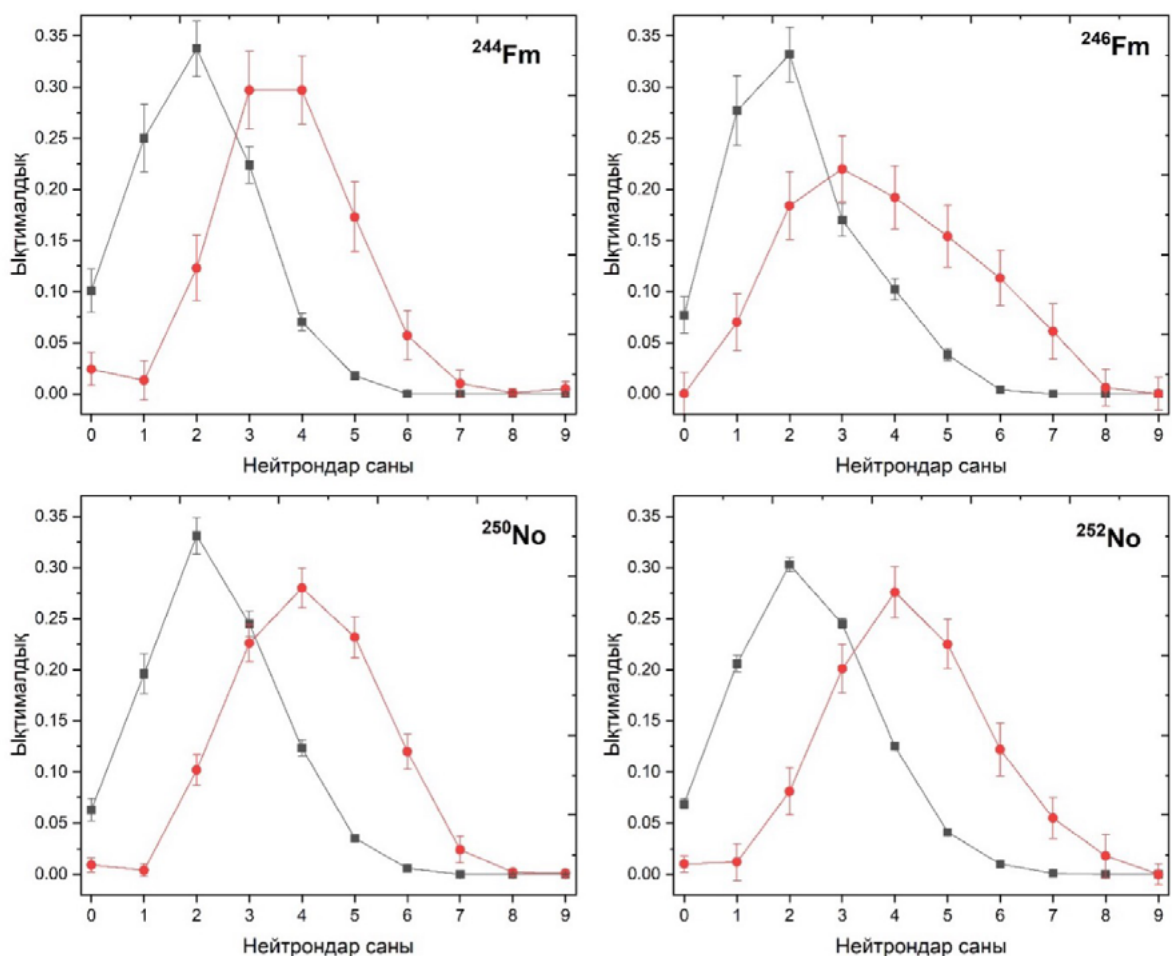
ҚЯ сенімді сәйкестендірілуі және олардың өмір сүру уақыттарын өлшеу корреляциялық талдау әдісімен жүзеге асырылды. Бұл тәсіл имплантацияланған ҚЯ мен оның ыдырау өнімдерінің (α -бөлшектері мен спонтанды бөліну жарықшақтары) арасындағы өзара байланыстарды іздеуді болжайды. Әдістің мәні ҚЯ-дың бастапқы тіркелген нүктесінде оның дәйекті ыдырауларын тіркеу болып табылады. Фокальді DSSD-де бөліну жарықшақтары анықталған кезде, алдымен оның ізделінді изотоптың $\sim 10 \times T_{1/2}$ дейінгі уақыт аралығында детектордың дәл сол пикселіне түскен ҚЯ-мен сәйкестігі бар-жоғы тексеріледі. Содан кейін 0 – 128 мкс уақыт аралығында ыдырау актілеріне қатысты нейтрондар ізделеді. Фермий мен нобелий изотоптары үшін корреляциялық іздеу нәтижелері, сондай-ақ өлшенген жартылай ыдырау периодтары 5-кестеде көрсетілген.

7-суретте ^{244}Fm , ^{246}Fm , ^{250}No , ^{252}No ядролары үшін лездік нейтрондардың еселігінің тәжірибелік таралулары көрсетілген. Олардың негізінде бөліну актісіне шаққандағы нейтрондардың орташа саны есептелді. Детектор тиімділігіне және фондық әсерлерге түзетулерді ескере отырып алынған соңғы нәтижелер 6-кестеде берілген.

5-Кесте. Фермий мен нобелий изотоптары бойынша деректерді өңдеу нәтижелері

Изотоп	Спонтанды бөліну оқиғалар саны	Бөліну актілеріндегі лездік нейтрондар саны	Жартылай ыдырау периоды ($T_{1/2}$)	Әдебиет
^{244}Fm	503	966	3.8 ± 0.3 мс	[13]
^{246}Fm	235	488	$1.50^{+0.08}_{-0.07}$ с	[14]
^{250}No	1357	3147	4.7 ± 0.2 мкс (негізгі) 46 ± 4 мкс (изомерлік)	[15]
^{252}No	3260	7574	2.44 ± 0.05 с	[5]

Нейтрондарды детекторлармен тіркеу тиімділігінің төмендігі тәжірибеде өлшенген нейтрондардың еселік таралу пішінінің шынайыға қарағанда айтарлықтай бұрмалануына әкеледі. Бұл мәселені шешу және таралудың бастапқы пішінін қалпына келтіру үшін Тихоновтың статистикалық регуляризациялау әдісі [16] қолданылды. Қалпына келтіру нәтижесі 7-суретте және 6-кестеде көрсетілген.



7-сурет. Фермий және нобелий изотоптарының спонтанды бөліну нейтрондарының өлшенген (қара шаршы) және қалпына келтірілген (қызыл дөңгелек) еселік таралуы

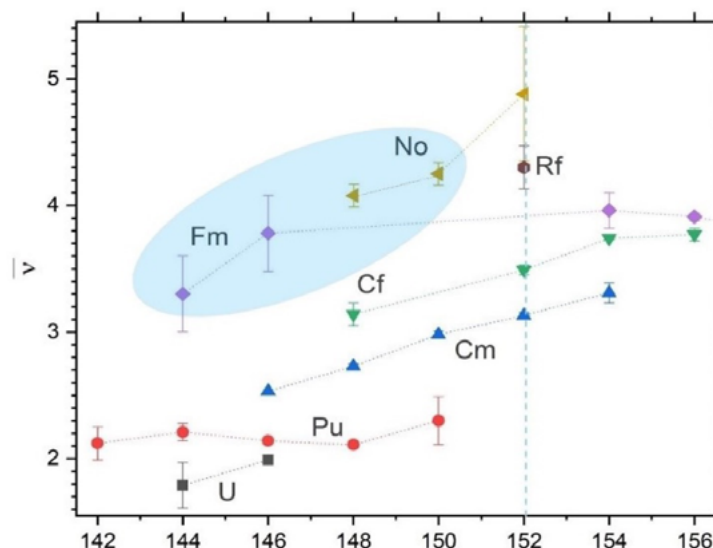
6-Кесте. Лездік нейтрондардың еселік таралу сипаттамалары

Изотоп	Бөліну актісіне шаққандағы нейтрондардың орташа саны	Таралу дисперсиясы	Қалпына келтірілген нейтрондардың орташа саны	Қалпына келтірілген таралудың дисперсиясы
^{244}Fm	3.6 ± 0.1	1.8	3.67 ± 0.1	1.8
^{246}Fm	3.8 ± 0.3	2.1	3.79 ± 0.2	2.8
^{250}No	4.1 ± 0.1	1.8	4.08 ± 0.1	1.8
^{252}No	4.25 ± 0.09	2.1	4.27 ± 0.15	2.2

Лездік нейтрондардың орташа санының ($\bar{\nu}$) ядроғағы нейтрондар санына тәуелділігінің жаңартылған систематикасы 8-суретте көрсетілген. Жұп-жұп ядролар аймағында $\bar{\nu}$ сипатында аномалиялар жоқ және массалық санның артуымен монотонды өсуде. Ең үлкен тіркелген $\bar{\nu} = 4.88 \pm 0.53$ мәні

^{254}No изотопы үшін байқалады. Алайда, $N=152$ қабықшасына жақын No және Rf ядролары үшін осы уақытқа дейін алынған деректер фрагменттік сипатта қалып отыр, бұл, өз кезегінде, көршілес спонтанды бөлінетін изотоптарға жаңа тәжірибелік зерттеулер жүргізу қажеттілігін көрсетеді.

Демек, SHELS сепараторында SFiNx детекторлық жүйесін қолдану арқылы алынған нәтижелер осы жүйенің жұмысқа қабілеттілігін көрсетеді және оны ААЭФ-на интеграциялау трансуран ядроларының спонтанды бөліну нейтрондарын зерттеудің жаңа мүмкіндіктерін ашады.



8-сурет. Лездік нейтрондардың орташа санының ядродағы нейтрондар санына тәуелділік систематикасы

Ескерту: сопақшамен (овалмен) сызылып көрсетілген деректер SFiNx детекторлық жүйесін қолдану арқылы алынған.

Қорытынды

GRAND сепараторындағы сынақ тәжірибелері ҚЯ тасымалдаудың жоғары тиімділігін (54%-ға дейін) және қондырғы жұмысының оңтайлы параметрлерін (гелий қысымы 0.7 Торр, ион-оптикалық схема $Q_v D_n Q_v Q_n D$) көрсетті. α -бөлшектердің жоғары энергетикалық ажыратымдылықпен (22-23 кэВ) тіркелуі және аса ауыр элементтерді синтездеу бойынша тәуелсіз тәжірибелермен сәйкес келетін деректердің алынуы GRAND сепараторының трансуран ядроларымен тәжірибелер жүргізуге дайындығын растайды.

SFiNx детекторлық жүйесін қолданумен жүргізілген тәжірибелер фермий (^{244}Fm , ^{246}Fm) және нобелий (^{250}No , ^{252}No) қысқа өмір сүретін изотоптарының лездік нейтрондардың еселігі туралы алғашқы толық деректерді алуға мүмкіндік берді. Тихоновтың статистикалық регуляризациялау әдісін қолдану нейтрондардың еселік таралуының пішінін қалпына келтіруге және массалық санның артуымен монотонды өсетін бөліну актісіне шаққандағы нейтрондардың орташа санының (ν) мәндерін алуға мүмкіндік берді.

GRAND сепараторының фокальді жазықтығына SFiNx жүйесін орналастыру БЯЗИ ААЭФ-да спонтанды бөлінудің қасиеттерін зерттеуге арналған теңдесі жоқ құрал жасауға мүмкіндік береді. Бұл әдістің басты артықшылығы – бөлінудің лездік нейтрондарын тіркеу мүмкіндігі, бұл бөлінудің теориялық модельдерін, оның ішінде процестің динамикасын, энергетикалық балансты және бөлінудің жаңа модаларын іздеуді дамыту үшін маңызды деректер алуға жол ашады.

Осылайша, SFiNx детекторлық жүйесін GRAND сепараторымен біріктіру жобасын іске асыру ядролық физикадағы маңызды қадам болып табылады және ядролардың өмір сүру шегіндегі қасиеттері туралы іргелі білім алуға зор үміт береді.

Алғыс

Бұл зерттеу Қазақстан Республикасы ғылым және жоғары білім министрлігі Ғылым комитетінің (№АР26195449 грант) қаржылық қолдауымен жүзеге асырылуда.

Авторлардың қосқан үлесі

Сайлаубеков Б.С. – жұмыстың барлық аспектілері үшін жауапты болуға келісім беру, мәтін жазу және оның мазмұнын сыни тұрғыдан қарау, зерттеу нәтижелерін жинау, талдау, зерттеу жұмысын жүргізу.

Свирихин А.И. – деректердің дұрыстығына, мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді реттеу, жариялау үшін мақаланың соңғы нұсқасын бекіту, зерттеу жұмысын жүргізу.

Тезекбаева М.С. – идея қалыптастыру, зерттеу жұмыстарын қаржыландыру мәселелерін реттеу, деректердің дұрыстығына көз жеткізу.

Девараджа Х.М. – зерттеу нәтижелеріне статистикалық талдау жүргізу, деректерді және дәлелдемелерді жинау, алынған деректерді түсіндіру, зерттеу жұмысын жүргізу.

Исаев А.В. – мақаланың барлық бөліктерінің тұтастығына байланысты мәселелерді реттеу және мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарау, деректердің дұрыстығына көз жеткізу, зерттеу жұмысын жүргізу.

Мухин Р.С. – мәтіннің мазмұнын сыни тұрғыда қайта қарау, деректердің біртұтастығына мән беру.

Попов Ю.А. – зерттеу жұмысын өткізуге дайындық жұмыстарын жасау және техникалық тұрғыда қамтамасыз ету, зерттеу жұмысын жүргізу.

Қолжазбаны дайындау процесінде генеративті ЖИ және ЖИ пайдаланатын технологияларды пайдалану туралы мәлімдеме

Осы жұмысты дайындау процесінде авторлар мәтінді қазақ тіліне аудару үшін DeepSeek ЖИ пайдаланды. Осы құралды пайдаланғаннан кейін авторлар мазмұнды қажеттілігіне қарай тексерді, редакциялады және жарияланған мақаланың мазмұны үшін толық жауапты болады.

Әдебиеттер тізімі

1. Hoffman D.C., Spontaneous fission properties and life-time systematic, Nuclear Physics A 502, p.21-40 (1989). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(89\)90652-0](https://doi.org/10.1016/0375-9474(89)90652-0)
2. Hoffman D.C., Lane M.R., Spontaneous fission, Radiochimica Acta 70/71, p.135-145 (1995). <https://doi.org/10.1524/ract.1995.7071.s1.135>
3. Popeko A.G., Smirnov V.I., Ter-Akopian G.M. et al., Multiplicity of prompt neutrons in spontaneous fission of ²³⁸U, Soviet Journal of Nuclear Physics 24(3), p.245-247 (1976)
4. Wild J.F., van Aarle J., Westmeier W. et al., Prompt neutron emission from the spontaneous fission of ²⁶⁰Md, Physical Review C 41(2), p.640-646 (1990). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.41.640>
5. Isaev A.V., Yeregin A.V., Zamyatin N.I. et al., The SFiNx detector system, Physics of Particles and Nuclei Letters 19(1), p.37-45 (2022). <https://doi.org/10.1134/S154747712201006X>
6. Isaev A.V., Mukhin R.S., Andreev A.V. et al., The SFiNx Detector System (Current Status), Physics of Particles and Nuclei Letters 22(2), p.300-303 (2025). <https://doi.org/10.1134/S1547477124702303>
7. Yeregin A.V., Popeko A.G., Svirikhin A.I. et al., GRAND Universal Gas-Filled Separator: First Experimental Results, Physics of Particles and Nuclei Letters 21(3), p.518-525(2024). <https://doi.org/10.1134/S1547477124700511>
8. Oganessian Yu.Ts., Utyonkov V.K., Popeko A.G. et al., DGFRS-2—A gas-filled recoil separator for the Dubna Super Heavy Element Factory, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 1033, p.166640-1-166640-9 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.nima.2022.166640>
9. Popeko A.G., Belozero A.V., Briançon Ch. et al., GABRIELA setup for nuclear spectroscopy of the transfermium element isotopes at the VASSILISSA separator, Physics of Atomic Nuclei 69(7), p.1183-1187 (2006). <https://doi.org/10.1134/S1063778806070143>
10. Svirikhin A.I., Isaev A.V., Yeregin A.V. et al., A detector for studying the characteristics of spontaneous fission of short-lived heavy nuclei, Instruments and Experimental Techniques 54(5), p.644-648 (2011). <https://doi.org/10.1134/S0020441211040154>
11. Glodo J., Wang Y., Shawgo R. et al., New developments in scintillators for security applications, Physics Procedia 90, p.285-290 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2017.09.012>

12. Popeko A.G., Yeregin A.V., Malyshev O.N. et al., Separator for Heavy Element Spectroscopy - Velocity filter SHELS, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms 376, p.140-143(2016). <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2016.03.045>
13. Mukhin R.S., Isaev A.V., Ulanova I.I. et al., Prompt neutron multiplicity from spontaneous fission of 244Fm, The European Physical Journal A 60(11), p.223-1-223-6 (2024). <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-024-01441-0>
14. Isaev A.V., Mukhin R.S., Andreev A.V. et al., Prompt neutron emission in the spontaneous fission of 246Fm, The European Physical Journal A 58(6), p.108-1-108-7 (2022). <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00761-3>
15. Mukhin R.S., Isaev A.V., Andreev A.V. et al., Prompt neutron emission in 250No spontaneous fission associated with ground and isomeric state decays, Chinese Physics C 48(6), p.064002-1-064002-6 (2024). <https://doi.org/10.1088/1674-1137/ad361a>
16. Mukhin R.S., Dushin V.N., Eremin A.V. et al., Reconstruction of spontaneous fission neutron multiplicity distribution spectra by the statistical regularization method, Physics of Particles and Nuclei Letters 18, p.439-444 (2021). <https://doi.org/10.1134/S1547477121040130>

**Б.С. Сайлаубеков^{1,2,3*}, А.И. Свирихин^{1,2,4}, М.С. Тезекбаева^{1,2,4},
Х.М. Девараджа^{1,2}, А.В. Исаев^{1,2,4}, Р.С. Мухин², Ю.А. Попов^{2,4}**

¹Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

²Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

⁴Государственный университет Дубна, Дубна, Россия

(E-mail: *bsailaybekov@jinr.ru, asvirikhin@jinr.ru, tezekbaeva@jinr.ru, devaraja@jinr.ru, isaev@jinr.ru, rmukhin11@gmail.com, yaropov8511@yandex.ru, zhumadilovk@gmail.com)

Применение детектирующей системы SFiNx в фокальной плоскости газонаполненного сепаратора GRAND для изучения свойств спонтанного деления трансурановых ядер

Аннотация. В Объединённом институте ядерных исследований (ОИЯИ) накоплен многолетний опыт исследований в области синтеза и изучения характеристик распада тяжёлых спонтанно делящихся ядер. Для расширения возможностей этих исследований создана Фабрика сверхтяжёлых элементов (СТЭ), ключевым элементом которой является газонаполненный сепаратор DGFRS-2, оптимизированный для работы с высокоинтенсивными пучками. Использование ускорителя ДЦ-280 в сочетании с сепаратором DGFRS-2 позволило в последние годы провести серию успешных экспериментов с трансурановыми мишенями. Высокая эффективность установки подтверждена регистрацией до 100 событий распада изотопов СТЭ за рекордно короткие сроки (порядка одного месяца), что является значительным достижением в условиях сверхмалых сечений образования.

Успешная эксплуатация сепаратора DGFRS-2 послужила основой для разработки проекта универсального газонаполненного сепаратора GRAND, в фокальной плоскости которого предполагается размещение детекторной системы SFiNx.

В данной статье основное внимание уделяется методике эксперимента и перспективам применения системы SFiNx на сепараторе GRAND для исследования свойств спонтанного деления трансурановых ядер. Представлены результаты тестовых экспериментов на сепараторе GRAND и экспериментов с использованием детектирующей системы SFiNx на сепараторе SHELS. Рассматриваются возможности внедрения данной системы в инфраструктуру Фабрики СТЭ. Ключевым преимуществом предлагаемой методики является возможность регистрации мгновенных нейтронов деления, что открывает новые горизонты для планирования экспериментов по измерению множественности нейтронов спонтанного деления тяжёлых и сверхтяжёлых ядер. Разработанные экспериментальные методы обладают значительным потенциалом для будущих исследований в этой области.

Ключевые слова: газонаполненный сепаратор, нейтронный детектор, множественность мгновенных нейтронов, спонтанное деление, трансурановые ядра.

**B.S. Sailaubekov^{*1,2,3}, A.I. Svirikhin^{1,2,4}, M.S. Tezekbayeva^{1,2,4},
H.M. Devaraja^{1,2}, A.V. Isaev^{1,2,4}, R.S. Mukhin², Yu.A. Popov^{2,4}**

¹*Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan*

²*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

³*L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

⁴*Dubna State University, Dubna, Russia*

(E-mail: *bsailaybekov@jinr.ru, asvirikhin@jinr.ru, tezekbaeva@jinr.ru, devaraja@jinr.ru,
isaev@jinr.ru, rmukhin11@gmail.com, yapopov8511@yandex.ru, zhumadilovk@gmail.com)

Application of the SFiNx detection system in the focal plane of the gas-filled separator GRAND for studying the spontaneous fission properties of transuranium nuclei

Abstract. The Joint Institute for Nuclear Research (JINR) has accumulated many years of experience in research on the synthesis and study of the decay characteristics of heavy spontaneously fissioning nuclei. To expand the capabilities of these studies, the Superheavy Element Factory (SHE Factory) was established, the key element of which is the gas-filled separator DGFRS-2, optimized for operation with high-intensity beams. The use of the DC-280 accelerator in combination with the DGFRS-2 separator has made it possible in recent years to conduct a series of successful experiments with transuranium targets. The high efficiency of the setup has been confirmed by the registration of up to 100 decay events of SHE isotopes in a record short time (about one month), which is a significant achievement under conditions of extremely small formation cross-sections.

The successful operation of the DGFRS-2 separator served as the foundation for the development of the universal gas-filled separator GRAND, in the focal plane of which the SFiNx detector system is planned to be placed.

This article focuses on the experimental methodology and the prospects of using the SFiNx system at the GRAND separator to study the spontaneous fission properties of transuranium nuclei. The results of test experiments conducted at the GRAND separator and experiments using the SFiNx detector system at the SHELS separator are presented. The possibilities of integrating this system into the infrastructure of the SHE Factory are considered. The key advantage of the proposed methodology is the capability to register prompt fission neutrons, which opens new horizons for planning experiments to measure the neutron multiplicity of spontaneous fission of heavy and superheavy nuclei. The developed experimental methods possess significant potential for future research in this field.

Keywords: gas-filled separator, neutron detector, prompt neutron multiplicity, spontaneous fission, transuranium nuclei.

Reference

1. Hoffman D.C., Spontaneous fission properties and life-time systematic, Nuclear Physics A 502, p.21-40 (1989). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(89\)90652-0](https://doi.org/10.1016/0375-9474(89)90652-0)
2. Hoffman D.C., Lane M.R., Spontaneous fission, Radiochimica Acta 70/71, p.135-145 (1995). <https://doi.org/10.1524/ract.1995.7071.s1.135>
3. Popeko A.G., Smirnov V.I., Ter-Akopian G.M. et al., Multiplicity of prompt neutrons in spontaneous fission of 238U, Soviet Journal of Nuclear Physics 24(3), p.245-247 (1976)
4. Wild J.F., van Aarle J., Westmeier W. et al., Prompt neutron emission from the spontaneous fission of 260Md, Physical Review C 41(2), p.640-646 (1990). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.41.640>
5. Isaev A.V., Yeregin A.V., Zamyatin N.I. et al., The SFiNx detector system, Physics of Particles and Nuclei Letters 19(1), p.37-45 (2022). <https://doi.org/10.1134/S154747712201006X>
6. Isaev A.V., Mukhin R.S., Andreev A.V. et al., The SFiNx Detector System (Current Status), Physics of Particles and Nuclei Letters 22(2), p.300-303 (2025). <https://doi.org/10.1134/S1547477124702303>
7. Yeregin A.V., Popeko A.G., Svirikhin A.I. et al., GRAND Universal Gas-Filled Separator: First Experimental Results, Physics of Particles and Nuclei Letters 21(3), p.518-525(2024). <https://doi.org/10.1134/S1547477124700511>
8. Oganessian Yu.Ts., Utyonkov V.K., Popeko A.G. et al., DGFRS-2—A gas-filled recoil separator for the Dubna Super Heavy Element Factory, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 1033, p.166640-1-166640-9 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.nima.2022.166640>

9. Popeko A.G., Belozerov A.V., Briançon Ch. et al., GABRIELA setup for nuclear spectroscopy of the transfermium element isotopes at the VASSILISSA separator, *Physics of Atomic Nuclei* 69(7), p.1183-1187 (2006). <https://doi.org/10.1134/S1063778806070143>
10. Svirikhin A.I., Isaev A.V., Yeregin A.V. et al., A detector for studying the characteristics of spontaneous fission of short-lived heavy nuclei, *Instruments and Experimental Techniques* 54(5), p.644-648 (2011). <https://doi.org/10.1134/S0020441211040154>
11. Glodo J., Wang Y., Shawgo R. et al., New developments in scintillators for security applications, *Physics Procedia* 90, p.285-290 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2017.09.012>
12. Popeko A.G., Yeregin A.V., Malyshev O.N. et al., Separator for Heavy Element Spectroscopy - Velocity filter SHELS, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 376, p.140-143(2016). <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2016.03.045>
13. Mukhin R.S., Isaev A.V., Ulanova I.I. et al., Prompt neutron multiplicity from spontaneous fission of ^{244}Fm , *The European Physical Journal A* 60(11), p.223-1-223-6 (2024). <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-024-01441-0>
14. Isaev A.V., Mukhin R.S., Andreev A.V. et al., Prompt neutron emission in the spontaneous fission of ^{246}Fm , *The European Physical Journal A* 58(6), p.108-1-108-7 (2022). <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00761-3>
15. Mukhin R.S., Isaev A.V., Andreev A.V. et al., Prompt neutron emission in ^{250}No spontaneous fission associated with ground and isomeric state decays, *Chinese Physics C* 48(6), p.064002-1-064002-6 (2024). <https://doi.org/10.1088/1674-1137/ad361a>
16. Mukhin R.S., Dushin V.N., Eremin A.V. et al., Reconstruction of spontaneous fission neutron multiplicity distribution spectra by the statistical regularization method, *Physics of Particles and Nuclei Letters* 18, p.439-444 (2021). <https://doi.org/10.1134/S1547477121040130>

Авторлар туралы мәлімет:

Сайлаубеков Б.С. – хат-хабар авторы, докторант, ғылыми қызметкер, жоба орындаушысы, ҚР Атом энергиясы агенттігінің «Ядролық физика институты» ШЖҚ РМК, Ибрагимов көшесі, 1, 050032, Алматы, Қазақстан, bsailaybekov@jinr.ru, +77473192696

Свирихин А.И. – физика-математика ғылымдарының кандидаты, жоба орындаушысы, сектор басшысы, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Жолио-Кюри көшесі, 6, 141980, Дубна, Ресей, asvirikhin@jinr.ru, +74962164633

Тезекбаева М.С. – физика-математика ғылымдарының кандидаты, жоба жетекшісі, ҚР Атом энергиясы агенттігінің «Ядролық физика институты» ШЖҚ РМК, Ибрагимов көшесі, 1, 050032, Алматы, Қазақстан, tezekbaeva@jinr.ru, +77053423129

Девараджа Х.М. – PhD, аға ғылыми қызметкер, жоба орындаушысы, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Жолио-Кюри көшесі, 6, 141980, Дубна, Ресей, devaraja@jinr.ru, +74962164432

Исаев А.В. – физика-математика ғылымдарының кандидаты, жоба орындаушысы, топ басшысы, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Жолио-Кюри көшесі, 6, 141980, Дубна, Ресей, isaev@jinr.ru, +74962164306

Мухин Р.С. – кіші ғылыми қызметкер, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Жолио-Кюри көшесі, 6, 141980, Дубна, Ресей, rmukhin11@gmail.com, +79826924026

Попов Ю.А. – топ басшысы, Біріккен ядролық зерттеулер институты, Жолио-Кюри көшесі, 6, 141980, Дубна, Ресей, уароров8511@yandex.ru, +74962164392

Сайлаубеков Б.С. – автор для корреспонденции, докторант PhD, научный сотрудник, исполнитель проекта, РГП на ПХВ «Институт ядерной физики» Агентства по атомной энергии РК, улица Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан, bsailaybekov@jinr.ru, +77473192696

Свирихин А.И. – кандидат физико-математических наук, исполнитель проекта, начальник сектора, Объединенный институт ядерных исследований, улица Жолио-Кюри, 6, 141980, Дубна, Россия, asvirikhin@jinr.ru, +74962164633

Тезекбаева М.С. – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, руководитель проекта, РГП на ПХВ «Институт ядерной физики» Агентства по атомной энергии РК, улица Ибрагимова, 1, 050032, Алматы, Казахстан, tezekbaeva@jinr.ru, +77053423129

Девараджа Х.М. – доктор PhD, старший научный сотрудник, исполнитель проекта, Объединенный институт ядерных исследований, улица Жолио-Кюри, 6, 141980, Дубна, Россия, devaraja@jinr.ru, +74962164432

Исаев А.В. – кандидат физико-математических наук, начальник группы, исполнитель проекта, Объединенный институт ядерных исследований, улица Жолио-Кюри, 6, 141980, Дубна, Россия, isaev@jinr.ru, +74962164306

Мухин Р.С. – младший научный сотрудник, Объединенный институт ядерных исследований, улица Жолио-Кюри, 6, 141980, Дубна, Россия, rmukhin11@gmail.com, +79826924026

Попов Ю.А. – начальник группы, Объединенный институт ядерных исследований, улица Жолио-Кюри, 6, 141980, Дубна, Россия, yarpopov8511@yandex.ru, +74962164392

Sailaubekov B.S. – corresponding author, PhD student, researcher, project executor, RSE on REM "Institute of Nuclear Physics" of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, 1 Ibragimov street, 050032, Almaty, Kazakhstan, bsailaybekov@jinr.ru, +77473192696

Svirikhin A.I. – PhD in physics, project executor, head of sector, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie street, 141980, Dubna, Russia, asvirikhin@jinr.ru, +74962164633

Tezekbayeva M.S. – PhD in physics, project manager, RSE on REM "Institute of Nuclear Physics" of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, 1 Ibragimov street, 050032, Almaty, Kazakhstan, tezekbaeva@jinr.ru, +77053423129

Devaraja H.M. – PhD in physics, senior researcher, project executor, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie street, 141980, Dubna, Russia, devaraja@jinr.ru, +74962164432

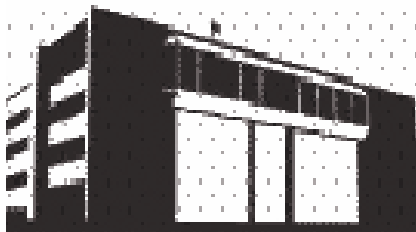
Isaev A.V. – PhD in physics, head of group, project executor, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie street, 141980, Dubna, Russia, isaev@jinr.ru, +74962164306

Mukhin R.S. – junior researcher, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie street, 141980, Dubna, Russia, rmukhin11@gmail.com, +79826924026

Popov Yu.A. – head of group, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie street, 141980, Dubna, Russia, yapopov8511@yandex.ru, +74962164392



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/>).



УДК 621.039:621-03

Научная статья

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2026-155-2-69-81>

Многофазные литийсодержащие керамики на основе Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 , Li_2MoO_4 : синтез, структура и упрочнение

Шлимас Д.И.^{1,2} , Хаметова А.А.^{1,2}

¹ Лаборатория физики твердого тела, Институт ядерной физики Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Алматы, Казахстан

² Лаборатория инженерного профиля, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

E-mail:shlimas@mail.ru, khametovaaa@gmail.com

Аннотация. Исследовано влияние формирования двух- и трехфазных литийсодержащих керамик на основе Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 и Li_2MoO_4 на их структурные и механические свойства в контексте применения в системах размножения трития. Целью исследования являлась оценка возможностей повышения механической устойчивости литийсодержащих керамик за счёт управления фазовым составом и реализации механизмов межфазного упрочнения.

Многофазные керамики получены методом механохимического твердофазного синтеза с последующей термической обработкой при 700°C . Фазовый состав и степень кристалличности образцов анализировались методом рентгеновской дифракции, а механические свойства оценивались методом оценки устойчивости к однократному сжатию. Показано, что используемый метод обеспечивает формирование керамик с высокой степенью кристалличности и стабильным фазовым составом.

Установлено, что варьирование соотношения фаз повышает критическую нагрузку разрушения при однократном сжатии двухфазных керамик более чем в 1.5 раза по сравнению с однофазными, а введение Li_2MoO_4 обеспечивает дополнительное увеличение этого параметра для трехфазных керамик (до 1.5–1.6 раза относительно двухфазных материалов). Полученные результаты демонстрируют потенциал применения многофазных литийсодержащих керамик для использования в бланкетных системах термоядерных реакторов.

Ключевые слова: литийсодержащие керамики, механохимический синтез, допирование, двухфазные и трехфазные керамики, структурное упорядочение, межфазные границы

Поступила 12.02.2026. После доработки 14.04.2026. Принята к печати 21.04.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

*автор для корреспонденции

Введение

В последние годы ядерная и термоядерная энергетика занимают особое место среди перспективных энергетических направлений, обладая высокой энергоёмкостью и значительным потенциалом для долгосрочного устойчивого развития [1–3]. Использование бланкетных систем на основе литийсодержащих керамик, обеспечивающих взаимодействие нейтронов с литием и формирование топливных компонентов непосредственно в активной зоне реактора является ключевой особенностью термоядерных энергетических установок [4–6]. В качестве материалов-размножителей трития наибольшее распространение получили литийсодержащие керамики на основе Li_2TiO_3 и Li_2ZrO_3 , привлекающие особое внимание благодаря высокой физической, термической стабильности, а также химической инертности [7–8]. Вместе с тем, молибдат лития (Li_2MoO_4) характеризуется структурной стабильностью и способен способствовать формированию плотной микроструктуры многофазных керамик за счёт особенностей синтеза и уплотнения, что делает его перспективным компонентом для микроструктурной модификации материалов и управления механическим откликом [9–10]. В то же время данные о влиянии Li_2MoO_4 на механические свойства и межфазное упрочнение многофазных литийсодержащих керамик в условиях, приближенных к эксплуатации термоядерных установок, остаются ограниченными.

Эксплуатация литийсодержащих керамик в условиях термоядерных реакторов сопровождается воздействием высоких температур, термомеханических напряжений и механических нагрузок, что предъявляет повышенные требования к их прочностным и структурным характеристикам. Однако однофазные литийсодержащие керамики зачастую демонстрируют ограниченную устойчивость к растрескиванию и накоплению дефектов при внешнем воздействии, что обуславливает актуальность разработки многофазных систем [11–12]. Формирование двух- и трехфазных керамических материалов на основе литиевых соединений, а также введение молибдата лития (Li_2MoO_4) в качестве допанта открывают возможности реализации эффекта межфазного упрочнения за счет торможения распространения микротрещин и перераспределения механических напряжений [13–16]. Одним из эффективных методов получения таких материалов является механохимический твердофазный синтез, позволяющий формировать однородные порошковые системы с контролируемым фазовым составом, однако требующий оптимизации режимов последующей термической обработки для стабилизации структуры и сохранения высокой степени кристалличности, что и реализуется в настоящей работе [17].

Целью работы является поиск и отработка технологических решений создания двух- и трехфазных литийсодержащих керамик на основе соединений Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 и Li_2MoO_4 с применением метода механохимического твердофазного синтеза. Объект исследования - многофазные литийсодержащие керамические материалы на основе соединений Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 и Li_2MoO_4 .

Предметом исследования являются закономерности формирования фазового состава, микроструктуры и механических свойств указанных керамик в зависимости от соотношения фаз и условий синтеза. В настоящей работе впервые проведено систематическое исследование влияния вариации соотношения фаз и содержания допирующей компоненты Li_2MoO_4 на фазовый состав, структурное упорядочение и механическую устойчивость двух- и трёхфазных литийсодержащих керамик, при однократном сжатии. Научный интерес работы обусловлен возможностью выявления закономерностей межфазного упрочнения в многофазных литийсодержащих керамиках, а практическая значимость связана с перспективами создания высокопрочных материалов-размножителей трития для бланкетных модулей термоядерных энергетических установок.

Материалы и методы

В рамках настоящей работы исследовательский вопрос заключался в установлении влияния фазового состава и соотношения фаз на структурные и механические свойства многофазных литийсодержащих керамик на основе соединений Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 и Li_2MoO_4 . В качестве рабочей гипотезы рассматривалось предположение о том, что формирование двух- и трехфазной структуры литийсодержащих керамик способствует повышению их механической устойчивости за счёт реализации механизмов межфазного упрочнения. Исследование включало последовательные этапы синтеза керамических материалов, их структурно-фазового анализа и оценку механической устойчивости керамик при однократном сжатии.

В качестве исходных объектов для исследования использовались порошки литийсодержащих керамик, такие как метатитанат лития (Li_2TiO_3), метацирконат лития (Li_2ZrO_3) и молибдат лития (Li_2MoO_4). Вариация соотношений компонент в двухфазных керамиках осуществлялась в диапазоне от 0.1 до 0.9 массовых долей (далее м.д.), в случае трехфазных керамик в качестве дополнительной компоненты использовался Li_2MoO_4 порошок, весовой

вклад которого варьировался от 0.1 до 0.25 м.д. от общего состава порошков в керамике. Все исходные компоненты были приобретены у компании Sigma Aldrich, химическая чистота реактивов составляла порядка 99.95 %.

Механохимический твердофазный синтез для получения двух и трехфазных литийсодержащих керамик использовался для смешивания исходных компонентов и получения однородного и изотропного распределения литийсодержащих керамик. Смешивание проводилось в планетарной мельнице PULVERISETTE 6 (Fritsch, Берлин, Германия) при скорости помола 150 оборот/мин в течение 30 минут. Выбор низких скоростей смешивания обусловлен возможностями исключения интенсивного деформационного воздействия на литийсодержащие порошки при перемешивании, а также исключения эффекта дробления зерен и разрушения кристаллической структуры. После перемешивания полученные порошки с изотропным распределением каждой фазы в составе были подвергнуты запрессовке в таблетки диаметром 10 мм и толщиной порядка 1 мм для изучения структурных особенностей и механической прочности на устойчивость к внешним воздействиям при однократном сжатии. Запрессовка осуществлялась с использованием стандартного метода в цилиндрической пресс-форме, давление составляло 250 МПа, время прессования 30 минут.

После перемешивания и прессования полученные таблетки из порошков подвергались термической обработке в муфельной печи для снятия релаксации деформационных напряжений, возникших при смешивании и последующей запрессовки в таблетки. Термический отжиг проводился в муфельной печи Nabertherm LE 4/11/R6 (Nabertherm, Лилиенталь, Германия) при температуре 700 °С в течение 5 часов при скорости нагрева 20 °С/мин. Выбор температурных режимов отжига обусловлен возможностью исключения эффектов фазовых трансформаций в исходных порошках литийсодержащих керамик, возникающих при высоких температурах воздействия.

Оценка фазового состава и структурных параметров исследуемых литийсодержащих керамик в зависимости от вариации соотношения компонент в составе осуществлялась с использованием метода рентгеновской дифракции. Съёмка дифрактограмм проводилась на рентгеновском дифрактометре D8 ADVANCE ECO (Bruker, Карлсруэ, Германия) в геометрии Брегг – Брентано в угловом диапазоне $2\theta=20-80^\circ$, с шагом 0.03° и временем набора дифрактограммы в одной точке 1 сек. Расшифровка дифрактограмм реализовывалась в программном коде DiffractionEVA v.4.2, определение фазового состава и уточнение параметров для всех установленных фаз было выполнено с использованием карточных значений из базы данных PDF-2. Весовые вклады каждой фазы были определены путем уточнения величин площадей всех дифракционных рефлексов, характерных для данной фазы с последующим вычислением их вклада в общей дифрактограмме с учетом корундовых чисел для каждой фазы.

Испытания на определение устойчивости к внешним воздействиям, в частности устойчивости к однократному сжатию, выполнялись методом одноосного сжатия образцов на испытательной машине LFM-L 10kN (Walter + Bai AG, Лёнинген, Швейцария). Нагружение осуществлялось с постоянной скоростью и было равным 0,05 мм/с. В ходе эксперимента регистрировалась зависимость приложенной нагрузки от деформации. Критическая нагрузка разрушения определялась при снижении давления не менее чем на 75% от максимального значения.

Для каждого состава было испытано не менее 4 образцов. Полученные значения критической нагрузки усреднялись, а в качестве итоговых значений приводились средние величины. Испытания проводились на образцах цилиндрической формы (таблетках) диаметром ~12 мм. Все образцы имели одинаковую геометрию и близкие линейные размеры, что обеспечивало корректность сравнительного анализа результатов механических испытаний по величине нагрузки.

Результаты и обсуждение

На рисунках 1 – 3 приведены результаты рентгеновской дифракции исследуемых образцов двухфазных керамик в случае вариации компонентов в диапазоне от 0.1 до 0.9 м.д., а также на рисунках указаны дифрактограммы для однофазных керамик. В таблицах 1 – 3 представлены результаты структурных параметров, определенных на основе полученных дифрактограмм и их анализе. На всех рентгеновских дифрактограммах выведены также дифрактограммы однофазных керамик с целью отражения положения основных рефлексов для однофазных керамик, а также сравнительного анализа с двухфазными керамиками при смешивании их в различном соотношении компонентов в составе. Общий вид приведенных дифрактограмм для двухфазных керамик свидетельствует о достаточно высокой степени кристалличности и структурного упорядочения исследуемых образцов вне зависимости от соотношения компонентов в составе, из чего следует вывод о том, что при механическом смешивании компонентов и последующей термической обработке образцов с целью снятия деформационных напряжений в структуре величина структурного упорядочения сохраняется. В случае двухфазных керамик на основе соединений метатитаната лития и метацирконата лития вариация компонентов в составе керамик не приводит

к формированию новых фаз, кроме двух основных установленных для однофазных керамик – метатитанат лития с моноклинным типом кристаллической структуры (PDF-01-077-8280) и метацирконата лития с моноклинным типом кристаллической структуры (PDF-00-033-0843). При этом следует отметить, что оценка весовых вкладов в составе двухфазных керамик, проведенная на основе полученных дифрактограмм, показала хорошую сходимость определенных весовых вкладов и весовых долей каждого компонента, используемого для синтеза двухфазных керамик. Приведенные в таблице 1 результаты структурных параметров исследуемых керамик свидетельствуют о малом влиянии деформационного механического воздействия на отклонение параметров от эталонных значений, а малые изменения свидетельствуют о структурных эффектах, связанных с процессами смешивания и последующей термической релаксации.

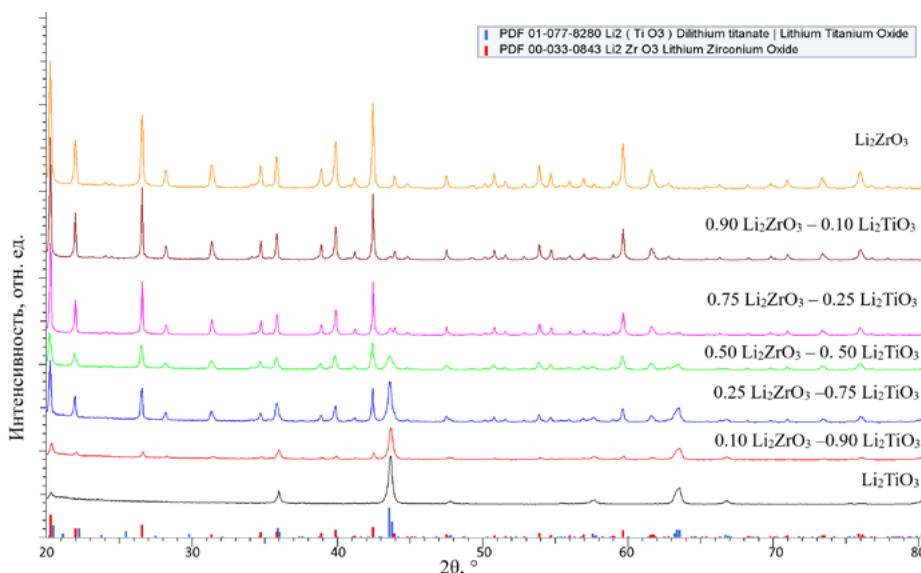


Рисунок 1. Результаты рентгеновской дифракции исследуемых $\text{Li}_2\text{TiO}_3 - \text{Li}_2\text{ZrO}_3$ керамик

Таблица 1. Результаты структурных параметров исследуемых $\text{Li}_2\text{TiO}_3 - \text{Li}_2\text{ZrO}_3$ керамик.

Фаза	Параметры кристаллической решетки						
	Концентрация компоненты Li_2ZrO_3 , м.д.						
	0.0	0.10	0.25	0.50	0.75	0.9	1.0
Li_2TiO_3	a=5.0335 Å, b=8.7754 Å, c=9.7361 Å, $\beta=100.310^\circ$ V=423.11 Å ³	a=5.0514 Å, b=8.7479 Å, c=9.7246 Å, $\beta=99.996^\circ$ V=423.20 Å ³	a=5.0454 Å, b=8.7652 Å, c=9.7896 Å, $\beta=99.917^\circ$ V=426.47 Å ³	a=5.0653 Å, b=8.7408 Å, c=9.7284 Å, $\beta=100.035^\circ$ V=424.15 Å ³	a=5.0673 Å, b=8.7721 Å, c=9.7743 Å, $\beta=100.507^\circ$ V=427.19 Å ³	a=5.0494 Å, b=8.7618 Å, c=9.8049 Å, $\beta=99.996^\circ$ V=427.20 Å ³	-
Li_2ZrO_3	-	a=5.4171 Å, b=9.0152 Å, c=5.4089 Å, $\beta=112.477^\circ$ V=244.08 Å ³	a=5.4128 Å, b=9.0044 Å, c=5.4387 Å, $\beta=112.565^\circ$ V=244.78 Å ³	a=5.4085 Å, b=9.0222 Å, c=5.4153 Å, $\beta=112.786^\circ$ V=243.62 Å ³	a=5.4170 Å, b=9.0186 Å, c=5.4153 Å, $\beta=112.433^\circ$ V=244.54 Å ³	a=5.4128 Å, b=9.0079 Å, c=5.4131 Å, $\beta=112.698^\circ$ V=243.49 Å ³	a=5.4171 Å, b=9.0151 Å, c=5.4132 Å, $\beta=112.477^\circ$ V=244.27 Å ³

В случае двухфазных керамик, полученных путем механического смешивания метатитаната лития и молибдата лития, также не наблюдается формирование каких-либо новых фаз, помимо двух основных, определенных для однофазных керамик, а малые смещения дифракционных рефлексов и их форма свидетельствует о малом деформационном воздействии фаз друг на друга при смешивании и последующем термическом воздействии.

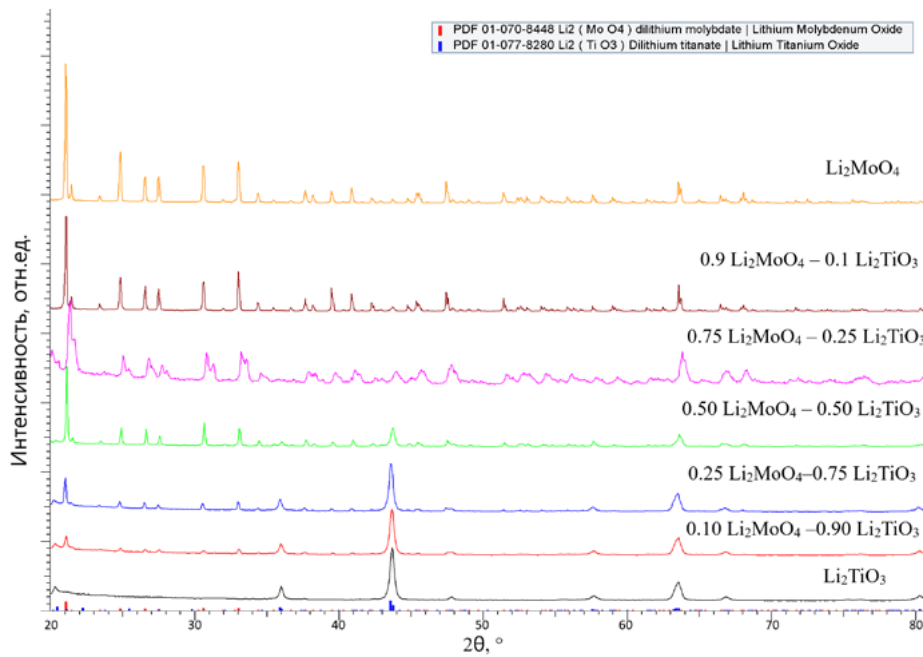


Рисунок 2. Результаты рентгеновской дифракции исследуемых Li₂TiO₃ – Li₂MoO₄ керамик

Основные фазы, установленные в образцах, представляют собой моноклинную фазу Li₂TiO₃ (PDF-01-077-8280) и ромбическую фазу Li₂MoO₄ (PDF-01-070-8448). Оценка весовых вкладов показала хорошее согласие между результатами весовых долей используемых компонентов при смешивании и их весовыми вкладами на дифрактограммах в исследуемых образцах, полученными в зависимости от вариации соотношения компонентов в составе. Результаты структурных параметров, приведенные в таблице 2, также свидетельствуют о малом вкладе деформационного воздействия при смешивании двух компонентов в керамиках.

Таблица 2 – Результаты структурных параметров исследуемых Li₂TiO₃ – Li₂MoO₄ керамик

Фаза	Параметры кристаллической решетки						
	Концентрация компонента Li ₂ MoO ₄ , м.д.						
	0.0	0.10	0.25	0.50	0.75	0.9	1.0
Li ₂ TiO ₃	a=5.0642 Å, b=8.7479 Å, c=9.7586 Å, β=100.310°, V=425.29 Å ³	a=5.0712 Å, b=8.8065 Å, c=9.7743 Å, β=100.310°, V=429.47 Å ³	a=5.0395 Å, b=8.7135 Å, c=9.7858 Å, β=100.507°, V=422.50 Å ³	a=5.0534 Å, b=8.7257 Å, c=9.6978 Å, β=99.760°, V=421.43 Å ³	a=5.0792 Å, b=8.7514 Å, c=9.7207 Å, β=100.153°, V=425.32 Å ³	a=5.0454 Å, b=8.7548 Å, c=9.7246 Å, β=100.035°, V=422.98 Å ³	-
Li ₂ MoO ₄	-	a=14.2834 Å, c=9.5607 Å, V=1689.21 Å ³	a=14.3227 Å, c=9.5607 Å, V=1698.53 Å ³	a=14.2890 Å, c=9.5757 Å, V=1693.20 Å ³	a=14.2946 Å, c=9.5682 Å, V=1693.20 Å ³	a=14.2890 Å, c=9.5607 Å, V=1690.82 Å ³	a=14.2721 Å, c=9.6246 Å, V=1697.82 Å ³

В случае двухфазных керамик Li₂MoO₄ – Li₂ZrO₃, так же как и в случае других синтезированных типов двухфазных керамик, наличие примесных фаз, возникающих при смешивании двух компонентов не установлено, на дифрактограммах присутствуют только дифракционные рефлексы для фаз Li₂MoO₄ (PDF-01-070-8448) с ромбическим типом кристаллической решетки и Li₂ZrO₃ (PDF-00-033-0843) с моноклинным типом кристаллической решетки. Оценка структурных параметров свидетельствует о малом влиянии деформационного механического воздействия при перемешивании двухфазных керамик на искажение кристаллической решетки (см. данные приведенные в таблице 3). Также в ходе исследований было обнаружено, что весовые вклады каждой установленной

фазы с применением метода рентгенофазового анализа имеют хорошее согласие с весовыми вкладами каждого компонента, используемого для смешивания образцов двухфазных керамик.



Рисунок 3. Результаты рентгеновской дифракции исследуемых Li_2ZrO_3 - Li_2MoO_4 керамик

Таблица 3. Результаты структурных параметров исследуемых Li_2ZrO_3 - Li_2MoO_4 керамик

Фаза	Параметры кристаллической решетки						
	Концентрация компонента Li_2MoO_4 , м.д.						
	0.0	0.10	0.25	0.50	0.75	0.9	1.0
Li_2ZrO_3	a=5.4319 Å, b=9.0398 Å, c=5.4216 Å, $\beta=112.831^\circ$, V=245.37 Å ³	a=5.4181 Å, b=9.0309 Å, c=5.4036 Å, $\beta=113.162^\circ$, V=243.09 Å ³	a=5.4340 Å, b=9.0469 Å, c=5.3877 Å, $\beta=113.495^\circ$, V=242.91 Å ³	a=5.4244 Å, b=9.0309 Å, c=5.4078 Å, $\beta=113.295^\circ$, V=243.32 Å ³	a=5.4085 Å, b=9.0539 Å, c=5.4237 Å, $\beta=112.873^\circ$, V=244.70 Å ³	a=5.4011 Å, b=9.0699 Å, c=5.4162 Å, $\beta=112.762^\circ$, V=244.66 Å ³	-
Li_2MoO_4	-	a=14.4015 Å, c=9.5043 Å, V=1707.12 Å ³	a=14.3817 Å, c=9.5322 Å, V=1707.44 Å ³	a=14.3619 Å, c=9.5079 Å, V=1698.42 Å ³	a=14.3253 Å, c=9.4763 Å, V=1684.14 Å ³	a=14.3843 Å, c=9.5041 Å, V=1703.03 Å ³	a=14.3648 Å, c=9.6321 Å, V=1721.18 Å ³

На рисунке 4 приведены результаты оценки прочностных свойств керамик в зависимости от вариации типа компонентов в двухфазных литийсодержащих керамиках. Данные были получены в ходе экспериментальных работ, выполненных на испытательной машине с применением метода однократного сжатия образцов и фиксации максимальной нагрузки, при которой происходит деструкция таблетки и ее растрескивания. Фиксация образования трещин в образцах при изменении величины оказываемого давления на образец проводилось с применением метода экстензометрии. Также на графике приведены результаты определения величины критической нагрузки, способной выдержать при сжатии однокомпонентных (однофазных) керамик. Результаты приведены для сравнения и оценки эффективности упрочнения за счет эффектов, связанных с вариацией двух фаз в составе керамик. В основе рассматриваемого эффекта упрочнения в случае двухфазных керамик рассматривается эффект межфазного упрочнения, связанного с возникновением дополнительных границ зерен при вариации соотношения фаз, наличие которых приводит к созданию дополнительных барьеров, сдерживающих распространение микротрещин при изменении внешней нагрузки на образцы при сжатии.

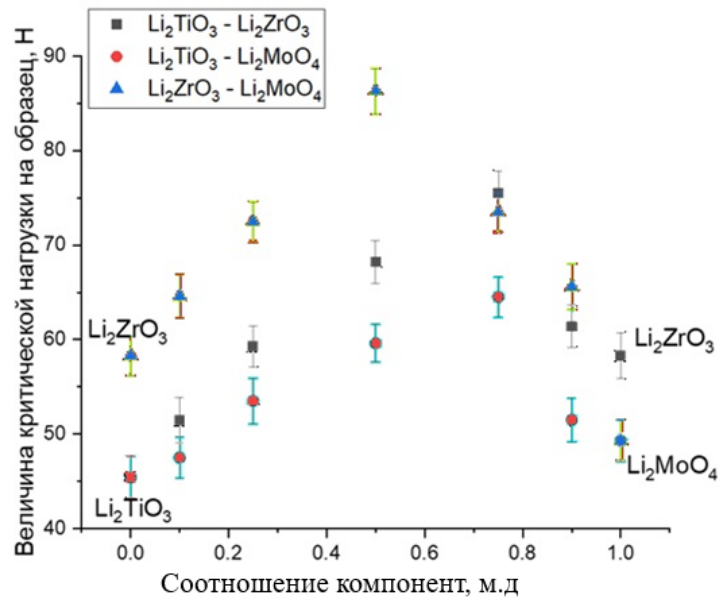


Рисунок 4. Результаты оценки изменения прочностных свойств двухфазных керамик при вариации соотношения компонентов в составе, в случае определения величины максимальной нагрузки на образец

Согласно приведенным данным видно, что использование предложенного метода смешивания двухфазных керамик приводит к увеличению эффективности и сопротивляемости к внешним механическим воздействиям при сжатии в сравнении с однофазными керамиками. При этом следует отметить, что Li_2TiO_3 керамик обладают наименьшей устойчивостью к однократному сжатию среди однофазных керамик, а Li_2ZrO_3 керамики обладают наибольшей сопротивляемостью к внешнему механическому воздействию, приводящему к растрескиванию при однократном сжатии. В случае Li_2TiO_3 керамик величина критической нагрузки, при которой наблюдается растрескивание, составляет порядка 45 ± 2 Н, для Li_2ZrO_3 керамик данная величина составляет порядка 58 ± 2 Н, для Li_2MoO_4 керамик величина составляет порядка 49 ± 2 Н, что больше, чем для метатитаната лития. В случае двухфазных литийсодержащих керамик при смешивании метатитаната лития и метацирконата лития увеличение соотношения компонентов в составе с 0.1 до 0.75 м.д. Li_2ZrO_3 приводит к росту величины критической нагрузки с 51 до 75 Н, что более чем в 1.5 раза больше величины критической нагрузки, способной выдержать однофазной Li_2TiO_3 керамикой. При этом увеличение содержания метацирконата лития до 0.9 м.д. приводит к снижению эффективности устойчивости к внешним механическим воздействиям при сжатии, из чего следует, что наблюдаемый эффект упрочнения, вероятно, связан с наличием межфазных границ, что может обуславливать сдерживание распространения микротрещин при сжатии и изменении нагрузки на образец. В данном случае можно предположить, что сдерживание осуществляется на межфазных границах, изменение плотности которых приводит к росту сопротивляемости к деградации при сжатии.

В случае $\text{Li}_2\text{TiO}_3 - \text{Li}_2\text{MoO}_4$ изменение соотношения компонентов в составе керамик приводит к повышению величины критической нагрузки с 45 ± 2 Н (в случае однофазной Li_2TiO_3 керамик) до 59 – 64 Н в случае, когда доля Li_2MoO_4 составляет 0.5 – 0.75 м.д. При этом следует отметить, что увеличение доли Li_2MoO_4 до 0.9 м.д. в составе приводит к снижению величины критической нагрузки до 51 ± 2 Н, что свидетельствует о снижении эффекта упрочнения за счет доминирования свойств одной из двух фаз в составе керамик.

В случае $\text{Li}_2\text{ZrO}_3 - \text{Li}_2\text{MoO}_4$ керамик величина максимальной нагрузки, способной выдержать керамикой, при концентрациях Li_2MoO_4 равной 0.5 – 0.75 м.д. составляет порядка 73 – 86 Н, что значительно выше, чем в случае двух других вариаций компонентов двухфазных керамик, полученных при смешивании метатитаната лития и молибдата лития и метатитаната лития и метацирконата лития. В данном случае эффект упрочнения, вероятно, обусловлен совокупностью эффектов наличия межфазных границ в составе керамик, а также более высокими показателями прочности и устойчивости к растрескиванию метацирконата лития и молибдата лития по сравнению с метатитанатом лития.

На рисунке 5 приведены результаты рентгеновской дифракции исследуемых трехфазных литийсодержащих керамик, полученных методом механического твердофазного смешивания. В качестве основы использовалась система $\text{Li}_2\text{TiO}_3 - \text{Li}_2\text{ZrO}_3$, полученная путем смешивания двух типов керамик в равном соотношении компонентов. В качестве допанта использовался молибдат лития, добавление которого осуществлялось к двухфазной керамике на этапе механического смешивания в соотношении компонентов от 0.10 до 0.25 м.д.

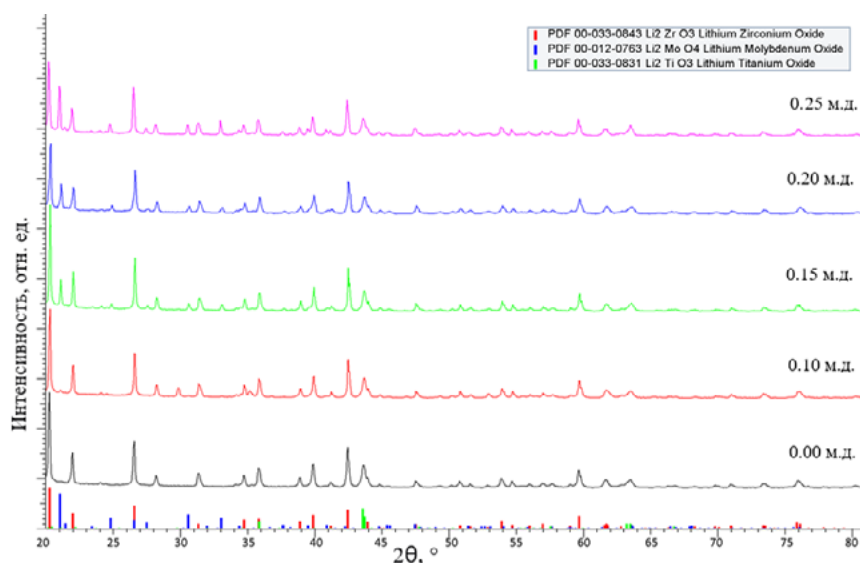


Рисунок 5. Результаты рентгеновской дифракции трехфазных литийсодержащих керамик при вариации соотношения компонентов в составе и добавлении в состав Li_2MoO_4

В таблице 4 приведены результаты оценки структурных параметров исследуемых керамик в зависимости от типа и соотношения компонентов в составе. После перемалывания в планетарной мельнице и запрессовке в таблетки, полученные образцы подвергались термической обработке. Рентгеновские дифрактограммы приведены для образцов после термического отжига. Общий вид полученных дифрактограмм в зависимости от вариации компонентов в составе свидетельствует об отсутствии процессов фазовых трансформаций, вызванных механически-деформационным воздействием и последующим термическим отжигом. При этом форма дифракционных рефлексов свидетельствует о положительном воздействии термического отжига, приводящего к релаксации деформационных напряжений и искажений, вызванных механическим воздействием мелющих тел в процессе перемешивания. Стоит также отметить, что на представленных дифрактограммах, в зависимости от изменения соотношения компонентов, в составе формирования новых фаз, кроме основных, характерных для исследуемых порошков, не наблюдается, что, в свою очередь, подтверждает отсутствие фазовых трансформаций в процессе смешивания и последующего термического воздействия.

Таблица 4. Данные структурных параметров для трехфазных литийсодержащих керамик

Весовой вклад Li_2MoO_4 в составе керамик, м.д.	Li_2TiO_3 – (PDF-00-033-0831), моноклинная, C2/c(15)	Li_2ZrO_3 – (PDF-00-033-0843), моноклинная, C2/c(15)	Li_2MoO_4 – (PDF-00-012-0763), ромбоэдрическая, R-3(148)
0	a=5.05608 Å, b=8.78347 Å, c=9.72264 Å, $\beta=100.062^\circ$, V=425.14 Å ³	a=5.42979 Å, b=9.04340 Å, c=5.43652 Å, $\beta=112.720^\circ$, V=246.24 Å ³	-
0.1	a=5.06403 Å, b=8.77657 Å, c=9.72264 Å, $\beta=100.023^\circ$, V=423.53 Å ³	a=5.41915 Å, b=9.0860 Å, c=5.41100 Å, $\beta=112.676^\circ$, V=244.01 Å ³	a=14.37897 Å, c=9.57198 Å, V=1713.91 Å ³
0.15	a=5.05608 Å, b=8.76967 Å, c=9.78770 Å, $\beta=100.062^\circ$, V=427.31 Å ³	a=5.40638 Å, b=9.00798 Å, c=5.41313 Å, $\beta=113.007^\circ$, V=242.65 Å ³	a=14.30025 Å, c=9.57198 Å, V=1695.20 Å ³

0.20	a=5.06005 Å, b=8.78347 Å, c=9.74561 Å, β=100.141°, V=426.37 Å ³	a=5.41489 Å, b=9.01506 Å, c=5.40675 Å, β=112.433°, V=243.96 Å ³	a=14.28901 Å, c=9.57574 Å, V=1693.20 Å ³
0.25	a=5.06403 Å, b=8.78002 Å, c=9.74561 Å, β=100.023°, V=426.70 Å ³	a=5.44043 Å, b=9.06464 Å, c=5.40888 Å, β=112.433°, V=246.56 Å ³	a=14.33961 Å, c=9.56822 Å, V=1703.87 Å ³

Оценка весовых вкладов показала, что в случае исходных двухфазных керамик использование равновероятного соотношения двух компонентов – метатитаната лития и метацирконата лития позволяет получить равное соотношение весовых вкладов фаз, установленных в составе двухфазных керамик. При добавлении молибдата лития в состав двухфазных керамик оценка весовых вкладов показала хорошее согласие между используемым весовым соотношением допанта и весовым вкладом, установленным для данной фазы при оценке фазового состава керамик. Оценка данных структурных параметров исследуемых фаз в составе керамик, выполненная с применением метода уточнения параметров и сравнения их с результатами для эталонных значений, взятых из базы данных PDF-2, показала, что механическое воздействие при перемалывании и последующем термическом отжиге приводит к незначительному отличию экспериментальных параметров от эталонных значений, обусловленных деформационным искажением при смешивании и воздействии фаз друг на друга, а также возможной инициализацией процессов катионного замещения при смешивании фаз и их контакте друг с другом в результате механического перемалывания, однако данный эффект в наблюдаемых образцах минимальный.

На рисунке 6 приведены результаты оценки величины критической нагрузки, способной выдержать трехфазной керамикой при однократном сжатии, отражающей устойчивость к внешним механическим нагрузкам. Полученные результаты свидетельствуют о влиянии вариации соотношения компонентов в составе трехфазных керамик на упрочнение и повышение устойчивости к внешним воздействиям при сжатии и механических нагрузках.

Как видно из представленных данных добавление в состав Li₂TiO₃ – Li₂ZrO₃ керамик допанта Li₂MoO₄ приводит к увеличению сопротивляемости к внешним механическим нагрузкам, при этом изменение концентрации с 0.1 до 0.15 м.д. приводит к росту эффективности с 16 до 34 %, в то время как увеличение концентрации до 0.2 – 0.25 м.д. приводит к росту эффективности сопротивляемости к растрескиванию до 56 – 60 %. Однако следует также отметить, что в случае увеличения концентрации допанта с 0.2 до 0.25 м.д. эффективность сопротивляемости к растрескиванию возрастает всего на 4 %, в то время как при меньших концентрациях рост доли допанта в составе приводит к более значимым эффектам упрочнения до 15 – 20 %.

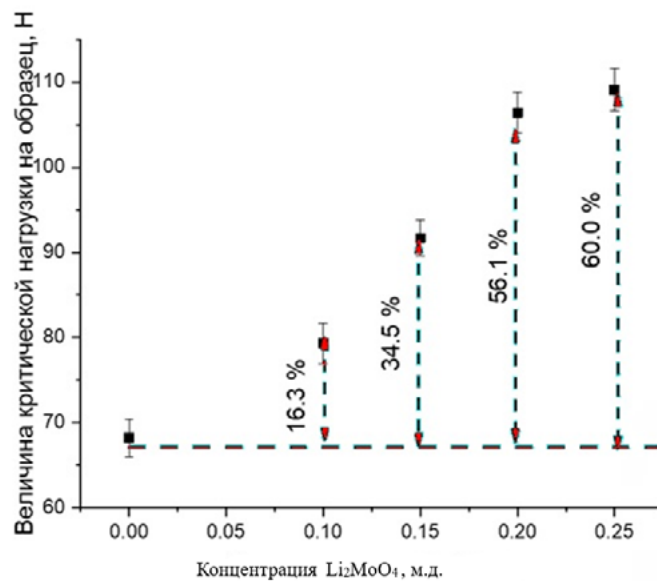


Рисунок 6. Результаты оценки величины критической нагрузки, при которой наблюдается растрескивание образцов керамик в зависимости от соотношения компонентов в трехфазных керамиках

Наблюдаемый эффект упрочнения свидетельствует о достаточно высокой эффективности использования метода модификации двухфазных керамик путем добавления третьего компонента в состав, наличие которого при малых концентрациях приводит к росту эффективности упрочнения более чем в 1.3 – 1.5 раза по сравнению с двухфазными керамиками.

Заключение

Методом механохимического твердофазного синтеза с последующей термической обработкой получены двух- и трехфазные литийсодержащие керамики на основе Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 и Li_2MoO_4 с различной вариацией соотношения компонентов. Рентгенофазовый анализ выявил отсутствие примесных фаз и высокую степень кристалличности синтезированных образцов при сохранении параметров кристаллических решёток, близких к эталонным значениям.

Установлено, что формирование двухфазных керамик сопровождается увеличением устойчивости к однократному сжатию по сравнению с однофазными материалами, при этом наибольший эффект упрочнения достигается при промежуточных соотношениях фаз (0.5–0.75 м.д.). Вместе с тем установлено, что введение Li_2MoO_4 в систему $\text{Li}_2\text{TiO}_3 - \text{Li}_2\text{ZrO}_3$ в качестве допанта обеспечивает дополнительное повышение прочности за счёт формирования трехфазной структуры по сравнению с двухфазными керамиками.

Полученные результаты свидетельствуют о потенциальной перспективности формирования многофазных литийсодержащих керамик для применения в качестве бланкетных материалов термоядерных энергетических установок. Для их практического применения необходимы дополнительные исследования, в том числе проверка на возможное формирование армирующего эффекта за счет межфазных границ, а также проведение испытаний на радиационную стойкость.

Благодарность

Исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (No. BR28712757).

Вклад авторов

Хаметова А.А. выполнила синтез и подготовку образцов литийсодержащих керамик, структурно-фазовый анализ и механические испытания, обработку и интерпретацию экспериментальных данных, подготовила первоначальную рукопись статьи.

Шлимас Д.И. участвовал в разработке научной концепции исследования, осуществил структурно-фазовый анализ, интерпретировал полученные результаты, выполнил критический пересмотр рукописи с точки зрения научного содержания и структуры, утвердил окончательный вариант статьи для публикации.

Список литературы

1. E. R. Sadik-Zada, A. Gatto, and Y. Weibnicht, Back to the Future: Revisiting the Perspectives on Nuclear Fusion and Juxtaposition to Existing Energy Sources, *Energy* 290, 129150 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.129150>
2. International Atomic Energy Agency, What is Nuclear Fusion? <https://www.iaea.org/newscenter/news/what-is-nuclear-fusion> (accessed January 21, 2026).
3. D. J. Rose, M. Clark Jr., and H. Chang, *Plasmas and Controlled Fusion* (Cambridge University Press, Cambridge, 1961).
4. R. Knitter et al., Recent developments of solid breeder fabrication, *J. Nucl. Mater.* 442, S420 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.02.060>
5. S. Konishi et al., Functional materials for breeding blankets—status and developments, *Nucl. Fusion* 57, 092014 (2017). DOI: 10.1088/1741-4326/aa7e4e
6. F. A. Hernández and P. Pereslavitsev, First principles review of options for tritium breeder and neutron multiplier materials for breeding blankets in fusion reactors, *Fusion Eng. Des.* 137, 243 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2018.09.014>
7. D. K. Meena et al., Inelastic scattering and first-principles study of tritium breeder materials Li_2TiO_3 and Li_2ZrO_3 , *Radiat. Phys. Chem.* 203, 110630 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2022.110630>
8. K. A. Rex et al., Defect properties and lithium incorporation in Li_2ZrO_3 , *Energies* 14, 3963 (2021). <https://doi.org/10.3390/en14133963>

9. R. Yang et al., Low-temperature sintering and microwave dielectric properties of glass-free SrWO_4 - Li_2MoO_4 ceramics, *Ceram. Int.* 49, 39959 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.09.306>
10. M. Väättäjä et al., Li_2MoO_4 -based composite ceramics fabricated from temperature- and atmosphere-sensitive MnZn ferrite at room temperature, *J. Am. Ceram. Soc.* 100, 3626 (2017). <https://doi.org/10.1111/jace.14914>
11. J. D. Lulewicz and N. Roux, First results of the investigation of Li_2ZrO_3 and Li_2TiO_3 pebbles, *Fusion Eng. Des.* 39, 745 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0920-3796\(98\)00328-7](https://doi.org/10.1016/S0920-3796(98)00328-7)
12. S. Gu et al., Mechanical strength stability of tritium breeding materials under high-temperature deuterium conditions, *Ceram. Int.* 46, 1195 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.09.092>
13. N. Chen et al., Cold-sintered $\text{Ni}_{0.2}\text{Cu}_{0.2}\text{Zn}_{0.6}\text{Fe}_2\text{O}_4$ - Li_2MoO_4 ceramic composites with enhanced magnetodielectric properties, *J. Eur. Ceram. Soc.* 41, 1310 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2020.09.034>
14. N. Kuzmić et al., Dielectric properties of upside-down $\text{SrTiO}_3/\text{Li}_2\text{MoO}_4$ composites fabricated at room temperature, *Front. Mater.* 8, 669421 (2021). <https://doi.org/10.3389/fmats.2021.669421>
15. H. Zhang et al., Preparation of Li_2MoO_4 using aqueous solution method and microwave dielectric properties after sintering, *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* 27, 5422 (2016). <https://doi.org/10.1007/s10854-016-4444-2>
16. O. Gavaldá-Díaz et al., Toughening of ceramics and ceramic composites through microstructure engineering: A review, *Int. Mater. Rev.* 70, 3 (2025). <https://doi.org/10.1177/09506608241308337>
17. Z. Qiang, J. Hu, and B. Jiang, Mechanochemical synthesis of advanced materials for all-solid-state battery (ASSB) applications: A review, *Polymers* 17, 2340 (2025). <https://doi.org/10.3390/polym17172340>

Шлимас Д.И.^{1,2}, Хаметова А.А.^{1,2*}

¹*Қатты дене физикасы зертханасы, Қазақстан Республикасы
Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан*

²*Инженерлік бейіндегі зертхана, Л.Н. Гумилев атындағы
Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан*

(E-mail: shlimas@mail.ru, khametovaaa@gmail.com)

Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 , Li_2MoO_4 негізіндегі көпфазалы литийқұрамды керамикалар: синтез, құрылым және беріктену

Аңдатпа. Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 және Li_2MoO_4 негізіндегі екіфазалы және үшфазалы литийқұрамды керамикалардың қалыптасуының олардың құрылымдық және механикалық қасиеттеріне әсері тритийді көбейту жүйелерінде қолдану тұрғысынан зерттелді. Зерттеудің мақсаты фазалық құрамды басқару және фазалар арасындағы беріктену механизмдерін іске асыру арқылы литийқұрамды керамикалардың механикалық тұрақтылығын арттыру мүмкіндіктерін бағалау болды.

Көпфазалы керамикалық материалдар механохимиялық қаттыфазалы синтез әдісімен, кейін 700 °С температурада термиялық өңдеу жүргізу арқылы алынды. Үлгілердің фазалық құрамы мен кристалдылық дәрежесі рентгенфазалық талдау әдісімен зерттелді, ал механикалық қасиеттері бір бағытта сығу төзімділігін бағалау арқылы анықталды. Қолданылған синтез әдісі жоғары кристалдылық дәрежесі мен тұрақты фазалық құрамға ие керамикалардың түзілуін қамтамасыз ететіні көрсетілді.

Фазалар арақатынасының өзгеруі екіфазалы керамикалардың бір бағытта сығу кезіндегі критикалық бұзылу жүктемесінің бірфазалы материалдармен салыстырғанда 1.5 еседен астам артуына әкелетіні анықталды, ал Li_2MoO_4 енгізілуі үшфазалы керамикалар үшін бұл көрсеткіштің қосымша өсуін қамтамасыз етеді (екіфазалы материалдармен салыстырғанда 1.5–1.6 есеге дейін). Алынған нәтижелер көпфазалы литийқұрамды керамикалардың термоядролық реакторлардың бланкет жүйелерінде қолдану үшін перспективалы екенін көрсетеді.

Түйін сөздер: литийқұрамды керамикалар, механохимиялық синтез, қоспалау, екіфазалы және үшфазалы керамикалар, құрылымдық реттелу, фазааралық шекаралар.

D.I. Shlimas^{1,2}, A.A. Khametova^{1,2*}¹Laboratory of Solid State Physics, Institute of Nuclear Physics of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan²Engineering Profile Laboratory, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan(E-mail: shlimas@mail.ru, khametovaaa@gmail.com)**Multiphase lithium-containing ceramics based on Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 , Li_2MoO_4 : synthesis, structure, and strengthening**

Abstract. The influence of the formation of two- and three-phase lithium-containing ceramics based on Li_2TiO_3 , Li_2ZrO_3 , and Li_2MoO_4 on their structural and mechanical properties was investigated in the context of their application in tritium breeding systems. The aim of the study was to evaluate the possibility of enhancing the mechanical stability of lithium-containing ceramics by controlling the phase composition and implementing interphase strengthening mechanisms.

Multiphase ceramic materials were synthesized using a mechanochemical solid-state method followed by thermal treatment at 700 °C. The phase composition and degree of crystallinity of the samples were analyzed by X-ray diffraction, while the mechanical properties were evaluated by assessing the resistance to uniaxial compression. It was shown that the applied synthesis route provides the formation of ceramics with a high degree of crystallinity and a stable phase composition.

It was established that variation of the phase ratio leads to an increase in the critical fracture load under uniaxial compression of two-phase ceramics by more than 1.5 times compared to single-phase materials, while the introduction of Li_2MoO_4 provides an additional increase of this parameter for three-phase ceramics (up to 1.5–1.6 times relative to two-phase materials). The obtained results demonstrate the potential of multiphase lithium-containing ceramics for application in blanket systems of thermonuclear reactors.

Keywords: lithium-containing ceramics, mechanochemical synthesis, doping, two-phase and three-phase ceramics, structural ordering, interphase boundaries.

References

1. E. R. Sadik-Zada, A. Gatto, and Y. Weibnicht, Back to the Future: Revisiting the Perspectives on Nuclear Fusion and Juxtaposition to Existing Energy Sources, *Energy* 290, 129150 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.energy.2023.129150>
2. International Atomic Energy Agency, What is Nuclear Fusion? <https://www.iaea.org/newscenter/news/what-is-nuclear-fusion> (accessed January 21, 2026).
3. D. J. Rose, M. Clark Jr., and H. Chang, *Plasmas and Controlled Fusion* (Cambridge University Press, Cambridge, 1961).
4. R. Knitter et al., Recent developments of solid breeder fabrication, *J. Nucl. Mater.* 442, S420 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.02.060>
5. S. Konishi et al., Functional materials for breeding blankets—status and developments, *Nucl. Fusion* 57, 092014 (2017). DOI: 10.1088/1741-4326/aa7e4e
6. F. A. Hernández and P. Pereslavitsev, First principles review of options for tritium breeder and neutron multiplier materials for breeding blankets in fusion reactors, *Fusion Eng. Des.* 137, 243 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2018.09.014>
7. D. K. Meena et al., Inelastic scattering and first-principles study of tritium breeder materials Li_2TiO_3 and Li_2ZrO_3 , *Radiat. Phys. Chem.* 203, 110630 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2022.110630>
8. K. A. Rex et al., Defect properties and lithium incorporation in Li_2ZrO_3 , *Energies* 14, 3963 (2021). <https://doi.org/10.3390/en14133963>
9. R. Yang et al., Low-temperature sintering and microwave dielectric properties of glass-free SrWO_4 - Li_2MoO_4 ceramics, *Ceram. Int.* 49, 39959 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.09.306>
10. M. Väätäjä et al., Li_2MoO_4 -based composite ceramics fabricated from temperature- and atmosphere-sensitive MnZn ferrite at room temperature, *J. Am. Ceram. Soc.* 100, 3626 (2017). <https://doi.org/10.1111/jace.14914>
11. J. D. Lulewicz and N. Roux, First results of the investigation of Li_2ZrO_3 and Li_2TiO_3 pebbles, *Fusion Eng. Des.* 39, 745 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0920-3796\(98\)00328-7](https://doi.org/10.1016/S0920-3796(98)00328-7)
12. S. Gu et al., Mechanical strength stability of tritium breeding materials under high-temperature deuterium condi-

- tions, *Ceram. Int.* 46, 1195 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.09.092>
13. N. Chen et al., Cold-sintered Ni_{0.2}Cu_{0.2}Zn_{0.6}Fe₂O₄-Li₂MoO₄ ceramic composites with enhanced magnetodielectric properties, *J. Eur. Ceram. Soc.* 41, 1310 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2020.09.034>
 14. N. Kuzmić et al., Dielectric properties of upside-down SrTiO₃/Li₂MoO₄ composites fabricated at room temperature, *Front. Mater.* 8, 669421 (2021). <https://doi.org/10.3389/fmats.2021.669421>
 15. H. Zhang et al., Preparation of Li₂MoO₄ using aqueous solution method and microwave dielectric properties after sintering, *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* 27, 5422 (2016). <https://doi.org/10.1007/s10854-016-4444-2>
 16. O. Gavalda-Diaz et al., Toughening of ceramics and ceramic composites through microstructure engineering: A review, *Int. Mater. Rev.* 70, 3 (2025). <https://doi.org/10.1177/09506608241308337>
 17. Z. Qiang, J. Hu, and B. Jiang, Mechanochemical synthesis of advanced materials for all-solid-state battery (ASSB) applications: A review, *Polymers* 17, 2340 (2025). <https://doi.org/10.3390/polym17172340>

Сведения об авторах:

Д.И. Шлимас - PhD, СИС Лаборатории физики твердого тела Астанинского филиала Института ядерной физики Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Алматы, Казахстан.

А.А. Хаметова - автор для корреспонденции, PhD, инженер Лаборатории физики твердого тела Астанинского филиала Института ядерной физики Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Алматы, Казахстан,

Д.И. Шлимас - PhD, Қазақстан Республикасы Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің Ядролық физика институтының Астана филиалы Қатты дене физикасы зертханасының аға ғылыми қызметкері, Алматы, Қазақстан.

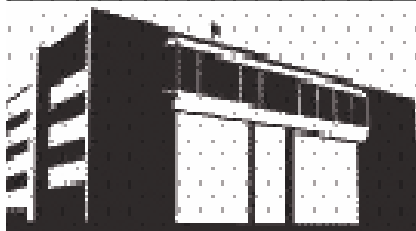
А.А. Хаметова - хат-хабар авторы, PhD, Қазақстан Республикасы Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің Ядролық физика институтының Астана филиалы Қатты дене физикасы зертханасының инженері, Алматы, Қазақстан.

D.I. Shlimas - PhD, Senior Researcher, Laboratory of Solid State Physics, Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan.

A.A. Khametova – the corresponding author, PhD, Engineer, Laboratory of Solid State Physics, Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, 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/>).



Өрістегі бөлшектердің периодты соқтығысусыз қозғалыста- рының гамильтондық формализмі

**Т.Б. Қоштыбаев¹ , Г. Әлімбаева¹ , Е.К. Жаменкеев² ,
А.Т. Жавлиева^{1*} , Э.О. Құткелдиева¹ , М.Е. Алиева²**

¹Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

²Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

*E-mail: koshtybayev70@mail.ru, alimbek50@mail.ru,
jamenkeev@mail.ru, zhavliyeva.11@gmail.com, elzira.kutkeldieva@gmail, moldir-2008@mail.ru*

Аңдатпа. Ұсынылып отырған мақалада гравитацияланушы бөлшектердің соқтығысуларсыз қозғалысының жазық, әрі өзара үйлесімді өрістегі гамильтондық формализмі ұсынылған. Жүйенің өрісі тереңдігі мен ұзындығы энергия мен қысым арқылы өрнектелетін потенциалдық шұңқыр деп алынды. Шұңқырдағы бөлшектердің шекараға қарай ығысып, жекелеген концентрантты аймақтар құрайтындығы көрсетілді. Жүйедегі релятивистік емес гравитацияланушы бөлшектердің екі ағынды периодты қозғалысы үзіліссіздік теңдеуі негізінде қарастырылды. Пуассон теңдеуінің көмегімен соқтығыспайтын бөлшектердің концентрациясы гравитациялық потенциалға тура пропорционал болатындығы дәлелденді. Сонымен бірге, бөлшектердің периодтық қозғалысы мен өзара үйлесімді өріс арасындағы екі ағынды статикалық тепе-теңдікті Пуассон теңдеуі бойынша сипаттап беруге болатындығы да көрсетілді. Бөлшектердің өріспен әсерлеулеріне арналған Гамильтон функциясы бірінші интеграл ретінде жүйенің толық қысымы болатындығы сақталу заңы арқылы дәлелденіп, Бернулли күшінің жаңа математикалық тұрғыдағы табиғаты анықталды. Жүйенің күйлеріне қатысты шарттар арқылы санақ басынан өтетін интегралдық қисықтар, ал жүйенің кеңістіктік ауқымы бойынша потенциалдың кеңістіктік үлестірім заңы анықталды. Бөлшектер жылдамдығының, қысым мен концентрацияның жүйе ұзындығы бойынша өзгеру заңдылығы күй параметрінің белгілі бір мәндерінде ғана орындалатындығы дәлелденді. Барлық есептеулердің нәтижелері ықшамдалып берілді. Екі ағынды жүйенің күй параметрінің мәндеріне қарай жүйе өрісінің потенциалды шұңқыр, саңылау пішіндес болатындығы көрсетілді.

Түйін сөздер: гамильтон формализмі, өрістік жүйе, үзіліссіздік теңдеуі, гравитациялық әсерлесулер, екі ағынды периодты қозғалыс, гравитациялық потенциал, гравитацияланушы бөлшектер

Жіберілді 9.04.2026. Өзгертілді 12.05.2026. Қабылданды 15.05.2026. Онлайн қол жетімді 30.06.2026.

*хат-хабар авторы

Кіріспе

Гравитациялық өрістегі қозғалыс жөнінде мәселе көтерілген тұста Гамильтондық формализм тек осы мәселенің негізгі бағыт-бағдарын белгілеуші ғана емес, ол заманауи физиканың діңгегі болып қала бермек. Оған 150 жыл толса да, өзектілік дәрежесі мына үш мәселеге қатысты алғанда Ньютон заманындағыдан да жоғары тұрады десек артық айтқандық болмас:

1. Аспан механикасы және сандық модельдеу. Лагранждық әдіске қарағанда гамильтондық механика симплекстік интеграторларды, яғни өте үлкен уақыт аралықтарында жүйенің фазалық көлемі мен энергиясын сақтап қала алатын алгоритмдерді қолданады.

2. Релятивистік астрофизика. Күшті өрістердегі (қара құрдымдар немесе нейтрондық жұлдыздар маңындағы) қозғалыстарды сипаттау барысында Арновитт–Дезер–Мизнер формализмі атты жалпылама салыстырмалылық теорияның (ЖСТ) гамильтондық түсіндірмесі (баяндалуы) қолданылады.

3. Кванттық гравитация. Гамильтониан–квантталуға апаратын көпір, Классикалық теорияны кванттық теорияға айналдыру үшін алдымен Гамильтон функциясын құрастырып алып, содан кейін айнымалыларды операторлармен алмастыру қажет болады.

Гамильтондық формализм – бөлшектің қозғалысын күштер арқылы емес, энергия (гамильтониан) мен сақталатын шамалар арқылы сипаттап беретін қуатты математикалық тіл. Оның гравитацияға қатысты табиғатына тоқталар болсақ, оған күрделі жүйелерді энергия мен фазалық кеңістік арқылы сипаттап бере алатын математикалық құрал есебінде қарауға болады. Нақты айтсақ, гамильтондық формализм 4–өлшемді кеңістік–уақытты уақыт бойынша өзгере алатын 3–өлшемді кеңістіктік қабаттарға тармақтайды. Бұл жағдай жалпылама салыстырмалылық теориясын кеңістік метрикасы гамильтониан, байланыстар теңдеуі және симметриялар арқылы сипатталатын динамикалық жүйе ретінде қайта жасақтауға (тұжырымдауға) мүмкіндік туғызады.

Гравитацияланушы бөлшектердің бір өлшемді динамикалық жүйесі бір түзудің бойымен қозғала отырып өзара Ньютондық күшпен тартылатын денелер жиынының моделі болып табылады. Барлық бөлшектер гравитация заңына ортақ формула негізінде бағынады. Мұндай жүйеде бөлшектер бір–бірі арқылы өте алмайды, ал қозғалыс теңдеулері интегралданады немесе гамильтондық формализм арқылы шешіледі. Бір өлшемді жағдайда екі бөлшек өзара орын алмаспайтын болса, онда олардың арасындағы әсерлесудің шамасы тұрақты болып қалады. Бұл жағдай өз кезегінде орнықсыздыққа, стахостылыққа және бөлшектердің бір жерге топырлап қалуына әкеліп соғады. Гамильтондық формализм – Гамильтон функциясын, координата мен импульстің фазалық кеңістігін қолданатын классикалық жүйелердің динамикасын сипаттаудың ерекше бір тәсілі. Мұнда қозғалыс теңдеулері бірінші ретті дифференциалдық жүйелерден құрылған екі жүйеден тұрады және Лагранж түрлендірулері қолданылады. Бұл гравитация теориясын Эйнштейннің жалпыламалық салыстырмалы теориясына ұқсамайтын каноникалық сипатта қарастыруға мүмкіндік жасайды. Т. Редже мен К. Тейтельбоймның ұсынған теориясы классикалық шектің теориясына ұқсас, яғни мұндағы төрт өлшемді кеңістік–уақыт өлшемдер саны көп жазық кеңістіктегі майысқан жазықтық кейпінде қарастырылған. Ал, П. Дирактың гамильтондық үлгідегі каноникалық қозғалыс теңдеулері ықшамды (жинақы) математикалық бейнеде берілген. Гамильтондық үлгінің арқасында ғана қойылған мәселе бірмінді, әрі айқын түрде ашылады.

Бұл мақалада гравитацияланушы бөлшектердің соқтығысуларсыз қозғалысының жазық өзара үйлесімді өрістегі гамильтондық формализмі ұсынылған. Жүйенің өрісі тереңдігі энергия интегралымен, ал ұзындығы толық қысым мәнімен анықталатын потенциалдық шұңқыр ретінде қарастырылған. Өріс жүйеде қамтылған бөлшектерді шекараға қарай ығыстыра отырып концентрациясы жоғары баяу бөлшектерден жасақталған облыстардың құрылуына ықпал етеді. Осы мазмұнда физикалық шамалардың үлестірімдік заңдылықтары зерттеліп, олардың математикалық тұжырымдамалары алынатын болады және олардың қолданылу аймақтарына талдаулар жүргізіледі.

Нәтижелер мен талқылау

Жүйедегі релятивистік емес гравитацияланушы бөлшектердің бойлық координатамен шектелген екі ағынды периодты қозғалысын қарастыратын боламыз. Бұл жағдай үшін үзіліссіздік теңдеуін төмендегіше түрде жазуға болады:

$$\vec{J}_1 + \vec{J}_2 = 0 \quad (1)$$

Бұл теңдікте \vec{J}_1 және \vec{J}_2 – бөлшектердің осының бағытында және оған қарама-қарсы бағыттағы ағындарының тығыздығы. Жазық симметрия жағдайында (1)– секілді кез-келген ағын үшін [1]

$$J_0 = \frac{n(x)\vartheta(x)}{2} = \frac{n_0\vartheta_0}{2} = \text{const} \quad (2)$$

Мұндағы –жүйенің кез-келген жазықтықтағы концентрациясы; –жүйедегі бөлшектердің жылдамдығы; –жүйенің жазықтығындағы ең аз концентрациясы; –жүйедегі бөлшектердің ең үлкен жылдамдығы. Бұдан кейінгі жазылатын өрнектердің барлығында да «0» индексі жазықтығына қатыстылықты білдіретін болады. Жүйедегі бөлшектер соқтығыспайтын болсын. Статикалық өзара үйлесімді өрістегі гравитацияланушы бөлшектердің қозғалысы уақытқа айқын түрде тәуелді болмайды және төмендегі энергия интегралы арқылы анықталады:

$$E = \frac{m\vartheta_0^2}{2} = \frac{m\vartheta^2}{2} + m\varphi = \text{const} \quad (3)$$

Мұндағы – барлық бөлшектер үшін бірдей болатын механикалық энергияның мәні; – бөлшектердің массасы; – статикалық гравитациялық өрістің потенциалы, ол Пуассон теңдеуімен сипатталады:

$$\varphi'' = 4\pi Gmn(\varphi) \quad (4)$$

Бұл теңдеудің оң жақ бөлігінде бөлшектердің концентрациясы координата бойынша үлестірім функциясы арқылы берілген (G – гравитациялық тұрақты). Соқтығыспайтын бөлшектердің үлестірім функциясын ($n(\varphi)$) (2) және (3) өрнектерді қолдана отырып анықтауға болады:

$$n = \frac{n_0}{\sqrt{1 - \frac{\varphi}{\varphi_m}}} \quad (5)$$

Бұл қатынаста

$$\varphi_m = \frac{E}{m} = \frac{\vartheta_0^2}{2} \quad (6)$$

гравитациялық потенциалдың жүйе шекараларындағы қабылдайтын (иеленетін) ең үлкен (\max) мәні. Олай болса, соқтығыспайтын бөлшектердің концентрациясы потенциалдың үлкен болатын жерлерінде жоғары болады екен [2–5]. (5)–ті (4)–ке қойып мынаны аламыз:

$$\varphi'' = \frac{4\pi Gmn_0}{\sqrt{1 - \frac{\varphi}{\varphi_m}}} \quad (7)$$

Бұл теңдеу бөлшектердің периодтық қозғалысы мен өзара үйлесімді өріс арасындағы екі ағынды статикалық тепе-теңділігін сипаттайды. Ол туынды ретін төмендетіп $y'' = f(y)$ алатын түрді қабылдайды. Реттіліктің төмендеуі интегралдауға әкеліп соғады.

Бөлшектердің өріспен әсерлеулеріне арналған Гамильтон функциясы. (7)–теңдеудің бірінші интегралы болып табылатын гамильтондық функция жүйенің толық қысымы (P) болып табылады:

$$\frac{(\varphi')^2}{8\pi G} + p_0\sqrt{1 - \frac{\varphi}{\varphi_m}} = P = H\left(\frac{\varphi'}{4\pi G}, \varphi, x\right) = \text{const} \quad (8)$$

Мұндағы – $p_0 = mn_0\vartheta_0^2$ бөлшектердің жазықтығындағы қысымы. Сақталу заңы деп аталатын (8) теңдеудің алғашқы құраушысы жүйенің өзара үйлесімді өрісінің қысымы, ал екінші мүше кинетикалық энергияның екі еселенген көлемдік тығыздығындай бөлшектердің бір өлшемді жүйесінің қысымы:

$$p = \frac{2mn\vartheta^2}{2} \quad (9)$$

(8) теңдеу сонымен бірге өріс пен бөлшектердің қысым градиенттерінің шамалары әсерлесу кеңістігінің кез-келген жазықтығында өзара тең, ал бағыттарының әртүрлі болатындығын білдіреді. Бернулли күшінің көлемдік тығыздығы бөлшектердің қысым градиентіне қарама-қарсы болғандықтан ($\vec{f} = -\text{grad}(p)$), бұл күшке жаңа математикалық тұрғыдағы анықтама беруге болады: Бернулли күшінің шамасы мен бағыты өріс қысымының градиентімен сәйкес келеді және өріс пен бөлшектер арасындағы тепе-теңдікті қамтамасыз ете алады. Ол жүйенің әрбір көлем элементінде ньютондық тартылуды компенсациялау арқылы жүйенің тұтастығын қорғап отырады [6-8].

Физикалық шамалардың үлестірімі. (8)-дің екі жағын да $-$ ге бөліп екі ағынды жүйенің күй параметрі атты

$$\beta = \frac{P}{p_0} \geq 1 \tag{10}$$

және

$$g_0 = \sqrt{8\pi G p_0} \tag{11}$$

гравитациялық өріс кернеулігінің ауқымы (масштабы) деген белгілеулерді енгізейік. Толық қысымның оң мәндерінде β параметрінің өзгеріс аймағы $1 \leq \beta < \infty$ болады және жүйе бөлшектердің периодты қозғалысындағы екі ағынды күйде болады. Жүйе шектелген жағдайда (күйде) қалуы үшін жүйедегі бөлшектердің $p(\varphi)$ қысымы нөлге айналуы тиіс, ал ол координатаның $x=\pm L$ мәндерінде ғана орындалады. Бұл мәнде жүйенің потенциалы ең үлкен мәнге ие болады (φ_m), ал оның градиентінің модульдері бірдей болғанымен, таңбалары әртүрлі:

$$\varphi'_m = \sigma \sqrt{8\pi G P} \quad \sigma = \text{sign}(\varphi') \tag{12}$$

Осы шешімдерден байқап отырғанымыздай, $x=\pm L$ жазықтықтарда бөлшектер тоқтап қалады.

Енді $(0,0)$ нүктесі арқылы өтетін интегралдық қисықтарды іздейтін боламыз. Ол үшін (8)-дің интегралдануын мына түрде алған ыңғайлы:

$$\sigma x = \int_0^\varphi \frac{d\varphi}{\sqrt{8\pi G \left[P - p_0 \sqrt{1 - \frac{\varphi}{\varphi_m}} \right]}} \tag{13}$$

Осы интегралдауды орындағаннан шығатын нәтиже мынадай:

$$\frac{\sigma x}{l} = \sqrt{\beta - \sqrt{1 - \frac{\varphi}{\varphi_m}}} \left(2\beta + \sqrt{1 - \frac{\varphi}{\varphi_m}} \right) - \sqrt{\beta - 1} \left(2\beta + 1 \right) \tag{14}$$

Мұндағы

$$l = \frac{\vartheta_0}{3\sqrt{2\pi G m n_0}} \tag{15}$$

жүйенің кеңістіктік ауқымы (масштабы). (14)-те $x=x(\varphi)$ функциялар жиынының төрт шешімі бар [9-11]. Оның біріншісі $\sigma=+1$ -ге қатысты шығады (шешім нөл нүктесінде оң таңбалы туындыға ие бола отырып осы нөл арқылы өтеді). Екінші шешім $\sigma=-1$ үшін алынған (бұл шешім нөл нүктесінде теріс туындыға ие бола отырып осы нөл арқылы өтеді). Ал, үшінші және төртінші шешімдердің шарттары сәйкесінше $\sigma=\sigma_1$, $\sigma=\sigma_2$. Бұл шарттарда

$$\sigma_1 = +1, x > 0 \quad \text{және} \quad \sigma_1 = -1, x < 0 \tag{16}$$

$$\sigma_2 = +1, x < 0 \quad \text{және} \quad \sigma_2 = -1, x > 0 \tag{17}$$

Физикалық жағдайды үшінші шешім сипаттап береді. Жүйенің жарты ұзындығын (14)-тен $\frac{\varphi}{\varphi_m} = 1$, $\sigma=+1$ мәндерінде алуға болады [12] және ол күй параметріне төмендегіше байланысты болады:

$$\frac{L}{1} = 2\sqrt{\beta^3} - \sqrt{\beta - 1} (2\beta + 1) \tag{18}$$

Жүйенің ұзындығы $d=2L$. Біз $\varphi=\varphi(x)$ тәуелділігінің нақты бейнесін алуымыз үшін (14)-ке мынада өлшемсіз айнымалыларды енгізуіміз қажет:

$$t = \frac{\sqrt{1 - \frac{\varphi}{\varphi_m}}}{\beta} \quad z = \frac{(x_0 + \sigma x)}{1\sqrt{\beta^3}} \tag{19}$$

Мұндағы

$$\frac{x_0}{1} = \sqrt{\beta - 1} (2\beta + 1) \tag{20}$$

(14)-тен $t=t(z)$ анықтай отырып потенциалдың кеңістіктік үлестірім заңын $0 \leq z \leq \sqrt{2}$ аралығы үшін жазамыз: $0 \leq z \leq \sqrt{2}$ аумағында

$$\frac{\varphi_1}{\varphi_m} = 1 - \beta^2 (2\cos\theta_1 - 1)^2 \tag{21}$$

ал, $\sqrt{2} \leq z \leq 2$ аралығы үшін

$$\frac{\varphi_2}{\varphi_m} = 1 - \beta^2 (2\cos\theta_2 - 1)^2 \tag{22}$$

Бұл өрнектерде

$$\theta_1 = \frac{1}{3} \left[\arccos \left(1 - \frac{z^2}{2} \right) \right] \tag{23}$$

$$\theta_2 = \frac{1}{3} \left[\pi - \arccos \left(\frac{z^2}{2} - 1 \right) \right] \tag{24}$$

Осы өрнектерде бекітілген аралықтағы айнымалы шамалар біркәнді түрде анықталатыныны ескеру керек. (21-24) қатынастардан мынадай тұжырымдама шығады: $\beta=1$ болғанда жүйенің өрісі $x=0$ -ге қатысты симметриялы, ұзындығы энергия интегралымен, ал тереңдігі толық қысым интегралымен анықталатын ерекше бір потенциалдық шұңқыр тәріздес. Ал, $\beta>1$ болғанда өріс тәрізді пішіндес кеңістікте шектелген потенциалды саңылау кейіпінде болады. Бұл жағдайда жүйедегі минимум потенциалдық энергия деген болмайды, яғни саңылау түбінде ең аз мәнді потенциалдық энергия мәнін қолдануға болады [13]. Өріс кернеулігінің координатаға проекциясы (21-24) өрнектерін дифференциалдау арқылы табылады: $0 \leq z \leq \sqrt{2}$ аумағында

$$g_1(x) = -2\sigma g \sqrt{\beta} \sin \left(\frac{\theta_1}{2} \right) \tag{25}$$

ал, аралығы үшін

$$g_2(x) = -2\sigma g \sqrt{\beta} \sin \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \tag{26}$$

Бұл теңдеулерден кернеулік құраушысының мәндері нөлдік потенциалы жазықтығында үзіліске ұшырайтындығын байқауға болады, яғни ол бұл жағдайда тек $+(g\sqrt{\beta-1})$ мен $-(g\sqrt{\beta-1})$ аралығындағы ғана мәндерді қабылдай алады. -ның өсуіне қарай саңылау тарыла береді де, гравитациялық өріс кернеулігінің секірмелі өзгерісі күшейеді. Жүйенің ұзындығы бойынша бөлшектер жылдамдығы мен қысымның өзгеру заңдылығын (3) пен (8)-нің екінші құраушысынан табуға болады: $0 \leq z \leq \sqrt{2}$ аумағында [14]

$$\frac{p_1}{p_0} = \frac{\vartheta_1}{\vartheta_0} = \beta (\cos\theta_1 - 1) \tag{27}$$

ал, $\sqrt{2} \leq z \leq 2$ аралығы үшін

$$\frac{p_2}{p_0} = \frac{\vartheta_2}{\vartheta_0} = \beta (\cos\theta_2 - 1) \tag{28}$$

Ал, концентрацияның ұзындыққа сәйкес өзгерісін (5)-тен анықтап аламыз: $0 \leq z \leq \sqrt{2}$ аралығы үшін [15]

$$\frac{n_1}{n_0} = \frac{1}{\beta(2\cos\theta_1 - 1)} \quad (29)$$

ал, $\sqrt{2} \leq z \leq 2$ болғандағы жағдай үшін

$$\frac{n_2}{n_0} = \frac{1}{\beta(2\cos\theta_2 - 1)} \quad (30)$$

Қысымның жүйе ұзындығына байланысты үлестірім (таралу) заңдылығы мынадай өрнектермен беріледі: $0 \leq z \leq \sqrt{2}$ аралығы үшін

$$D_1 = \frac{g_1^2}{8\pi G} = 4\beta p_0 \sin^2\left(\frac{\theta_1}{2}\right) \quad (31)$$

ал, $\sqrt{2} \leq z \leq 2$ болғандағы жағдай үшін [16]

$$D_2 = \frac{g_2^2}{8\pi G} = 4\beta p_0 \sin^2\left(\frac{\theta_2}{2}\right) \quad (32)$$

(27) және (31), сонымен бірге (28) және (32) теңдіктерден әсерлесу кеңістігінің кез-келген жазықтығында бөлшектер мен өрістің қысымдарының қосындысы жүйенің толық $P = \beta p_0$ қысымына тең болатындығын және бұл шама тұрақты болып қалатындығын байқау қиын емес.

Қорытынды

Жүйелік өріс пен бөлшек арасындағы әсерлесулер арқылы гравитацияланушы бөлшектердің соқтығысуларсыз қозғалысының гамильтондық формализмі әсерлесулер кеңістігінің әртүрлі жазықтықтарында қарастырылды. Ондағы мақсат бөлшектердің жүйелік өріске қатысты қозғалыстарының ерекшеліктерін бөліп көрсету болды. Жүйенің потенциалдық шұңқыр және саңылау кейпіндегі күй параметрінің мәндері мен $t=t(z)$ функционалының өзгеру аралықтарына сәйкес жылдамдық, қысым, концентрация шамаларының өзгеру заңдылықтары тағайындалды. Жүйенің өрісі тереңдігі мен ұзындығы энергия мен қысым арқылы өрнектелетін потенциалдық шұңқыр деп алынған жағдайы кезінде бөлшектердің шекараға қарай ығысып, жекелеген концентрантты аймақтар құрайтындығы көрсетілді. Жүйедегі релятивистік емес гравитацияланушы бөлшектер екі ағынды периодты қозғалысы үзіліссіздік теңдеуі негізінде қарастырылды. Пуассон теңдеуінің көмегімен соқтығыспайтын бөлшектердің концентрациясы гравитациялық потенциалға тура пропорционал болатындығы, сонымен бірге бөлшектердің периодтық қозғалысы мен өзара үйлесімді өріс арасындағы екі ағынды статикалық тепе-теңділікті Пуассон теңдеуі бойынша сипаттауға болатындығы көрсетілді. Бөлшектердің өріспен әсерлеулеріне арналған Гамильтон функциясы бірінші интеграл ретінде жүйенің толық қысымы болатындығы сақталу заңы арқылы дәлелденіп, Бернулли күшінің жаңа математикалық тұрғыдағы табиғаты белгіленді. Жүйенің күйлеріне қатысты шарттар арқылы санақ басынан өтетін интегралдық қисықтар, ал жүйенің кеңістіктік ауқымы бойынша потенциалдың кеңістіктік үлестірім заңы белгіленді. Бөлшектер жылдамдығының, қысым мен концентрацияның жүйе ұзындығы бойынша өзгеру заңдылығы күй параметрінің белгілі бір мәндерінде ғана орындалатындығы дәлелденді. Барлық есептеулердің нәтижелері ықшамдалып берілді. Екі ағынды жүйенің күй параметрінің мәндеріне қарай жүйе өрісінің потенциалды шұңқыр, саңылау пішіндес болатындығы көрсетілді.

Мақалада алынған нәтижелердің қолданылу нысандарына (аймағына) қатысты мына жағдайларды айтуға болады:

- айналып тұрған қара құрдымдар маңындағы бөлшектердің хаосты қозғалыстарын зерттеуде (Кеер метрикасы) теориялық модель ретінде пайдалануға болады;
- кванттық гравитация мен космологиялық модельдер гравитациялық өрістің гамильтондық талдауына негізделетін болғандықтан осы салада алгоритмдік нұсқа мазмұнында қолдануға болады.

Плазма жағдайында Больцманның кинетикалық теңдеуінің сол жақ бөлігімен ғана шектеліп, соқтығысу интегралын ескермеуге болады. Электрондық газ бен ауыр иондардан тұратын электрлі нейтралды жүйенің

тепе–теңділік күйіндегі бірлік көлемде электрондар мен иондар саны бірдей болғандықтан, орташалап алғанда электр өрісінің кернеулігі нөлге тең болып табылады. Күшті өрістер бөлшектердің траекториясын өзгертеді, нәтижеде электронның осцилляция энергиясы тыныштық энергиясынан артық болады. Басқаша айтқанда, бөлшек пен өрістің әсерлесу энергиясы олардың жылулық қозғалыстарының энергиясынан көп деген сөз. Сондықтан да, кинетикалық теорияның зерттеу нәтижелігін көтеру үшін қуатты сыртқы өрісі бар Власов—Максвелл теңдеуін қолданған ұтымды. Күшті өрістер кезінде процестерге кететін уақыт релаксация уақытынан аз болуынан жұптық соқтығысулар ескерілмей қалып жатады, сондықтан да Власов теңдеуі негізгі математикалық құрал ретінде пайдаланылуы тиіс.

Авторлардың қосқан үлесі

Т.Б. Қоштыбаев – Жүйедегі релятивистік емес гравитацияланушы бөлшектердің екі ағынды периодты қозғалысы үзіліссіздік теңдеуі негізінде қарастырылатындығын есептеді. Пуассон теңдеуінің көмегімен соқтығыспайтын бөлшектердің концентрациясы гравитациялық потенциалға тура пропорционал болатындығын, сонымен бірге, бөлшектердің периодтық қозғалысы мен өзара үйлесімді өріс арасындағы екі ағынды статикалық тепе–теңдікті Пуассон теңдеуі бойынша сипаттап беруге болатындығын көрсетті.

Г. Әлімбаева – Жүйенің өрісі тереңдігі мен ұзындығы энергия мен қысым арқылы өрнектелуін потенциалдық шұңқыр түрінде қарастырудың негізгі математикалық есептеулерін басқарды. Шұңқырдағы бөлшектердің шекараға қарай ығысып, жекелеген концентрантты аймақтар құрайтындығын дәлелдеді.

Е.К. Жаменкеев – Бөлшектердің өріспен әсерлеулеріне арналған Гамильтон функциясы бірінші интеграл ретінде жүйенің толық қысымы болатындығы сақталу заңы арқылы дәлелдеді, Бернулли күшінің жаңа математикалық тұрғыдағы табиғаты анықтады.

А.Т. Жавлиева – Жүйенің күйлеріне қатысты шарттар арқылы санақ басынан өтетін интегралдық қисықтарды, жүйенің кеңістіктік ауқымы бойынша потенциалдың кеңістіктік үлестірім заңын анықтады. Леспе хатты дайындап, мақаланы редакцияға жолдауды да іске асырды.

Э.О. Құткелдиева – Бөлшектер жылдамдығының, қысым мен концентрацияның жүйе ұзындығы бойынша өзгеру заңдылығы күй параметрінің белгілі бір мәндерінде ғана орындалатындығын дәлелдеді. Барлық есептеулердің нәтижелерін ықшамдауға атсалысты.

М.Е. Алиева – Мақаланың талапқа сай рәсімделуіне де атсалысқан, аңдатпаның орыс және ағылшын мәтіндерін жазды, әдебиеттер тізімінің ағылшын нұсқасын жасады. Барлық есептеулерді тексеріп шықты.

Әдебиеттер тізімі

1. С.А. Лукашевия, А.А. Садовский, Определение фундаментальных понятий физики через законы, Эпохи науки, № 22, с. 56–61 (2020). <https://doi.org/10.24411/2409-3203-2020-12274>
2. Т.Б. Қоштыбаев, М.Е. Алиева, Б.Ә. Камал, Э.О. Құткелдиева, Дененің бірқалыпты және бірқалыпсыз қозғалыстарының математикалық негіздемесі, Абай атындағы ҚазҰПУ хабаршысы. Физика–математика ғылымдары сериясы, Том 85, №1, 80–92 б. (2024). <https://doi.org/10.51889/2959-5894.2024.85.1.001>
3. Т.Б. Қоштыбаев, Ә.Ә. Ақжолова, А.М. Татенов, М.Е. Алиева, Механикалық қозғалыстардың математикалық бастамалары, Қазақстан Республикасы Ұлттық инженерлік академиясының хабаршысы. Математикалық ғылымдар сериясы, Том 93, №3, 329–341 б. (2024). <https://doi.org/10.47533/2024.1606–146X.72>
4. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теория поля, Серия Теоретическая физика, (Наука, Москва, 1988), с. 512.
5. J.G. Vargas, Differential Geometry for Physicists and Mathematicians (World Scientific Publishing Company, 2014).
6. G. Giachetta, L. Mangiarotti, G. Sardanashvily, Advanced Classical Field Theory (World Scientific Publishing Company, Singapore, 2009).
7. A.B. Kurzhanski, P. Varaiya, Dynamics and Control of Trajectory Tubes. Theory and Computation (Birkhäuser, 2014).
8. C. Rham, G. Gabadadze, A.J. Tolley, Resummation of Massive Gravity, Phys. Rev. Lett. 106, p.231101 (2011).
9. G. Pretti, W.M. Coombs, C.E. Augarde, B. Sims, M.M. Puigvert, J.A. Gutiérrez, A conservation law consistent updated Lagrangian material point method for dynamic analysis, Journal of Computational Physics 485, p.112075, (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112075>
10. G. Shafer, Causal interpretation of graphical models, International Journal of Approximate Reasoning 141, p.179–182 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.ijar.2021.12.014>
11. S. Shahsavari, S. Boutorabi, A general approach to the mechanical analysis of continuous local inhomogeneity using continuum mechanics theory and a new general energy-based-model, Applications in Engineering Science

- 16, p.100149 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.apples.2023.100149>
12. E. Celledoni, A. Leone, D. Murari, B. Owren, Learning Hamiltonians of constrained mechanical systems, Journal of Computational and Applied Mathematics 417, p.114608 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.cam.2022.114608>
13. A. Bermúdez, Operational classical mechanics: holonomic systems, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 55(40), p.405201 (2022). <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac8f75>
14. H.G. Solari, M. Natiello, A Constructivist View of Newton's Mechanics, Foundations of Science 24(1), p.307-341 (2019). <https://doi.org/10.1007/s10699-018-9573-z>
15. M.I. Mironov, F.S. Zaitsev, N.N. Gorelenkov, V.I. Afanasyev, F.V. Chernyshev, V.G. Nesenevich, M.P. Petrov, Sawtooth mixing of alphas, knock-on D, and T ions, and its influence on NPA spectra in ITER plasma, Nuclear Fusion 58(8), p.1-9 (2018). <https://doi.org/10.1088/1741-4326/aab678>
16. I.N. Kosarev, Kinetic theory of a nonideal plasma: Dispersion relations, Gas Discharges 53, p.1296-1301 (2008). <https://doi.org/10.1134/S106378420810006X>

**Т.Б. Коштыбаев¹, Г. Алимбекова¹, Е.К. Жаменкеев²,
А.Т. Жавлиева^{1*}, Э.О. Куткелдиева¹, М.Е. Алиева²**

¹ *Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан*

² *Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан*

*(E-mail: koshtybayev70@mail.ru, alimbek50@mail.ru,
jamenkeev@mail.ru, zhavliyeva.11@gmail.com, elzira.kutkeldieva@gmail.com, moldir-2008@mail.ru)*

Гамильтонов формализм периодического бесстолкновительного движения частиц в поле

Аннотация. В статье представлен гамильтонов формализм движения гравитирующих частиц без столкновений в плоском и в самосогласованном поле. Поле системы представлено в виде потенциальной ямы, глубина и длина которой выражаются энергией и давлением. Было показано, что частицы в яме накапливаются в границе, образуя отдельные концентрические области. Двухпоточное периодическое движение нерелятивистских гравитирующих частиц системы рассматривалось на основе уравнения непрерывности. С помощью уравнения Пуассона было доказано, что концентрация не сталкивающихся частиц прямо пропорциональна гравитационному потенциалу. А также было показано, что статическое равновесие между двухпоточным периодическим движением частиц и самосогласованном полем можно описать с помощью уравнения Пуассона. На основе закона сохранения было доказано, что гамильтонова функция для взаимодействий частиц с полем является полным давлением в качестве первого интеграла и определена математическая природа силы Бернулли. По условиям состояния и пространственному масштабу системы определены интегральные кривые, проходящие через начало отсчета и закон пространственного распределения потенциала. Доказано, что закон изменения скорости, давления и концентрации частиц по длине системы выполняется при определенных значениях параметра состояния. Результаты теоретических вычислений были представлены в упрощенной форме. Было показано, что в зависимости от значений параметра состояния двухпоточной системы поле системы имеет формы потенциальной ямы и щели.

Ключевые слова: гамильтонов формализм, полевая система, уравнение непрерывности, гравитационные взаимодействия, двухпоточное периодическое движение, гравитационный потенциал, гравитирующие частицы

**T.B. Koshtybayev¹, G. Alimbekova¹, E.K. Zhamenkeev²,
A.T. Zhavliyeva^{1*}, E.O. Kutkeldiyeva¹, M.E. Aliyeva²**

¹ *Kazakh National Women's Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan*

² *Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan*

*(E-mail: koshtybayev70@mail.ru, alimbek50@mail.ru,
jamenkeev@mail.ru, zhavliyeva.11@gmail.com, elzira.kutkeldieva@gmail.com, moldir-2008@mail.ru)*

Hamiltonian formalism of periodic collisionless motion of particles in a field

Abstract. The paper presents a Hamiltonian formalism of the motion of gravitational particles without collisions in a flat and self-consistent field. The field of the system is represented as a potential well, the depth and length of which are expressed by energy and pressure. It was shown that the particles in the well accumulate in the boundary, forming separate concentric regions. The two-stream periodic motion of non-relativistic gravitating particles of the system was considered on the basis of the continuity equation. Using the Poisson equation, it was proved that the concentration of non-colliding particles is directly proportional to the gravitational potential. It was also shown that the static equilibrium between the two-flow periodic motion of particles and a self-consistent field can be described using the Poisson equation. Based on the conservation law, it was proved that the Hamiltonian function for particle interactions with a field is the total pressure as the first integral, and the mathematical nature of the Bernoulli force was determined. According to the conditions of the state and the spatial scale of the system, integral curves passing through the origin and the law of spatial potential distribution are determined. It is proved that the law of variation of velocity, pressure and concentration of particles along the length of the system is fulfilled at certain values of the state parameter. The results of theoretical calculations were presented in a simplified form. It was shown that, depending on the values of the state parameter of a two-stream system, the field of the system has the forms of a potential pit and a gap.

Keywords: Hamiltonian formalism, field system, continuity equation, gravitational interactions, two-stream periodic motion, gravitational potential, gravitating particles.

References

1. S.A. Lukashvija, A.A. Sadovskij, *Opređenje fundamental'nyh ponjatij fiziki cherez zakony* [Defining the fundamental concepts of physics through laws], *Jepohi nauki* [The eras of science] № 22, p. 56–61 (2020). <https://doi.org/10.24411/2409-3203-2020-12274> [in Russian]
2. T.B. Koshtybayev, M.E. Alieva, B.A. Kamal, Je.O. Kutkel'dieva, *Matematicheskoe obosnovanie pлавnyh i pлавnyh dvizhenij tela* [Mathematical justification of smooth and graceful body movements], *Abaj atyndary KazUPU habarshysy. Fizika–matematika ғылымдары сериясы* [Bulletin of Abai Kaznpu, series of physical and Mathematical Sciences] 85(1), p.80–92 (2024). <https://doi.org/10.51889/2959-5894.2024.85.1.001> [in Kazakh]
3. T.B. Koshtybayev, A.A. Akzholova, A.M. Tatenov, M.E. Alieva, *Matematicheskie nachala mehanicheskikh dvizhenij* [Mathematical beginnings of mechanical movements], *Kazakstan Respublikasy Ul'tyк inzhenerlik akademijasynyn habarshysy. Matematikalyk ғылымдар сериясы* [National Engineering Academy of the Republic of Kazakhstan, Mathematical Sciences] 93(3), p. 329–341 (2024). <https://doi.org/10.47533/2024.1606-146X.72>. [in Kazakh]
4. L.D. Landau, E.M. Lifshic, *Teoriya polja* [Field theory] (Nauka, Moscow, 1988), p.512. [in Russian]
5. J.G. Vargas, *Differential Geometry for Physicists and Mathematicians* (World Scientific Publishing Company, 2014).
6. G. Giachetta, L. Mangiarotti, G. Sardanashvily, *Advanced Classical Field Theory* (World Scientific Publishing Company, Singapore, 2009).
7. A.B. Kurzhanski, P. Varaiya, *Dynamics and Control of Trajectory Tubes. Theory and Computation* (Birkh"auser, 2014).
8. C. Rham, G. Gabadadze, A.J. Tolley, *Resummation of Massive Gravity*, *Phys. Rev. Lett.* 106, p. 231101 (2011).
9. G. Pretti, W.M. Coombs, C.E. Augarde, B. Sims, M.M. Puigvert, J.A. Gutiérrez, *A conservation law consistent updated Lagrangian material point method for dynamic analysis*, *Journal of Computational Physics* 485, p. 112075 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112075>
10. G. Shafer, *Causal interpretation of graphical models*, *International Journal of Approximate Reasoning*, 141, p. 179–182 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.ijar.2021.12.014>
11. S. Shahsavari, S. Boutorabi, *A general approach to the mechanical analysis of continuous local inhomogeneity using continuum mechanics theory and a new general energy-based-model*, *Applications in Engineering Science* 16, p. 100149 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.apples.2023.100149>
12. E. Celledoni, A. Leone, D. Murari, B. Owren, *Learning Hamiltonians of constrained mechanical systems*, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 417, p. 114608 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.cam.2022.114608>
13. A. Bermúdez, *Operational classical mechanics: holonomic systems*, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 55, p. 405201 (2022). <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac8f75>
14. H.G. Solari, M. Natiello, *A Constructivist View of Newton's Mechanics*, *Foundations of Science* 24, p. 307-341 (2019). <https://doi.org/10.1007/s10699-018-9573-z>

15. M.I. Mironov, F.S. Zaitsev, N.N. Gorelenkov, V.I. Afanasyev, F.V. Chernyshev, V.G. Nesenevich, M.P. Petrov, Sawtooth mixing of alphas, knock-on D, and T ions, and its influence on NPA spectra in ITER plasma, Nuclear Fusion 58(8), p.1-9 (2018). <https://doi.org/10.1088/1741-4326/aab678>
16. I.N. Kosarev, Kinetic theory of a nonideal plasma: Dispersion relations, Gas Discharges 53, p.1296–1301 (2008). <https://doi.org/10.1134/S106378420810006X>

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.

Әлімбаева Г. – педагогика ғылымдарының докторы, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының доценті, Әйтеке би, 99, 050000, Алматы, Қазақстан.

Жаменкеев Е.К. – техника ғылымдарының кандидаты, қауым.профессоры м. а., Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Достық даңғылы, 13, 050000, Алматы, Қазақстан.

Жавлиева А.Т. – хат–хабар авторы, педагогика ғылымдарының магистрі, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының оқытушысы, Алматы қ., Әйтеке би көшесі, 99, 050000, Алматы, Қазақстан.

Құткелдиева Э.О. – педагогика ғылымдарының магистрі, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті физика кафедрасының аға оқытушысы, Алматы қ., Әйтеке би, 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.

Алимбаева Г. – доктор педагогических наук, доцент кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, ул. Айтеке би, 99, 050000, Алматы, Казахстан.

Жаменкеев Е.К. – кандидат технических наук, и. о. асс. профессора кафедры физики Казахского национального педагогического университета имени Абая, пр. Достык, 13, 050000, Алматы, Казахстан.

Жавлиева А.Т. – автор для корреспонденции, магистр педагогических наук, преподаватель кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, ул. Айтеке би, 99, 050000, Алматы, Казахстан.

Құткелдиева Э.О. – магистр педагогических наук, старший преподаватель кафедры физики Казахского национального женского педагогического университета, г. Алматы, 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.

Alimbekova G. – doctor of Pedagogical Sciences, the acting associate Professor of the Physics Department of the Kazakh National Women’s Teacher Training University, Aiteke bi, 99, 050000, Almaty, Kazakhstan.

Zhamenkeev E.K. – candidate of Technical Sciences, acting associate professor of Physics Department of the Abai Kazakh National Pedagogical University, Dostyk Ave., 13, 050000, Almaty, Kazakhstan.

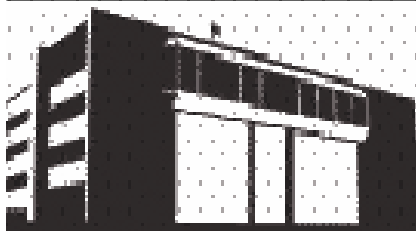
Zhavliyeva A.T. – corresponding author, master of Pedagogical Sciences, lecturer of the Department of physics of the Kazakh National Women’s Teacher Training University, Aiteke bi street, 99, 050000, Almaty, Kazakhstan.

Kutkeldiyeva E.O. – master of Pedagogical Sciences, Senior lecturer of the Physics Department of the Kazakh National Women’s Teacher Training University, Almaty, Aiteke bi, 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/>).



МРНТИ 29.19.16: 29.19.22: 29.19.31:

Научная статья

<https://doi.org/10.32523/2616-6836-2026-155-2-92-105>

Фотоэлектрохимические пути к зелёному водороду: анализ, обзор и форсайт

**Е.В. Шевченко¹, Н.Б. Бакранов^{1,2}, Б.Ж. Сейтов^{2,4}
А.С. Серикканов¹, Д.И. Бакранова^{2,3*}, С.А. Пазылбек⁵**

¹Национальная академия наук Республики Казахстан при Президенте Республики Казахстан, Алматы, Казахстан

²«Research Group altAir nanolab», Алматы, Казахстан

³SDU University, Каскелен, Казахстан

⁴Международный казахско-турецкий университет имени Х.А. Ясави, Туркестан, Казахстан

⁵Университет имени Ж.А. Ташенева, Шымкент, Казахстан

*E-mail: yelenashevchenko@gmail.com, bakranov@gmail.com, bekbolat.seitov@ayu.edu.kz,
a.serikkanov.nas@gmail.com, dinabakranova@gmail.com, sapargali.pa@gmail.com*

Аннотация. Современная динамика декарбонизации выявляет структурные ограничения существующих моделей производства водорода. Технично-экономические оценки показывают, что ключевым фактором себестоимости зелёного водорода остаётся энергопотребление, тогда как темпы наращивания мощностей электролиза не соответствуют траекториям достижения углеродной нейтральности. Несмотря на рост установленной мощности электролизёров с приблизительно 0,1 ГВт в 2020 г. до 1,75 ГВт в 2023 г., значительная часть заявленных проектов не достигает стадии окончательного инвестиционного решения, а инфраструктурные ограничения сохраняются.

Целью настоящего исследования является системный анализ эволюции фотоэлектрохимических (ПЕС) технологий производства водорода и оценка их потенциала в формирующейся архитектуре низкоуглеродной энергетики. Фотоэлектрохимическое водоразложение рассматривается как альтернативная технологическая конфигурация, объединяющая светопоглощение полупроводником и электрохимическое расщепление воды в единой системе, что позволяет реализовать локальную генерацию водорода и снизить уязвимости цепочек поставок по сравнению с централизованными схемами электролиза.

Методология исследования основана на комплексном системном анализе, включающем обобщение материаловедческих данных, библиометрических показателей и патентной динамики. Проанализирована взаимосвязь между пороговыми значениями эффективности преобразования солнечной энергии в водород, ограничениями стабильности материалов и инновационными траекториями развития оксидных, нитридных, халькогенидных и гибридных фотоэлектродов. В качестве основного результата предложена прогнозная дорожная карта развития ПЕС-техно-

Поступила 11.03.2026. После доработки 10.04.2026. Принята к печати 10.04.2026. Доступно онлайн 30.06.2026

*автор для корреспонденции

логий до 2035 года, ориентированная на замещение благородных металлов, повышение промышленной совместимости и интеграцию в распределённую водородную инфраструктуру. Научная ценность работы заключается в формировании целостного представления о долгосрочном потенциале PEC как комплементарной технологии водородной энергетики, а практическое значение связано с возможностью использования полученных выводов при стратегическом и технологическом планировании систем производства зелёного водорода.

Ключевые слова: Фотоэлектрохимическое водоразложение; зелёный водород; PEC-материалы; полупроводниковые фотоэлектроды; solar-to-hydrogen эффективность; библиометрический анализ; водородная инфраструктура

Введение

Ключевым ограничением масштабирования зелёного водорода остаётся его энергоёмкость, напрямую определяющая экономическую эффективность производства [1, 2]. Одновременно мировой спрос на водород вырос с 70 Мт в 2019 году до примерно 97 Мт в 2023 году, при этом доля низкоуглеродного водорода остаётся ниже 1 %, а сопутствующие выбросы достигают порядка 920 Мт CO₂ [3, 4]. Для соответствия климатическим целям объём низкоуглеродного производства должен увеличиться до порядка 49 Мт к 2030 году [1, 4], что требует не только роста спроса, но и замещения углеродоёмких технологий производства [5].

Электролиз на основе возобновляемых источников энергии является основным направлением декарбонизации. Установленные мощности выросли в период 2020–2023 гг. [6, 7], однако лишь небольшая часть проектов достигла стадии окончательного инвестиционного решения. Даже при оптимистичных сценариях к 2030 году ожидается 230–375 ГВт, что существенно ниже примерно 550 ГВт, необходимых для сценария достижения нулевых выбросов [4]. Дополнительные барьеры включают капиталоемкость инфраструктуры хранения и транспорта, зависимость от критических материалов и инвестиционную неопределённость.

Регуляторные подходы различаются по регионам. В США стимулирование осуществляется через налоговые механизмы, тогда как Европейский союз расширил нормативную базу в рамках Hydrogen and Decarbonised Gas Market Package, распространив её на возобновляемый и низкоуглеродный водород [8]. Тем не менее существующие меры не устраняют системных ограничений, что усиливает интерес к альтернативным солнечно-ориентированным маршрутам.

Фотоэлектрохимическое водоразложение основано на прямом сопряжении процессов поглощения фотонов и каталитических окислительно-восстановительных реакций в единой полупроводниковой структуре [9, 10]. Возможность локальной генерации водорода из солнечного излучения и воды позволяет потенциально минимизировать логистические риски, характерные для централизованных водородных цепочек поставок [11].

С теоретической точки зрения предельная эффективность solar-to-hydrogen для PEC-систем достигает 47,3 %, однако для положительного энергетического баланса необходимы значения не ниже 3–5%, а для коммерческого внедрения - порядка 10 % и выше [12]. Интеграция функций светопоглощения и катализа в одном устройстве может снизить системную сложность по сравнению с электролизом, питаемым внешним источником энергии [1, 13]. В то же время уровень технологической готовности остаётся низким вследствие проблем стабильности, рекомбинационных потерь и масштабируемости [14].

Современные направления исследований включают разработку наноструктурированных гетероинтерфейсов, защитных покрытий, плавающих фотокаталитических систем, а также применение цифрового моделирования и методов машинного обучения для ускорения поиска оптимальных материалов [15]. Однако переход от лабораторных образцов к промышленным устройствам требует смещения акцента от рекордных показателей эффективности к вопросам технологической воспроизводимости, долговечности и интеграции в распределённые энергетические системы [16].

Механизм PEC-водоразложения

Фотоэлектрохимическое расщепление воды представляет собой процесс прямой трансформации солнечного излучения в химическую энергию водорода. Конструктивно PEC-ячейка включает полупроводниковый фотоанод и/или фотокатод, контактирующие с электролитом [17]. Ключевая особенность системы заключается в совмещении светопоглощения и электрохимических реакций в единой межфазной структуре.

Энергетическое соответствие зонной структуры полупроводника редокс-потенциалам воды определяет принципиальную возможность протекания реакций. Валентная зона должна располагаться более положительно относительно потенциала окисления воды (+1,23 В vs. RHE), тогда как зона проводимости — более отрицательно потенциала восстановления водорода (0 В vs. RHE). С учётом перенапряжений практически реализуемая ширина запрещённой зоны составляет порядка 1,5-1,8 эВ.

Функционирование системы можно рассматривать как совокупность трёх взаимосвязанных стадий: генерация носителей заряда под действием света, их пространственное разделение и транспорт, а также межфазные окислительно-восстановительные реакции [18].

При формировании контакта полупроводника с электролитом возникает твёрдо-жидкостный переход, сопровождающийся перераспределением зарядов и выравниванием уровней Ферми рабочего электрода, электролита и противоиэлектрода [19]. В результате формируется область пространственного заряда в объёме полупроводника и двойной электрический слой в растворе.

Поглощение фотонов с энергией, превышающей ширину запрещённой зоны, инициирует переход электрона из валентной зоны в зону проводимости, что сопровождается образованием дырки. Возникающие электрон-дырочные пары создают квазиуровни Ферми и внутреннее электрическое поле, способствующее их разделению [20]. Эффективность устройства во многом определяется вероятностью достижения носителями межфазной границы до рекомбинации.

В n-типе фотоанодов дырки мигрируют к поверхности и инициируют реакцию выделения кислорода, тогда как электроны через внешнюю цепь поступают к катоду. В р-типе фотокатодов, напротив, фотогенерированные электроны участвуют в реакции выделения водорода непосредственно на поверхности электрода. Дополнительное пространственное разделение носителей может усиливаться гетеропереходами и встроенными электрическими полями [18, 21].

Полуреакции, протекающие на границе раздела фаз, описываются следующими уравнениями:



Для самопроизвольного протекания процесса энергетические уровни полупроводника должны обеспечивать достаточное фотонапряжение для одновременного инициирования обеих реакций.

Реальная эффективность PEC ограничивается совокупностью потерь, среди которых объёмная рекомбинация носителей, поверхностная рекомбинация на дефектах, кинетические барьеры межфазных реакций, необходимость преодоления перенапряжений, а также фотокоррозия и деградация материала при длительном освещении и приложенном потенциале.

Для минимизации этих потерь применяются стратегии инженерной модификации, включающие регулирование зонной структуры путём легирования и формирования твёрдых растворов, создание гетероструктур для усиления разделения зарядов, нанесение сокатализаторов для ускорения межфазной кинетики, использование защитных оксидных покрытий для повышения стабильности, а также наноструктурирование поверхности с целью сокращения диффузионной длины носителей и увеличения активной площади реакции.

Таким образом, механизм PEC-водоразложения определяется балансом четырёх взаимосвязанных факторов: спектральной эффективности светопоглощения, динамики транспорта носителей заряда, скорости межфазных электрохимических реакций и устойчивости материала в рабочей среде. Оптимизация каждого из этих компонентов является необходимым условием перехода от лабораторных прототипов к практически применимым системам.

Библиометрический и форсайт-анализ

Даже самые эффективные материалы и архитектуры остаются научно интересными, но коммерчески нерелевантными без надёжной интеграции на уровне системы. Как отмечают Brown и соавт. [22], энергосистемы с доминирующей долей переменных возобновляемых источников будут всё чаще сталкиваться с продолжительными периодами нулевых или отрицательных цен и высокой волатильности. В таких условиях PEC-системы должны развиваться синхронно с инфраструктурой хранения и компримирования водорода, ионообменными мембранами, системами теплового менеджмента и рекуперации отходящего тепла, а также технологиями предварительной подготовки воды [23]. Современные форсайт-исследования также недостаточно учитывают системные риски, включая сырьевую безопасность, инфляционное давление и социальное принятие технологий. В более широком контексте масштабирование PEC-технологий определяется не только технологической зрелостью, но и уровнем общественного восприятия водородной энергетики. Вопросы безопасности хранения и использования водорода,

а также необходимость адаптации существующей энергетической инфраструктуры могут влиять на скорость внедрения распределённых решений.

Дополнительно инфляционное давление на критические материалы, компоненты установок и логистические цепочки способно существенно изменить экономику PEC-систем, снижая их конкурентоспособность по сравнению с традиционным электролизом в краткосрочной перспективе. В этой связи дальнейшие исследования должны учитывать не только материалы и устройства, но и макроэкономические и институциональные факторы [24, 25]. Следовательно, необходим системный подход: даже лучшие PEC-электроды остаются неэффективными без интеграции в цепочки создания стоимости водорода.

Замещение благородных металлов доступными катализаторами, включая нанокристаллический CoO и металсиллициды [26, 27], может существенно снизить стоимостные барьеры внедрения PEC-технологий. Хотя показатели эффективности могут быть умеренными, доступность, масштабируемость и совместимость этих катализаторов с крупноформатными устройствами делают их привлекательными для промышленного применения.

Разрыв между лабораторными достижениями и практическим внедрением обусловлен прежде всего инженерией системного уровня: интеграцией PEC-модулей с системами разделения водорода, циркуляции электролита и теплового регулирования. Ограниченное число патентов в этой области подчёркивает необходимость смещения фокуса инноваций от материаловедения к разработке устройств и демонстрационных образцов.

Библиометрическое картирование исследований PEC

Для выявления перспективных направлений исследований было проведено тематическое моделирование более чем 6 000 аннотаций Web of Science (2015-2025 гг.) с использованием метода Latent Dirichlet Allocation (LDA). На рисунке 1 представлена временная тепловая карта весов тематических кластеров, полученных на основе LDA-моделирования.



Рисунок 1. Тепловая карта годовых весов тематик в исследованиях PEC-водородной генерации (2015–2025). Тепловая карта демонстрирует ежегодную динамику исследовательского акцента по десяти темам, выделенным методом LDA в области PEC-водородразложения. Более тёплые цвета соответствуют большей значимости темы в конкретный год.

Каждая строка отражает отдельный тематический кластер (например, Hydrogen & PEC Efficiency, TiO₂ & Charge Transfer и др.), а каждый столбец соответствует году публикации. Интенсивность цвета указывает на относительную значимость (вес) темы в конкретный год, причём более тёмные оттенки соответствуют более высокой активности.

Примечательно, что тема Water Oxidation Mechanisms демонстрирует наиболее устойчивый и значительный рост с пиком в 2024 году. В противоположность этому направления Quantum Dots & WS₂/CdS, Fe₂O₃ и легирование металлами остаются относительно стагнирующими или демонстрируют снижение активности в последние годы. Наблюдаемое снижение активности ряда тематик к 2025 году может быть обусловлено как насыщением исследовательских направлений, так и перераспределением научного финансирования в пользу новых материалов и гибридных архитектур. В частности, усиление интереса к тандемным PEC-PV системам и нитридным полупроводникам приводит к относительному снижению доли традиционных оксидных систем в публикационном потоке. Данная временная карта отражает эволюцию исследовательских приоритетов и позволяет выделить как зрелые, так и формирующиеся направления в PEC-водородной генерации (таблица 1), где наиболее быстро растущая тема - Механизмы окисления воды, рост с 38 (2015) до 164 (2024), затем снижение до 120 (2025); формирующееся направление - Поглощение видимого света, рост в период 2020–2024 гг., отражающий усиление интереса к регулированию ширины запрещённой зоны; снижающиеся темы - Тонкие плёнки, и температура, и Fe₂O₃, и легирование металлами показывают устойчивое снижение после 2019 года; стабильные направления - Водород, эффективность PEC, Фототок и производительность сохраняют умеренно высокий интерес на протяжении десятилетия.

Следует отметить, что показатель «рост (Δ веса)» отражает не абсолютное изменение числа публикаций, а изменение нормализованного веса темы, рассчитанного в рамках LDA-модели. Данный показатель учитывает относительную значимость темы в корпусе аннотаций и может не совпадать с разностью абсолютных значений, приведённых для иллюстрации динамики.

Таблица 1. Временная динамика роста тематик в PEC-водоразложении (2015–2025)

Ранг	Название темы	Ключевые слова темы (основные термины)	Рост (Δ веса)
1	Механизмы окисления воды	water, oxidation, mechanism, O ₂ , oxygen, catalyst	+82.52
2	Поглощение видимого света	visible, light, absorption, bandgap, spectrum	+30.88
3	Фототок и производительность	photocurrent, performance, density, stability, enhancement	+29.33
4	Катализаторы и интеграция PEC	catalyst, interface, cocatalyst, tandem, integration	+23.73
5	TiO ₂ и перенос заряда	TiO ₂ , charge, transfer, electron, carrier	+18.77
6	Водород и эффективность PEC	hydrogen, efficiency, STH, production, solar-to-hydrogen	+3.55
7	Квантовые точки и WS ₂ /CdS	quantum, dot, QDs, CdS, WS ₂	+0.73
8	Fe ₂ O ₃ и легирование металлами	Fe ₂ O ₃ , doping, metal, hematite, transition	-2.42
9	Спектроскопия и CuO	spectroscopy, CuO, signal, fluorescence, spectrum	-12.16
10	Тонкие плёнки и температура	thin film, substrate, phase, temperature, crystallinity	-16.94

Для выявления перспективных исследовательских траекторий временное тематическое моделирование было дополнено библиометрическим сетевым анализом, что позволило отразить как динамику тем во времени,

так и структурные взаимосвязи между ключевыми материалами. Если тепловая карта на рисунке 1 демонстрирует изменение значимости тематических кластеров в период 2015–2025 гг., то карта совместной встречаемости терминов, построенная в VOSviewer (рисунок 2), отражает структурную организацию исследований PEC-водородного разложения. Размер узла соответствует частоте использования термина, цвет обозначает тематическую кластеризацию, а толщина связей отражает силу совместной встречаемости.

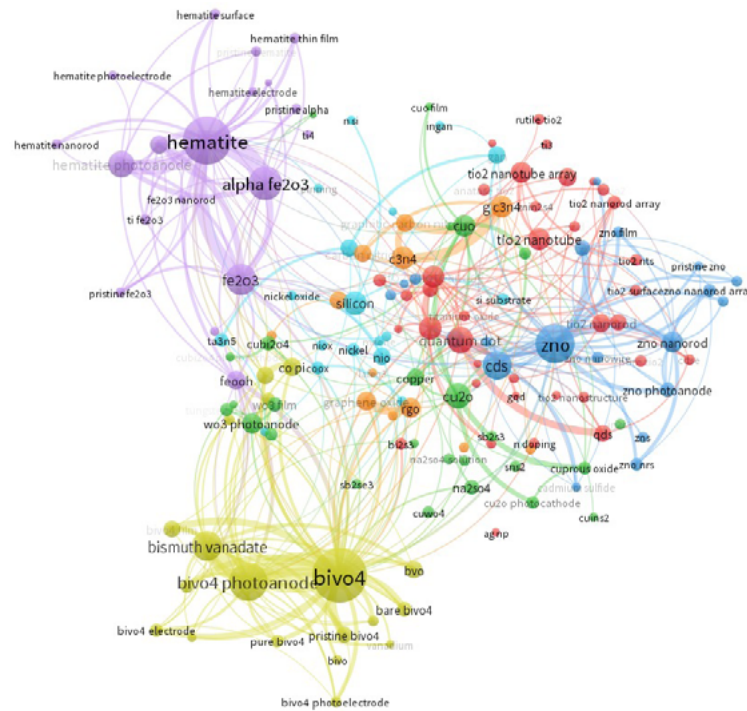


Рисунок 2. Организация материалов и концепций в исследовательском ландшафте PEC

Крупные и плотно связанные узлы, такие как Fe₂O₃ и TiO₂, отражают хорошо сформированные, но ограниченные по эффективности направления, характеризующиеся большим объёмом публикаций при умеренных темпах роста. BiVO₄ выступает центральным хабом, демонстрируя сильные связи с WO₃, Cu₂O и углеродсодержащими модификаторами, что подчёркивает его статус одной из наиболее активно оптимизируемых платформ фотоанодов.

Параллельно кластеры, центрированные вокруг ZnO, CdS и квантовых точек, указывают на продолжающийся интерес к наноструктурированным архитектурам и гетеропереходам для улучшения переноса заряда и светопоглощения.

Меньшие кластеры, связанные с кремнием, GaN, Ta₃N₅ и перовскитами, представляют быстрорастущие, но ещё формирующиеся области, что указывает на их потенциал для тандемных и гибридных PEC/PV-решений. Углеродный нитрид и оксид графена выступают связующими элементами между зрелыми оксидными системами и новыми гибридными архитектурами, отражая точки концептуальной конвергенции.

С форсайт-позиции двойной подход к картированию подчёркивает одновременную зрелость традиционных оксидных фотоэлектродов и ускоряющуюся диверсификацию в сторону нитридов, перовскитов и углеродных полупроводников. Эти выводы имеют значение для построения сценариев: зрелые материалы вероятно будут использоваться в демонстрационных установках ближайшего периода, тогда как формирующиеся кластеры отражают направления, способные обеспечить прорывы к 2035 году.

Анализ значимости и карты динамики PEC-материалов

Карта «значимость-динамика» (рисунок 3) предоставляет двумерный обзор исследовательской активности в области PEC-материалов и демонстрирует контраст между зрелыми, но насыщенными темами (высокая значимость, низкая динамика) и новыми, но нишевыми направлениями (низкая значимость, высокая динамика).

Ось X (Dynamics) отражает нормализованный среднегодовой темп роста публикаций за последние пять лет, а ось Y (Significance) - накопленный вес научного вклада. Размер пузыря соответствует общему числу публи-

каций, цвет - семейству материалов.

TiO₂, Fe₂O₃ и BiVO₄ доминируют в верхнем левом квадранте: высокая значимость при умеренной или снижающейся динамике. TiO₂ остаётся наиболее изученным материалом благодаря стабильности и доступности, однако темпы роста публикаций стабилизировались. Эти направления относятся к категории «консолидированных технологий».

Переходные и гибридные направления (g-C₃N₄, WO₃, CdS, ZnO) занимают промежуточную зону значимости и демонстрируют умеренную динамику. Они формируют «зону диверсификации», где прогресс обусловлен интеграцией с другими полупроводниками.

CuO выделяется среди оксидных материалов как один из немногих примеров, демонстрирующих умеренную значимость при сохранении положительной динамики публикационной активности, что отличает его от большинства традиционных оксидных систем, характеризующихся стабилизацией или снижением темпов роста. Перовскиты галогенидов демонстрируют низкую PEC-специфичную активность, но активно развиваются в фотовольтаике, формируя потенциал для PEC-PV-тандемов. 2D-материалы (MoS₂, WS₂), нитриды и оксинитриды (GaN, Ta₃N₅, SiC) относятся к формирующимся направлениям с повышенной динамикой.

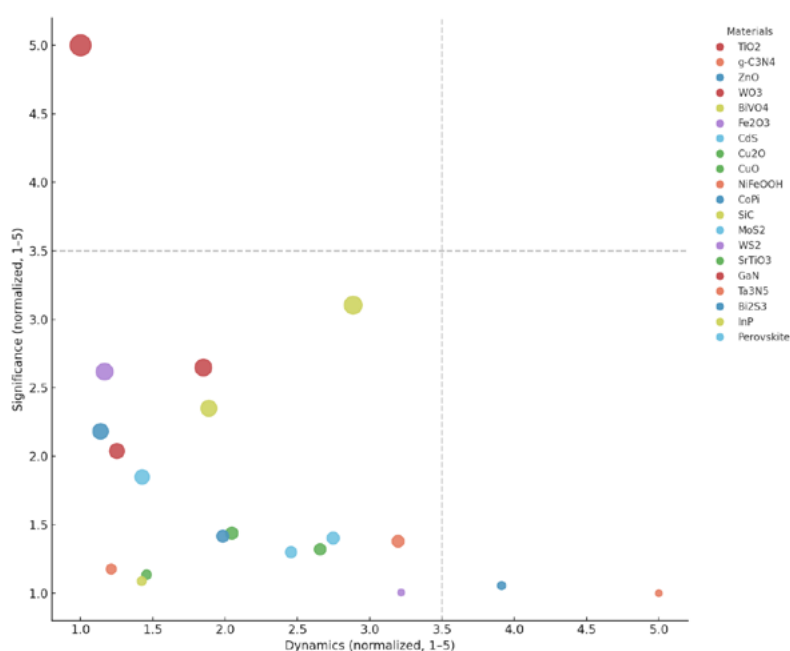


Рисунок 3. Двумерный обзор исследовательской активности в области материалов для PEC-водоразложения

Библиометрическое сравнение PEC-материалов: эффективность и динамика

Для оценки структуры и эволюции тематики PEC [28] была построена трёхмерная карта тематических кластеров (рисунок 4), где ось X – объём публикаций; ось Y – общее число цитирований; ось Z – размер кластера. Цвет представляет временное кодирование (фиолетовый относится к зрелым темам, зелёно-жёлтый к новым)

Ландшафт демонстрирует стратифицированную структуру: крупные «ядровые» кластеры с высоким числом публикаций и цитирований формируют фундамент направления. Меньшие, но высокоцитируемые кластеры отражают специализированные, но влиятельные исследования. Небольшие «нишевые» кластеры демонстрируют потенциал роста.

Перспективные направления включают BiVO₄-основанные фотоаноды (CAGR >20%, STH 2–4%), Cu₂O, WO₃, CuO.

Гибридные системы на основе углеродных материалов характеризуются невысокой медианной STH, но высокими темпами роста.

Зрелые материалы (TiO₂, α-Fe₂O₃) представляют крупные кластеры с ограниченным ростом.

Стратегически значимые материалы (Si, GaN, Ta₃N₅) сочетают высокую STH и устойчивый рост публикационной активности, что делает их ключевыми для развития PEC к 2035 году.

Использование данных на уровне аннотаций обеспечивает масштабируемость и воспроизводимость

анализа. Хотя полнотекстовый анализ дал бы более детальные параметры, он снижает сопоставимость и увеличивает вариативность извлечения данных. Следовательно, набор данных отражает не абсолютные рекордные показатели, а репрезентативные пороговые значения, акцентированные авторами публикаций.

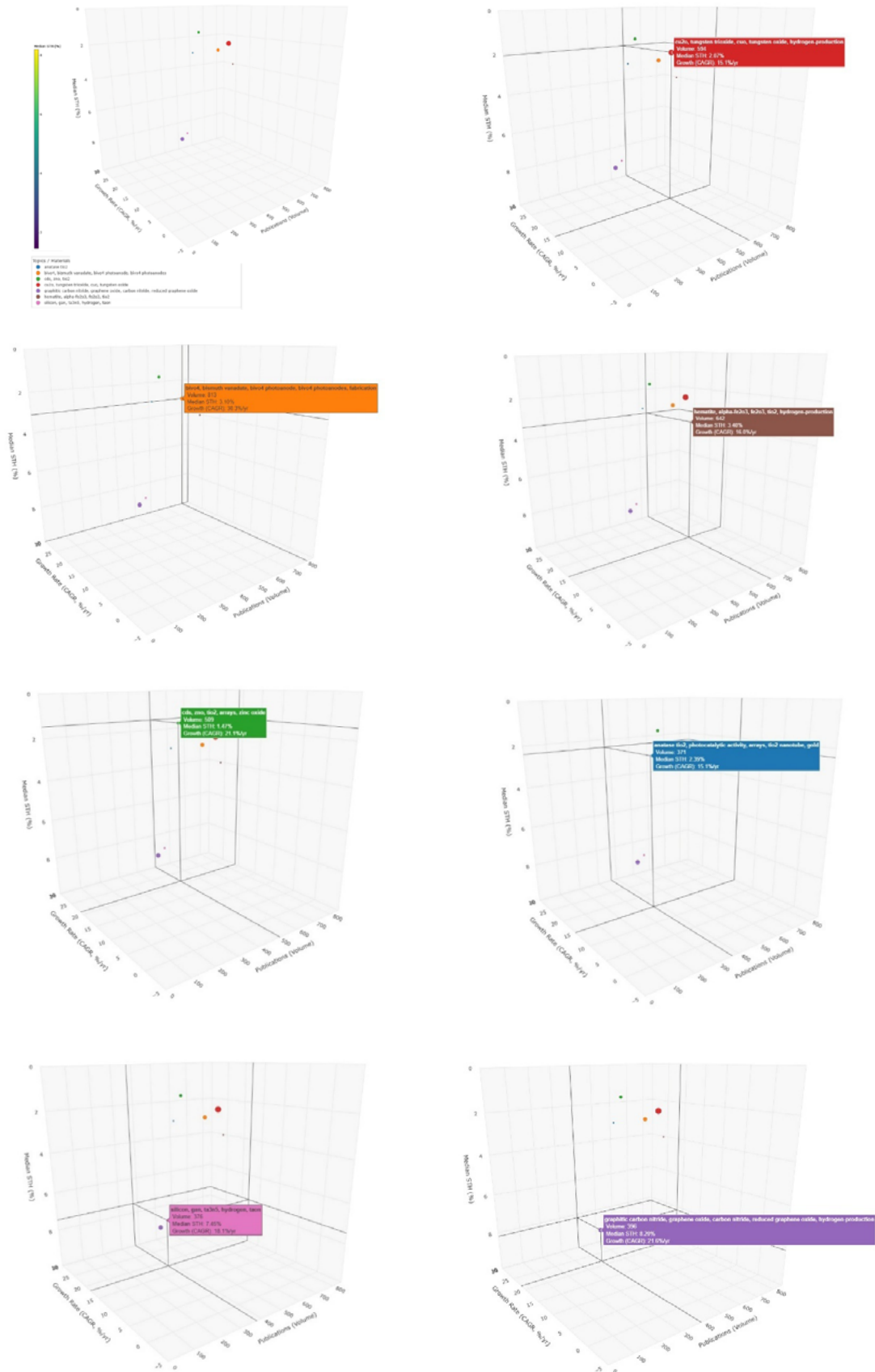


Рисунок 4. Трёхмерная библиометрическая карта, сопоставляющая объём публикаций

Заключение

Проведённый анализ показывает, что развитие водородной энергетики в условиях глобальной декарбонизации сталкивается не столько с отсутствием технологических решений, сколько с системными ограничениями масштабирования. Электролиз остаётся доминирующим низкоуглеродным маршрутом, однако его экономическая чувствительность к стоимости электроэнергии, несоответствие темпов наращивания мощностей целевым сценариям, а также инфраструктурные и инвестиционные барьеры формируют необходимость поиска комплементарных технологических платформ.

Фотоэлектрохимическое водоразложение демонстрирует концептуальное преимущество за счёт интеграции светопоглощения и электрохимической конверсии в единой системе, что потенциально снижает зависимость от сложных логистических цепочек и инфраструктуры централизованного производства. При этом достижение практически значимых значений solar-to-hydrogen эффективности требует преодоления пороговых уровней 3–5 % для энергетической целесообразности и порядка 10 % для коммерческой конкурентоспособности. Основными ограничениями остаются стабильность материалов, рекомбинационные потери и масштабируемость технологий.

Анализ механизма PEC подтверждает, что эффективность системы определяется балансом четырёх ключевых факторов – спектрального поглощения, разделения и транспорта носителей заряда, межфазной кинетики и долговременной устойчивости. Следовательно, дальнейший прогресс невозможен без комплексной оптимизации этих параметров на уровне материала и устройства.

Библиометрическое картирование и анализ динамики тематических кластеров выявили структурную стратификацию направления. Оксидные системы, такие как TiO₂, Fe₂O₃ и BiVO₄, формируют консолидированное ядро исследований, тогда как нитриды, перовскиты, 2D-материалы и гибридные архитектуры демонстрируют более высокую динамику роста и потенциал технологических прорывов. Особое значение приобретает переход от узко материаловедческой парадигмы к инженерии системного уровня, включая интеграцию PEC-модулей с системами хранения, разделения и теплового управления.

Замещение благородных металлов доступными катализаторами и развитие гибридных конструкций представляют важное направление снижения стоимостных барьеров. Вместе с тем форсайт-анализ указывает на недооценку системных рисков, связанных с сырьевой безопасностью и макроэкономической нестабильностью, что требует расширения аналитической рамки за пределы лабораторных показателей эффективности.

При этом социально-экономические факторы, включая общественное принятие технологий и волатильность стоимости материалов, будут играть всё более значимую роль при переходе от лабораторных разработок к промышленным решениям.

Таким образом, PEC-технологии следует рассматривать как долгосрочный элемент диверсифицированной водородной архитектуры. В краткосрочной перспективе зрелые оксидные системы могут служить платформой для демонстрационных установок, тогда как формирующиеся материалы и tandemные конфигурации обладают потенциалом обеспечения прорывных решений к 2035 году. Ключевым условием коммерциализации является переход от рекордных лабораторных показателей к воспроизводимым, масштабируемым и экономически обоснованным системам, интегрированным в распределённую энергетическую инфраструктуру.

Благодарности

Данное исследование было профинансировано Комитетом Науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № 061140007608/260009/00 от 2026-02-10 по специфике 001-103-154 «Услуги по проведению форсайтных исследований по развитию науки в рамках реализации Закона Республики Казахстан «О науке и технологической политике»). Авторы выражают благодарность Национальной академии наук Республики Казахстан при Президенте Республики Казахстан за оказанную поддержку.

Вклад авторов

Е.В. Шевченко - разработка концепции исследования, постановка задачи, участие в интерпретации результатов, редактирование рукописи.

Н.Б. Бакранов - участие в анализе фотоэлектрохимических данных, участие в интерпретации результатов, редактирование рукописи.

Б.Ж. Сейтов - участие в интерпретации данных, согласование окончательной версии статьи.

А.С. Серикканов - первичная обработка данных, участие в подготовке иллюстративного материала, написание текста статьи.

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

С.А. Пазылбек - анализ данных, согласование окончательной версии статьи, проверка достоверности всех полученных результатов.

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

Список литературы

1. International Renewable Energy Agency, Green Hydrogen: A Guide to Policy Making (IRENA, Abu Dhabi, 2020), доступно по адресу: <https://www.irena.org/publications/2020/Nov/Green-hydrogen>.
2. D. Guan et al., Hydrogen society: from present to future, *Energy & Environmental Science* 16 (11), p.4926–4943 (2023). <https://doi.org/10.1039/D3EE02695G>.
3. International Energy Agency; Japan for the G20, The Future of Hydrogen (IEA, Paris, 2019), доступно по адресу: <https://www.iea.org/reports/the-future-of-hydrogen>.
4. International Energy Agency, Global Hydrogen Review 2024 (IEA, Paris, 2024), доступно по адресу: <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2024>.
5. D. Hauglustaine et al., Climate benefit of a future hydrogen economy, *Communications Earth & Environment* 3 (1), p.1-14 (2022). <https://doi.org/10.1038/s43247-022-00626-z>.
6. Hydrogen Council; McKinsey & Company, Hydrogen Insights 2023 (2023), доступно по адресу: <https://hydrogencouncil.com/en/hydrogen-insights-2023/>.
7. Hydrogen Council; McKinsey & Company, Hydrogen Insights 2024 (2024), доступно по адресу: <https://hydrogencouncil.com/en/hydrogen-insights-2024/>.
8. S. Penttinen, Navigating the hydrogen landscape: An analysis of hydrogen support mechanisms in the US and the EU, *Review of European Comparative & International Environmental Law* 33 (3), p.397–411 (2024). <https://doi.org/10.1111/reel.12575>.
9. T. Chen et al., An overview of semiconductor electrode materials for photoelectrochemical water splitting and CO₂ conversion, *International Journal of Electrochemical Science* 19 (5), 100542 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.ijoes.2024.100542>.
10. Z. Li et al., Surface engineering of hematite nanorods photoanode towards optimized photoelectrochemical water splitting, *Journal of Colloid and Interface Science* 626, p.879–888 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2022.07.018>.
11. S. Almaraz et al., A holistic approach to assessing reliability in green hydrogen supply chains using mixed methods, *Technological Forecasting and Social Change* 209, 123816 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2024.123816>.
12. H. Zhang, H. Wang, J. Xuan, Rational design of photoelectrochemical cells towards bias-free water splitting: Thermodynamic and kinetic insights, *Journal of Power Sources* 462, 228113 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2020.228113>.
13. U.S. Department of Energy, U.S. National Clean Hydrogen Strategy and Roadmap (Washington, DC, 2023), доступно по адресу: https://www.hydrogen.energy.gov/docs/hydrogenprogramlibraries/pdfs/us-national-clean-hydrogen-strategy-roadmap.pdf?sfvrsn=c425b44f_5.
14. A. Ku et al., Opportunities for the materials research community to support the development of the H₂ economy, *MRS Energy & Sustainability* 10 (2), p.158–173 (2023). <https://doi.org/10.1557/s43581-023-00061-3>.
15. M. Bhatt, J. Lee, Nanomaterials for photocatalytic hydrogen production: from theoretical perspectives, *RSC Advances* 7 (55), p.34875–34885 (2017). <https://doi.org/10.1039/C7RA03435K>.
16. H. Oktar, I. Tonyali, A. Apaydin, A cost-effective and sustainable path to a green future: Retrofitting internal combustion engines for hydrogen fuel utilization, *International Journal of Hydrogen Energy* 143, p.969–977 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.12.240>.
17. F. Khodabandeh et al., Photoelectrochemical water splitting based on chalcopyrite semiconductors: A review, *International Journal of Hydrogen Energy* 65, p.779–803 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.03.378>.
18. S. Nasejje et al., Device architectures for photoelectrochemical water splitting based on hematite: a review, *Discover Materials* 4 (44) (2024). <https://doi.org/10.1007/s43939-024-00112-7>.
19. D. Bakranova, B. Seitov, N. Bakranov, Preparation and photocatalytic/photoelectrochemical investigation of 2D ZnO/CdS nanocomposites, *ChemEngineering* 6 (87) (2022). <https://doi.org/10.3390/chemengineering6060087>.
20. Z. Dong et al., Recent advances and perspective of modified TiO₂-based photoanodes toward photoelectrochemical

- water splitting, Fuel 373, 122366 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.132366>.
21. J. Ke et al., Nanocarbon-enhanced 2D photoelectrodes: A new paradigm in photoelectrochemical water splitting, Nano-Micro Letters 13 (24) (2021). <https://doi.org/10.1007/s40820-020-00545-8>.
 22. Brown T., Neumann F., Riepin I. Price formation without fuel costs: The interaction of demand elasticity with storage bidding, Energy Economics 147, 108483 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.eneco.2025.108483>.
 23. Kern F., Schmelzle F., Hummel M. Hydrogen as a panacea for decarbonising everything? Exploring contested hydrogen pathways in Germany, Environmental Research Letters 18, 114017 (2023). <https://doi.org/10.1088/1748-9326/acff0e>.
 24. L. Leypoldt et al., The hydrogen field in 2035: A Delphi study forecasting dominant technology bundles, Technological Forecasting and Social Change 207, 123593 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2024.123593>.
 25. S. Sajjadian, A critique on the UK's net zero strategy, Sustainable Energy Technologies and Assessments 56, 103003 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.seta.2022.103003>.
 26. L. Bao (Jiming), High-efficiency solar water splitting by nanocrystalline cobalt (II) oxide photocatalyst and uses thereof, US patent, (2016).
 27. M. Demuth, A. Kuklya, Silicides for photoelectrochemical water splitting and/or the production of electricity, US patent, (2015).
 28. Y. Wei et al., Frontiers of low-carbon technologies: Results from bibliographic coupling with sliding window, Journal of Cleaner Production 190, 422–431 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.04.170>.

**Е.В. Шевченко¹, Н.Б. Бакранов^{1,2}, Б.Ж. Сейтов^{2,4},
А.С. Серикканов¹, Д.И. Бакранова^{2,3*}, С.А. Пазылбек⁵**

¹ *Национальная академия наук Республики Казахстан при Президенте Республики
Казахстан, Алматы, Казахстан*

² *«Research Group altAir nanolab», Алматы, Казахстан*

³ *SDU University, Каскелен, Казахстан*

⁴ *Международный казахско-турецкий университет имени Х.А. Ясави, Туркестан, Казахстан*

⁵ *Университет имени Ж.А. Ташенева, Шымкент, Казахстан*

*(E-mail: yelenashevchenko@gmail.com, bakranov@gmail.com, bekbolat.seitov@ayu.edu.kz,
a.serikkanov.nas@gmail.com, dinabakranova@gmail.com, sapargali.pa@gmail.com)*

Жасыл сутек алудың фотоэлектрохимиялық жолдары: талдау, шолу және форсайт

Аңдатпа. Декарбонизацияның қазіргі динамикасы қолданыстағы сутегі өндірісі модельдерінің құрылымдық шектеулерін көрсетеді. Техникалық және экономикалық бағалаулар энергия тұтынуы жасыл сутегінің негізгі шығын факторы болып қала беретінін, ал электролиз қуатын кеңейту қарқыны көміртегі бейтараптығы траекторияларына сәйкес келмейтінін көрсетеді. Орнатылған электролизер қуатының 2020 жылы шамамен 0,1 ГВт-тан 2023 жылы 1,75 ГВт-қа дейін өсуіне қарамастан, жарияланған жобалардың айтарлықтай бөлігі соңғы инвестициялық шешім қабылдау кезеңіне жетпейді және инфрақұрылымдық шектеулер сақталуда.

Бұл зерттеудің мақсаты - фотоэлектрохимиялық (ПЕС) сутегі өндірісі технологияларының эволюциясын жүйелі түрде талдау және олардың пайда болатын төмен көміртекті энергия архитектурасындағы әлеуетін бағалау. Фотоэлектрохимиялық суды бөлу жартылай өткізгіш жарықты сіңіру мен электрохимиялық суды бөлуді бір жүйеде біріктіретін балама технологиялық конфигурация ретінде қарастырылады, бұл жергілікті сутегі өндіруге мүмкіндік береді және орталықтандырылған электролиз схемаларымен салыстырғанда жеткізу тізбегінің осалдықтарын азайтады. Зерттеу әдістемесі материалтану деректерін синтездеу, библиометриялық көрсеткіштер және патент динамикасын қамтитын кешенді жүйелік талдауға негізделген. Күн энергиясын сутегіге түрлендіру тиімділігінің шекті мәндері, материалдық тұрақтылық шектеулері және оксид, нитрид, халькогенид және гибриді фотоэлектродтар үшін инновациялық даму траекториялары арасындағы байланыс талданады. Негізгі нәтиже - бағалы металдарды алмастыру, өнеркәсіптік үйлесімділікті жақсарту және оларды таратылған сутегі инфрақұрылымына біріктіруге бағытталған 2035 жылға дейінгі ПЕС технологияларын дамытудың болжамды жол

картасы. Зерттеудің ғылыми құндылығы PEC-тің сутегі энергиясын толықтыратын технология ретіндегі ұзақ мерзімді әлеуетін тұтас түсінуді дамытуда, ал оның практикалық маңыздылығы - жасыл сутегі өндірісі жүйелерін стратегиялық және технологиялық жоспарлауда зерттеу нәтижелерін пайдалану мүмкіндігінде.

Түйін сөздер: фотозлектрохимиялық су ыдырату; жасыл сутек; PEC-материалдар; жартылай өткізгіш фотозлектродтар; solar-to-hydrogen тиімділігі; библиометриялық талдау; сутек инфрақұрылымы.

Ye.V. Shevchenko¹, **N.B. Bakranov**^{1,2}, **B. Zh. Seitov**^{2,4}, **A.S. Serikkanov**¹,
D.I. Bakranova^{2,3*}, **S.A. Pazyzbek**⁵

¹*National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan under the President of the Republic of Kazakhstan, Almaty, Kazakhstan*

²*«Research Group altAir nanolab», Almaty, Kazakhstan*

³*SDU University, Kaskelen, Kazakhstan*

⁴*Ahmet Yassawi University, Turkestan, Kazakhstan*

⁵*Tashenev University, Shymkent, Kazakhstan*

(E-mail: yelenashevchenko@gmail.com, bakranov@gmail.com, bekbolat.seitov@ayu.edu.kz,
a.serikkanov.nas@gmail.com, dinabakranova@gmail.com, sapargali.pa@gmail.com)

Photoelectrochemical Pathways to Green Hydrogen: Analysis, Review, and Foresight

Abstract. The current dynamics of decarbonization reveal the structural limitations of existing hydrogen production models. Technical and economic assessments show that energy consumption remains the key cost factor for green hydrogen, while the pace of electrolysis capacity expansion is not aligned with carbon neutrality trajectories. Despite the growth of installed electrolyzer capacity from approximately 0.1 GW in 2020 to 1.75 GW in 2023, a significant portion of announced projects do not reach the final investment decision stage, and infrastructure constraints remain.

The objective of this study is to systematically analyze the evolution of photoelectrochemical (PEC) hydrogen production technologies and assess their potential in the emerging low-carbon energy architecture. Photoelectrochemical water splitting is considered as an alternative technology configuration that combines semiconductor light absorption and electrochemical water splitting in a single system, enabling localized hydrogen generation and reducing supply chain vulnerabilities compared to centralized electrolysis schemes. The research methodology is based on a comprehensive systems analysis, including the synthesis of materials science data, bibliometric indicators, and patent dynamics. The relationship between threshold values for solar-to-hydrogen conversion efficiency, material stability limitations, and innovative development trajectories for oxide, nitride, chalcogenide, and hybrid photoelectrodes is analyzed. The main result is a predictive roadmap for the development of PEC technologies through 2035, focused on substituting precious metals, improving industrial compatibility, and integrating them into a distributed hydrogen infrastructure. The scientific value of the study lies in the development of a holistic understanding of the long-term potential of PEC as a complementary technology to hydrogen energy, while its practical significance lies in the potential for using the findings in strategic and technological planning for green hydrogen production systems.

Keywords: Photoelectrochemical water splitting; green hydrogen; PEC materials; semiconductor photoelectrodes; solar-to-hydrogen efficiency; bibliometric analysis; hydrogen infrastructure.

References

1. International Renewable Energy Agency, Green Hydrogen: A Guide to Policy Making (IRENA, Abu Dhabi, 2020), доступно по адресу: <https://www.irena.org/publications/2020/Nov/Green-hydrogen>.
2. D. Guan et al., Hydrogen society: from present to future, Energy & Environmental Science 16 (11), p.4926–4943 (2023). <https://doi.org/10.1039/D3EE02695G>.
3. International Energy Agency; Japan for the G20, The Future of Hydrogen (IEA, Paris, 2019), доступно по адресу: <https://www.iea.org/reports/the-future-of-hydrogen>.
4. International Energy Agency, Global Hydrogen Review 2024 (IEA, Paris, 2024), доступно по адресу: <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2024>.
5. D. Hauglustaine et al., Climate benefit of a future hydrogen economy, Communications Earth & Environment 3 (1),

- p.1-14 (2022). <https://doi.org/10.1038/s43247-022-00626-z>.
6. Hydrogen Council; McKinsey & Company, Hydrogen Insights 2023 (2023), доступно по адресу: <https://hydrogencouncil.com/en/hydrogen-insights-2023/>.
 7. Hydrogen Council; McKinsey & Company, Hydrogen Insights 2024 (2024), доступно по адресу: <https://hydrogencouncil.com/en/hydrogen-insights-2024/>.
 8. S. Penttinen, Navigating the hydrogen landscape: An analysis of hydrogen support mechanisms in the US and the EU, Review of European Comparative & International Environmental Law 33 (3), p.397–411 (2024). <https://doi.org/10.1111/reel.12575>.
 9. T. Chen et al., An overview of semiconductor electrode materials for photoelectrochemical water splitting and CO₂ conversion, International Journal of Electrochemical Science 19 (5), 100542 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.ijoes.2024.100542>.
 10. Z. Li et al., Surface engineering of hematite nanorods photoanode towards optimized photoelectrochemical water splitting, Journal of Colloid and Interface Science 626, p.879–888 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2022.07.018>.
 11. S. Almaraz et al., A holistic approach to assessing reliability in green hydrogen supply chains using mixed methods, Technological Forecasting and Social Change 209, 123816 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2024.123816>.
 12. H. Zhang, H. Wang, J. Xuan, Rational design of photoelectrochemical cells towards bias-free water splitting: Thermodynamic and kinetic insights, Journal of Power Sources 462, 228113 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2020.228113>.
 13. U.S. Department of Energy, U.S. National Clean Hydrogen Strategy and Roadmap (Washington, DC, 2023), доступно по адресу: https://www.hydrogen.energy.gov/docs/hydrogenprogramlibraries/pdfs/us-national-clean-hydrogen-strategy-roadmap.pdf?sfvrsn=c425b44f_5.
 14. A. Ku et al., Opportunities for the materials research community to support the development of the H₂ economy, MRS Energy & Sustainability 10 (2), p.158–173 (2023). <https://doi.org/10.1557/s43581-023-00061-3>.
 15. M. Bhatt, J. Lee, Nanomaterials for photocatalytic hydrogen production: from theoretical perspectives, RSC Advances 7 (55), p.34875–34885 (2017). <https://doi.org/10.1039/C7RA03435K>.
 16. H. Oktar, I. Tonyali, A. Apaydin, A cost-effective and sustainable path to a green future: Retrofitting internal combustion engines for hydrogen fuel utilization, International Journal of Hydrogen Energy 143, p.969–977 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.12.240>.
 17. F. Khodabandeh et al., Photoelectrochemical water splitting based on chalcopyrite semiconductors: A review, International Journal of Hydrogen Energy 65, p.779–803 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.03.378>.
 18. S. Nasejje et al., Device architectures for photoelectrochemical water splitting based on hematite: a review, Discover Materials 4 (44) (2024). <https://doi.org/10.1007/s43939-024-00112-7>.
 19. D. Bakranova, B. Seitov, N. Bakranov, Preparation and photocatalytic/photoelectrochemical investigation of 2D ZnO/CdS nanocomposites, ChemEngineering 6 (87) (2022). <https://doi.org/10.3390/chemengineering6060087>.
 20. Z. Dong et al., Recent advances and perspective of modified TiO₂-based photoanodes toward photoelectrochemical water splitting, Fuel 373, 122366 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.122366>.
 21. J. Ke et al., Nanocarbon-enhanced 2D photoelectrodes: A new paradigm in photoelectrochemical water splitting, Nano-Micro Letters 13 (24) (2021). <https://doi.org/10.1007/s40820-020-00545-8>.
 22. Brown T., Neumann F., Riepin I. Price formation without fuel costs: The interaction of demand elasticity with storage bidding, Energy Economics 147, 108483 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.eneco.2025.108483>.
 23. Kern F., Schmelzle F., Hummel M. Hydrogen as a panacea for decarbonising everything? Exploring contested hydrogen pathways in Germany, Environmental Research Letters 18, 114017 (2023). <https://doi.org/10.1088/1748-9326/acff0e>.
 24. L. Leypoldt et al., The hydrogen field in 2035: A Delphi study forecasting dominant technology bundles, Technological Forecasting and Social Change 207, 123593 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.techfore.2024.123593>.
 25. S. Sajjadian, A critique on the UK's net zero strategy, Sustainable Energy Technologies and Assessments 56, 103003

(2023). <https://doi.org/10.1016/j.seta.2022.103003>.

26. L. Bao (Jiming), High-efficiency solar water splitting by nanocrystalline cobalt (II) oxide photocatalyst and uses thereof, US patent, (2016).
27. M. Demuth, A. Kuklya, Silicides for photoelectrochemical water splitting and/or the production of electricity, US patent, (2015).
28. Y. Wei et al., Frontiers of low-carbon technologies: Results from bibliographic coupling with sliding window, Journal of Cleaner Production 190, 422–431 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.04.170>.

Сведения об авторах:

Е.В. Шевченко – вице-президент Правления Национальной Академии наук Республики Казахстан при Президенте Республики Казахстан, 050010, Алматы, Казахстан.

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

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

А.С. Серикканов – вице-президент Правления Национальной Академии наук Республики Казахстан при Президенте Республики Казахстан, 050010, Алматы, Казахстан.

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

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

Е.В. Шевченко – Қазақстан Республикасы Президентінің жанындағы Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы Басқармасының вице-президенті, 050010, Алматы, Қазақстан.

Н.Б. Бакранов – PhD, «research Group altAir nanolab» бас ғылыми қызметкері, 050043, Алматы, Қазақстан.

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

А.С. Серикканов – Қазақстан Республикасы Президентінің жанындағы Қазақстан Республикасының Ұлттық ғылым академиясы Басқармасының вице-президенті, 050010, Алматы, Қазақстан.

Д.И. Бакранова – хат-хабар авторы, PhD, SDU University қауымдастырылған профессоры, инженерия және жаратылыстану ғылымдары факультеті, Абылай хан көшесі 1/1, 040900, Қаскелең, Қазақстан.

С.А. Пазылбек – PhD, «Математика және информатика» кафедрасының қауымдастырылған профессоры, Ж.А. Ташенев атындағы университет, Қонаев даңғылы 21, 160012, Шымкент, Қазақстан.

Ye.V. Shevchenko – Vice President of the Board of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan under the President of the Republic of Kazakhstan, 050010, Almaty, Kazakhstan.

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

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

A.S. Serikkanov – Vice President of the Board of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan under the President of the Republic of Kazakhstan, 050010, Almaty, Kazakhstan.

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

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



Ғарыш инфрақұрылымында FBG сенсоры қамтамасыз ететін заманауи талаптарды зерттеу

**С.Ж. Көшкінбаев^{1,2} , А.К. Сейтханова³ , Н.К. Смайлов*¹ ,
Қ.М. Ысырайыл¹ , А.Е. Куттыбаева¹**

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

²Мирас университеті, Шымкент, Қазақстан

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

E-mail: koshkinbaev_s@miras.edu.kz, ainur1179@mail.ru, n.smailov@satbayev.university,
kidir200091@gmail.com, a.kuttybayeva@satbayev.university

Аңдатпа. Бұл мақала ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдық денсаулықты бақылау жүйелеріне қойылатын заманауи талаптарды зерттеуге және оларды Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорлары негізінде іске асыру мүмкіндіктерін талдауға арналған. Ғарыш аппараттарының күн панельдері, антенналары, композиттік тасымалдаушы құрылымдары және жылулық қорғау жүйелері пайдалану барысында иондаушы сәулелену, вакуум, температураның кең ауқымды ауытқуы және механикалық жүктемелер сияқты қолайсыз факторлардың әсеріне ұшырайды. Бұл жағдайлар материалдардың қасиеттерінің өзгеруіне, деформациялардың жинақталуына және құрылымдардың сенімділігінің төмендеуіне алып келуі мүмкін. Осыған байланысты өте кіші деформацияларды жоғары дәлдікпен және ұзақ мерзім бойы бақылау маңызды міндет болып табылады. Зерттеуде FBG сенсорларының жұмыс істеу принциптері, Брэгг толқын ұзындығының деформация мен температура әсерінен өзгеруі, сондай-ақ радиациялық әсердің өлшеу тұрақтылығына ықпалы қарастырылды. Құрылымдық мониторингтің тиімділігін арттыруға бағытталған үш негізгі тәсіл талданды: радиацияға төзімді FBG сенсорларын пайдалану, нақты уақыттағы мониторингке арналған мультиплекстелген сенсорлық желілерді қолдану және сенсорларды деформация ең жоғары аймақтарға оңтайлы орналастырып, алынған деректерді интеллектуалды өңдеу. Зерттеу нәтижелері аталған тәсілдерді кешенді қолдану өлшеу дәлдігін арттырып, жүйенің массасы мен күрделілігін азайтуға, ақпараттық тиімділікті жоғарылатуға және ғарыштық құрылымдардың ұзақ мерзімді сенімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз етуге мүмкіндік беретінін көрсетті. FBG негізіндегі сенсорлық жүйелер ғарыш инфрақұрылымын мониторингтеудің перспективалы және инженерлік тұрғыдан тиімді шешімі болып табылады.

Түйін сөздер: ғарыштық инфрақұрылым, Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорлары, деформация, ғарыштық орта, жоғары дәлдік, Брэгг толқын ұзындығы.

Жіберілді 22.04.2026. Өзгертілді 6.05.2026. Қабылданды 12.05.2026. Онлайн қол жетімді 30.06.2026.

*хат-хабар авторы

Кіріспе

Ғарыштық инфрақұрылым объектілері күн панельдері, антенналар, композиттік тасымалдаушы құрылымдар және жылулық қорғау жүйелері ұзақ мерзімді миссиялар барысында радиация, вакуум, температураның кең ауқымды ауытқуы және механикалық жүктемелердің бірлескен әсеріне ұшырайды, бұл материалдардың физика-механикалық қасиеттерінің өзгеруіне және құрылымдық тұрақтылықтың төмендеуіне әкелуі мүмкін [1]. Осындай жағдайларда өте кіші деформацияларды жоғары дәлдікпен және ерте кезеңде анықтау ғарыш аппараттарының сенімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз етудің негізгі шарты болып табылады, ал мониторингтің кешігуі құрылымдық зақымданудың үдеуіне және жүйенің жұмыс қабілетінің төмендеуіне себеп болуы ықтимал. Ұзақ мерзімді ғарыштық миссияларда материалдардың қартаюуы, радиациялық зақымдануы және құрылымдық шаршау процестерінің жинақталмалы сипаты құрылымдық мониторинг жүйелеріне қойылатын талаптарды одан әрі күшейтеді [2, 3].

Дәстүрлі электрлік сенсорлар ғарыштық ортада электромагниттік кедергілерге сезімталдығы, массасының салыстырмалы түрде жоғары болуы және ұзақ мерзімді тұрақтылығының шектеулілігі салдарынан өте кіші деформацияларды сенімді түрде бақылау талаптарын толық қанағаттандыра алмайды [4, 5]. Осыған байланысты соңғы жылдары оптикалық талшықты сенсорлар, әсіресе Fiber Bragg Grating (FBG) сенсорлары, ғарыштық құрылымдық денсаулықты бақылау жүйелерінде перспективалы шешім ретінде кеңінен зерттелуде [6]. FBG сенсорларының жоғары сезімталдығы, электромагниттік кедергілерге иммундылығы, аз массасы және бір талшық бойына көпнүктелі өлшеу мүмкіндігі оларды ғарыш инфрақұрылымына интеграциялау үшін қолайлы етеді [6, 7].

Ғарыштық ортадағы негізгі шектеуші факторлардың бірі иондаушы сәулеленудің оптикалық талшықтың сыну көрсеткішіне және сенсорлық сипаттамаларына әсері. Радиацияның әсерінен Брэгг толқын ұзындығының дрейфі пайда болып, өлшеу дәлдігі төмендеуі мүмкін, сондықтан радиацияға төзімді FBG сенсорларын әзірлеу және жетілдіру өзекті ғылыми мәселе болып табылады. Бұл бағыттағы зерттеулер арнайы талшық материалдарын, жетілдірілген FBG жазу технологияларын және өзін-өзі қалпына келтіретін сенсорлық жүйелерді қолдану арқылы өлшеу тұрақтылығын арттыру мүмкіндігін көрсетеді [8, 9]. Сонымен қатар, ғарыш құрылымдарының кең аумақты болуы барлық аймақты сенсорлармен толық жабуды техникалық және массалық тұрғыда мүмкін етпейді. Осы себепті бір оптикалық талшық бойына мультиплекстелген FBG сенсорлық желілерін пайдалану және сенсорларды деформация ең жоғары болатын аймақтарға оңтайлы орналастыру әдістері ерекше маңызға ие [10]. Мұндай тәсілдер нақты уақыттағы құрылымдық күйді бақылауды қамтамасыз етіп қана қоймай, минималды сенсор санымен максималды ақпарат алуға мүмкіндік береді және цифрлық егіз (Digital Twin) концепциясымен үйлесімді түрде дамытылуда [11].

Бұл жұмыстың ғылыми жаңалығы келесі аспектілермен сипатталады:

(1) радиациялық әсер, температура және деформация факторларын бір уақытта ескеретін FBG сенсорларын қолданудың кешенді тәсілі ұсынылды;

(2) мультиплекстелген сенсорлық желілер мен оңтайлы орналастыру әдістерін біріктіретін интеграцияланған әдіс ұсынылды;

(3) минималды сенсор санымен максималды ақпарат алуға бағытталған инженерлік шешім негізделді. Сонымен қатар, ғарыштық ортада вакуум, термиялық циклдер (-150°C – $+150^{\circ}\text{C}$), ультракүлгін сәулелену, атомарлық оттегі және ұшыру кезіндегі діріл сияқты факторлар сенсорлардың ұзақ мерзімді тұрақтылығына айтарлықтай әсер етеді.

Әдіснама

Зерттеу әдіснамасы аналитикалық талдау, салыстырмалы әдеби шолу және модельдік бағалау әдістеріне негізделген. Әдебиеттер Scopus және Web of Science дерекқорларынан “FBG sensors”, “space SHM”, “radiation effects in optical fibers” кілт сөздері бойынша таңдалды.

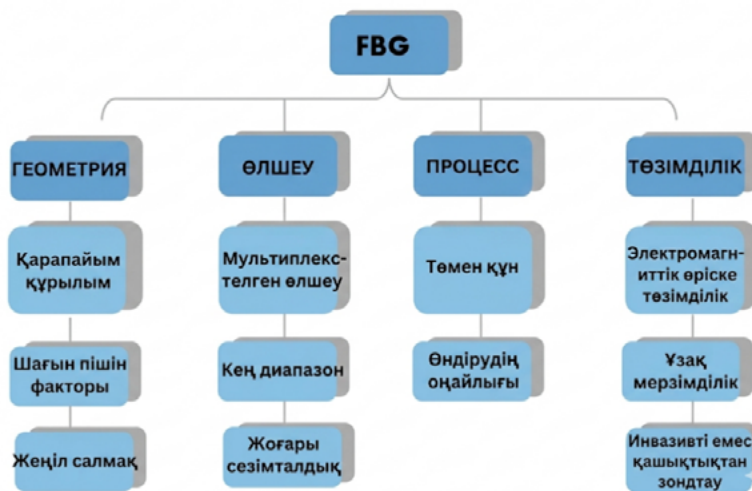
Әдістерді бағалау келесі критерийлер бойынша жүргізілді:

- өлшеу дәлдігі
- радиацияға төзімділік
- жүйе массасы
- сенсорлар саны
- ұзақ мерзімді тұрақтылық.

Сонымен қатар, ғарыштық ортада вакуум, термиялық циклдер (-150°C – +150°C), ультракүлгін сәулелену, атомарлық оттегі және ұшыру кезіндегі діріл сияқты факторлар сенсорлардың ұзақ мерзімді тұрақтылығына айтарлықтай әсер етеді.

Ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдардың ұзақ мерзімді сенімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз ету үшін сенсорлар өте жоғары дәлдікке, тұрақтылыққа және қоршаған ортаның қатал әсерлеріне төзімділікке ие болуы тиіс. Осы талаптарды қанағаттандыратын перспективалы технология – оптикалық талшықты Брэгг торларына (FBG) негізделген сенсорлар [12]. Ғарыш инфрақұрылымына арналған мониторинг жүйелері өте кіші деформацияларды жоғары дәлдікпен анықтай алуы қажет. FBG сенсорының маңызы электромагниттік кедергілерге иммундылығы, өте аз салмағы, кең ауқымды қамту мүмкіндігі, шағын өлшемі, ақпарат жоғалтудың аздығы, жоғары сезімталдық. Соның нәтижесінде бұл сенсорлық жүйелері деформация, температура, діріл және орын ауыстыру сияқты параметрлерді өлшеу үшін кеңінен қолданылады [12, 13].

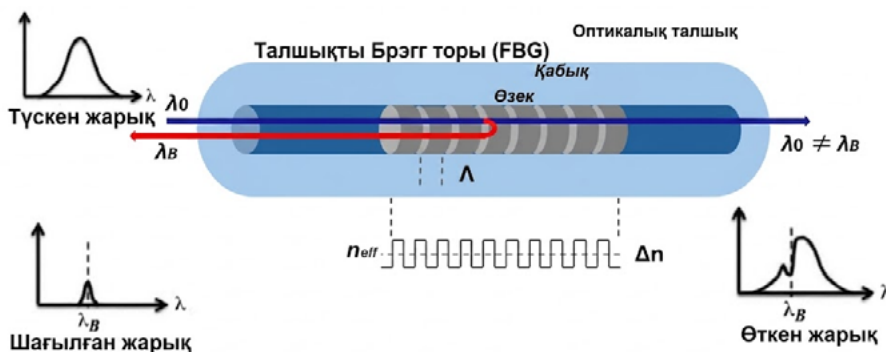
FBG сенсорлары радиациялық әсер жағдайында ең көп зерттелген сенсорлар болып табылады және соңғы жылдары нарықтағы үлесі айтарлықтай артты. FBG сенсорларының негізгі артықшылықтары 1-суретте көрсетілген және олар әртүрлі қолданбаларда оңтайлы сенсорды таңдауға әсер ететін сипаттамалар бойынша жіктелген [14].



Сурет 1. FBG сенсорларының сипаттамалары.

FBG толқын ұзындығына селективті сүзгі болып табылады, мұнда Брэгг торы оптикалық талшықтың өзегіне жазылып, талшықтың осьтік бағыты бойымен сыну көрсеткішінің периодты бұзылуын қалыптастырады. Құрылымының толқын ұзындығын таңдау қасиеті сыну көрсеткішіндегі осы периодты өзгерістерден туындайтын көп мәртелі Френель шағылулары мен олардың когерентті интерференциясына 2-суреттегідей негізделген [15]. FBG тиімді сыну көрсеткішімен көбейтілген тор периодының екі есесіне сәйкес келетін толқын ұзындығындағы жарықты шағылыстырады. Бұл жағдайда Брэгг шарты орындалады және ол 1-формуламен анықталады [16, 17].

$$\lambda_B = 2n_{eff}\Lambda \tag{1}$$

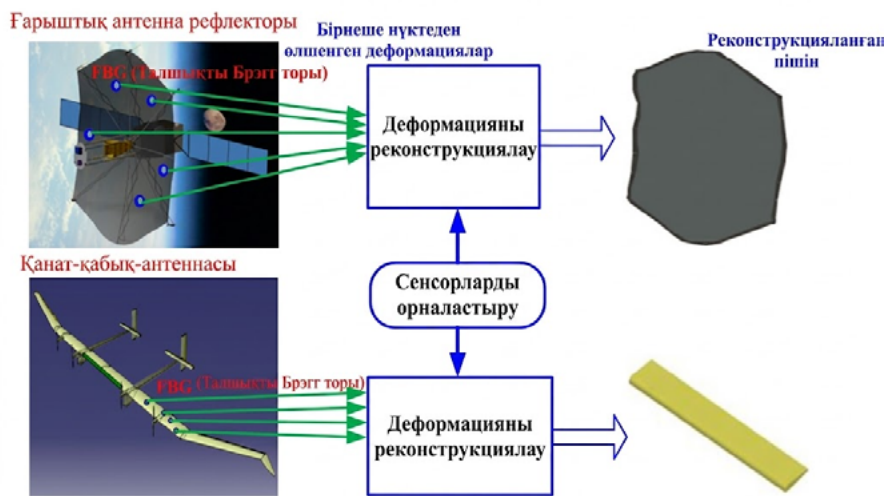


Сурет 2. FBG жұмыс істеу принципінің сұлбасы.

Сенсорға түсірілген жүктемелер (индукцияланған деформация түрінде) немесе температуралық ауытқулар FBG шағылыстыратын толқын ұзындығының айтарлықтай өзгеруіне әкелетіні оңай түсіндірілген және 2-формуламен өрнектеуге болады [18].

$$\Delta\lambda_B = K_\epsilon \Delta\epsilon + K_T \Delta T \tag{2}$$

Заманауи әуе және ғарыштық антенналардың жұмыс сипаттамаларына қойылатын талаптар үнемі артып келетіндіктен, өзіне ендірілген немесе бекітілген FBG деформация сенсорлары бар жаңа антенна құрылымы ұсынылады. Өлшенген дискретті деформация деректерін пайдалана отырып, деформация пішіні деформация – ығысу түрлендіруі арқылы бағаланады. 3-суретте бекітілген немесе ендірілген FBG деформация сенсорларына негізделген ұсынылған пішін деформациясын сезу әдісінің тұжырымдамасы көрсетілген [19].



Сурет 3. FBG деформация сенсорларының деформацияны сезуінің сұлбалық диаграммасы.

Тор периоды Λ да, тиімді сыну көрсеткіші n_{eff} те деформацияға және температураға тәуелді. Брэгг толқын ұзындығының салыстырмалы өзгерісі үшін, температурасы өзгермелі жағдайда FBG көмегімен деформацияны сезудің негізгі 3-формуламен жазылады [20].

$$\frac{\Delta\lambda_B(\epsilon, T)}{\lambda_B} = K_\epsilon + \zeta_T \tag{3}$$

Температура мен деформация әсерін ажырату үшін келесі әдістер қолданылады:

- эталондық FBG қолдану
- қос толқын ұзындығы әдісі
- температураны компенсациялау алгоритмдері
- арнайы қаптамалар (packaging)

Бұл әдістер айқаспалы сезімталдық (cross-sensitivity) әсерін 30–60 % -ға дейін төмендетуге мүмкіндік береді. FBG сенсорлары үшін негізгі физикалық параметрлер сандық түрде келесідей сипатталады. Деформация ϵ әдетте 0–3000 $\mu\epsilon$ диапазонында өлшенеді, ал температура T –150°C-тан +300°C-қа дейін өзгеруі мүмкін.

Брэгг толқын ұзындығының ығысуы $\Delta\lambda$ келесі диапазонда болады:

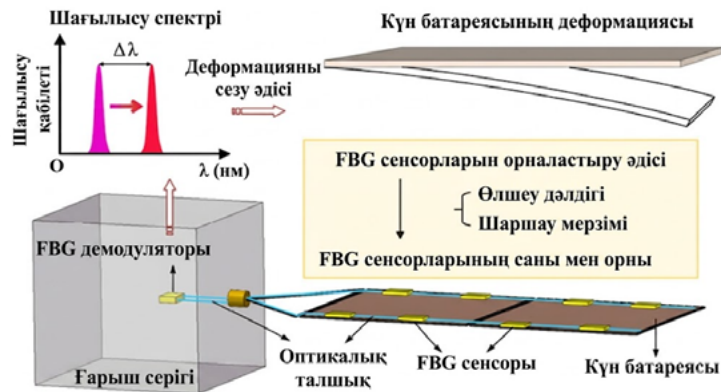
$$\Delta\lambda \approx 1-10 \text{ pm}/\mu\epsilon \text{ (деформация әсерінен)} \text{ және } \Delta\lambda \approx 10-15 \text{ pm}/^\circ\text{C} \text{ (температура әсерінен)}.$$

Сезімталдық коэффициенттері: $K_\epsilon \approx 1.2 \text{ pm}/\mu\epsilon$, $K_T \approx 10 \text{ pm}/^\circ\text{C}$.

Бұл параметрлер FBG сенсорларының жоғары дәлдікпен микро-деформацияларды анықтауға мүмкіндік беретінін көрсетеді.

FBG сенсорына негізделген сезу әдісі объектілерге бекіту немесе ендіру арқылы жергілікті деформацияны анықтауға мүмкіндік береді. FBG сенсорларын пайдалана отырып спутниктің күн панелінің деформациясын

сезудің сұлбасы 4-суретте көрсетілген. Оптикалық талшықтағы FBG сенсорлары күн панелінің бетіне бекітіледі. FBG демодуляторы спутниктің ішінде орнатылады және Брэгг толқын ұзындығының өзгерісі арқылы FBG сенсорларындағы деформация мәндерін анықтайды [21].



Сурет 4. FBG сенсорларын пайдалана отырып спутниктің күн панелінің деформациясын сезудің сұлбасы.

Енді тақырыпқа сай толық қамтылу мақсатында негізгі 3 әдісті талдаймыз:

1-әдіс. Радиацияға төзімді FBG сенсорларын қолдану негізі: Ғарыштық ортада иондаушы сәулелену (γ-сәулелер, протондар, электрондар) оптикалық талшықтың сыну көрсеткішін өзгертіп, өлшеу қателігін тудырады. Осыған байланысты арнайы радиацияға төзімді талшықтар мен FBG жазу технологиялары қолданылады. Қамтамасыз етілетін заманауи талап: Ұзақ мерзімді тұрақтылық, ғарыштағы радиациялық ортада өлшеу дәлдігін сақтау [22].

Ғарыштық ортада радиациялық доза 10–100 krad, ал протон флюенсі 10^{11} – 10^{13} p/cm² дейін жетуі мүмкін. Бұл жағдайда стандартты FBG сенсорларында Брэгг толқын ұзындығының дрейфі 100–300 pm құрайды.

Радиацияға төзімді FBG (фемтосекундтық немесе қайта қалпына келтірілген Брэгг торлары) қолданылған жағдайда бұл дрейф 30–80 pm дейін төмендейді.

2-әдіс. Нақты уақыттағы құрылымдық денсаулық мониторингіне арналған FBG сенсорлық желілері (FBG sensor networks for real-time SHM): Ғарыш құрылымдары (күн панельдері, антенналар, композиттік қабықтар, MLI жылу жабындары) кең аумақты қамтиды. Бір талшық бойына бірнеше FBG орналастыру арқылы көпнүктелі, нақты уақыттағы деформация және температура мониторингі іске асырылады. Қамтамасыз етілетін заманауи талап: Масса мен кабель санын азайту, Нақты уақыттағы құрылымдық күйді бақылау, Сенсорлық артықшылық.

3-әдіс. FBG сенсорларын оңтайлы орналастыру және деректерді интеллектуалды өңдеу: Ғарыш құрылымдарында барлық аймаққа сенсор орнату мүмкін емес. Сондықтан FBG сенсорларын деформация ең жоғары болатын аймақтарға математикалық және алгоритмдік әдістермен оңтайлы орналастыру қолданылады. Қамтамасыз етілетін заманауи талап: Жоғары өлшеу дәлдігі, Құрылымның қызмет ету мерзімін арттыру, Минималды сенсор санымен максималды ақпарат алу [23].

Нәтижелер мен талқылау

Бұл зерттеуде ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдардың жалпы қатал орта жағдайында ұзақ мерзім бойы сенімді түрде бақылауды қамтамасыз етуге бағытталған әдістемелік тәсілдер қарастырылады. Негізгі назар FBG сенсорына негізделген өлшеу құралдары арқылы тиімділікке аударылады. Сонымен қатар FBG сенсорының нақты атқара алатын міндеттерінің ауқымын көрсетеміз.

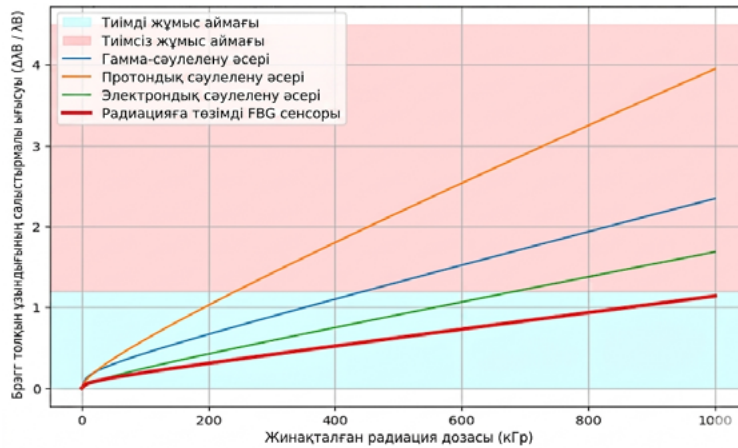
Әдістеме бөлімінде талдаған әдістерді арнайы жүйелі түрде талдасақ,

1. 5-суретте FBG сенсорларының ғарыштық радиациялық ортада жұмыс істеу тиімділігі Брэгг толқын ұзындығының салыстырмалы ығысуы арқылы бағаланады. Диаграммада жұмыс режимдері екі негізгі аймаққа бөлінген. Сурет авторлардың модельдік бағалау нәтижелері негізінде құрастырылған.

Графикте абсцисса осінде радиациялық доза (kGy), ал ординатада Брэгг толқын ұзындығының салыстырмалы ығысуы ($\Delta\lambda/\lambda$) көрсетілген. Деректер модельдеу нәтижелері негізінде алынған және стандартты және радиацияға төзімді FBG сенсорлары үшін салыстырмалы түрде ұсынылған.

Тиімді жұмыс аймағы (өте ашық көк түспен): Бұл аймақ Брэгг толқын ұзындығының салыстырмалы ығысуы аз болатын жағдайларды сипаттайды. Мұнда өлшеу дәлдігі сақталып, сенсор ұзақ мерзімді құрылымдық мониторинг талаптарын қанағаттандырады.

Тиімсіз жұмыс аймағы (өте ашық қызыл түспен): Бұл аймақта сәулеленудің әсерінен Брэгг толқын ұзындығының айтарлықтай дрейфі байқалады, нәтижесінде өлшеу қателігі артып, сенсордың сенімділігі төмендейді. Стандартты оптикалық талшықтарда жазылған FBG сенсорлары, әсіресе протондық сәулелену жағдайында, осы аймаққа ерте өтетіні анық көрінеді.

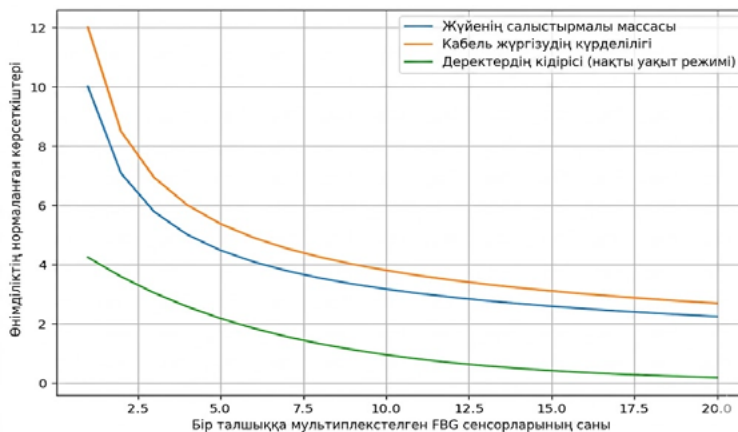


Сурет 5. Ғарыштық радиацияның негізгі факторлары әсеріндегі FBG сенсорларының радиацияға төзімді жұмыс қабілеті.

2. Нақты уақыттағы құрылымдық денсаулықты бақылауға арналған FBG сенсорлық желілерінің өнімділік сипаттамалары 6-суреттегі графикте көрсетілген. Бір оптикалық талшық бойына мультиплекстелген FBG сенсорларына негізделген нақты уақыттағы құрылымдық денсаулықты бақылау (real-time SHM) жүйесінің негізгі тиімділік сипаттамаларын көрсетеді. Абсцисса осінде бір талшыққа орналастырылған FBG сенсорларының саны берілген.

Абсцисса осі – сенсорлар саны (N), ордината – жүйенің салыстырмалы массасы (kg) және деректерді өңдеу кідірісі (ms). Нәтижелер мультиплекстеу тиімділігінің экспоненциалды емес, бірақ қанығу сипатында өсетінін көрсетеді.

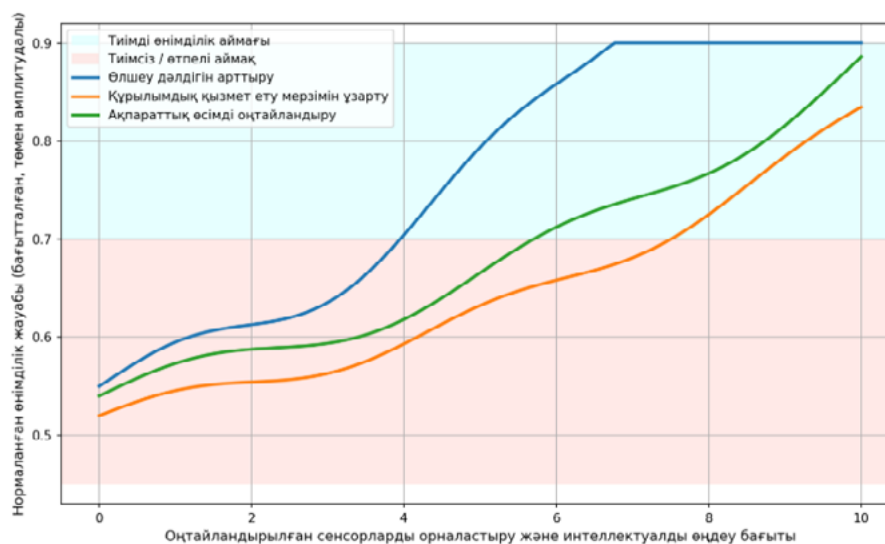
FBG сенсорларын бір оптикалық талшық бойына мультиплекстеу жүйенің салыстырмалы массасын және кабельдік күрделілікті едәуір азайтады, себебі бірнеше сенсорды бір талшықта біріктіру қосымша кабельдер мен механикалық элементтердің санын қысқартады. Сонымен қатар, сенсор саны артқан сайын деректерді беру мен өңдеу кідірісі төмендеп, FBG сенсорлық желілері ғарыш құрылымдарының күйін нақты уақыт режимінде сенімді бақылауға мүмкіндік береді.



Сурет 6. Нақты уақыттағы құрылымдық денсаулықты бақылауға арналған FBG сенсорлық желілерінің өнімділік сипаттамалары.

Оңтайландырылған FBG сенсорларын орналастыру және деректерді интеллектуалды өңдеудің бағытталған толқындық тиімділігі 7-суретте көрсетілген. Бұл бағытталған толқындық диаграмма FBG сенсорларын деформация ең жоғары аймақтарға оңтайлы орналастыру және деректерді интеллектуалды өңдеу нәтижесінде құрылымдық мониторинг сипаттамаларының біртіндеп жақсаруын көрсетеді. Төмен амплитудалы толқындық компоненттер өлшеу нәтижелеріндегі локалды ауытқуларды сипаттайды, ал жалпы өсу бағыты оңтайландыру стратегиясының тиімділігін білдіреді.

График модельдік деректерге негізделген және оптимизация алгоритмінің итерациялық жақсаруын көрсетеді. Ординатада өлшеу дәлдігі (%), ал абсциссада итерациялар саны берілген.



Сурет 7. Оңтайландырылған FBG сенсорларын орналастыру және деректерді интеллектуалды өңдеудің бағытталған толқындық тиімділігі.

Ұсынылған әдістер жиынтығы ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдық денсаулықты бақылау міндеттерін кешенді түрде шешуге бағытталған. Радиацияға төзімді FBG сенсорларын қолдану қатал ғарыштық ортада өлшеу тұрақтылығын қамтамасыз етсе, мультиплекстелген FBG сенсорлық желілерін пайдалану масса мен кабельдік күрделілікті азайта отырып, нақты уақыттағы мониторингті іске асырады. Ал сенсорларды оңтайлы орналастыру мен деректерді интеллектуалды өңдеу әдістері минималды сенсор санымен жоғары өлшеу дәлдігін, ақпараттық тиімділікті және құрылымның қызмет ету мерзімін арттыруға мүмкіндік береді. Бұл тәсілдердің өзара үйлесімі FBG негізіндегі құрылымдық мониторинг жүйелерін заманауи ғарыш аппараттары үшін сенімді әрі тиімді шешім ретінде айқындайды.

Ұсынылған әдістердің тиімділігін бағалау үшін әдебиеттердегі деректермен салыстыру жүргізілді. Мысалы, [5,9] еңбектерінде стандартты FBG сенсорлары үшін радиациялық дрейф 50–200 pm диапазонында байқалады, ал ұсынылған радиацияға төзімді тәсілдер бұл мәнді 20–50 pm деңгейіне дейін төмендетуге мүмкіндік береді.

Бұл ұсынылған әдістің өлшеу тұрақтылығын 2–3 есе арттыратынын көрсетеді.

Қорытынды

Бұл зерттеуде ғарыш инфрақұрылымындағы құрылымдық денсаулықты бақылау мәселесін шешуге бағытталған FBG сенсорларына негізделген кешенді әдістемелік тәсілдер қарастырылды. Талдау нәтижелері радиацияға төзімді FBG сенсорларын қолдану ғарыштық иондаушы сәулелену жағдайында өлшеу тұрақтылығын сақтауға мүмкіндік беретінін көрсетті. Сонымен қатар, бір оптикалық талшық бойына мультиплекстелген FBG сенсорлық желілерін пайдалану жүйенің массасын және кабельдік күрделілікті айтарлықтай азайтып, құрылымдардың күйін нақты уақыт режимінде бақылауды қамтамасыз етеді.

FBG сенсорларын деформация ең жоғары аймақтарға оңтайлы орналастыру және деректерді интеллектуалды өңдеу әдістерін енгізу минималды сенсор санымен жоғары өлшеу дәлдігін, ақпараттық тиімділікті және

құрылымның қызмет ету мерзімін арттыруға жағдай жасайды. Ұсынылған әдістердің өзара үйлесімді қолданылуы ғарыштық құрылымдардың ұзақ мерзімді сенімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз ететін тиімді құрылымдық мониторинг жүйесін қалыптастыруға мүмкіндік береді. Нәтижесінде FBG негізіндегі сенсорлық жүйелер заманауи ғарыш аппараттары үшін перспективалы және инженерлік тұрғыдан негізделген шешім ретінде қарастырылады.

Алғыс

Осы мақала AP26197431 «Талшықты Брэгг торларын пайдалана отырып, ғарыштық инфрақұрылымдағы деформацияларды жоғары дәлдікпен бақылауға арналған құрылымдар мен технологияларды әзірлеу» жобасы аясында орындалды.

Авторлардың қосқан үлесі

Көшкінбаев С.Ж. – зерттеудің ғылыми тұжырымдамасын қалыптастырып, зерттеу бағытын айқындады және жұмыстың жалпы әдіснамасын әзірледі; мақаланың мазмұнын сыни тұрғыдан қайта қарап, ғылыми редакциялауға қатысты.

Смайлов Н.К. – зерттеу әдістемесін жетілдіріп, алынған нәтижелерді талдау мен интерпретациялауға жетекшілік етті; мақаланың негізгі ғылыми мазмұнын қалыптастыруға қатысып, соңғы нұсқасын бекітті.

Ысырайыл Қ.М. – эксперименттік және аналитикалық деректерді жинақтап, оларды өңдеу жұмыстарын жүргізді; графиктер мен иллюстрациялық материалдарды дайындап, мақаланың негізгі мәтінін жазды.

Сейтханова А.К. – ғылыми әдебиеттерді саралап, зерттеу нәтижелерін жүйеледі; мақаланың кіріспе және теориялық бөлімдерін әзірлеп, мәтінді ғылыми тұрғыдан редакциялауға үлес қосты.

Куттыбаева А.Е. – алынған нәтижелерді ғылыми тұрғыдан талдап, мақаланың құрылымын жетілдіруге және мәтінді редакциялауға қатысты.

Барлық авторлар мақаланың соңғы нұсқасын қарап, жариялауға келісім берді және зерттеу жұмысының ғылыми дәлдігі мен тұтастығы үшін ортақ жауапкершілік алады.

Қолжазбаны дайындау процесінде генеративті ЖИ және ЖИ пайдаланатын технологияларды пайдалану туралы мәлімдеме

«Ғарыш инфрақұрылымында FBG сенсоры қамтамасыз ететін заманауи талаптарды зерттеу» мақаласын дайындау процесінде С.Ж. Көшкінбаев, А.К. Сейтханова, Н.К. Смайлов, Қ.М. Ысырайыл и А.Е. Куттыбаева авторлар ақпаратты іздеу және құрылымдау, мәтіндік сөздерді жақсарту, грамматиканы тексеру және қолжазбаның стилистикалық бөлімдерін редакциялау үшін ChatGPT (OpenAI) құралын пайдаланды. Осы құралды пайдаланғаннан кейін авторлар мазмұнды қажеттілігіне қарай тексерді, редакциялады және жарияланған мақаланың мазмұны үшін толық жауапты болады.

Әдебиеттер тізімі

1. Z. Huan, Y. Zheng, K. P. Wang, Z. Shen, W. Ni, J. Zu, and Y. Shao, J. Mater. Chem. A 12, 1910 (2024). <https://doi.org/10.1039/d3ta06388g>
2. M. Tomsia, J. Cieśla, et al., Front. Physiol. 15, 1284644 (2024). <https://doi.org/10.3389/fphys.2024.1284644>
3. X. Ma, N. An, et al., Commun. Eng. 3, 223 (2024). <https://doi.org/10.1038/s44172-024-00223-2>
4. S. J. Mihailov, Sensors 12, 1898 (2012). <https://doi.org/10.3390/s120201898>
5. A. Morana, E. Marin, et al., Sensors 22, 8175 (2022). <https://doi.org/10.3390/s22218175>
6. A. N. D. Alhussein, M. R. T. M. Qaid, T. Agliullin, B. Valeev, O. Morozov, and A. Sakhabutdinov, Sensors 25, 2289 (2025). <https://doi.org/10.3390/s25072289>
7. J. Lai, J. Qiu, et al., J. Sens. 2016, 8658290 (2016). <https://doi.org/10.1155/2016/8658290>
8. M. A. Arockiyadoss, A. M. Dehnaw, et al., Electronics 13, 1276 (2024). <https://doi.org/10.3390/electronics13071276>
9. L. Fazzi, N. Dias, M. Holynska, A. Tighe, R. Rampini, and R. M. Groves, Meas. Sci. Technol. 33, 065102 (2022). <https://doi.org/10.1088/1361-6501/ac6d45>
10. A. Aimasso and C. G. Ferro, in Proc. IEEE MetroAeroSpace (2023), p. 10189989. https://doi.org/10.1109/METRO_AEROSPACE57412.2023.10189989
11. W. Liu, M. Wu, G. Wan, and M. Xu, Remote Sens. 16, 3023 (2024). <https://doi.org/10.3390/rs16163023>
12. G. M. Berruti et al., J. Lightwave Technol. 44, 2858–2865 (2026). <https://doi.org/10.1109/JLT.2025.3650002>

13. S. Mortazavi, S. Makouei, K. Abbasian, and S. Danishvar, *Photonics* 12, 1202 (2025). <https://doi.org/10.3390/photronics12121202>
14. A. Rovera, A. Tancau, et al., *Sensors* 23, 2512 (2023). <https://doi.org/10.3390/s23052512>
15. A. Aimasso, C. G. Ferro, M. Bertone, M. D. L. Dalla Vedova, and P. Maggiore, *Micromachines* 14, 926 (2023). <https://doi.org/10.3390/mi14050926>
16. S. P. Kok, Y. I. Go, X. Wang, and M. L. D. Wong, *IEEE Sens. J.* (2024). <https://doi.org/10.1109/JSEN.2024.3434351>
17. M. Malekzadeh, M. Gul, I.-B. Kwon, and N. Catbas, *Struct. Eng. Mech.* 14, 917 (2014). <https://doi.org/10.12989/sss.2014.14.5.917>
18. J. M. López-Higuera, L. Rodriguez Cobo, A. Quintela Incera, and A. Cobo, *J. Lightwave Technol.* 29, 587 (2011). <https://doi.org/10.1109/JLT.2011.2106479>
19. J. Zhou, Z. Cai, P. Zhao, and B. Tang, *Sensors* 18, 2481 (2018). <https://doi.org/10.3390/s18082481>
20. I. McKenzie, S. Ibrahim, E. Haddad, S. Abad, A. Hurni, and L. K. Cheng, *Front. Phys.* 9, 719441 (2021). <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.719441>
21. Y. Zhu, J. Jin, X. Wang, J. Qi, and H. Xu, *IEEE Sens. J.* 23, 3335256 (2023). <https://doi.org/10.1109/JSEN.2023.3335256>
22. D. V. Przhiialkovskii, N. A. Plyuskova, and O. V. Butov, *IEEE Sens. J.* 25, 538–544 (2025). <https://doi.org/10.1109/JSEN.2024.3494261>
23. R. O. Ogunleye, S. Rusnáková, J. Javorík, M. Žaludek, and B. Kotlánová, *Adv. Eng. Mater.* 26, 2401745 (2024). <https://doi.org/10.1002/adem.202401745>

**С.Ж.Көшкінбаев^{1,2}, А.К.Сейтханова³,
Н.К.Смайлов^{*1}, Қ.М.Ысырайыл¹, А.Е.Куттыбаева¹**

¹*Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, Алматы, Казахстан*

²*Университет Мирас, Шымкент, Казахстан*

³*Павлодарский педагогический университет имени Әлкей Марғұлан, Павлодар, Казахстан*

(E-mail: koshkinbaev_s@miras.edu.kz, ainur1179@mail.ru,
n.smailov@satbayev.university, kidir200091@gmail.com, a.kuttybayeva@satbayev.university)

Исследование современных требований, обеспечиваемых FBG-сенсорами в космической инфраструктуре

Аннотация. Данная статья посвящена исследованию современных требований к системам мониторинга технического состояния космической инфраструктуры и анализу возможностей их реализации на основе датчиков Fiber Bragg Grating (FBG). Космические конструкции, включая солнечные панели, антенны, композитные несущие элементы и системы тепловой защиты, в процессе эксплуатации подвергаются воздействию ионизирующего излучения, значительных температурных колебаний, вакуума и механических нагрузок. Эти факторы могут приводить к возникновению деформаций и постепенному снижению надежности конструкций, что требует применения высокоточных средств контроля. В работе рассмотрены физические принципы функционирования FBG-сенсоров, особенности изменения длины волны Брэгга под воздействием деформации и температуры, а также влияние радиационных факторов на стабильность измерений. Выполнен анализ трех основных подходов к повышению эффективности структурного мониторинга: использования радиационно-стойких FBG-сенсоров, организации мультиплексированных сенсорных сетей для мониторинга в реальном времени и оптимального размещения сенсоров в наиболее нагруженных зонах с последующей интеллектуальной обработкой данных. Показано, что комплексное применение указанных методов обеспечивает высокую точность измерений, снижение массы и сложности сенсорной системы, повышение информативности мониторинга и увеличение долговременной надежности космических конструкций. Полученные результаты подтверждают перспективность FBG-технологий для создания современных систем структурного мониторинга космической инфраструктуры.

Ключевые слова: космическая инфраструктура, сенсоры Fiber Bragg Grating (FBG), деформация, космическая среда, высокая точность, длина волны Брэгга.

**S.Zh. Koshkinbayev^{1,2}, A.K. Seytkhanova³, N.K. Smailov¹,
K.M. Yssyraiyl¹, A.E. Kuttybayeva¹**

¹*Kazakh National Research Technical University after K.I. Satbayev, Almaty, Kazakhstan,*

²*Miras University, Shymkent, Kazakhstan*

³*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)

Analysis of modern requirements supported by Fiber Bragg Grating (FBG) sensors in space infrastructure

Abstract. This paper investigates modern requirements for structural health monitoring systems in space infrastructure and analyzes the capabilities of Fiber Bragg Grating (FBG) sensor technology to meet these demands. Space structures, including solar panels, antennas, composite load-bearing components, and thermal protection systems, are exposed to harsh environmental conditions such as ionizing radiation, vacuum, severe temperature fluctuations, and mechanical loads throughout their operational lifetime. These factors can induce structural degradation and deformation, making accurate and long-term monitoring essential for ensuring mission reliability and safety. The study reviews the operating principles of FBG sensors, the dependence of Bragg wavelength shifts on strain and temperature variations, and the influence of radiation-induced effects on measurement stability. Particular attention is paid to three key approaches for improving monitoring performance: the application of radiation-resistant FBG sensors, the implementation of multiplexed FBG sensor networks for real-time monitoring, and the optimal placement of sensors in critical deformation zones combined with intelligent data processing techniques. The analysis demonstrates that the integrated use of these approaches enables highly accurate measurements with a minimal number of sensors while reducing system weight, cabling complexity, and maintenance requirements. Furthermore, the proposed solutions improve monitoring efficiency and enhance the long-term reliability of space structures. The results confirm the strong potential of FBG-based sensing technologies for next-generation structural health monitoring systems in aerospace and space infrastructure applications.

Keywords: space infrastructure, Fiber Bragg Grating (FBG) sensors, deformation, space environment, high accuracy, Bragg wavelength.

References

1. Z. Huan, Y. Zheng, K. P. Wang, Z. Shen, W. Ni, J. Zu, and Y. Shao, *J. Mater. Chem. A* 12, 1910 (2024). <https://doi.org/10.1039/d3ta06388g>
2. M. Tomsia, J. Cieřla, et al., *Front. Physiol.* 15, 1284644 (2024). <https://doi.org/10.3389/fphys.2024.1284644>
3. X. Ma, N. An, et al., *Commun. Eng.* 3, 223 (2024). <https://doi.org/10.1038/s44172-024-00223-2>
4. S. J. Mihailov, *Sensors* 12, 1898 (2012). <https://doi.org/10.3390/s120201898>
5. A. Morana, E. Marin, et al., *Sensors* 22, 8175 (2022). <https://doi.org/10.3390/s22218175>
6. A. N. D. Alhussein, M. R. T. M. Qaid, T. Agliullin, B. Valeev, O. Morozov, and A. Sakhabutdinov, *Sensors* 25, 2289 (2025). <https://doi.org/10.3390/s25072289>
7. J. Lai, J. Qiu, et al., *J. Sens.* 2016, 8658290 (2016). <https://doi.org/10.1155/2016/8658290>
8. M. A. Arockiyadoss, A. M. Dehnaw, et al., *Electronics* 13, 1276 (2024). <https://doi.org/10.3390/electronics13071276>
9. L. Fazzi, N. Dias, M. Holynska, A. Tighe, R. Rampini, and R. M. Groves, *Meas. Sci. Technol.* 33, 065102 (2022). <https://doi.org/10.1088/1361-6501/ac6d45>
10. A. Aimasso and C. G. Ferro, in *Proc. IEEE MetroAeroSpace* (2023), p. 10189989. <https://doi.org/10.1109/METROAEROSPACE57412.2023.10189989>

11. W. Liu, M. Wu, G. Wan, and M. Xu, *Remote Sens.* 16, 3023 (2024). <https://doi.org/10.3390/rs16163023>
12. G. M. Berruti et al., *J. Lightwave Technol.* 44, 2858–2865 (2026). <https://doi.org/10.1109/JLT.2025.3650002>
13. S. Mortazavi, S. Makouei, K. Abbasian, and S. Danishvar, *Photonics* 12, 1202 (2025). <https://doi.org/10.3390/photonics12121202>
14. A. Rovera, A. Tancau, et al., *Sensors* 23, 2512 (2023). <https://doi.org/10.3390/s23052512>
15. A. Aimasso, C. G. Ferro, M. Bertone, M. D. L. Dalla Vedova, and P. Maggiore, *Micromachines* 14, 926 (2023). <https://doi.org/10.3390/mi14050926>
16. S. P. Kok, Y. I. Go, X. Wang, and M. L. D. Wong, *IEEE Sens. J.* (2024). <https://doi.org/10.1109/JSEN.2024.3434351>
17. M. Malekzadeh, M. Gul, I.-B. Kwon, and N. Catbas, *Struct. Eng. Mech.* 14, 917 (2014). <https://doi.org/10.12989/sss.2014.14.5.917>
18. J. M. López-Higuera, L. Rodriguez Cobo, A. Quintela Incera, and A. Cobo, *J. Lightwave Technol.* 29, 587 (2011). <https://doi.org/10.1109/JLT.2011.2106479>
19. J. Zhou, Z. Cai, P. Zhao, and B. Tang, *Sensors* 18, 2481 (2018). <https://doi.org/10.3390/s18082481>
20. I. McKenzie, S. Ibrahim, E. Haddad, S. Abad, A. Hurni, and L. K. Cheng, *Front. Phys.* 9, 719441 (2021). <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.719441>
21. Y. Zhu, J. Jin, X. Wang, J. Qi, and H. Xu, *IEEE Sens. J.* 23, 3335256 (2023). <https://doi.org/10.1109/JSEN.2023.3335256>
22. D. V. Przhiiakovskii, N. A. Plyuskova, and O. V. Butov, *IEEE Sens. J.* 25, 538–544 (2025). <https://doi.org/10.1109/JSEN.2024.3494261>
23. R. O. Ogunleye, S. Rusnáková, J. Javorík, M. Žaludek, and B. Kotlánová, *Adv. Eng. Mater.* 26, 2401745 (2024). <https://doi.org/10.1002/adem.202401745>

Авторлар туралы мәлімет:

Көшкінбаев Сәулетбек Жолдықараұлы – PhD, қауымдастырылған профессор, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық университеті, 050013, Алматы, Қазақстан, «Мирас» университеті, Шымкент, Қазақстан, koshkinbaev_s@miras.edu.kz, +7 747 121 7984.

Сейтханова Айнур Кусбековна – PhD, қауымдастырылған профессор, Ә. Марғұлан атындағы Павлодар педагогикалық университеті, 140000, Павлодар, Қазақстан, ainur1179@mail.ru, +7 705 834 7608.

Смайлов Нуржигит Куралбаевич – хат-хабар авторы, PhD, профессор, «Электроника, телекоммуникация және ғарыштық технологиялар» кафедрасы, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, 050013, Алматы, Қазақстан, n.smailov@satbayev.university, +7 702 986 9486.

Ысырайыл Қыдырәлі Мұсаханұлы – докторант, «Электроника, телекоммуникация және ғарыштық технологиялар» кафедрасы, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті университеті, 050013, Алматы, Қазақстан, kidir200091@gmail.com, +7 702 535 72 65.

Куттыбаева Айнур Еремеккалиевна – қауымдастырылған профессор, «Электроника, телекоммуникация және ғарыштық технологиялар» кафедрасы, Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, 050013, Алматы, Қазақстан, a.kuttybayeva@satbayev.university, +7 707 116 2790.

Көшкінбаев Сәулетбек Жолдықараұлы – доктор PhD, ассоциированный профессор, Казахский национальный технический университет имени К.Сатпаева, 050013, г. Алматы, Казахстан, Университет «Мирас», г. Шымкент, Казахстан, koshkinbaev_s@miras.edu.kz, +7 747 121 7984.

Сейтханова Айнур Кусбековна – доктор PhD, ассоциированный профессор, Павлодарский педагогический университет имени Ә. Марғұлан, 140000, г. Павлодар, Казахстан, ainur1179@mail.ru, +7 705 834 7608.

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, n.smailov@satbayev.university, +7 702 986 9486.

Ысырайыл Қыдырәлі Мұсаханұлы - докторант кафедры электроники, телекоммуникации и космических технологий, Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, 050013, г. Алматы, Республика Казахстан, kidir200091@gmail.com, +7 702 535 72 65.

Куттыбаева Айнур Еремеккалиевна - ассоциированный профессор кафедры электроники, телекоммуникации и космических технологий, Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И. Сатпаева, 050013, г. Алматы, Республика Казахстан, a.kuttybayeva@satbayev.university, +7 707 116 2790.

Koshkinbayev Sauletbek Zholdykarauly – PhD, Associate Professor, K. Satpayev Kazakh National Technical University, 050013, Almaty, Republic of Kazakhstan, Miras University, Shymkent, Republic of Kazakhstan, koshkinbaev_s@miras.edu.kz, +7 747 121 7984.

Seitkhanova Ainur Kusbekovna – PhD, Associate Professor, A. Margulan Pavlodar Pedagogical University, 140000, Pavlodar, Kazakhstan, ainur1179@mail.ru, +7 705 834 7608.

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, Republic of Kazakhstan, Almaty, n.smailov@satbayev.university, +7 702 986 9486.

Yssyraiyl Kydyrali Musakhanuly – doctoral student, Department of Electronics, Telecommunications and Space Technologies, Kazakh National Research Technical University after K.I. Satbayev, 050013, Republic of Kazakhstan, Almaty, kidir200091@gmail.com, +7 702 535 72 65.

Kuttybayeva Ainur Ermekkalievna – Associate Professor, Department of Electronics, Telecommunications and Space Technologies, Kazakh National Research Technical University after K.I. Satbayev, 050013, Republic of Kazakhstan, Almaty, a.kuttybayeva@satbayev.university, +7 707 116 2790.



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/>).



Исследование ионной проводимости с-ZrO₂, стабилизированного CaO и Y₂O₃ методом ТФП

**Г.Б. Байрбаева*¹, Доломатов М.Ю²,
Т.И. Шарипов³, Ж.М. Салиходжа¹**

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

²Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Республика Башкортостан, РФ

³Уфимский университет науки и технологий, Республика Башкортостан, РФ

E-mail: bairbayeva_gb_3@enu.kz, mdolomatov@bk.ru, Sha-t@ya.Ru, sali.zhm64@yandex.kz

Аннотация. В работе методом теории функционала плотности с использованием гибридного функционала ВЗLYP исследована миграция кислородных ионов в кубическом диоксиде циркония, стабилизированном примесями CaO и Y₂O₃. Рассмотрено влияние типа и концентрации замещающих катионов на энергию миграции иона кислорода, а также на особенности формирования кислородных вакансий в кристаллической решетке. Показано, что введение примесных катионов приводит к существенному снижению миграционного барьера по сравнению с нестабилизированным ZrO₂. Это связано с изменением локального электростатического поля, перераспределением зарядовой плотности и ослаблением взаимодействия мигрирующего кислородного иона с окружающими катионами. Снижение энергии миграции способствует увеличению подвижности кислородных ионов и повышению ионной проводимости материала. Установлено, что наиболее благоприятные условия для кислород-ионного переноса реализуются в иттрий-стабилизированных конфигурациях. Для таких систем характерно более эффективное уменьшение миграционного барьера и стабилизация дефектной структуры. Влияние кальциевых примесей также проявляется в снижении энергии миграции, однако зависит от их концентрации и локального расположения в решетке. Полученные результаты важны для направленного конструирования твердооксидных электролитов на основе ZrO₂ с улучшенными транспортными характеристиками.

Ключевые слова: теория функционала плотности, диоксид циркония, электронная структура, ионная проводимость, энергия миграции.

Поступила 18.04.2026. После доработки 21.05.2026. Принята к печати 25.05.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

*автор для корреспонденции

Введение

ZrO₂ обладает высокой диэлектрической постоянной, широкой запрещенной зоной, высоким полем пробоя и превосходной термической стабильностью [1–5]. Используя соответствующие условия синтеза, кислотные свойства диоксида циркония можно регулировать, образуя твердую кислоту с уникальными каталитическими свойствами [6]. Что касается оптических свойств и теплопроводности диоксида циркония, он демонстрирует высокий показатель преломления, широкую оптическую ширину запрещенной зоны, высокую оптическую прозрачность в видимом и ближнем инфракрасном диапазоне и низкую теплопроводность, поэтому его можно применять в виде тонких пленок в качестве оптических датчиков кислорода [7] или высоко отражающих покрытий [8–10] для мощных лазеров. Диоксид циркония также исследовался в качестве биоактивных покрытий на костных имплантах [11]. Проще говоря, диоксид циркония обладает привлекательными каталитическими, диэлектрическими, оптическими и механическими свойствами, и его применение обусловлено сильной корреляцией его свойств с его кристаллической структурой [12].

При комнатной температуре ZrO₂ характеризуется моноклинной кристаллической структурой. С повышением температуры до приблизительно 1170 °C происходит переход в тетрагональную модификацию, устойчивую в диапазоне 1170–2370 °C. При температурах выше 2370 °C и до температуры плавления диоксид циркония существует в кубической фазе [13]. Из всех фаз моноклинная ZrO₂ была наиболее широко исследована, поскольку она является термодинамически стабильной фазой ниже 1170 °C при атмосферном давлении, например, в качестве каталитической подложки или катализатора [14], или биоактивных покрытий на костных имплантах [15].

Диоксид циркония является широкозонным оксидом, свойства которого в значительной степени определяются собственными и индуцированными дефектами, прежде всего кислородными вакансиями. В чистом ZrO₂ образование кислородных вакансий энергетически невыгодно, поэтому его ионная проводимость мала. При легировании стабилизирующими примесями, такими как MgO или Y₂O₃, возникают вакансии кислорода, и именно их миграция определяет кислород-ионный перенос. При этом проводимость реализуется не простым перескоком из любой вакансии, а через образование активных вакансий, окруженных ионами циркония. Такой процесс имеет двухступенчатый характер, а суммарная энергия активации составляет порядка 1.0–1.5 эВ [16].

С точки зрения электронной структуры кислородные вакансии в кубической, тетрагональной и моноклинной фазах ZrO₂ являются центрами локализации заряда и могут выступать как ловушки и для электронов, и для дырок. Расчёты показывают, что дефектные состояния, связанные с одной вакансией кислорода, располагаются в запрещенной зоне, а при увеличении числа вакансий становится энергетически выгодным их сближение с образованием двух вакансий и более крупных комплексов. В тетрагональной фазе возможно формирование упорядоченных цепочек вакансий, а каждая последующая вакансия создаёт дополнительный заполненный уровень в запрещенной зоне. Полученный результат указывает на важную роль поливакансионных дефектных комплексов в процессах переноса заряда и согласуется с представлениями о формировании локализованных проводящих каналов в кислород-дефицитном ZrO₂ [17]. Кроме того, при ионном облучении наблюдаются дополнительные парамагнитные центры, в формировании которых, вероятно, участвуют ионы Zr³⁺ и кислородные вакансии. Эти результаты показывают, что вакансионные дефекты напрямую связаны с термолюминесцентными и ЭПР-характеристиками материала [18].

Энергия активации ионного переноса в ZrO₂ определяется суммой энергии образования кислородной вакансии и барьера её миграции. Поэтому легирование является основным инструментом повышения ионной проводимости и стабилизации требуемых полиморфных модификаций диоксида циркония. В качестве наиболее распространенных примесей используются Yb, Ce и Y, а также Al, Ca, Eu, Mg, Na, Sc и Tb. Их введение изменяет концентрацию кислородных вакансий, фазовый состав и особенности электронной структуры материала. В частности, добавление 10 мол. % Sc стабилизирует кубическую фазу c-ZrO₂, обладающую высокой ионной проводимостью. Легирование Al позволяет варьировать ширину запрещенной зоны и увеличивать коэффициент поглощения в тетрагональной фазе ZrO₂. В свою очередь, ионы лантаноидов не только стабилизируют структуру диоксида циркония, но и существенно влияют на его оптические и люминесцентные свойства [19–27].

Таким образом, совокупность рассмотренных работ показывает, что легирующие добавки в ZrO₂ не только определяют соотношение моноклинной, тетрагональной и кубической фаз, но и контролируют дефектную структуру материала. Именно через концентрацию и конфигурацию кислородных вакансий примеси MgO, CaO и Y₂O₃ влияют на ионный транспорт, тогда как совместное введение CaO и TiO₂ позволяет дополнительно расширить область фазовой стабилизации и улучшить технологические свойства циркониевой керамики. Более того,

легирование ZrO_2 примесными ионами влияет на полную энергию системы, способствуя стабилизации фазы и улучшению ионной проводимости, что важно для применения в твердооксидных топливных элементах [28].

Несмотря на большое число работ по моделированию ZrO_2 , влияние пространственного распределения ионов Ca и Y относительно траектории миграции O_2^- на ионный перенос остаётся неустановленным. Неясно, приводит ли локализация примесей вблизи миграционного канала к снижению энергетического барьера за счёт стабилизации структуры с вакансией или, напротив, вызывает локальные искажения решётки и замедляет перенос.

В работе методом DFT с гибридным функционалом B3LYP исследована миграция кислорода в с- ZrO_2 , стабилизированном кальцием и иттрием. Рассмотрено влияние кислородных вакансий, локального расположения примесей CaO и Y_2O_3 , а также концентрации замещающих атомов на энергетический профиль миграции. Новизна работы состоит в сравнительном анализе различных конфигураций замещения и в установлении определяющей роли ближайшего катионного окружения в формировании низкоэнергетических путей кислород-ионного переноса.

Методология

Идеальный кристалл с- ZrO_2 имеет структуру типа флюорита и принадлежит пространственной группе $Fm\bar{3}m$. В этой структуре катион Zr^{4+} координирован восемью анионами O^{2-} , а каждый ион кислорода окружён четырьмя эквивалентными атомами циркония. Такая трёхмерная кубическая решётка служит исходной моделью для анализа кислород-ионной миграции.

Расчёты выполнены в рамках теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP, реализованного в пакете CRYSTAL23. В качестве модели использовалась суперячейка 222, содержащая 96 атомов. Начальный параметр решётки принимался равным 5.10 Å. Использовались базисные наборы из библиотеки CRYSTAL: Zr — HAYWSC-3111(32111df) G, O — 8-411, Ca — 86-511d3G, Y — buljan_1999. Во всех расчётах применялась ограниченная по спину схема.

В квантовой химии широко используется обменный функционал B3LYP. Гибридные функционалы аппроксимируют обменно-корреляционный функционал теории функционала электронной плотности, используя сумму обменной энергии, вычисленной методом HF, и обменно-корреляционной энергии, полученной другим способом. В этом случае обменная энергия выражается через орбитали Кона-Шэма, а не через электронную плотность, поэтому такой функционал называется неявным. Применение решений, полученных методом HF, улучшает точность расчета параметров, которые плохо описываются ab-initio функционалами. Обычно такие функционалы строятся как линейная комбинация обменного функционала и набора обменно-корреляционных функционалов, оперирующих электронной плотностью. Наиболее часто используемый функционал этого типа – B3LYP (трехпараметрический функционал Беке, Ли-Янга-Парра). Он определяется следующим выражением [29,30]

$$E_{XC}^{B3LYP} = E_{XC}^{LDA} + a(E_X^{HF} - E_X^{LDA}) + b(E_X^{GGA} - E_X^{LDA}) + c(E_C^{GGA} - E_C^{LDA}) \quad (1)$$

где, $a=0.2$, $b=0.72$, $c=0.81$, B3- функционал Беке, LYP- корреляционный функционал Ли, Янга и Парра.

Дефектные конфигурации строились путём замещения одного, двух и трёх атомов Zr атомами Ca или Y с введением кислородных вакансий для зарядовой компенсации. В целом, система сохраняет электрическую нейтральность. Рассматривались два типа расположения замещающих катионов, на пути миграции кислорода и вне пути миграции. Это позволило проследить влияние как концентрации замещающих атомов, так и их пространственного положения на энергетический профиль переноса.

Энергетические характеристики систем определялись по полной энергии без полной геометрической релаксации атомных позиций и параметров решётки. Такой подход использовался для сохранения единого кубического каркаса и корректного сопоставления миграционных барьеров для различных дефектных конфигураций в пределах одной структурной модели. В этом случае изменение энергии отражает главным образом влияние локального поля и конфигурации дефектов на перенос кислорода.

Для идеального с- ZrO_2 рассчитанная ширина запрещённой зоны составила 5.28 эВ, что близко к экспериментальному значению 6.1 эВ [31]. Сходимость расчётов обеспечивалась строгими критериями: порог по энергии составлял 10–6 эВ, порог по градиенту – 4.510-4эВ/Å, максимальное смещение атомов – 1.810-3Å.

Миграция кислорода моделировалась путём последовательного смещения атома кислорода между соседними узлами кислородной подрешётки с расчётом полной энергии системы вдоль выбранной траектории. На этой основе строились энергетические профили миграции, определялись локальные минимумы и максимумы, а также высоты миграционных барьеров.

В периодической расчётной модели концентрация ионов замещения определялась как доля замещённых атомов в катионной подрешётке. При замещении части атомов Zr атомами замещения концентрация рассчитывалась по формуле

$$C_Y = \frac{N_Y}{N_{Zr} + N_Y} \times 100\%, \quad (2)$$

где N_d — число атомов замещения в суперячейке, а $N_{Zr} + N_d$ — общее число катионных узлов. Поэтому далее концентрация примеси указывается в ат.% по катионной подрешётке, что соответствует общепринятой практике описания периодических DFT-моделей.

Это позволило установить влияние концентрации замещающих катионов и их положения относительно траектории переноса на энергетический рельеф кислород-ионной миграции в c-ZrO₂.

Результаты и обсуждение

Ионная проводимость c-ZrO₂, стабилизированного CaO, при расположении примеси вне пути миграции

В настоящем подразделе исследуется влияние замещения атомов циркония кальцием на миграцию кислородной вакансии в c-ZrO₂. Соответствующие концентрации кальция по катионной подрешётке составляют 3.125; 6.25 и 9.375 ат.% соответственно. Во всех рассмотренных конфигурациях атомы кальция располагались вне траектории миграции кислородной вакансии, что даёт возможность оценить влияние примесных катионов на энергию миграции за счёт искажений кристаллической решётки и изменения локального дефектного окружения (рисунок 1).

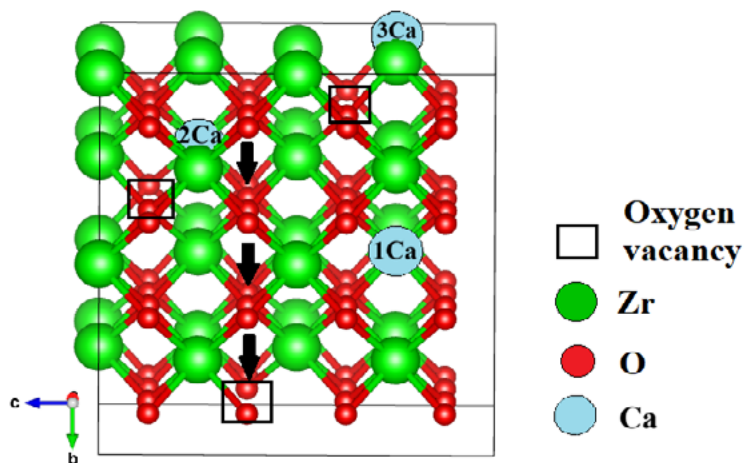


Рисунок 1. Миграция кислорода при замещении одного, двух, трех атомов Zr атомами Ca в c-ZrO₂.

На рисунке 2 представлена зонная структура ZrO₂ с одним атомом Ca и одной кислородной вакансией. Видно, что ниже уровня Ферми располагается валентная зона, а выше уровня Ферми до 4,8 эВ располагается запрещенная зона, следовательно, система является диэлектриком. Уменьшение ширины запрещённой зоны при введении комплекса Ca + V_o связано с появлением локализованных дефектных уровней в запрещённой зоне ZrO₂. Эти уровни обусловлены кислородной вакансией и локальной релаксацией структуры вблизи дефектного комплекса, что приводит к уменьшению эффективной ширины запрещённой зоны. Однако в запрещенной зоне при энергиях 2,15 и 4,1 эВ обнаруживаются уровни, соответствующие кислородной вакансии и ионам кальция, что свидетельствует о дефектно-индуцированной модификации электронной структуры под действием комплекса CaZr+V_o. Основные состояния зоны проводимости расположены в области 4.5–6.0 эВ.

На рисунке 3 представлены полная и парциальная плотности состояний для ZrO₂, содержащего один атом Ca и одну V_o. Вблизи уровня Ферми DOS практически обращается в нуль, что указывает на сохранение диэлектрического характера системы. Основной вклад в валентную зону в диапазоне энергии - 0.7÷2.1eV вносят 2p-состоя-

ния O, тогда как интенсивные состояния зоны проводимости в диапазоне 4.65–6.1 эВ преимущественно связаны с 5s² и 4d²-состояниями атомов циркония. Вклад кальция в DOS очень мал и проявляется при диапазонах энергии -2.2÷0 эВ, 2÷2,5 эВ и 4.2÷6 эВ. Вклад кислородной вакансии в DOS также очень мал, в диапазоне энергии -2.1÷-1 эВ меньше, чем вклад Ca. DOS выше уровня Ферми в диапазоне энергий 2÷2.4 и 4÷6 эВ в несколько раз выше, чем у Ca.

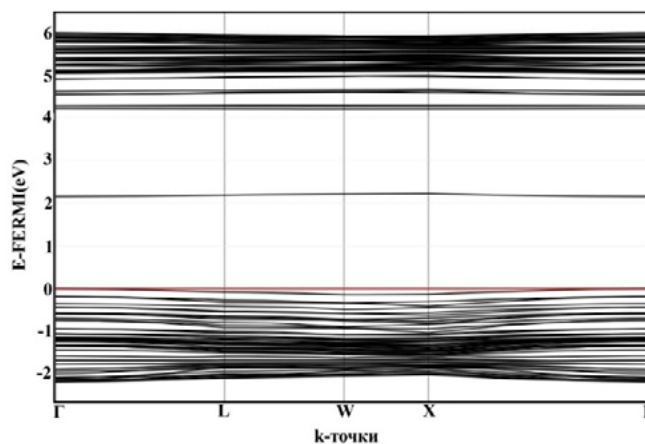


Рисунок 2. Зонная структура Zr₃₁Ca₁O₆₃

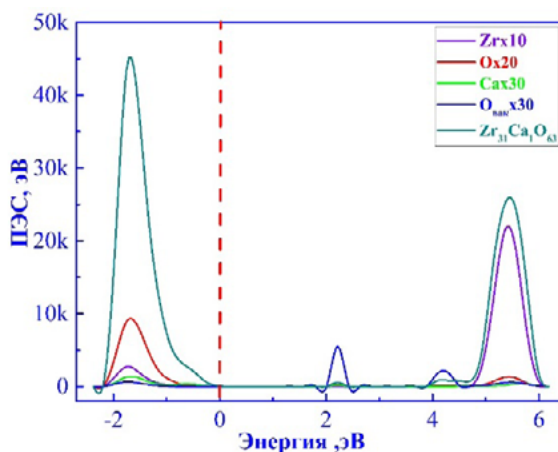


Рисунок 3. Полная плотность электронных состояний Zr₃₁Ca₁O₆₃

На рисунке 4 представлена зависимость полной энергии системы от координаты миграции для кубической структуры Zr₃₁Ca₁O₆₃, в которой один атом кальция расположен вне пути миграции кислородной вакансии.

На начальном пути энергия уменьшается от ~0.2 эВ и достигает локального минимума порядка 0.08–0.10 эВ при $r=0.4-0.5 \text{ \AA}$. Затем наблюдается резкий рост энергии с формированием первого выраженного максимума ~0.9 эВ при 1.3 Å. После этого кривая снова снижается и при $r=2.1 \text{ \AA}$ достигает минимума ~0.07 эВ. В области $r=2.4-2.5 \text{ \AA}$ фиксируется менее выраженный локальный максимум порядка 0.45 эВ, после которого формируется наиболее глубокий минимум при $r = 2.8-2.9 \text{ \AA}$, где энергия становится близкой к нулю.

При дальнейшем увеличении координаты миграции энергия возрастает и достигает широкого максимума ~1.03 эВ при $r=3.8 \text{ \AA}$. Далее кривая понижается до локального минимума ~0.37 эВ при $r=4.6 \text{ \AA}$, после чего вблизи $r = 5 \text{ \AA}$ наблюдается узкий максимум ~0.88 эВ. Следующий локальный минимум составляет около 0.30 эВ и реализуется при $r=5.4-5.5 \text{ \AA}$. Наибольшая энергия миграции соответствует расстоянию $r = 6.4 \text{ \AA}$, где полная энергия достигает ~1.15 эВ. Затем энергия уменьшается до ~0.46 эВ при $r=7.2 \text{ \AA}$ и вновь возрастает до 1.0 эВ.

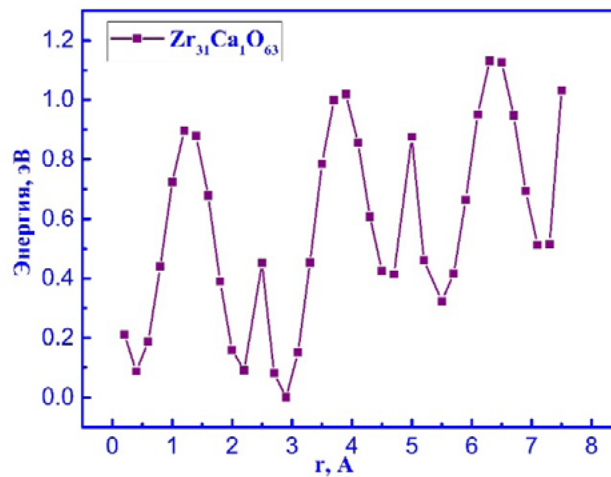


Рисунок 4. Зависимость полной энергии системы от расстояния миграции кислорода при замещении одного атома Zr на Ca в $Zr_{31}Ca_1O_{63}$.

Также нами рассмотрена система $Zr_{30}Ca_2O_{62}$, содержащая два атома кальция и две кислородные вакансии. Как показывает зонная структура, данная конфигурация остается диэлектриком. На рисунках 5–6 представлены зонная структура, полная и парциальные плотности системы $Zr_{30}Ca_2O_{62}$. Валентная зона располагается ниже уровня Ферми $-2,9 \pm 0$ эВ. В диапазоне $-1,3 \div 2,9$ эВ преобладает плотность электронных состояний кислорода. Плотности электронных состояний (ПЭС) ионов кальция и кислородных вакансий очень малы, а ПЭС ионов циркония значительно больше, чем у ионов кальция и кислородных вакансий, но в 2,5 раза меньше, чем у кислорода. В запрещенной зоне видны электронные уровни, в диапазонах энергии $1,2 \div 1,9$ эВ и $3,2 \div 3,9$ эВ, соответствующие кислородным вакансиям и ионам кальция. Плотность электронных состояний ионов Ca вблизи уровня Ферми значительно меньше по сравнению с вкладом состояний, связанных с кислородной вакансией. Это указывает на то, что смещение уровня Ферми обусловлено преимущественно дефектными состояниями кислородной вакансии, тогда как вклад Ca-состояний является незначительным. Это указывает на смещение уровня Ферми в сторону зоны проводимости и уменьшению ширины запрещенной зоны при увеличении концентрации кальция. Зона проводимости расположена в области примерно 3.9–5.5 эВ.

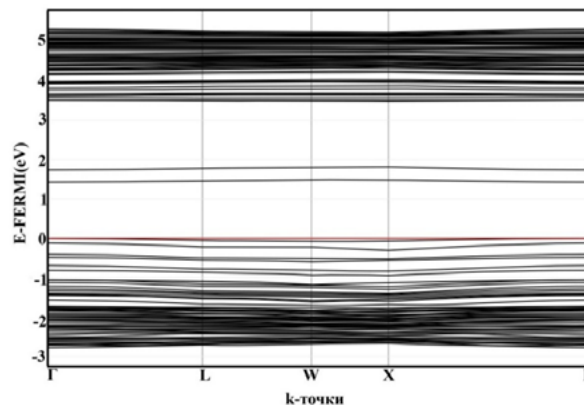


Рисунок 5. Зонная структура $Zr_{30}Ca_2O_{62}$

На рисунке 6 представлены полная и парциальная плотности состояний для ZrO_2 с двумя атомами Ca и двумя кислородными вакансиями. Вблизи уровня Ферми DOS практически равна нулю, что указывает на наличие запрещенной зоны.

Валентная зона формируется преимущественно 2p-состояниями кислорода с основным максимумом в области $-2,9 \div -1,3$ эВ. Вклад кальция проявляется в той же энергетическом диапазоне. В интервале 1.4–1.8 эВ и 3.3–3.9 эВ наблюдаются дефектные состояния, связанные преимущественно с кислородными вакансиями. Нижняя часть зоны проводимости в диапазоне 4.3–5.4 эВ формируется главным образом 4d-состояниями циркония.

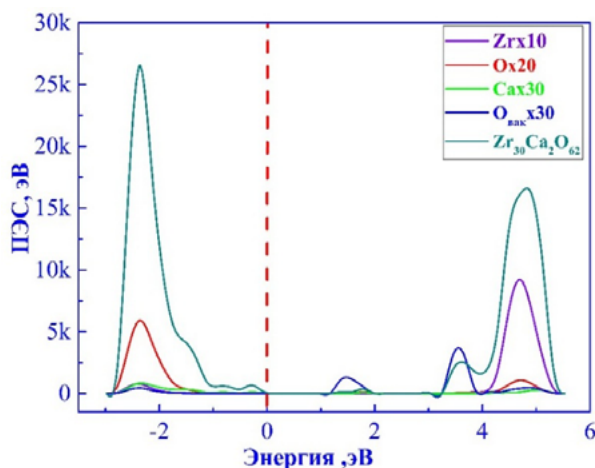


Рисунок 6. Полная плотность электронных состояний $Zr_{30}Ca_2O_{62}$

Для системы $Zr_{30}Ca_2O_{62}$ энергия миграции кислородной вакансии описывается локальными минимумами и максимумами. Первый выраженный максимум ~ 1.2 эВ наблюдается при $r=1.3$ Å, тогда как глубокий минимум, близкий к 0 эВ, реализуется при $r=2.9$ Å. В средней части траектории формируются дополнительные барьеры ~ 0.9 эВ при $r=3.8$ Å и ~ 1.1 эВ при $r=5$ Å. Наибольшая энергия миграции достигает ~ 1.4 эВ при $r=6.4-6.5$ Å. Полученные результаты показывают, что увеличение числа атомов Ca приводит к росту миграционных барьеров (рисунок 7).

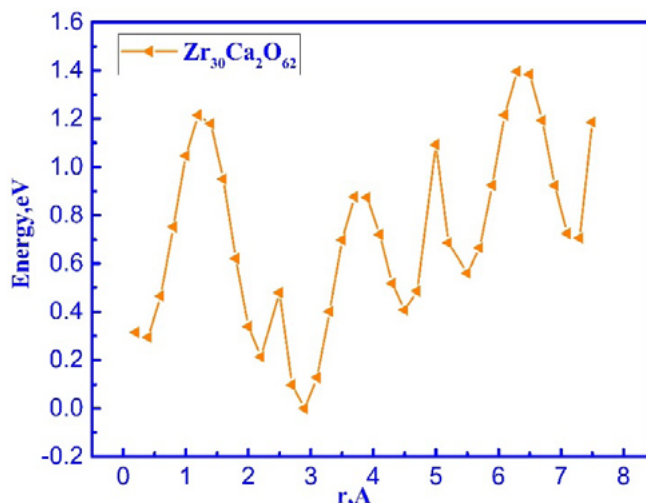


Рисунок 7. Зависимость полной энергии системы от расстояния миграции кислорода при замещении двух атомов Zr на Ca в $c-ZrO_2$

Дальнейшее увеличение концентрации кальция было рассмотрено для $Zr_{29}Ca_3O_{61}$, содержащей три атома Ca и три вакансии кислорода. Анализ системы позволяет проследить, как изменяется электронная структура ZrO_2 при росте содержания кальция и одновременном усилении дефектного возмущения кристаллической решётки.

На рисунках 8–9 представлены зонная структура и плотность электронных состояний системы $Zr_{29}Ca_3O_{61}$. Уровень Ферми принят за 0 эВ. На рисунке представлена зонная структура $Zr_{29}Ca_3O_{61}$ вдоль направления высокой симметрии $\Gamma-L-W-X-\Gamma$.

Из рисунков видно, что валентная расположена ниже уровня Ферми в диапазоне энергии $0 \div -2,8$ эВ. В диапазоне $-2,8 \div 1$ эВ парциальные плотности электронных состояний имеют значения выше 0. В этом диапазоне максимальная плотность наблюдается у атомов кислорода, около 280 единиц. Плотность электронных состояний у атомов циркония порядка 50 единиц, а у ионов кальция и кислородных вакансий намного меньше, чем у ионов кислорода и циркония.

Зона проводимости расположена выше уровня Ферми на 3,9 эВ, т.е. ширина запрещённой зоны значительно сужается из-за примеси и наблюдается смещение уровня Ферми в правую сторону на 0,8–1 эВ. В зоне проводимости в диапазоне 3,9–5,6 эВ основной вклад в ПЭС дают ионы циркония, вклады ионов кислорода и кислородных вакансий около 30–35 единиц, а вклады ионов кальция очень малы. В зоне проводимости в диапазоне энергии 1,2–3,9 эВ наблюдаются небольшие полосы ПЭС, соответствующие кислородным вакансиям и ионам кальция. Вклад ионов кальция очень незначительный, около нескольких единиц. Эти небольшие полосы ПЭС кислородных вакансий и ионов кальция соответствуют одинаковым интервалам энергии, что означает о связанном состоянии ионов кальция и кислородных вакансий.

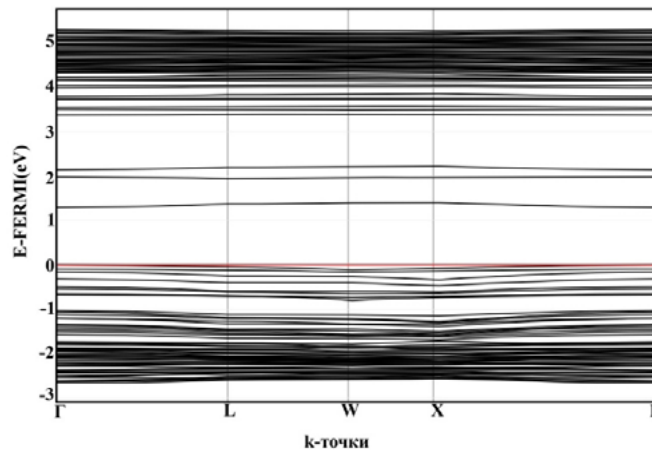


Рисунок 8. Зонная структура $\text{Zr}_{29}\text{Ca}_3\text{O}_{61}$

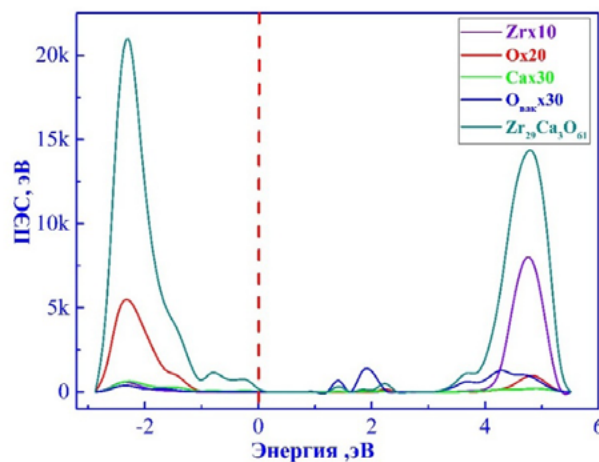


Рисунок 9. Плотность электронных состояний $\text{Zr}_{29}\text{Ca}_3\text{O}_{61}$

На рисунке 10 показана энергия миграции для системы $\text{Zr}_{29}\text{Ca}_3\text{O}_{61}$. Первый высокий максимум ~ 1.0 эВ реализуется при $r=1.3$ Å, наиболее глубокий минимум, близкий к 0 эВ, наблюдается при $r=2.8$ – 2.9 Å, а наибольший энергетический барьер ~ 1.05 эВ достигается при $r=5$ Å. Дополнительные максимумы ~ 0.88 и ~ 0.94 эВ формируются при $r=3.8$ и $r=6.4$ – 6.5 Å соответственно. Это указывает на то, что при увеличении концентрации Ca до 9.375 атм% миграция кислородной вакансии сопровождается существенным искажением энергии миграции.

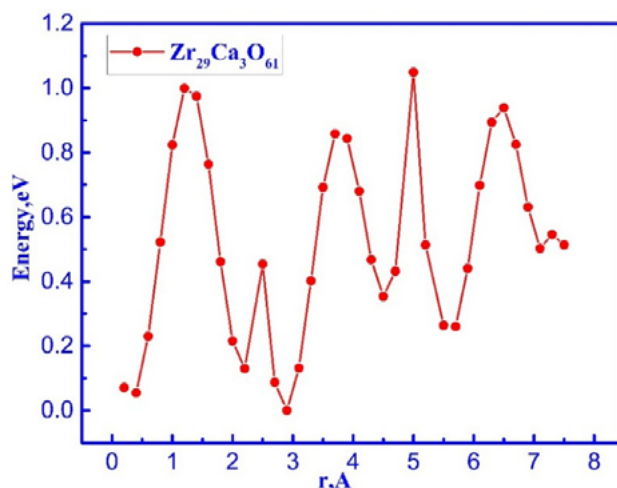


Рисунок 10. Зависимость полной энергии системы от расстояния миграции кислорода при замещении трех атомов Zr на Ca в $c\text{-ZrO}_2$

Однако энергии миграции демонстрируют немонотонную зависимость от числа атомов Ca. Для одного атома Ca максимальный барьер составляет около 1.15 эВ. При двух атомах Ca барьер возрастает до 1.40 эВ, что указывает на менее благоприятные условия миграции. Для трёх атомов Ca максимальный барьер снижается до 1.05 эВ. Таким образом, миграция кислорода в Ca-стабилизированном кубическом ZrO_2 определяется не только концентрацией кальция, но и пространственным расположением примесных атомов.

Сравнение конфигураций с 1Ca, 2Ca и 3Ca, соответствующих 3.125; 6.25 и 9.375 атм. % Ca по катионной подрешётке, показывает, что даже при расположении атомов кальция вне траектории миграции они существенно влияют на энергию переноса кислородной вакансии. Во всех случаях миграция имеет сложную поэтапную динамику с несколькими промежуточными максимумами. Максимальный барьер составляет около 1.15 эВ для 1Ca, 1.4 эВ для 2Ca и 1.05 эВ для 3Ca. Полученные данные свидетельствуют о нелинейном характере зависимости миграционных характеристик от концентрации кальция. Следовательно, определяющее значение имеет не только содержание примесных атомов, но и их пространственное распределение в кристаллической решётке, так как именно оно задаёт локальные энергетические неоднородности и, следовательно, условия миграции кислородной вакансии.

По сравнению с кальцием и магнием, стабилизация иттрием характеризуется более мягкой зарядовой компенсацией. При замещении Zr^{+4} ионами Y^{+3} для образования одной кислородной вакансии требуется два атома иттрия, тогда как для катионов Ca^{+2} и Mg^{+2} каждый примесный атом вносит более сильное отклонение заряда. В результате Y-стабилизация обычно приводит к менее резкому искажению локального электростатического поля и формирует более благоприятные условия для миграции кислородных ионов по сравнению с Ca- и Mg-содержащими структурами (рисунок 11).

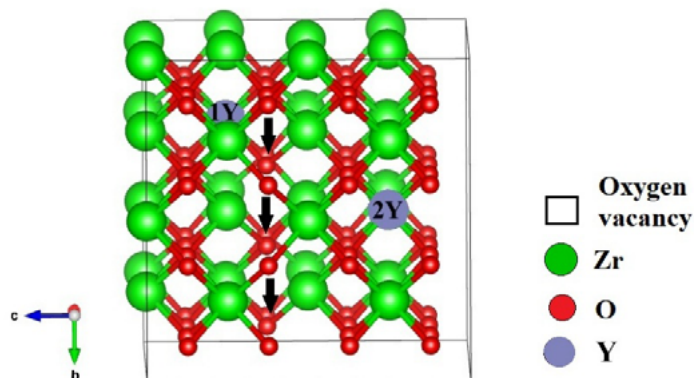


Рисунок 11. Миграция кислорода при замещении двух атомов Zr атомами Y в $c\text{-ZrO}_2$

Для исследования влияния примесей иттрия на электронную структуру диоксида циркония была рассмотрена система $Zr_{30}Y_2O_{61}$, содержащая два атома Y и три кислородных вакансии. Такая модель соответствует зарядовой компенсации при замещении двух ионов Zr^{+4} двумя ионами Y^{+3} , что сопровождается образованием одной вакансии кислорода.

На рисунках 12–13 представлены зонная структура и ПЭС системы $Zr_{30}Y_2O_{61}$. Энергия отсчитана относительно уровня Ферми, который принят за 0 эВ. Полная плотность состояний хорошо согласуется с зонной структурой.

Валентная зона располагается в области примерно в энергетическом интервале $-4,8 \div 0$ эВ и состоит из большого числа близко расположенных подзон. В интервале энергии $-4,8 \div -2,75$ эВ наблюдаются полосы ПЭС, соответствующие ионам кислорода, циркония, иттрия и кислородным вакансиям. ПЭС ионов кислорода имеют самые высокие значения порядка 830 ед., ПЭС ионов циркония около 175 ед., ионов иттрия около 90 ед. и ПЭС кислородных вакансии несколько единиц. В валентной зоне также наблюдаются небольшие ПЭС в интервалах $-1 \div -0,3$ эВ и $-0,3 \div 0$ эВ. В этих интервалах преобладает вклад ПЭС кислородных вакансий, который составляет около 30 и 20 ед., а вклад ионов иттрия – 10 и 5 ед.

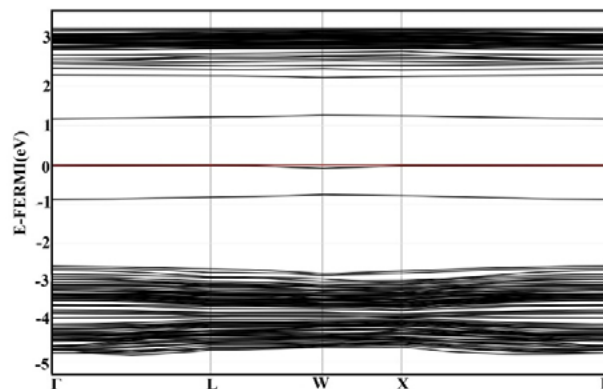


Рисунок 12. Зонная структура $Zr_{30}Y_2O_{61}$

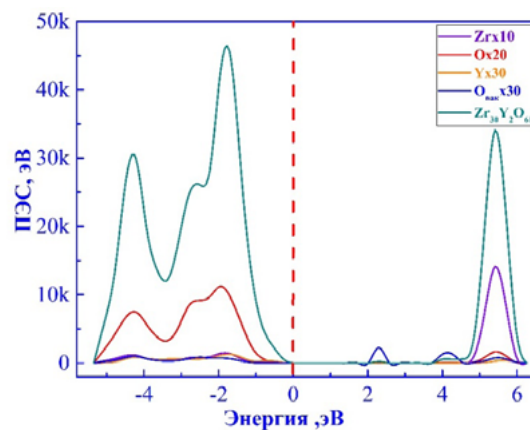


Рисунок 13. Полная плотность электронных состояний $Zr_{30}Y_2O_{61}$

Зона проводимости находится выше уровня Ферми в интервале энергии $0 \div 3,8$ эВ. В интервалах энергии $1,2 \div 1,45$ эВ и $2,1 \div 2,8$ эВ наблюдаются примесные уровни, соответствующие ионам иттрия и кислородным вакансиям. В интервале энергии $2,3 \div 3,8$ эВ преимущественный вклад в ПЭС вносят ионы циркония, около 1100 ед., вклад ионов кислорода около 80 ед. Вклады ионов иттрия и кислородных вакансии около 35 и 20 ед., соответственно. Введение в структуру ZrO₂ стабилизирующей примеси иттрия приводит к изменению электронной структуры, которое выражается в смещении уровня Ферми вправо и сужении ширины запрещенной зоны.

Для структуры $Zr_{30}Y_2O_{61}$ энергия миграции кислородной вакансии изменяется периодически вдоль рассматриваемой траектории. На начальном участке энергия составляет около 0.1 эВ, затем быстро возрастает и достигает первого локального максимума порядка 1.5 эВ при $r \approx 1.2-1.3$ Å. После этого энергия постепенно снижается и в области $r \approx 2.5-2.7$ Å достигает локального минимума, близкого к $0-0.05$ эВ (рисунок 14).

Далее профиль повторяет аналогичное поведение. Во второй части траектории энергия вновь возрастает до ~1.5 эВ при $r \approx 3.8-4.0 \text{ \AA}$, после чего уменьшается до минимума, практически равного 0 эВ, в области $r \approx 5.1-5.2 \text{ \AA}$. На заключительном участке наблюдается еще один максимум порядка 1.5 эВ при $r \approx 6.4-6.5 \text{ \AA}$, после чего энергия снова снижается и к концу траектории достигает значения около 0.1 эВ.

Таким образом, для структуры, в которой замещающий атом расположен вне линии миграции иона, характерен периодическое поведение энергии барьера с тремя близкими по величине локальными максимумами около 1.5 эВ и несколькими минимумами, близкими к 0 эВ. Это указывает на повторяющийся характер энергии миграции вдоль линии миграции и на сравнительно умеренную величину энергетического барьера для перемещения кислородной вакансии.

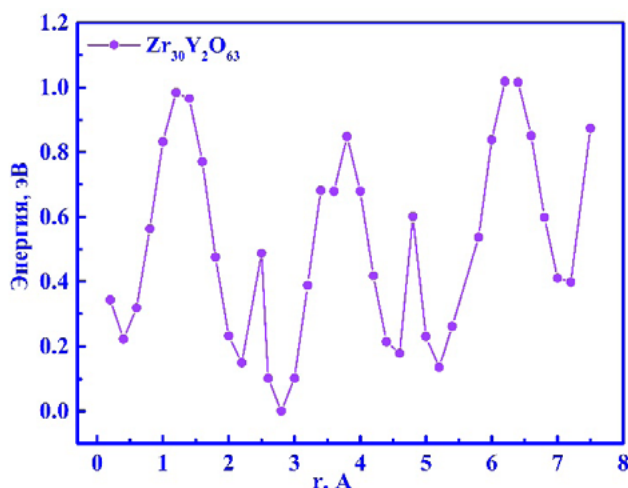


Рисунок 14. Зависимость полной энергии системы от расстояния миграции кислорода при замещении двух атомов Zr на Y в c-ZrO₂.

Заключение

Сравнение рассмотренных конфигураций показывает, что ключевым фактором является расположение замещающих катионов относительно траектории миграции кислорода. В случаях, когда катионное замещение реализуется на пути миграции, формируются более высокие энергетические барьеры. Если же замещающие катионы расположены вне траектории миграции, энергетический барьер уменьшается, а условия миграции иона кислорода оказываются более благоприятными.

Таблица 1 показывает, что энергетические барьеры миграции кислорода в c-ZrO₂ существенно зависят как от природы замещающего катиона, так и от его положения относительно траектории переноса. Для конфигураций с атомами Ca значение максимальной энергии миграции находится в диапазоне 1.05–1.40 эВ, что указывает на относительно слабое искажение потенциального рельефа переноса при удалённом положении замещающих катионов.

Для системы Zr₃₀Y₂O₆₁ энергия миграции становится более периодическим. Минимальные значения энергии составляют 0–0.05 эВ, тогда как максимальный барьер не превышает ~1.5 эВ. Следовательно, в этом случае перенос иона кислорода (или кислородной вакансии) протекает значительно легче.

Таблица 1. Энергетические барьеры миграции кислорода в c-ZrO₂ при различных конфигурациях замещения Ca и Y

Конфигурация замещения	Число замещающих атомов	Минимальный барьер, эВ	Максимальный барьер, эВ
Zr ₃₁ Ca ₁ O ₆₃	1	0.45	1.15
Zr ₃₀ Ca ₂ O ₆₃	2	0.50	1.40
Zr ₂₉ Ca ₃ O ₆₁	3	0.46	1.05
Zr ₃₀ Y ₂ O ₆₁	2	0.05	1.0

Для Ca⁺² и Y⁺³ барьеры миграции выше при расположении примеси вдоль пути миграции и ниже при расположении вне пути. При этом влияние Y⁺³ выражено сильнее, чем Ca⁺². Следовательно, наиболее благоприятные условия миграции кислородной вакансии реализуются при расположении замещающих атомов вне траектории переноса.

Полученные результаты важны для понимания того, как замещающие катионы и кислородные вакансии влияют на стабилизацию кубической структуры ZrO₂ и на энергию миграции ионов кислорода. Установленные закономерности могут быть использованы при выборе легирующей примеси для твердооксидных топливных элементов и кислородных сенсоров.

Таким образом, поставленная в работе цель достигнута. Показано, что энергетический профиль миграции кислорода в кубическом ZrO₂ определяется концентрацией и пространственным распределением атомов Ca и Y, а также их положением относительно траектории переноса. Установлено, что управление распределением катионных замещений и кислородных вакансий является одним из основных факторов, определяющих кислород-ионную проводимость диоксида циркония. Это открывает возможности для целенаправленного формирования твердооксидных электролитов с улучшенными транспортными характеристиками.

Вклад авторов

Байрбаева Г.Б. – проведение основных квантово-химических расчетов, написание текста статьи, интерпретация результатов исследования.

Доломатов М.Ю. – анализ результатов расчетов, критический пересмотр его содержания, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Шарипов Т.И. – анализ результатов расчетов, критический пересмотр содержания статьи, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Салиходжа Ж.М. – проведение основных расчетов, написание текста статьи, интерпретация результатов исследования, согласие нести ответственность за все аспекты работы, надлежащее изучение и решение вопросов, связанных с достоверностью данных или целостностью всех частей статьи.

Список литературы

1. S. Chatterjee, S.K. Samanta, H.D. Banerjee, C.K. Maiti, Deposition of high-k ZrO₂ films on strained SiGe layers using microwave plasma, *Electronics Letters* 37(6), pp. 390-392 (2001).
2. M. Copel, M. Gribelyuk, E. Gusev, Structure and stability of ultrathin zirconium oxide layers on Si (001), *Applied Physics Letters* 76(4), pp. 436-438 (2000).
3. C.C. Lin, Y.P. Chang, H.B. Lin, C.H. Lin, Effect of non-lattice oxygen on ZrO₂-based resistive switching memory, *Nanoscale Research Letters* 7(1), p. 187 (2012).
4. V. Chauhan, R. Gupta, V. Kumar, J. Ram, F. Singh, M. Prasad, R. Kumar, High energy (150 MeV) Fe¹¹⁺ ion beam induced modifications of physic-chemical and photoluminescence properties of high-k dielectric nanocrystalline zirconium oxide thin films, *Ceramics International* 45(15), pp. 18887-18898 (2019).
5. X. Dong, G. Xia, Q. Zhang, L. Li, H. Gong, J. Bi, S. Wang, Room-temperature UV-ozone assisted solution process for zirconium oxide films with high dielectric properties, *Ceramics International* 43(17), pp. 15205-15213 (2017).
6. D.A. Ward, E.I. Ko, One-step synthesis and characterization of zirconia-sulfate aerogels as solid superacids, *Journal of Catalysis* 150(1), pp. 18-33 (1994).
7. H.G. Floch, P.F. Belleville, Damage-resistant sol-gel optical coatings for advanced lasers at CEL-V: Code: F13, *Journal of Sol-Gel Science and Technology* 2(1), pp. 695-705 (1994).
8. X. Wang, G. Wu, B. Zhou, J. Shen, Improvement on laser-induced damage threshold of sol-gel ZrO₂ coatings by crystal structure tuning, *Optics Express* 20(22), pp. 24482-24487 (2012).
9. Q. Zhang, X. Li, J. Shen, G. Wu, J. Wang, L. Chen, ZrO₂ thin films and ZrO₂/SiO₂ optical reflection filters deposited by sol-gel method, *Materials Letters* 45(6), pp. 311-314 (2000).
10. G. Wang, F. Meng, C. Ding, P.K. Chu, X. Liu, Microstructure, bioactivity and osteoblast behavior of monoclinic zirconia coating with nanostructured surface, *Acta Biomaterialia* 6(3), pp. 990-1000 (2010).
11. N.C.S. Selvam, A. Manikandan, L.J. Kennedy, J.J. Vijaya, Comparative investigation of zirconium oxide (ZrO₂) nano and microstructures for structural, optical and photocatalytic properties, *Journal of Colloid and Interface Science*

- 389(1), pp. 91-98 (2013).
12. E.H. Kisi, C.J. Howard, Crystal structures of zirconia phases and their inter-relation, *Key Engineering Materials* 153, pp. 1-36 (1998).
 13. R.H.J. Hannink, P.M. Kelly, B.C. Muddle, Transformation toughening in zirconia-containing ceramics, *Journal of the American Ceramic Society* 83(3), pp. 461-487 (2000).
 14. C. Piconi, G. Mascauro, Zirconia as a ceramic biomaterial, *Biomaterials* 20(1), pp. 1-25 (1999).
 15. В.Г. Заводинский, О механизме ионной проводимости в стабилизированном кубическом диоксиде циркония, *Физика твердого тела* 46(3), с. 441-445 (2004).
 16. Т.В. Перевалов, Моделирование атомной и электронной структуры вакансий и поливакансий кислорода в ZrO_2 , *Физика твердого тела* 60(3), с. 421-425 (2018).
 17. А.К. Даулетбекова, С.В. Никифоров, Д.В. Ананченко, Г.М. Аралбаева, Г.А. Ахметова-Абдик, Радиационные дефекты в наноструктурных компактах ZrO_2 , облученных электронными и ионными пучками, *Вестник НЯЦ РК №2*, с. 43-48 (2023).
 18. P. Gayathri, V. Balasubramani, P. Balraju, M.A. Sayed, M. Shkir, Ultra-high photosensitivity response in MIS SBDs enabled by Zn-integrated $ZrO_2@Zn$ interfacial layers for photovoltaic device, *Physica B: Condensed Matter* 714, p. 417506 (2025).
 19. A.M. Aboaraia, I.M. Sharaf, S. Alradaddi, A.B.G. Trabelsi, F.H. Alkallas, Advanced supercapacitors: benefit from the electrode material cubic- ZrO_2 by doping with Gd, *Physica B: Condensed Matter* 714, p. 417519 (2025).
 20. Z. Cheng, H. Ren, Y. Wang, S. Ta, P. Zhang, Y. Yang, W. Deng, Effects of Yb_2O_3 as stabilizer and sensitizer on the luminescence properties of cubic ZrO_2 single crystals, *Crystal Growth & Design* 22(9), pp. 5481-5488 (2022).
 21. M. Thammachart, V. Meeyoo, T. Risksomboon, S. Osuwan, Catalytic activity of CeO_2-ZrO_2 mixed oxide catalysts prepared via sol-gel technique: CO oxidation, *Catalysis Today* 68(1-3), pp. 53-61 (2001).
 22. P. Li, I.W. Chen, J.E. Penner-Hahn, Effect of dopants on zirconia stabilization — an X-ray absorption study: I, trivalent dopants, *Journal of the American Ceramic Society* 77(1), pp. 118-128 (1994).
 23. J.P. Winczewski, S. Zeiler, S. Gabel, D. Maestre, B. Merle, J.G.E. Gardeniers, A.S. Arce, Additive manufacturing of 3D yttria-stabilized zirconia microarchitectures, *Materials & Design* 238, p. 112701 (2024).
 24. Y. Feng, J. Wu, Q. Chi, W. Li, Y. Yu, W. Fei, Defects and aliovalent doping engineering in electro ceramics, *Chemical Reviews* 120(3), pp. 1710-1787 (2020).
 25. C. Haering, A. Roosen, H. Schichl, M. Schnöller, Degradation of the electrical conductivity in stabilised zirconia system: Part II: Scandia-stabilized zirconia, *Solid State Ionics* 176(3-4), pp. 261-268 (2005).
 26. A. King, R. Singh, R. Anand, S.K. Behera, B.B. Nayak, Phase and luminescence behavior of Ce-doped zirconia nanopowders for latent fingerprint visualization, *Optik* 242, p. 167087 (2021).
 27. Q. Xue, X. Huang, L. Wang, H. Zhang, J. Zhang, Computational and experimental investigations of defect interaction and ionic conductivity in doped zirconia, *Physical Review Applied* 10(1), p. 014032 (2018).
 28. S.H. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis, *Canadian Journal of Physics* 58(8), pp. 1200-1211 (1980).
 29. W.F. Perger, J. Criswell, B. Civalieri, R. Dovesi, Ab-initio calculation of elastic constants of crystalline systems with the CRYSTAL code, *Computer Physics Communications* 180(10), pp. 1753-1759 (2009).
 30. R.H. French, S.J. Glass, F.S. Ohuchi, Y.N. Xu, W.Y. Ching, Experimental and theoretical determination of the electronic structure and optical properties of three phases of ZrO_2 , *Physical Review B* 49(8), pp. 5133-5142 (1994).

Г.Б. Байрбаева¹, М.Ю. Долوماتов², Т.И. Шарипов³, Ж.М. Салиходжа¹

¹Л.Н. Гумилева атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²Уфа мемлекеттік мұнай-техникалық университеті, Уфа, Башқұртстан, РФ

³Уфа ғылым және технологиялар университеті, Башқұртстан, РФ

(E-mail: bairbayeva_gb_3@enu.kz, mdolomatov@bk.ru, Sha-t@ya.Ru, sali.zhm64@yandex.kz)

**СаО және Y_2O_3 -пен тұрақтандырылған с- ZrO_2 -нің иондық
өткізгіштігін тығыздық теориясы функционалы әдісімен зерттеу**

Аңдатпа. Жұмыста тығыздық функционалы теориясы әдісімен B3LYP гибриді функционалын қолдана отырып, CaO және Y₂O₃ қоспаларымен тұрақтандырылған кубтық цирконий диоксидіндегі оттегі иондарының миграциясы зерттелді. Оттегі ионының миграция энергиясына алмастырушы катиондардың түрі мен концентрациясының әсері, сондай-ақ кристалдық торда оттегі вакансияларының түзілу ерекшеліктері қарастырылды. Қоспа катиондарын енгізу тұрақтандырылмаған ZrO₂-пен салыстырғанда миграциялық тосқауылдың айтарлықтай төмендеуіне әкелетіні көрсетілді. Бұл жергілікті электростатикалық өрістің өзгеруімен, заряд тығыздығының қайта таралуымен және миграцияланатын оттегі ионының қоршаған катиондармен өзара әрекеттесуінің әлсіреуімен байланысты. Миграция энергиясының төмендеуі оттегі иондарының қозғалғыштығын арттырып, материалдың иондық өткізгіштігінің жоғарылауына ықпал етеді. Оттегі-иондық тасымал үшін ең қолайлы жағдайлар иттриймен тұрақтандырылған конфигурацияларда жүзеге асатыны анықталды. Мұндай жүйелер үшін миграциялық тосқауылдың тиімдірек төмендеуі және ақаулық құрылымның тұрақтануы тән. Кальций қоспаларының әсері де миграция энергиясының төмендеуінен байқалады, алайда ол олардың концентрациясына және тордағы жергілікті орналасуына байланысты. Алынған нәтижелер жақсартылған тасымалдау сипаттамалары бар ZrO₂ негізіндегі қатты оксидті электролиттерді бағытты түрде құрастыру үшін маңызды.

Түйін сөздер: тығыздық функционалы теориясы, цирконий диоксиді, электрондық құрылым, иондық өткізгіштік, миграция энергиясы.

G.B. Bairbayeva^{*1}, M.Yu. Dolomatov², T.I. Sharipov³, Zh.M. Salikhodzha¹

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²Ufa State Petroleum Technological University, Ufa, Bashkortostan, Russian Federation

³Ufa University of Science and Technology, Bashkortostan, Russian Federation

(E-mail: bairbayeva_gb_3@enu.kz, mdolomatov@bk.ru, Sha-t@ya.Ru, sali.zhm64@yandex.kz)

DFT study of the ionic conductivity of CaO- and Y₂O₃-stabilized c-ZrO₂

Abstract. In this work, the migration of oxygen ions in cubic zirconium dioxide stabilized with CaO and Y₂O₃ impurities was studied using density functional theory with the hybrid B3LYP functional. The influence of the type and concentration of substituting cations on the migration energy of an oxygen ion, as well as on the formation features of oxygen vacancies in the crystal lattice, was considered. It was shown that the introduction of impurity cations leads to a significant decrease in the migration barrier compared with unstabilized ZrO₂. This is associated with changes in the local electrostatic field, redistribution of charge density, and weakening of the interaction between the migrating oxygen ion and the surrounding cations. A decrease in migration energy contributes to an increase in the mobility of oxygen ions and enhances the ionic conductivity of the material. It was established that the most favorable conditions for oxygen-ion transport are realized in yttrium-stabilized configurations. Such systems are characterized by a more effective reduction of the migration barrier and stabilization of the defect structure. The effect of calcium impurities is also manifested in a decrease in migration energy; however, it depends on their concentration and local arrangement in the lattice. The obtained results are important for the targeted design of solid oxide electrolytes based on ZrO₂ with improved transport characteristics.

Keywords: density functional theory, zirconium dioxide, band structure, ionic conductivity, migration energy.

References

1. S. Chatterjee, S.K. Samanta, H.D. Banerjee, C.K. Maiti, Deposition of high-k ZrO₂ films on strained SiGe layers using microwave plasma, *Electronics Letters* 37(6), pp. 390-392 (2001).
2. M. Copel, M. Gribelyuk, E. Gusev, Structure and stability of ultrathin zirconium oxide layers on Si (001), *Applied Physics Letters* 76(4), pp. 436-438 (2000).
3. C.C. Lin, Y.P. Chang, H.B. Lin, C.H. Lin, Effect of non-lattice oxygen on ZrO₂-based resistive switching memory, *Nanoscale Research Letters* 7(1), p. 187 (2012).
4. V. Chauhan, R. Gupta, V. Kumar, J. Ram, F. Singh, M. Prasad, R. Kumar, High energy (150 MeV) Fe¹¹⁺ ion beam induced modifications of physic-chemical and photoluminescence properties of high-k dielectric nanocrystalline zirconium oxide thin films, *Ceramics International* 45(15), pp. 18887-18898 (2019).
5. X. Dong, G. Xia, Q. Zhang, L. Li, H. Gong, J. Bi, S. Wang, Room-temperature UV-ozone assisted solution process for

- zirconium oxide films with high dielectric properties, *Ceramics International* 43(17), pp. 15205-15213 (2017).
6. D.A. Ward, E.I. Ko, One-step synthesis and characterization of zirconia-sulfate aerogels as solid superacids, *Journal of Catalysis* 150(1), pp. 18-33 (1994).
 7. H.G. Floch, P.F. Belleville, Damage-resistant sol-gel optical coatings for advanced lasers at CEL-V: Code: F13, *Journal of Sol-Gel Science and Technology* 2(1), pp. 695-705 (1994).
 8. X. Wang, G. Wu, B. Zhou, J. Shen, Improvement on laser-induced damage threshold of sol-gel ZrO₂ coatings by crystal structure tuning, *Optics Express* 20(22), pp. 24482-24487 (2012).
 9. Q. Zhang, X. Li, J. Shen, G. Wu, J. Wang, L. Chen, ZrO₂ thin films and ZrO₂/SiO₂ optical reflection filters deposited by sol-gel method, *Materials Letters* 45(6), pp. 311-314 (2000).
 10. G. Wang, F. Meng, C. Ding, P.K. Chu, X. Liu, Microstructure, bioactivity and osteoblast behavior of monoclinic zirconia coating with nanostructured surface, *Acta Biomaterialia* 6(3), pp. 990-1000 (2010).
 11. N.C.S. Selvam, A. Manikandan, L.J. Kennedy, J.J. Vijaya, Comparative investigation of zirconium oxide (ZrO₂) nano and microstructures for structural, optical and photocatalytic properties, *Journal of Colloid and Interface Science* 389(1), pp. 91-98 (2013).
 12. E.H. Kisi, C.J. Howard, Crystal structures of zirconia phases and their inter-relation, *Key Engineering Materials* 153, pp. 1-36 (1998).
 13. R.H.J. Hannink, P.M. Kelly, B.C. Muddle, Transformation toughening in zirconia-containing ceramics, *Journal of the American Ceramic Society* 83(3), pp. 461-487 (2000).
 14. C. Piconi, G. Maccauro, Zirconia as a ceramic biomaterial, *Biomaterials* 20(1), pp. 1-25 (1999).
 15. V.G. Zavodinskii, O mekhanizme ionnoi provodimosti v stabilizirovannom kubicheskom dioksidi tsirkoniya [On the mechanism of ionic conductivity in stabilized cubic zirconium dioxide], *Fizika Tverdogo Tela [Physics of the Solid State]* 46(3), p. 441-445 (2004) [in Russian]
 16. T.V. Perevalov, Modelirovanie atomnoi i elektronnoi struktury vakansii i polivakansii kisloroda v ZrO₂ [Modeling of the atomic and electronic structure of oxygen vacancies and oxygen divacancies in ZrO₂], *Fizika Tverdogo Tela [Physics of the Solid State]* 60(3), p. 421-425 (2018) [in Russian]
 17. A.K. Dauletbekova, S.V. Nikiforov, D.V. Ananchenko, G.M. Aralbayeva, G.A. Akhmetova-Abdik, Radiatsionnye defekty v nanostrukturnykh kompaktnykh ZrO₂, obluchennykh elektronnyimi i ionnyimi puchkami [Radiation defects in nanostructured ZrO₂ compacts irradiated with electron and ion beam], *Vestnik Natsional'nogo Yadernogo Tsentra Respubliki Kazakhstan [Bulletin of the National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan]* №2, c. 43-48 (2023) [in Russian]
 18. P. Gayathri, V. Balasubramani, P. Balraju, M.A. Sayed, M. Shkir, Ultra-high photosensitivity response in MIS SBDs enabled by Zn-integrated ZrO₂@Zn interfacial layers for photovoltaic device, *Physica B: Condensed Matter* 714, p. 417506 (2025).
 19. A.M. Aboraia, I.M. Sharaf, S. Alradaddi, A.B.G. Trabelsi, F.H. Alkallas, Advanced supercapacitors: benefit from the electrode material cubic-ZrO₂ by doping with Gd, *Physica B: Condensed Matter* 714, p. 417519 (2025).
 20. Z. Cheng, H. Ren, Y. Wang, S. Ta, P. Zhang, Y. Yang, W. Deng, Effects of Yb₂O₃ as stabilizer and sensitizer on the luminescence properties of cubic ZrO₂ single crystals, *Crystal Growth & Design* 22(9), pp. 5481-5488 (2022).
 21. M. Thammachart, V. Meeyoo, T. Risksomboon, S. Osuwan, Catalytic activity of CeO₂-ZrO₂ mixed oxide catalysts prepared via sol-gel technique: CO oxidation, *Catalysis Today* 68(1-3), pp. 53-61 (2001).
 22. P. Li, I.W. Chen, J.E. Penner-Hahn, Effect of dopants on zirconia stabilization — an X-ray absorption study: I, trivalent dopants, *Journal of the American Ceramic Society* 77(1), pp. 118-128 (1994).
 23. J.P. Winczewski, S. Zeiler, S. Gabel, D. Maestre, B. Merle, J.G.E. Gardeniers, A.S. Arce, Additive manufacturing of 3D yttria-stabilized zirconia microarchitectures, *Materials & Design* 238, p. 112701 (2024).
 24. Y. Feng, J. Wu, Q. Chi, W. Li, Y. Yu, W. Fei, Defects and aliovalent doping engineering in electro ceramics, *Chemical Reviews* 120(3), pp. 1710-1787 (2020).
 25. C. Haering, A. Roosen, H. Schichl, M. Schnöller, Degradation of the electrical conductivity in stabilised zirconia system: Part II: Scandia-stabilized zirconia, *Solid State Ionics* 176(3-4), pp. 261-268 (2005).
 26. A. King, R. Singh, R. Anand, S.K. Behera, B.B. Nayak, Phase and luminescence behavior of Ce-doped zirconia nanopowders for latent fingerprint visualization, *Optik* 242, p. 167087 (2021).
 27. Q. Xue, X. Huang, L. Wang, H. Zhang, J. Zhang, Computational and experimental investigations of defect interaction and ionic conductivity in doped zirconia, *Physical Review Applied* 10(1), p. 014032 (2018).

28. S.H. Vosko, L. Wilk, M. Nusair, Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis, *Canadian Journal of Physics* 58(8), pp. 1200-1211 (1980).
29. W.F. Perger, J. Criswell, B. Civalleri, R. Dovesi, Ab-initio calculation of elastic constants of crystalline systems with the CRYSTAL code, *Computer Physics Communications* 180(10), pp. 1753-1759 (2009).
30. R.H. French, S.J. Glass, F.S. Ohuchi, Y.N. Xu, W.Y. Ching, Experimental and theoretical determination of the electronic structure and optical properties of three phases of ZrO_2 , *Physical Review B* 49(8), pp. 5133-5142 (1994).

Сведения об авторах:

Байрбаева Г.Б. – автор для корреспонденции, преподаватель кафедры теплоэнергетики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана 13, Астана, Казахстан.

Доломатов М.Ю. – профессор, доктор химических наук, Уфимский государственный нефтяной технический университет, 450062, улица Космонавтов, 1 Уфа, Республика Башкортостан, РФ.

Салиходжа Ж.М. – к.ф.-м.н., доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана 13, Астана, Казахстан.

Шарипов Т.И. - доцент, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры электроники и физики наноструктур, Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди, 32, 450076, Уфа, Россия.

Байрбаева Г.Б. – хат-хабар авторы, жылуэнергетика кафедрасының оқытушысы, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі 13, Астана, Қазақстан.

Доломатов М.Ю. – химия ғылымдарының докторы, профессор, Уфа мемлекеттік мұнай техникалық университеті, 450062, Космонавттар көшесі, 1, Уфа, Башқұртстан Республикасы, РФ.

Салиходжа Ж.М. – физика-математика ғылымдарының кандидаты, техникалық физика кафедрасының доценті, Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қажымұқан көшесі 13, Астана, Қазақстан.

Шарипов Т.И. – физика-математика ғылымдарының кандидаты, доцент, электроника және наноқұрылымдар физикасы кафедрасының доценті, Уфа ғылым және технологиялар университеті, Заки Валиди көшесі, 32, 450076, Уфа, Ресей, +79273210087

Bairbayeva G.B. – corresponding author, lecture, Department of Thermal Power Engineering, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan str., Astana, Kazakhstan.

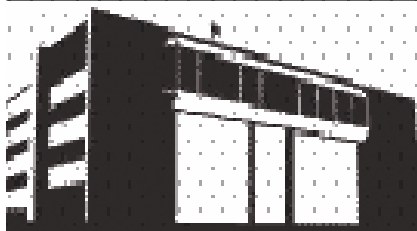
M. Yu. Dolomatov – Professor, Doctor of Chemical Sciences, Ufa State Petroleum Technological University, 1 Kosmonavtov Street, 450062 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russian Federation.

Salikhodzha Zh.M. – PhD, Associate Professor, Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

Sharipov T.I. - Associate Professor, Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Department of Electronics and Physics of Nanostructures, Ufa University of Science and Technology, 32 Zaki Validi St., 450076, Ufa, Russia.



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/>).



Теоретический обзор переноса протонов в композитных мембранах MOF-5/полимер/глубокоэвтектический растворитель: взаимосвязь структуры и свойств

А.А.Темирбаева*¹ , А.Кырыкбаева² , Г. Кабдрахимова¹

¹Институт физико-технических наук Евразийский Национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

²Факультет математики, физики и информатики Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

E-mail: assem.zkgmu@gmail.com, asemkyrykbaeva@gmail.com, gaukharkd@gmail.com

Аннотация. Протонно-обменные мембраны (РЕМ) являются ключевым компонентом топливных элементов, однако их эффективность ограничивается снижением протонной проводимости в условиях низкой влажности и повышенных температур. В настоящем обзорно-теоретическом исследовании проанализированы современные данные о переносе протонов в композитных системах MOF-5/полимер/глубокоэвтектический растворитель (DES) с акцентом на результаты, полученные методами теории функционала плотности (DFT) и молекулярной динамики (MD). Показано, что совместная интеграция MOF-структур, полимерных матриц и DES способствует формированию взаимосвязанных сетей водородных связей, перераспределению электронной плотности и снижению энергетических барьеров миграции протонов. Согласно опубликованным данным, нанопористая структура MOF-5 способствует формированию направленных путей переноса протонов, тогда как DES-домены поддерживают стабильность протонпроводящих путей в условиях ограниченной гидратации. Анализ литературы показывает, что протонная проводимость в системах MOF–полимер–DES определяется кооперативным взаимодействием межфазных эффектов, динамики водородных связей и пространственного ограничения внутри пористых структур. Проведённый анализ литературных данных позволяет сформировать современное представление о механизмах многоканального переноса протонов и могут служить основой для рационального проектирования РЕМ нового поколения с повышенной термической стабильностью и устойчивостью к дегидратации.

Ключевые слова: теория функционала плотности, диоксид циркония, электронная структура, ионная проводимость, энергия миграции.

Поступила 25.05.2026. После доработки 26.05.2026. Принята к печати 31.05.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

*автор для корреспонденции

1. Введение

Разработка высокоэффективных протонно-обменных мембран остаётся одной из ключевых задач водородной энергетики и технологий PEMFC. Водород, особенно производимый из возобновляемых ресурсов, широко признан ключевым компонентом в достижении целей декарбонизации и смягчении последствий изменения климата. Среди водородных технологий наибольший интерес представляют PEMFC благодаря высокой энергоэффективности, низкой рабочей температуре и экологичности [1–5].

Несмотря на эти преимущества, широкая коммерциализация топливных элементов с протонно-обменной мембраной (PEMFC) значительно затруднена ограничениями, связанными с протонно-обменными мембранами (PEM), включая недостаточную протонную проводимость в условиях низкой влажности, термическую нестабильность при повышенных температурах и высокую стоимость материалов. Mauritz et al. отмечали, что мембраны на основе перфторсульфоновой кислоты, включая Nafion, характеризуются высокой протонной проводимостью в гидратированном состоянии. Однако при пониженной влажности и повышенных температурах эффективность таких мембран существенно снижается вследствие нарушения непрерывных водосодержащих каналов, обеспечивающих перенос протонов. Кроме того, ограниченная термическая стабильность и высокая зависимость от гидратации существенно усложняют эксплуатацию подобных мембран в реальных условиях работы PEMFC [6].

Последние достижения в материаловедении подчеркнули потенциал композитных мембран, включающих металлоорганические каркасы (MOF), полимеры и ионные или глубокие эвтектические растворители (DES), как многообещающую стратегию для преодоления этих проблем. MOF, в частности MOF-5, обладают большой площадью поверхности, регулируемой структурой пор и способностью вмещать функциональные группы, что делает их привлекательными кандидатами для облегчения переноса протонов. В то же время полимерные матрицы обеспечивают механическую стабильность и технологичность, а системы DES, такие как хлорид-холина:мочевина (ChCl: мочевина), создают обширные сети водородных связей, которые способствуют проводимости протонов [7–8].

Несмотря на быстро растущий интерес к протонпроводящим мембранам на основе MOF, ряд фундаментальных научных вопросов остаются нерешёнными. Существующие исследования преимущественно сосредоточены либо на изолированных структурах MOF, либо на полимерных матрицах, либо на системах, содержащих DES, по отдельности, в то время как кооперативное поведение переноса протонов, возникающее при их одновременной интеграции, остаётся недостаточно изученным.

Таким образом, целью настоящего обзора является анализ опубликованных экспериментальных и вычислительных исследований, посвящённых переносу протонов в композитных мембранах MOF-5/полимер/DES, с особым акцентом на результаты, полученные методами теории функционала плотности (DFT) и молекулярной динамики (MD) [9–13].

Анализ литературных данных показывает, что перенос протонов в системах MOF–полимер–DES определяется сложным взаимодействием между перераспределением электронной плотности, динамикой водородных связей и эффектами пространственного ограничения внутри наноканалов MOF. Согласно опубликованным исследованиям, подобные многокомпонентные композитные системы способны формировать адаптивные пути переноса протонов, менее чувствительные к дегидратации по сравнению с традиционными гидратированными PEM-мембранами.

Таким образом, представленный обзор позволяет обобщить современные представления о механизмах переноса протонов в гибридных мембранных системах MOF–полимер–DES и определить перспективные направления дальнейшего рационального проектирования протонно-обменных мембран нового поколения с улучшенной проводимостью, термической стабильностью и эксплуатационной устойчивостью [14–16].

1.1. Современное состояние исследований протонно-обменных мембран

В последние десятилетия значительное внимание уделяется разработке высокоэффективных протонно-обменных мембран (PEM) для топливных элементов нового поколения. Согласно Smith, et al., традиционные мембраны на основе перфторсульфоновой кислоты, включая Nafion, длительное время рассматривались как промышленный стандарт благодаря высокой протонной проводимости и удовлетворительной химической стабильности [17]. Однако высокая зависимость таких мембран от гидратации, снижение проводимости при повышенных температурах и высокая стоимость существенно ограничивают их практическое применение.

В связи с этим значительное количество исследований было направлено на разработку альтернативных протонпроводящих систем, включая сульфированные ароматические полимеры, неорганически-органические

гибридные мембраны, композиты с оксидными наполнителями, а также мембраны на основе ионных жидкостей и металлоорганических каркасов (MOF) [18-20].

Kreuer et al. отмечали, что одним из ключевых направлений развития PEM является создание материалов, способных поддерживать эффективный перенос протонов в условиях низкой влажности и повышенных температур [21]. В связи с этим особый интерес вызывают гибридные системы, содержащие MOF-структуры, обладающие высокой пористостью, регулируемой морфологией и возможностью формирования направленных транспортных каналов.

Одновременно Zhang и Dai сообщали, что глубокие эвтектические растворители (DES) способны формировать динамические сети водородных связей, поддерживающие перенос протонов даже при ограниченном содержании воды [20]. Благодаря высокой ионной подвижности, низкой летучести и термической стабильности DES рассматриваются как перспективная альтернатива традиционным гидратированным системам переноса протонов.

1.2. Проблемы, возникающие в протонно-обменных мембранах

Протонно-обменные мембраны (PEM) являются ключевым функциональным компонентом топливных элементов с протонно-обменной мембраной (PEM), определяющим перенос протонов, электрохимическую эффективность и долговременную долговечность. Несмотря на значительный прогресс в разработке мембранных материалов, ряд фундаментальных проблем продолжает ограничивать их практическое применение, особенно в условиях низкой влажности и высоких температур [21].

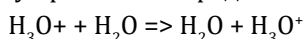
Протонная проводимость в обычных протонно-обменных мембранах сильно зависит от содержания воды. Транспорт протонов обычно происходит по двум основным механизмам: транспортному механизму, при котором протоны переносятся в виде гидратированных частиц (например, H₃O⁺), и механизму Гроттуса, включающему перескок протонов вдоль сетей водородных связей [22].

Протонную проводимость можно описать следующим образом:

$$\sigma = \frac{F^2 cD}{RT} \tag{1}$$

где σ — протонная проводимость, F — постоянная Фарадея, c — концентрация носителей заряда, D — коэффициент диффузии, R — газовая постоянная, а T — температура.

В условиях достаточного увлажнения разветвленные сети водородных связей способствуют эффективному переносу протонов посредством структурной диффузии:



Однако в условиях низкой влажности или повышенной температуры нарушение водородных связей приводит к значительному снижению подвижности протонов, что ограничивает эффективность мембраны.

Механизмы переноса протонов в протонно-обменных мембранах схематически показаны на рисунке 1.

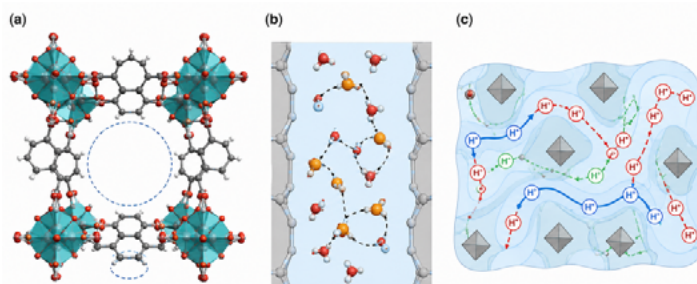


Рисунок 1. Концептуальная схема структуры MOF-5 и механизмов протонного транспорта в гибридных протонно-обменных мембранах на основе металлоорганических каркасов. (а) Схематическое представление пористой структуры MOF-5. Показаны металлические узлы Zn₄O, органические линкеры BDC (1,4-бензолдикарбоксилат), внутренние полости диаметром порядка 11–15 Å и окна между порами размером около 7–8 Å; (б) Схема инкапсуляции протонпроводящих компонентов (молекул воды, фосфорной кислоты

или глубоких эвтектических растворителей) в порах MOF с образованием непрерывной сети водородных связей, обеспечивающей перенос протонов; (с) Основные механизмы переноса протонов в гибридных мембранах MOF–полимер–DES: механизм Гроттуса (эстафетный перенос протонов по сети водородных связей), транспортный (vehicular) механизм и межфазный перенос на границе раздела MOF и полимерной матрицы.

Источник: составлено авторами на основе Kreuer et al. [21]

Несмотря на существенный прогресс в разработке протонно-обменных мембран, прогнозирование их транспортных характеристик остаётся сложной задачей вследствие многофакторного влияния структуры, гидратации и межфазных взаимодействий. Для исследования механизмов переноса протонов на различных масштабах широко применяются методы теории функционала плотности (DFT) и молекулярной динамики (MD), обеспечивающие молекулярное понимание взаимосвязи структуры и свойств мембранных материалов.

В таблице 1 представлено сравнение современных протонно-обменных мембран, описанных в литературе. В число выбранных систем входят традиционные полимерные мембраны, неорганические-органические композиты, а также перспективные материалы на основе MOF и DES, с указанием их протонной проводимости, структурных особенностей и основных ограничений.

Таблица 1. Сравнение усовершенствованных протонно-обменных мембран и композитных систем.

	Мембранная Система	Метод	Протонная Проводимость (С/ см)	Ключевые Параметры	Ограничения	Литература
1	Nafion	Экспериментальный	$\sim 10^{-1}$ (гидратированный)	Высокий проводимость, коммерческий стандарт	Снижение проводимости при повышенных температурах	[2,3,6]
2	Сульфированный полиэфиркетон (SPEEK)	Экспериментальный	$10^{-3}-10^{-2}$	Низкая стоимость, хороший стабильность	Ниже проводимость чем у Nafion	[4,33]
3	Nafion / SiO ₂ композитный	Экспериментальный	$\sim 10^{-2}$	Повышенная способность удержания влаги	Наполнитель агломерация	[35]
4	Nafion / TiO ₂	Экспериментальный	$\sim 10^{-2}$	Повышенная термическая стабильность	Межфазная граница сопротивление	[35,36]
5	Nafion / графен оксид (ГО)	Экспериментальный	$10^{-2}-10^{-1}$	Улучшена механическая сила	Неравномерная дисперсия	[35,43]
6	MOF-5/ Полимер	DFT + MD	$\sim 10^{-3}$	Большая площадь поверхности, пористая структура	Недостаточная межфазная совместимость	[7-10,12]
7	Полимер / DES (хлорид холина:мочевина)	MD +Экспериментальный	$10^{-3}-10^{-2}$	Сильная водородная связь сеть	Вязкость эффекты	[16-20]

8	Полимер /DES + MOF	DFT + MD	$\sim 10^{-2}$	множественные пути переноса	Сложный структура контроль	[16-20,31]
9	Композит Nafion / MOF	Экспериментальный	$10^{-2}-10^{-1}$	Улучшено проводимость и удержание	Расходы и синтез сложность	[31,35]
10	Композит полимер /углеродные нанотрубки	Экспериментальный	$\sim 10^{-2}$	механическое усиление	Ограниченный протон транспорт роль	[43]
11	Гибридный органический – неорганический PEM	MD + Экспериментальный	10^{-2}	Настраиваемая структура	Стабильность проблемы	[36,43]
12	Полимерный /функционализированный MOF	DFT + MD	$\sim 10^{-2}$	повышенная вероятность протонного переноса	Сложный синтез	[7-13]
13	Полимер /DES (гидратированный)	MD	$\sim 10^{-1}$	Гроттус + транспортное средство транспорт	зависимость от содержания воды	[21-24,16]

Как показано в таблице 1, традиционные протонно-обменные мембраны, такие как Nafion, демонстрируют высокую протонную проводимость в условиях полного увлажнения благодаря образованию непрерывных каналов переноса протонов, опосредованных водой. Однако их перенос протонов сильно зависит от удержания воды, что приводит к значительным потерям проводимости при повышенных температурах и низкой влажности. Это ограничение подчеркивает внутреннюю зависимость классических систем протонно-обменных мембран от механизмов подвижности протонов, опосредованных гидратацией.

Напротив, гибридные мембранные системы, содержащие неорганические наполнители, MOF или глубокие эвтектические растворители, демонстрируют улучшенную структурную и транспортную стабильность в условиях пониженной гидратации. Включение структур MOF создает ограниченные наноканалы, которые могут пространственно направлять пути миграции протонов, в то время как домены глубоких эвтектических растворителей способствуют формированию динамически перестраиваемых сетей водородных связей. Эти комбинированные эффекты уменьшают случайность диффузии протонов и способствуют к более непрерывным путям переноса протонов.

Сравнительный анализ, представленный в таблице 1, дополнительно подтверждает, что протонная проводимость в современных композитных мембранах определяется не только собственной проводимостью отдельных компонентов, но и межфазной совместимостью между частицами MOF, полимерными цепями и протонпроводящими жидкими доменами. Системы с плохой межфазной интеграцией часто страдают от разрывов переноса и повышенного межфазного сопротивления, даже при наличии высокопроводящих компонентов.

Примечательно, что мембраны, объединяющие как каркасы MOF, так и фазы DES, демонстрируют переход от преимущественно контролируемого гидратацией транспорта к многоканальному поведению протонной проводимости, включающему прыжки Гроттуса, диффузию через транспортные средства и миграцию протонов, опосредованную ограничением. Это наблюдение указывает на то, что рациональный контроль над структурной организацией на наноразмерном уровне может быть более важным, чем простое увеличение поглощения воды или концентрации кислоты в конструкции протонно-обменных мембран следующего поколения [23-27].

Для более глубокого понимания механизмов переноса протонов на молекулярном уровне были опубликованы различные атомистические исследования, основанные на теории функционала плотности (DFT) и моделировании молекулярной динамики (MD). Сводная таблица репрезентативных вычислительных исследований протонпроводящих мембранных систем представлена в таблице 2.

Таблица 2. Сводка результатов атомистических исследований (DFT и MD) протонпроводящих мембранных систем.

Система	Метод	Ключевые Параметры	Основные Результаты	Релевантность к PEM	Литература
Nafion (гидратированный)	MD	T = 300–400 К, вода кластеры	Транспорт протонов посредством механизма Гроттуса + транспортных механизмов	Бенчмарк система	[21–24]
мембрана SPEEK	MD	Степень из сульфирования	Подвижность протонов зависит от уровня гидратации.	Альтернатива к Nafion	[4,33]
Полимер /DES, (хлорид холина: мочевины)	MD	водородная связь сеть, вязкость	Улучшенная передача протонов через сеть DES	Уменьшенная вода зависимость	[16– 20]
MOF-5	DFT	Электронная структура, пора размер	Низкий внутренний протон проводимости	Требует функционализации	[7–10]
Функционализированный MOF-5	DFT	Связывание энергии, заряд распределение	Улучшенное средство к протонам за счет функциональных групп.	Улучшает транспорт пути	[12–15]
MOF-5 + полимер	MD	Интерфейс взаимодействия	Ограниченный транспорт из-за межфазного сопротивления	Потребности совместимости оптимизация	[31, 36]
MOF-5 + DES	DFT + MD	Водород соединение, заряд плотность	DES образует протонпроводящие мостики	Ключ инновации направление	[16-20, 7-10]
Композитный PEM (MOF + полимер + DES)	DFT + MD + Экспериментальный метод	Полная система	Синергетический протон транспорт	Рассматриваемая в литературе система	[45–52]

Сравнительный анализ опубликованных DFT- и MD-исследований показывает, что перенос протонов в композитных системах PEM не может быть адекватно описан в рамках одномасштабного теоретического подхода. Согласно данным литературы, протонная проводимость в подобных системах определяется совокупностью электронных, молекулярных и мезомасштабных процессов, совместно формирующих непрерывные пути миграции протонов.

Согласно опубликованным DFT-исследованиям, электронная структура систем MOF–полимер–DES играет ключевую роль в формировании протонпроводящих путей. Ряд авторов отмечают, что включение компонентов DES способствует перераспределению электронной плотности и усилению донорно-акцепторных взаимодействий, что может снижать энергетические барьеры переноса протонов и повышать стабильность водородно-связанных сетей [28-30].

Jiang et al. сообщили, что методы молекулярной динамики позволяют исследовать динамическую перестройку сетей водородных связей и их влияние на непрерывность путей переноса протонов в композитных мембранах [31]. Согласно опубликованным исследованиям, системы, содержащие DES-домены, способны поддерживать более стабильные протонпроводящие каналы в условиях пониженной влажности по сравнению с традиционными гидратированными PEM-системами.

Xu et al. отмечали, что наличие ограниченных нанопространств внутри структур MOF может существенно изменять характер диффузии протонов по сравнению с традиционными гидратированными полимерными мембранами. Согласно их исследованиям, пространственное ограничение внутри наноканалов MOF способствует более направленной миграции протонов и повышению непрерывности транспортных путей [32-35].

Li et al. отмечали, что современные подходы к атомистическому моделированию протонного транспорта всё ещё имеют ряд ограничений [36]. В частности, классические MD-модели не всегда способны корректно описывать процессы разрыва и образования связей, характерные для механизма переноса протонов по Гроттусу, тогда как традиционные DFT-расчёты остаются вычислительно ограниченными при исследовании крупных многокомпонентных мембранных систем. Следовательно, интеграция многомасштабных подходов, включая реактивные силовые поля, ab initio молекулярную динамику и моделирование с использованием машинного обучения, может представлять собой критически важное направление для будущих исследований в области моделирования PEM.

Согласно опубликованным DFT- и MD-исследованиям, эффективный перенос протонов в мембранах MOF-полимер-DES определяется не одним доминирующим механизмом, а кооперативным взаимодействием между перераспределением электронного заряда, динамическими сетями водородных связей и эффектами наноразмерного ограничения [37-40]. Ряд авторов отмечают, что именно многоканальный характер переноса протонов является одним из ключевых преимуществ гибридных композитных PEM-систем по сравнению с традиционными гидратированными мембранами.

1.3. Общие сведения о композитных мембранах MOF-полимер-DES

Разработка протонно-обменных мембран следующего поколения все больше фокусируется на гибридных системах, сочетающих неорганические каркасы, полимерные матрицы и функциональные растворители для преодоления присущих традиционным протонно-обменным мембранам ограничений. В частности, композитные мембраны на основе металлоорганических каркасов (MOF), полимеров и глубоких эвтектических растворителей (DES) стали перспективной платформой для достижения повышенной протонной проводимости, структурной стабильности и снижения зависимости от гидратации.

Металлоорганические каркасы (MOF) — это кристаллические пористые материалы, состоящие из металлических кластеров, соединенных органическими линкерами, обладающие большой площадью поверхности, регулируемой структурой пор и четко определенными наноканалами. Среди них MOF-5 ($Zn_4O(BDC)_3$) относится к наиболее изученным металлоорганическим каркасам и характеризуется кубической структурой содержащая внутренние полости диаметром порядка 11–15 Å, соединённые окнами размером около 7–8 Å. Высокая пористость обеспечивает возможность размещения молекул-гостей и формирования транспортных каналов. Вместе с тем существенным ограничением MOF-5 является сравнительно низкая гидротермическая стабильность, что требует его функционализации или интеграции в состав композитных мембран. Эти структурные особенности позволяют удерживать молекулы-гости, такие как вода или ионные частицы, что может облегчить перенос протонов через наноразмерные каналы. Однако чистый MOF-5 обладает ограниченной собственной протонной проводимостью, что требует функционализации или интеграции с другими компонентами для создания эффективных путей переноса [41-45].

Полимерные матрицы играют решающую роль в композитных системах на основе полимерных электролитов, обеспечивая механическую целостность, гибкость и технологичность. Сульфированные полимеры, такие как сульфированный поли(эфир-эфир-кетон) (SPEEK) или сульфированные полисульфон (SPSU) вводит кислые функциональные группы ($-SO_3H$), которые действуют как протонпроводящие участки. Эти группы обеспечивают диссоциацию протонов и способствуют образованию гидрофильных доменов внутри мембраны. Тем не менее, мембраны, состоящие исключительно из полимерной матрицы, остаются сильно зависимыми от содержания воды и их характеристики ухудшаются в условиях низкой влажности, как обсуждалось в разделе 1.1.

Для преодоления этого ограничения значительное внимание привлекли глубокие эвтектические растворители (ГЭР), в частности хлорид холина:мочевина (ChCl:мочевина), в качестве протонпроводящих сред. Системы DES образуются за счет прочных водородных связей между донором и акцептором водородной связи, в результате

чего образуется жидкость с уникальными физико-химическими свойствами, включая низкую летучесть, высокую ионную проводимость и термическую стабильность. В приложениях с протонно-обменными мембранами (PEM) DES могут создавать разветвленные сети водородных связей, которые поддерживают перенос протонов как по транспортному механизму, так и по механизму Гроттуса, даже в отсутствие воды в объеме.

Сочетание MOF, полимеров и DES приводит к синергетической системе, в которой каждый компонент выполняет взаимодополняющую роль. Наноканалы MOF обеспечивают ограниченные пути для миграции протонов, полимерная матрица обеспечивает структурную когезию и механическую прочность, а домены DES способствуют динамической проводимости протонов через сети водородных связей. Важно отметить, что присутствие DES внутри пор MOF и полимерных интерфейсов позволяет формировать непрерывные транспортные пути, менее чувствительные к эффектам дегидратации [46,47].

Структурная организация и пути переноса протонов в таких композитных системах схематически показаны на рисунке 2.



Рисунок 2. Схематическое представление путей переноса протонов в композитных мембранах MOF-5/полимер/DES. Источник: составлено авторами на основе [38-45].

Как показано на рисунке 2, перенос протонов в композитной мембране происходит по множеству взаимосвязанных путей. Сеть водородных связей, образованная DES и остаточными молекулами воды, обеспечивает быстрое перемещение протонов, в то время как сульфокислотные группы полимера обеспечивают дополнительные источники протонов. Одновременно наноканалы MOF действуют как ограниченные каналы, которые направляют движение протонов и усиливают направленный транспорт. Этот многоканальный механизм транспорта представляет собой значительное преимущество по сравнению с традиционными системами PEM, где протонная проводимость в основном ограничена гидратированными полимерными доменами.

Несмотря на эти многообещающие характеристики, в оптимизации композитных мембран MOF–полимер–DES остается ряд проблем. К ним относятся достижение равномерного распределения частиц MOF в полимерной матрице, минимизация межфазного сопротивления и контроль распределения DES в структуре композита. Кроме того, сложное взаимодействие структурных, химических и динамических факторов требует детального понимания механизмов переноса протонов в различных масштабах.

В этом контексте методы атомистического моделирования, включая теорию функционала плотности (DFT) и моделирование молекулярной динамики (MD), предоставляют мощные инструменты для исследования взаимодействий между MOF, полимерами и DES на молекулярном уровне. Эти подходы позволяют идентифицировать пути переноса протонов, оценивать энергетические барьеры и устанавливать взаимосвязи структуры и свойств, что имеет важное значение для рационального проектирования высокоэффективных материалов PEM [48-50].

2. Атомистическое моделирование протонного переноса в системах MOF- полимер-DES

Для исследования механизмов переноса протонов в композитных мембранах MOF–полимер–DES в опубликованных работах широко применяются многомасштабные подходы, объединяющие методы теории функционала плотности (DFT) и молекулярной динамики (MD). Эти вычислительные методы позволяют анализировать как электронные взаимодействия, так и динамическое структурное поведение, определяющее подвижность протонов в гибридных мембранных системах [51].

Согласно литературным данным, методы DFT, основанные на гибридных обменно-корреляционных функционалах, таких как B3LYP, активно используются для исследования перераспределения заряда, сродства к протону и межмолекулярных взаимодействий в системах, содержащих MOF-5 и глубокие эвтектические растворители [52-54]. В ряде исследований особое внимание уделялось взаимодействию между каркасами MOF-5, компонентами DES и функциональными группами полимерной матрицы.

Электронная структура системы описывается в рамках теории Кона-Шэма:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{eff}}(r)] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r) \tag{2}$$

где $V_{\text{eff}}(r)$ представляет собой эффективный потенциал, включающий электрон-электронные взаимодействия, а ψ_i и ϵ_i — орбитали и энергии Кона-Шэма соответственно.

В опубликованных DFT-исследованиях для учета ван-дер-ваальсовых взаимодействий в системах MOF-DES часто используются гибридные функционалы с дисперсионными поправками Grimme D3, позволяющие более корректно описывать межмолекулярные взаимодействия и водородные связи [55-57].

Энергия взаимодействия между компонентами рассчитывалась следующим образом:

$$E_{\text{int}} = E_{\text{total}} - (E_{\text{MOF}} + E_{\text{DES}} + E_{\text{полимер}})$$

Отрицательные значения E_{int} указывают на благоприятные взаимодействия и стабильное образование композита.

Исследования, основанные на теории функционала плотности (DFT), позволяют получить представление о: сродстве к протонам

- распределении электронной плотности и локализации заряда
- образовании водородных связей
- изменениях электронной структуры при включении компонентов DES

Эти факторы имеют решающее значение для понимания путей переноса протонов на атомном уровне [57].

Опубликованные MD-исследования протонпроводящих мембран позволяют анализировать динамическое поведение систем MOF-полимер-DES в условиях различной температуры и степени гидратации. В большинстве работ для моделирования подобных композитных систем используются классические силовые поля, включая OPLS-AA, CHARMM и их модифицированные версии, позволяющие исследовать крупномасштабные структуры на длительных временных интервалах [58].

В литературе коэффициент диффузии протонов был определен с использованием соотношения Эйнштейна:

$$D = \frac{1}{6} \frac{d}{dt} \langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle \tag{3}$$

где $\langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle$ — среднеквадратичное смещение (MSD) протонных частиц.

Согласно опубликованным исследованиям, температурно-зависимое MD-моделирование позволяет оценивать влияние тепловых флуктуаций на подвижность протонов и стабильность сетей водородных связей внутри композитной мембраны. Связь между коэффициентом диффузии и протонной проводимостью часто описывается уравнением Нернста-Эйнштейна:

$$\sigma = \frac{nq^2 D}{k_B T} \tag{4}$$

где n — плотность числа носителей заряда, q — заряд протона, а k_B — постоянная Больцмана.

Следует подчеркнуть, что уравнение Нернста-Эйнштейна строго применимо для систем с невзаимодействующими носителями заряда. В реальных протонпроводящих мембранах перенос протонов часто сопровождается коррелированными процессами миграции и коллективной перестройкой сетей водородных связей, вследствие чего расчётные значения проводимости могут отличаться от экспериментальных.

Анализ опубликованных MD-исследований показывает, что моделирование молекулярной динамики предоставляет важную информацию о:

- формировании и перестройке сетей водородных связей
- динамике переноса протонов
- влиянии пространственного ограничения внутри пор MOF
- структурной организации DES-доменов
- температурной зависимости транспортных свойств

Marx et al. отмечали, что совместное применение методов теории функционала плотности (DFT) и молекулярной динамики (MD) позволяет более полно описывать взаимосвязь между электронной структурой, динамикой водородных связей и механизмами переноса протонов в композитных мембранных системах [59]. Согласно опубликованным исследованиям, интеграция DFT- и MD-подходов является эффективным инструментом для анализа многомасштабных процессов протонного транспорта в гибридных PEM-материалах. Следует отметить, что широко используемый функционал B3LYP не всегда обеспечивает корректное описание дисперсионных взаимодействий и водородных связей в пористых системах MOF. По этой причине в современных исследованиях всё чаще используются функционалы с дисперсионными поправками (например, B3LYP-D3, ω B97X-D и M06-2X). Кроме того, классическая молекулярная динамика не позволяет непосредственно моделировать процессы разрыва и образования химических связей, лежащие в основе механизма Гроттуса [59-60].

На молекулярном уровне плотность и связность сетей водородных связей определяют непрерывность путей миграции протонов. Системы, содержащие динамически перестраиваемые домены DES, по-видимому, поддерживают более стабильные транспортные каналы в условиях пониженной гидратации по сравнению с обычными водозависимыми системами PEM.

На более крупных структурных масштабах пространственное расположение частиц MOF внутри полимерной матрицы влияет на степень локализации и доступность взаимосвязанных наноканалов. Равномерно распределенные домены MOF могут способствовать более непрерывному переносу протонов, тогда как агрегированные области могут создавать локальное сопротивление переносу и нарушать связность путей.

Эти наблюдения показывают, что протонную проводимость в гибридных композитных мембранах нельзя оптимизировать с помощью одного параметра. Вместо этого, для эффективного проектирования мембран требуется одновременный контроль над наноразмерной морфологией, межфазной совместимостью, динамикой водородных связей и организацией протонпроводящих доменов.

Схема многомасштабного моделирования представлена на рисунке 3.

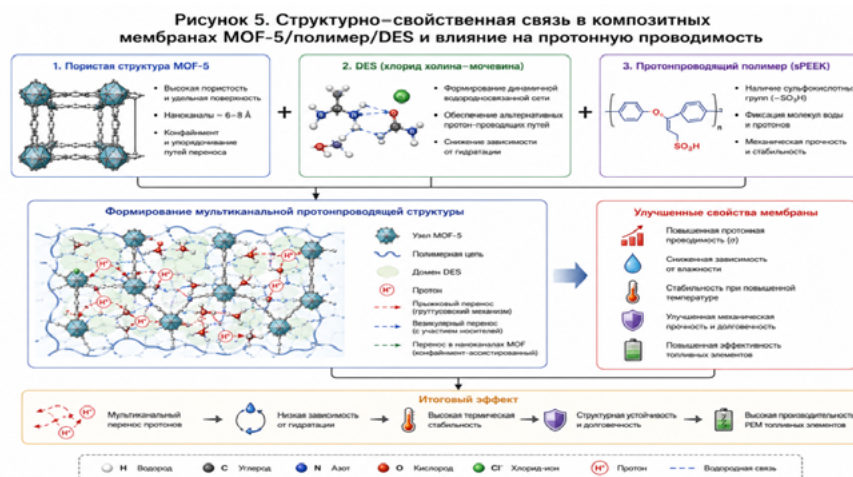


Рисунок 3. Многомасштабный подход к моделированию, интегрирующий расчёты методом теории функционала плотности (DFT) и молекулярной динамики (MD), для исследования переноса протонов в композитных мембранах MOF-полимер-DES. Источник: адаптировано авторами на основе опубликованных подходов многомасштабного моделирования [45-49, 53-55].

Интеграция этих вычислительных методов позволяет:

- идентифицировать доминирующие пути переноса протонов
- оценивать энергетические барьеры переноса протонов
- устанавливать корреляции между структурой и протонной проводимостью

Такой подход имеет ключевое значение для рационального проектирования усовершенствованных протонно-обменных мембран с улучшенными характеристиками в практических условиях эксплуатации

3. Обсуждение, перспективы

В отличие от традиционных гидратированных PEM-систем, перенос протонов в композитных мембранах MOF-полимер-DES определяется не одним доминирующим механизмом, а совокупностью взаимосвязанных процессов, происходящих на различных структурных уровнях. Наличие DES-доменов способствует формированию динамических сетей водородных связей, тогда как наноканалы MOF-5 создают пространственно ограниченные пути миграции протонов. Подобная многоканальная организация транспорта может снижать зависимость протонной проводимости от степени гидратации и обеспечивать более стабильную работу мембраны при повышенных температурах. В совокупности это указывает на перспективность гибридных систем MOF-полимер-DES как платформы для разработки PEM нового поколения. Несмотря на многообещающие транспортные характеристики, предсказанные для композитных мембран MOF-полимер-DES, ряд факторов может ограничивать прямое применение настоящих теоретических результатов к реальным мембранным системам. В частности, атомистические моделирования обычно проводятся в идеализированных структурных условиях и могут не в полной мере учитывать дефекты, локальные неоднородности, частичную закупорку пор или долговременные структурные перестройки, происходящие в экспериментально изготовленных мембранах.

Кроме того, на перенос протонов в реалистичных средах протонно-обменных мембран влияют многочисленные взаимосвязанные явления, включая локальные флуктуации гидратации, механическое напряжение, электрохимическую деграцию и динамическую реструктуризацию межфазной границы. Эти эффекты по-прежнему трудно точно воспроизвести в рамках традиционных классических моделей молекулярной динамики, и они могут приводить к расхождениям между моделируемыми и экспериментально наблюдаемыми транспортными свойствами.

Еще одно важное ограничение связано с упрощенным представлением событий переноса протонов в неактивных моделях молекулярной динамики. Хотя динамику водородных связей и пути диффузии протонов можно оценить косвенно, явные процессы разрыва и образования связей, связанные с истинными механизмами переноса Гроттуса, требуют более сложных вычислительных подходов, таких как реактивные силовые поля или молекулярная динамика *ab initio*.

Таким образом, опубликованные литературные данные следует рассматривать прежде всего, как теоретическую и механистическую основу для понимания процессов переноса протонов в композитных мембранах MOF-полимер-DES, а не как прямые количественные прогнозы характеристик реальных мембранных систем. Тем не менее, анализ современных DFT- и MD-исследований позволяет выявить ключевые факторы, влияющие на протонную проводимость, динамику водородных связей и межфазные взаимодействия. В совокупности эти данные формируют важную научную основу для дальнейшего рационального проектирования и экспериментальной оптимизации протонпроводящих композитных мембран нового поколения.

В перспективе разработка протонно-обменных мембран следующего поколения, вероятно, выиграет от более интегрированного и основанного на данных подхода. Сочетание вычислительного моделирования, экспериментальной характеристики и методов машинного обучения открывает новые возможности для ускорения открытия и оптимизации материалов. В частности, высокопроизводительный скрининг структур MOF, химического состава полимеров и составов DES может привести к выявлению оптимальных комбинаций с повышенной протонной проводимостью и стабильностью.

Следует также отметить, что концепция многоканального переноса протонов, продемонстрированная в данном исследовании, может быть распространена на другие классы материалов, включая ковалентные органические каркасы (COF), гибридные ионные системы и биоинспирированные мембраны. Путем целенаправленного регулирования взаимодействия между компонентами и контроля их пространственной организации можно создавать системы с высокоэффективными и надежными транспортными свойствами.

Дополнительные перспективы связаны с использованием методов многомасштабного моделирования, машинного обучения и искусственного интеллекта для прогнозирования взаимосвязи структуры и свойств перспективных PEM-материалов. Ряд авторов отмечают, что сочетание DFT, молекулярной динамики и *data-driven* подходов может существенно ускорить рациональное проектирование мембран нового поколения с улучшенной протонной проводимостью, термической стабильностью и долговечностью.

В долгосрочной перспективе подобные гибридные мембранные системы могут найти применение в высокоэффективных водородных энергетических технологиях, включая PEM-топливные элементы, водородные сенсоры и электрохимические устройства хранения энергии.

4. Выводы

В настоящем обзорно-теоретическом исследовании авторы пришли к следующим выводам:

Анализ литературы показывает, что интеграция MOF-5, полимерной матрицы и DES способствует формированию многоканальных путей переноса протонов.

DES обеспечивают устойчивые сети водородных связей и снижают зависимость проводимости от степени гидратации.

MOF-5 создаёт направленные наноканалы переноса, однако требует модификации вследствие ограниченной гидротермической стабильности.

Наиболее перспективными вычислительными инструментами являются DFT с дисперсионными поправками и многомасштабное MD-моделирование.

Для практического применения необходимы дальнейшие экспериментальные исследования, направленные на оптимизацию состава MOF-полимер-DES и повышение долговременной стабильности мембран.

В будущих исследованиях следует сосредоточиться на интеграции реактивной молекулярной динамики, моделирования переноса протонов методом *ab initio* и подходов к проектированию материалов с использованием машинного обучения, чтобы добиться более точного моделирования явлений переноса протонов в реалистичных условиях эксплуатации.

В совокупности полученные результаты подтверждают мнение о том, что композитные мембраны MOF - полимер - DES представляют собой перспективную платформу для разработки протонно-обменных мембран с пониженной зависимостью от гидратации и улучшенной транспортной стабильностью

Благодарности

Авторы выражают благодарность за поддержку исследования, выполненного в рамках проекта AP26100243 «Проектирование и разработка протоннообменных мембран на основе композитов металлоорганический каркас – полимер с глубокими эвтектическими растворителями: комбинированное вычислительное и экспериментальное исследование» (2025–2027 гг.), финансируемым Министерством высшего образования и науки РК.

Вклад авторов

А.А. Темирбаева внесла основной вклад в разработку концепции исследования, поиск и анализ научной литературы, интерпретацию данных, подготовку и написание рукописи.

А.Кырыкбаева участвовала в сборе и систематизации литературных источников, анализе и обсуждении результатов исследования, а также в подготовке отдельных разделов статьи.

Г. Кабдрахимова принимала участие в анализе и интерпретации данных, критическом пересмотре содержания рукописи, редактировании текста и подготовке окончательной версии статьи.

Все авторы внесли существенный интеллектуальный вклад в выполнение работы, ознакомились и одобрили окончательный вариант статьи и несут ответственность за ее содержание.

Заявление об использовании генеративного ИИ и технологий, использующих ИИ, в процессе подготовки рукописи

В процессе подготовки данной работы авторы использовали ChatGPT (OpenAI) для лингвистического редактирования текста, улучшения стилистики изложения материала, проверки грамматической корректности и совершенствования структуры рукописи. После использования данного инструмента авторы тщательно проверили, отредактировали и верифицировали содержание статьи, а также несут полную ответственность за достоверность представленных данных, интерпретацию результатов и содержание опубликованной работы.

Список литературы

1. Kreuer, K. D., Proton conductivity: Materials and applications. *Chem. Mater.* 8, 610–641 (1996). <https://doi.org/10.1021/cm950192a>.
2. Mauritz, K. A., Moore, R. B., State of understanding of Nafion. *Chem. Rev.* 104, 4535–4586 (2004). <https://doi.org/10.1021/cr0207123>
3. Zawodzinski, T. A. et al., Water uptake by Nafion. *J. Electrochem. Soc.* 140, 1041–1047 (1993). <https://doi.org/10.1149/1.2056194>
4. Li, Q., He, R., Jensen, J. O., Bjerrum, N. J., Approaches and recent development of PEM. *Chem. Mater.* 15, 4896–4915 (2003). <https://doi.org/10.1021/cm0310519>
5. Hickner, M. A., Ion-containing polymers. *Mater. Today* 13, 34–41 (2010).
6. Kusoglu, A., Weber, A. Z., New insights into Nafion. *Chem. Rev.* 117, 987–1104 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00159>
7. Furukawa, H., Cordova, K. E., O’Keeffe, M., Yaghi, O. M., Chemistry of MOFs. *Science* 341, 1230444 (2013). <https://doi.org/10.1126/science.1230444>
8. Li, J. R.; Kuppler, R. J.; Zhou, H. C., MOFs for gas storage. *Chem. Soc. Rev.* 38, 1477–1504 (2009). <https://doi.org/10.1039/B802426j>
9. Rowsell, J. L. C., Yaghi, O. M., MOFs: a new class. *Microporous Mesoporous Mater.* 73, 3–14 (2004). <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2004.03.034>
10. Férey, G., Hybrid porous solids. *Chem. Soc. Rev.* 37, 191–214 (2008). <https://doi.org/10.1039/B618320B>
11. Kitagawa, S., Kitaura, R., Noro, S., Functional porous coordination polymers. *Angew. Chem. Int. Ed.* 43, 2334–2375 (2004). <https://doi.org/10.1002/anie.200300610>
12. Taylor, J. M. et al., Proton conduction in MOFs. *J. Am. Chem. Soc.* 132, 14055–14057 (2010). <https://doi.org/10.1021/ja104356t>
13. Horike, S. et al., Proton conduction in porous materials. *Nat. Chem.* 1, 695–704 (2009). <https://doi.org/10.1021/ar3001719>
14. Yamada, T. et al., Proton-conductive MOFs. *J. Am. Chem. Soc.* 133, 12366–12369 (2011). <https://doi.org/10.1039/C3CS60053E>
15. Shigematsu, A. et al., Proton conductivity in MOF frameworks. *J. Am. Chem. Soc.* 133, 2034–2036 (2011). <https://doi.org/10.1021/ja1091436>
16. Abbott, A. P. et al., Deep eutectic solvents formed between choline chloride and urea. *Chem. Commun.*, 70–71 (2003). <https://doi.org/10.1039/B210714G>
17. Smith, E. L., Abbott, A. P., Ryder, K. S., Deep eutectic solvents review. *Chem. Rev.* 114, 11060–11082 (2014). <https://doi.org/10.1021/cr300162p>
18. Zhang, Q.; De Oliveira Vigier, K.; Royer, S.; Jérôme, F. DES overview. *Chem. Soc. Rev.* 41, 7108–7146 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2CS35178A>
19. Francisco, M., van den Bruinhorst, A., Kroon, M. C., DES fundamentals. *Angew. Chem. Int. Ed.* 52, 3074–3085 (2013). <https://doi.org/10.1002/anie.201207548>
20. Dai, Y. et al., Natural DES. *Anal. Chim. Acta* 766, 61–68 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.aca.2012.12.019>
21. Kreuer, K. D., Proton conductivity mechanisms. *Solid State Ionics* 97, 1–15 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(97\)00054-0](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(97)00054-0)
22. Agmon, N., Grotthuss mechanism. *Chem. Phys. Lett.* 244, 456–462 (1995). [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(95\)00905-J](https://doi.org/10.1016/0009-2614(95)00905-J)
23. Marx, D., Tuckerman, M. E., Hutter, J., Parrinello, M., Proton transfer simulation. *Nature* 397, 601–604 (1999). <https://doi.org/10.1038/17579>
24. Tuckerman, M. E. et al., Ab initio MD proton transfer. *J. Phys. Chem. B* 106, 9533–9541 (2002). <https://doi.org/10.1126/science.275.5301.817>
25. Spohr, E., Proton transport modeling. *Electrochim. Acta* 50, 5139–5145 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2005.03.009>
26. Devanathan, R., Recent developments in proton exchange membranes. *Energy Environ. Sci.* 1, 101–119 (2008). <https://doi.org/10.1039/B809723P>
27. Paddison, S. J., Proton conduction modeling. *Annu. Rev. Mater. Res.* 33, 289–319 (2003). <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.33.022702.154551>

28. Eikerling, M., Kornyshev, A., Proton transport in membranes. *J. Electroanal. Chem.* 453, 89–106 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0022-0728\(98\)00121-4](https://doi.org/10.1016/S0022-0728(98)00121-4)
29. He, R. et al., High temperature PEM. *J. Membr. Sci.* 226, 169–184 (2003). <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2003.09.019>
30. Li, Q. et al., Phosphoric acid doped membranes. *J. Membr. Sci.* 347, 260–270 (2009). <https://doi.org/10.1002/fuce.200400018>
31. Jiang, R. et al., MOF-based membranes. *Adv. Mater.* 31, 1805127 (2019).
32. Xu, H. et al., MOF membranes review. *Chem. Rev.* 120, 803–898 (2020).
33. Zhang, H., Shen, P. K. PEM fuel cells. *Chem. Rev.* 112, 2780–2832 (2012). <https://doi.org/10.1021/cr200035s>
34. Kusoglu, A., Weber, A. Z., Nafion revisited. *Chem. Rev.* 117, 987–1104 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00159>
35. Chen, Y. et al., Composite PEM membranes. *J. Membr. Sci.* 476, 327–336 (2015).
36. Li, X. et al., Hybrid membranes review. *Prog. Polym. Sci.* 34, 449–477 (2009).
37. Zhang, J. et al., PEMFC technology. *J. Power Sources* 160, 872–891 (2006). <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.02.074>
38. Wang, Y. et al., PEM fuel cells overview. *Appl. Energy* 88, 981–1007 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2010.09.030>
39. Borup, R. et al., PEM durability. *Chem. Rev.* 107, 3904–3951 (2007). <https://doi.org/10.1021/cr050182l>
40. Steele, B. C. H., Heinzel, A., Fuel cell technologies. *Nature* 414, 345–352 (2001). <https://doi.org/10.1038/35104620>
41. Kreuer, K. D., On the complexity of proton transport. *Solid State Ionics* 136–137, 149–160 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(00\)00329-8](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(00)00329-8)
42. Pivovar, B. S., Nafion transport properties. *J. Electrochem. Soc.* 152, A53–A60 (2005). <https://doi.org/10.1149/1.1832721>
43. Park, H. B. et al., Polymer membranes for energy. *Science* 356, eaab0530 (2017). <https://doi.org/10.1126/science.aab0530>
44. Logadottir, A. et al., Hydrogen reactions modeling. *J. Catal.* 197, 229–231 (2001). <https://doi.org/10.1006/jcat.2000.3075>
45. Kresse, G., Furthmüller, J., DFT methods. *Phys. Rev. B* 54, 11169–11186 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
46. Becke, A. D., Density-functional thermochemistry. *J. Chem. Phys.* 98, 5648–5652 (1993). <https://doi.org/10.1063/1.464913>
47. Grimme, S., D3 dispersion correction. *J. Chem. Phys.* 132, 154104 (2010). <https://doi.org/10.1063/1.3382344>
48. Frenkel, D., Smit, B., *Understanding Molecular Simulation*; Academic Press, (2002).
49. Allen, M. P.; Tildesley, D. J. *Computer Simulation of Liquids*; Oxford, (1987).
50. Rapaport, D. C., *The Art of Molecular Dynamics Simulation*; Cambridge, (2004).
51. Plimpton, S., Fast MD algorithms. *J. Comput. Phys.* 117, 1–19 (1995). <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
52. Van der Spoel, D. et al., GROMACS software. *J. Comput. Chem.* 26, 1701–1718 (2005). <https://doi.org/10.1002/jcc.20291>
53. Jorgensen, W. L. et al., OPLS force field. *J. Am. Chem. Soc.* 118, 11225–11236 (1996). <https://doi.org/10.1021/ja9621760>
54. MacKerell, A. D. et al., CHARMM force field. *J. Phys. Chem. B* 102, 3586–3616 (1998). <https://doi.org/10.1021/jp973084f>
55. Marrink, S. J. et al., MARTINI force field. *J. Phys. Chem. B* 111, 7812–7824 (2007). <https://doi.org/10.1021/jp071097f>
56. Tuckerman, M. E., *Statistical mechanics MD*. Oxford, (2010).
57. Kreuer, K. D., Proton conduction fundamentals. *Solid State Ionics* 136, 149–160 (2000).
58. Agmon, N., Proton mobility. *Chem. Phys. Lett.* 244, 456–462 (1995).
59. Marx, D., Proton transfer simulation. *Nature* 397, 601–604 (1999).
60. Devanathan, R., Proton exchange membranes review. *Energy Environ. Sci.* 1, 101–119 (2008).

А.А.Темирбаева^{*1}, А.Қырықбаева², Г.Кабдрахимова¹

¹*Физика-техникалық ғылымдар институты, Л.Н.Гумилев атындағы*

Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²*Математика, физика және информатика факультеті,*

Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

(E-mail: assem.zkgmu@gmail.com, asemkyrykbaeva@gmail.com,
gaukharkd@gmail.com)

**MOF-5/полимер/терең эвтектикалық еріткіш негізіндегі
композиттік мембраналардағы протон тасымалының теориялық шолуы:
құрылым мен қасиеттердің өзара байланысы**

Аңдатпа. Протоналмасу мембраналары (РЕМ) отын элементтерінің негізгі компоненттерінің бірі болып табылады, алайда олардың тиімділігі төмен ылғалдылық және жоғары температура жағдайларында протондық өткізгіштіктің төмендеуімен шектеледі. Осы шолу-теориялық жұмыста MOF-5/полимер/терең эвтектикалық еріткіш (DES) композиттік жүйелеріндегі протон тасымалына қатысты заманауи зерттеулерге талдау жасалып, тығыздық функционалы теориясы (DFT) және молекулалық динамика (MD) әдістері арқылы алынған нәтижелерге ерекше назар аударылды. MOF-құрылымдарының, полимер матрицаларының және DES жүйелерінің бірлескен интеграциясы өзара байланысқан сутектік байланыс желілерінің түзілуіне, электрондық тығыздықтың қайта таралуына және протон миграциясының энергетикалық тосқауылдарының төмендеуіне ықпал ететіні көрсетілді. Әдебиет деректері бойынша, MOF-5 наноканалдары бағытталған протон тасымалын қамтамасыз ете алады, ал DES-домендері шектеулі гидратация жағдайында протонөткізгіш жолдардың тұрақтылығын сақтауға мүмкіндік береді. Талдау нәтижелері MOF–полимер–DES жүйелеріндегі протондық өткізгіштік фазалар шекарасындағы әсерлердің, сутектік байланыстар динамикасының және кеуекті құрылымдардағы кеңістіктік шектеулердің кооперативті әрекеттесуімен анықталатынын көрсетті. Ұсынылған нәтижелер көпарналы протон тасымалы механизмдері туралы заманауи түсінік қалыптастырып, жоғары термиялық тұрақтылық пен дегидратацияға төзімділігі арттырылған жаңа буындағы PEM мембраналарын рационалды жобалауға негіз бола алады.

Түйін сөздер: протоналмасу мембраналары, MOF-5, терең эвтектикалық еріткіштер, DES, протон тасымалы, тығыздық функционалы теориясы.

A.A. Temirbayeva^{*1}, A. Kyrykbaeva², G.Kabdrakhimova¹

¹*Institute of Physics and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian*

National University, Astana, Kazakhstan

²*Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Abai Kazakh*

National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: assem.zkgmu@gmail.com, asemkyrykbaeva@gmail.com,
gaukharkd@gmail.com)

**Theoretical review of proton transport in MOF-5/polymer/deep eutectic
solvent composite membranes: structure–property relationships**

Abstract. Proton exchange membranes (PEMs) are key components of fuel cells; however, their performance is often limited by reduced proton conductivity under low-humidity and elevated-temperature conditions. In the present review-theoretical study, recent advances in proton transport within MOF-5/polymer/deep eutectic solvent (DES) composite systems are analyzed, with particular emphasis on results obtained using density functional theory (DFT) and molecular dynamics (MD) methods. It is shown that the combined integration of MOF structures, polymer matrices, and DES promotes the formation of interconnected hydrogen-bond networks, redistribution of electron density, and reduction of proton migration energy barriers. Reported studies indicate that MOF-5 nanochannels can facilitate directed proton

transport, whereas DES domains contribute to the stability of proton-conducting pathways under restricted hydration conditions. The literature analysis demonstrates that proton conductivity in MOF-polymer-DES systems is governed by the cooperative interplay of interfacial effects, hydrogen-bond network dynamics, and confinement within porous structures. The presented findings provide a modern understanding of multichannel proton transport mechanisms and may serve as a foundation for the rational design of next-generation PEMs with improved thermal stability and resistance to dehydration.

Keywords: proton exchange membranes, MOF-5, deep eutectic solvents, DES, proton transport, density functional theory.

References

1. Kreuer, K. D., Proton conductivity: Materials and applications. *Chem. Mater.* 8, 610–641 (1996). <https://doi.org/10.1021/cm950192a>.
2. Mauritz, K. A., Moore, R. B., State of understanding of Nafion. *Chem. Rev.* 104, 4535–4586 (2004). <https://doi.org/10.1021/cr0207123>
3. Zawodzinski, T. A. et al., Water uptake by Nafion. *J. Electrochem. Soc.* 140, 1041–1047 (1993). <https://doi.org/10.1149/1.2056194>
4. Li, Q., He, R., Jensen, J. O., Bjerrum, N. J., Approaches and recent development of PEM. *Chem. Mater.* 15, 4896–4915 (2003). <https://doi.org/10.1021/cm0310519>
5. Hickner, M. A., Ion-containing polymers. *Mater. Today* 13, 34–41 (2010).
6. Kusoglu, A., Weber, A. Z., New insights into Nafion. *Chem. Rev.* 117, 987–1104 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00159>
7. Furukawa, H., Cordova, K. E., O’Keeffe, M., Yaghi, O. M., Chemistry of MOFs. *Science* 341, 1230444 (2013). <https://doi.org/10.1126/science.1230444>
8. Li, J. R.; Kuppler, R. J.; Zhou, H. C., MOFs for gas storage. *Chem. Soc. Rev.* 38, 1477–1504 (2009). <https://doi.org/10.1039/B802426j>
9. Rowsell, J. L. C., Yaghi, O. M., MOFs: a new class. *Microporous Mesoporous Mater.* 73, 3–14 (2004). <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2004.03.034>
10. Férey, G., Hybrid porous solids. *Chem. Soc. Rev.* 37, 191–214 (2008). <https://doi.org/10.1039/B618320B>
11. Kitagawa, S., Kitaura, R., Noro, S., Functional porous coordination polymers. *Angew. Chem. Int. Ed.* 43, 2334–2375 (2004). <https://doi.org/10.1002/anie.200300610>
12. Taylor, J. M. et al., Proton conduction in MOFs. *J. Am. Chem. Soc.* 132, 14055–14057 (2010). <https://doi.org/10.1021/ja104356t>
13. Horike, S. et al., Proton conduction in porous materials. *Nat. Chem.* 1, 695–704 (2009). <https://doi.org/10.1021/ar3001719>
14. Yamada, T. et al., Proton-conductive MOFs. *J. Am. Chem. Soc.* 133, 12366–12369 (2011). <https://doi.org/10.1039/C3CS60053E>
15. Shigematsu, A. et al., Proton conductivity in MOF frameworks. *J. Am. Chem. Soc.* 133, 2034–2036 (2011). <https://doi.org/10.1021/ja1091436>
16. Abbott, A. P. et al., Deep eutectic solvents formed between choline chloride and urea. *Chem. Commun.*, 70–71 (2003). <https://doi.org/10.1039/B210714G>
17. Smith, E. L., Abbott, A. P., Ryder, K. S., Deep eutectic solvents review. *Chem. Rev.* 114, 11060–11082 (2014). <https://doi.org/10.1021/cr300162p>
18. Zhang, Q.; De Oliveira Vigier, K.; Royer, S.; Jérôme, F. DES overview. *Chem. Soc. Rev.* 41, 7108–7146 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2CS35178A>
19. Francisco, M., van den Bruinhorst, A., Kroon, M. C., DES fundamentals. *Angew. Chem. Int. Ed.* 52, 3074–3085 (2013). <https://doi.org/10.1002/anie.201207548>
20. Dai, Y. et al., Natural DES. *Anal. Chim. Acta* 766, 61–68 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.aca.2012.12.019>
21. Kreuer, K. D., Proton conductivity mechanisms. *Solid State Ionics* 97, 1–15 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(97\)00054-0](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(97)00054-0)
22. Agmon, N., Grotthuss mechanism. *Chem. Phys. Lett.* 244, 456–462 (1995). [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(95\)00905-J](https://doi.org/10.1016/0009-2614(95)00905-J)
23. Marx, D., Tuckerman, M. E., Hutter, J., Parrinello, M., Proton transfer simulation. *Nature* 397, 601–604 (1999). <https://doi.org/10.1038/17579>

24. Tuckerman, M. E. et al., Ab initio MD proton transfer. *J. Phys. Chem. B* 106, 9533–9541 (2002). <https://doi.org/10.1126/science.275.5301.817>
25. Spohr, E., Proton transport modeling. *Electrochim. Acta* 50, 5139–5145 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2005.03.009>
26. Devanathan, R., Recent developments in proton exchange membranes. *Energy Environ. Sci.* 1, 101–119 (2008). <https://doi.org/10.1039/B809723P>
27. Paddison, S. J., Proton conduction modeling. *Annu. Rev. Mater. Res.* 33, 289–319 (2003). <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.33.022702.154551>
28. Eikerling, M., Kornyshev, A., Proton transport in membranes. *J. Electroanal. Chem.* 453, 89–106 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0022-0728\(98\)00121-4](https://doi.org/10.1016/S0022-0728(98)00121-4)
29. He, R. et al., High temperature PEM. *J. Membr. Sci.* 226, 169–184 (2003). <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2003.09.019>
30. Li, Q. et al., Phosphoric acid doped membranes. *J. Membr. Sci.* 347, 260–270 (2009). <https://doi.org/10.1002/fuce.200400018>
31. Jiang, R. et al., MOF-based membranes. *Adv. Mater.* 31, 1805127 (2019).
32. Xu, H. et al., MOF membranes review. *Chem. Rev.* 120, 803–898 (2020).
33. Zhang, H., Shen, P. K. PEM fuel cells. *Chem. Rev.* 112, 2780–2832 (2012). <https://doi.org/10.1021/cr200035s>
34. Kusoglu, A., Weber, A. Z., Nafion revisited. *Chem. Rev.* 117, 987–1104 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00159>
35. Chen, Y. et al., Composite PEM membranes. *J. Membr. Sci.* 476, 327–336 (2015).
36. Li, X. et al., Hybrid membranes review. *Prog. Polym. Sci.* 34, 449–477 (2009).
37. Zhang, J. et al., PEMFC technology. *J. Power Sources* 160, 872–891 (2006). <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.02.074>
38. Wang, Y. et al., PEM fuel cells overview. *Appl. Energy* 88, 981–1007 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2010.09.030>
39. Borup, R. et al., PEM durability. *Chem. Rev.* 107, 3904–3951 (2007). <https://doi.org/10.1021/cr050182l>
40. Steele, B. C. H., Heinzel, A., Fuel cell technologies. *Nature* 414, 345–352 (2001). <https://doi.org/10.1038/35104620>
41. Kreuer, K. D., On the complexity of proton transport. *Solid State Ionics* 136–137, 149–160 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0167-2738\(00\)00329-8](https://doi.org/10.1016/S0167-2738(00)00329-8)
42. Pivovar, B. S., Nafion transport properties. *J. Electrochem. Soc.* 152, A53–A60 (2005). <https://doi.org/10.1149/1.1832721>
43. Park, H. B. et al., Polymer membranes for energy. *Science* 356, eaab0530 (2017). <https://doi.org/10.1126/science.aab0530>
44. Logadottir, A. et al., Hydrogen reactions modeling. *J. Catal.* 197, 229–231 (2001). <https://doi.org/10.1006/jcat.2000.3075>
45. Kresse, G., Furthmüller, J., DFT methods. *Phys. Rev. B* 54, 11169–11186 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
46. Becke, A. D., Density-functional thermochemistry. *J. Chem. Phys.* 98, 5648–5652 (1993). <https://doi.org/10.1063/1.464913>
47. Grimme, S., D3 dispersion correction. *J. Chem. Phys.* 132, 154104 (2010). <https://doi.org/10.1063/1.3382344>
48. Frenkel, D., Smit, B., *Understanding Molecular Simulation*; Academic Press, (2002).
49. Allen, M. P.; Tildesley, D. J. *Computer Simulation of Liquids*; Oxford, (1987).
50. Rapaport, D. C., *The Art of Molecular Dynamics Simulation*; Cambridge, (2004).
51. Plimpton, S., Fast MD algorithms. *J. Comput. Phys.* 117, 1–19 (1995). <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
52. Van der Spoel, D. et al., GROMACS software. *J. Comput. Chem.* 26, 1701–1718 (2005). <https://doi.org/10.1002/jcc.20291>
53. Jorgensen, W. L. et al., OPLS force field. *J. Am. Chem. Soc.* 118, 11225–11236 (1996). <https://doi.org/10.1021/ja9621760>
54. MacKerell, A. D. et al., CHARMM force field. *J. Phys. Chem. B* 102, 3586–3616 (1998). <https://doi.org/10.1021/jp973084f>
55. Marrink, S. J. et al., MARTINI force field. *J. Phys. Chem. B* 111, 7812–7824 (2007). <https://doi.org/10.1021/jp071097f>
56. Tuckerman, M. E., *Statistical mechanics MD*. Oxford, (2010).
57. Kreuer, K. D., Proton conduction fundamentals. *Solid State Ionics* 136, 149–160 (2000).
58. Agmon, N., Proton mobility. *Chem. Phys. Lett.* 244, 456–462 (1995).

59. Marx, D., Proton transfer simulation. Nature 397, 601–604 (1999).
60. Devanathan, R., Proton exchange membranes review. Energy Environ. Sci. 1, 101–119 (2008).

Сведения об авторах:

Темирбаева А.А. - автор для корреспонденции, докторант 2 курса по специальности «Физика» Института физико-технических наук Евразийского Национального университета имени Л.Н.Гумилева, 010000 г.Астана, ул.Кажымукана 13.

Қырықбаева А. - Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, факультет математики, физики и информатики, 050010 г.Алматы, пр.Достык 13.

Қабдрахимова Г. - Институт физико-технических наук Евразийского Национального университета имени Л.Н.Гумилева, 010000 г.Астана, ул.Кажымукана 13.

Темирбаева А.А. – хат-хабар авторы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті Физика-техникалық ғылымдар институтының «Физика» білім беру бағдарламасы бойынша 2-курс докторанты, 010000, Астана қ., Қажымұқан көшесі, 13.

Қырықбаева А. – Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Математика, физика және информатика факультеті, 050010, Алматы қ., Достық даңғылы, 13.

Қабдрахимова Г. – Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті Физика-техникалық ғылымдар институты, 010000, Астана қ., Қажымұқан көшесі, 13.

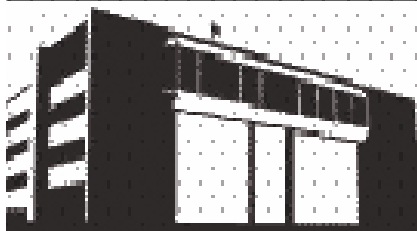
Temirbayeva A.A. – Corresponding Author, 2nd-year PhD student in Physics, Institute of Physics and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana 010000, Kazakhstan.

Kyrykbayeva A. – Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Abai Kazakh National Pedagogical University, 13 Dostyk Avenue, Almaty 050010, Kazakhstan.

Kabdrakhimova G. – Institute of Physics and Technical Sciences, L.N. Gumilyov Eurasian National University, 13 Kazhymukan Street, Astana 010000, 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/>).



DFT исследование гибридной структуры $\text{BaTiO}_3/\text{g-C}_3\text{N}_4$

Байкадамова Л.С.¹, Каптагай Г.А.*¹, Копенбаева А.С.¹,
Далелханқызы А.¹, Койлык Н.О.², Сандибаева Н.А.¹, Муратбек Т.¹

¹ Казахский национальный женский педагогический университет, Алматы, Казахстан

² Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Алматы, Казахстан

E-mail: bajkadamovalaura@gmail.com, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz, kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz,
dalelkhankyzy.d@gmail.com, nurgali.koilyk@mail.ru, nazirasandibaeva@gmail.com, muratbektursyngull@gmail

Аннотация. В последние десятилетия графитовый нитрид углерода ($\text{g-C}_3\text{N}_4$), являющийся биметаллическим полимерным органическим полупроводником с три-*s*-триазиновыми звеньями, за счет оптимальных фотокаталитических свойств и уникальных характеристик, таких как подходящая зонная структура, активность поглощения видимого света и высокая химическая и термическая стабильность, является перспективной темой для исследований. Однако фотокаталитическая эффективность чистого $\text{g-C}_3\text{N}_4$ из-за высокой скорости рекомбинации фотогенерированных зарядов, недостаточного поглощения света и малой удельной площади поверхности ограничивает его применение в фотокаталитических системах. Комбинация графитового нитрида углерода с перовскитами дает хорошую возможность скорректировать эти недостатки. В данном исследовании рассматривалось теоретическое моделирование гибридной структуры $\text{g-C}_3\text{N}_4/\text{BaTiO}_3$. Из кубической фазы титаната бария была создана (100) поверхность. Для (100) поверхностей BaTiO_3 было выявлено, что более термодинамически выгодным является TiO_2 -терминированная поверхность. Исследовался процесс релаксации гибридной структуры. Разработанный интерфейс является термодинамической стабильной, что дает предпосылки для дальнейшего его применения для фотогенерации энергии в различных процессах на основе окислительно-восстановительных реакций. Расчетами выявленная термодинамическую стабильность нанокompозита $\text{BaTiO}_3/\text{g-C}_3\text{N}_4$ можно объяснить взаимодействием наночастиц BaTiO_3 с $\text{g-C}_3\text{N}_4$ через связь Ti-N , уменьшением ширины запрещенной зоны за счет введения гибридных состояний, приводящих к увеличению поглощения в видимом диапазоне, и большой площадью поверхности, которая обеспечивает больше активных центров для эффективного поглощения света.

Ключевые слова: Графитовый нитрид углерода ($\text{g-C}_3\text{N}_4$), интерфейс, гибридная структура, низкоразмерная структура, гетероструктура, нанокompозит.

Поступила 28.05.2026. После доработки 8.06.2026. Принята к печати 9.06.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

*автор для корреспонденции

Введение

Графитовый нитрид углерода (g-C₃N₄), представляющий собой одноатомный слой атомов углерода и азота со структурой гексогональной решетки, продемонстрировал исключительные физические, химические, оптические и механические свойства. Кроме того, g-C₃N₄ состоит из распространенных в земле элементов углерода и азота, а дешевизна исходных прекурсоров делает его перспективным фотокаталитическим материалом для различных применений, таких как генерация энергии [1–3], сенсоры [4] и топливные элементы [5], а также для очистки окружающей среды [6]. Ширина запрещенной зоны g-C₃N₄ в пределах 2,4–2,8 эВ, и поэтому он способен поглощать излучение видимого света [7]. Однако фотокаталитическую эффективность чистого g-C₃N₄ ограничивает несколько факторов [8]. В связи с этим исследователи в последнее время предпринимали различные попытки устранить эти проблемы. Для повышения его фотокаталитической активности были применены различные стратегии, такие как синтез мезопористого g-C₃N₄ [9], синтез двумерных нанолитов [10], сочетание с проводящими материалами [11], формирование гетероструктур с другими полупроводниковыми материалами [12–13] и синтез материалов, подобных нитриду углерода [14].

За последнее десятилетие низкоразмерные нанокompозитные материалы, такие как нитрид углерода, графен и нитрид бора получили значительное развитие в исследованиях разложения загрязняющих веществ, расщепления воды, а также фотосинтеза [1,2]. Нитрид углерода в последние десятилетия стал предметом интенсивных исследований благодаря своей уникальной электронной структуре, которая важна для практического применения в нанoeлектронике.

g-C₃N₄ состоит из двумерных слоев с субъединицами три-*s*-триазина, соединенными через плоские третичные аминогруппы в слое. Важно отметить, что малая величина запрещенной зоны g-C₃N₄ является предпосылкой его применения в качестве фотокатализатора, активным в видимом свете, для фотохимических реакций и преобразования солнечной энергии [11], таких как расщепление воды [12,13], минерализация органических загрязнителей [14] и разложение CO₂. [15] Тем не менее, чистый g-C₃N₄ все еще не соответствует требованиям применения в реальных практических приложениях из-за высокой скорости рекомбинации фотогенерированных электронно-дырочных пар [16]. Было предпринято множество усилий для повышения фотокаталитической активности g-C₃N₄, таких как легирование металлами/неметаллами [17,18], наноструктурирование [19] и его комбинирование с другими материалами [20]. В качестве одной из эффективных стратегий повышения разделения и переноса фотогенерированных электронно-дырочных пар является комбинация полупроводником. Чжао и др. успешно получили композиты CdMoO₄/g-C₃N₄ [21], которые показали в 4,8 раза более высокую скорость преобразования CO₂, чем g-C₃N₄. Хе и др. синтезировали фотокатализатор ZnO/g-C₃N₄ [22], который показал в 4,9 раза более высокую скорость фотокаталитического восстановления CO₂, чем чистый g-C₃N₄. Ши и др. сообщили что в композитах с пористыми TiO₂/g-C₃N₄ [23] N-TiO₂ действует как ловушка для электронов, что приводит к более высокой фотокаталитической активности выделения H₂. Вышеприведенные результаты работ показывают, что сочетание полупроводников может быть подходящим вариантом для улучшения фотокаталитической активности g-C₃N₄. В последнее время, благодаря своим превосходным диэлектрическим, ферроэлектрическим и пьезоэлектрическим свойствам, титанат бария (BaTiO₃) признан перспективным материалом для использования в оптоэлектронных устройствах. Как ферроэлектрический материал, BaTiO₃ обладает спонтанной поляризацией благодаря асимметрии кристаллической решетки, что позволяет проявлять особые свойства в фотохимии. Было высказано предположение, что дипольный момент полярной молекулы будет взаимодействовать с поляризацией сегнетоэлектрических доменов, тем самым уменьшая энергию, необходимую для разрыва связи. Однако BaTiO₃ с шириной запрещенной зоны 3,0–3,3 эВ, как известно, недостаточно взаимодействует с видимым светом, что ограничивает его перспективные применения в фотокатализе. Все исследования сосредоточены на модификации энергетической зонной структуры, что должно способствовать явному красному сдвигу в сторону видимого света. Однако существует лишь несколько исследований о синтезе и применении нанокompозитов (100) BaTiO₃/g-C₃N₄.

Разработанная гибридная структура может решить проблемы, связанные с разделением и регенерацией носителей тока в процессе фотокатализа. Нанокompозиты на основе g-CN и различных перовскитов обладают рядом преимуществ для процессов разложения:

1. Повышенная фотокаталитическая активность. Нанокompозиты, состоящие из g-C₃N₄ и различных перовскитов демонстрируют значительно улучшенную фотокаталитическую активность по сравнению с его отдельными компонентами [23–25]. Повышение активности приводит к более эффективному разложению загрязняющих веществ и органических соединений.

2. Поглощение видимого света. Способность нанокмозитов на основе графитового нитрида углерода и различных перовскитов поглощать видимый свет, обусловленная присутствием $g\text{-C}_3\text{N}_4$, расширяет спектр света, доступного для разложения. Это преимущество особенно важно, поскольку видимый свет более распространен в солнечном свете, в отличие от ультрафиолетового излучения.

3. Стабильность и возможность повторного использования. Нанокмозиты демонстрируют замечательную стабильность и могут быть легко отделены от реакционной смеси после разложения. Эта характеристика позволяет использовать их повторно в последующих процессах разложения, тем самым снижая потребность в дополнительных катализаторах и минимизируя образование отходов.

Таким образом нанокмозиты $g\text{-C}_3\text{N}_4$ /перовскит могут эффективно использоваться в различных процессах разложения, таких как очистка сточных вод, очистка воздуха и рекультивация почвы [26,27]. Их универсальность делает их пригодными для широкого спектра экологических применений. В целом, нанокмозиты обладают рядом существенных преимуществ, включая повышенную фотокаталитическую активность, поглощение видимого света, синергетический эффект, стабильность, возможность многократного использования и широкую область применения. Таким образом прогнозируется что разработанный нанокмозит $g\text{-C}_3\text{N}_4$ /ВТО аналогично структурам C_3N_4 /перовскит [28-33] будет перспективным катализатором для широкого спектра процессов разложения.

Методы исследования

Все расчеты из первых принципов выполнены на основе DFT, реализованной в коде VASP.6.5.0 [34, 35]. Моделирование проводилось с использованием энергии отсечки 520 эВ. Разбиение обратного пространства, полученного с помощью схемы Монхорста-Пака [36] для $\text{BaTiO}_3/g\text{-C}_3\text{N}_4$ гибридной структуры суперячейки было выбрано в виде сетки $4 \times 2 \times 2$. Структурные релаксации проводились на основе функционала обменно-корреляционного взаимодействия Пердью-Берка-Эрнхофа (PBE) [37] в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) до тех пор, пока остаточные силы на всех атомах не стали меньше $0,01 \text{ эВ/\text{Å}}$. Для постобработки данных, рассчитанных с помощью пакета VASP.6.5.0, применялся программный код VASPKIT [38] и Vesta 3.5.5 [39]. Описание потенциалов примененных в работе приведена в таблице 1.

Таблица 1. Описание PAW потенциалов ионов.

Элемент	Ecut, эВ	Количество валентных электронов	конфигурация
Ba	187.210	10	$5s^2 6s^2 5p^6$
Ti_pv	222.335	12	$3p^6 4s^1 3d^6$
O	400	6	$2s^2 p^4$
C	350	4	$1s^2 2s^2 2p^2$
N	305	5	$1s^2 2s^2 2p^3$

Результаты исследования и обсуждение

Для описания (100) поверхности была рассмотрена симметричная модель атомарной плиты конечной толщины по оси z и расширенной (6×2) по осям x и y и содержащая нечетное (5, 7, 9 и 11) количество атомарных слоев. Поверхности BaTiO_3 (100) моделировались симметричными относительно плоскости зеркала пластинами, состоящими из чередующихся слоев BaO и TiO_2 соответственно. Одна из этих пластин завершалась плоскостями TiO_2 для кристалла BaTiO_3 (см. рис. 1а). Вторая пластина завершалась пластинами BaO (см. рис. 1б). Эти плиты нестехиометричны и симметричны вдоль нормальной плоскости поверхности. Эти две термации (BaO и TiO_2) являются единственными возможными плоскими и плотными поверхностями (100) для структуры решетки перовскита BaTiO_3 . При подборе оптимальной толщины пластины в качестве сравнительного критерия была выбрана поверхностная энергия. Для этой цели мы сравнивали результаты расчетов для пластин с различным количеством атомарных слоев. При изменении числа слоев от 5 к 6, разница в энергии поверхности составила менее $0.01 \text{ эВ/\text{Å}^2}$ (менее 1%), что послужило критерием для выбора 5-слойной пластины.

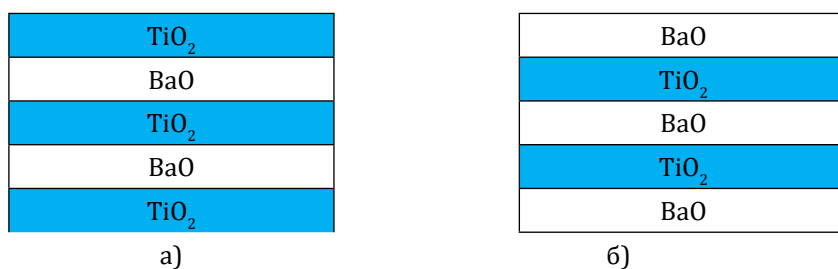


Рисунок 1. Изображение BaTiO₃ (100) пластины в виде чередования слоев TiO₂ и BaO: а- TiO₂-терминированная и б- BaO-терминированная поверхность.

(100) пластина титаната бария была сконструирована двумя способами в зависимости от терминирующего слоя на поверхностном слое, как указана на 1 рисунке. В соответствии содержанию ионов атомарные слои TiO₂ и BaO образуют TiO₂-терминированная (1,а-рисунок) и BaO-терминированная (1,б-рисунок) (100) плоскость BaTiO₃.

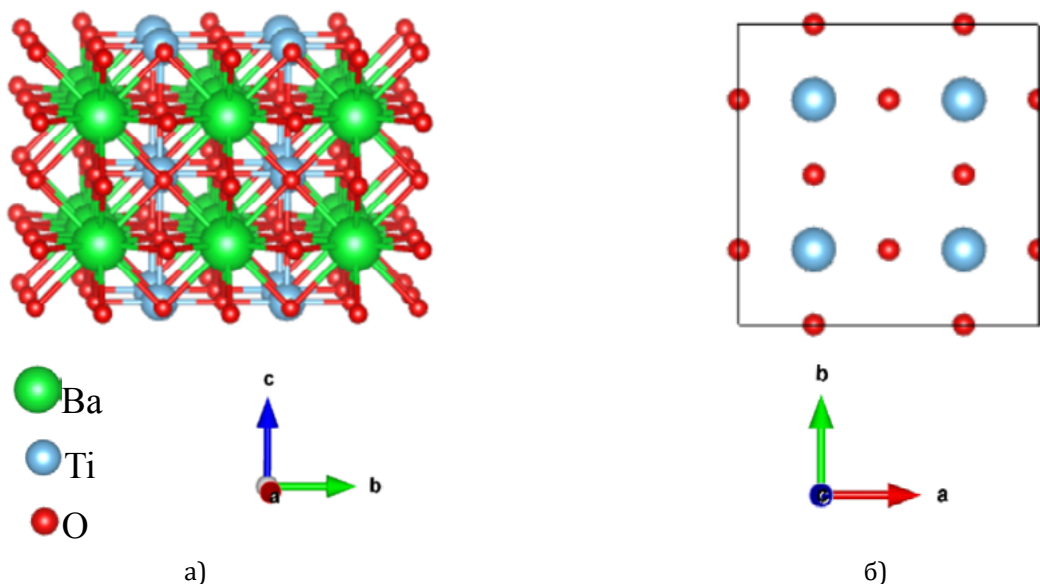
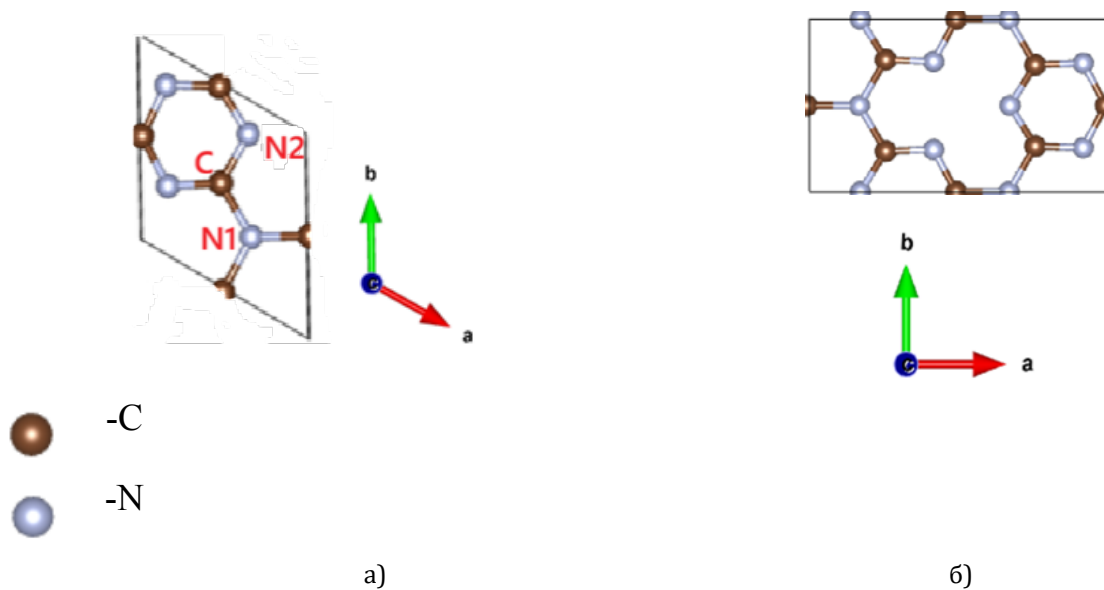


Рисунок 2. TiO₂-терминированная BaTiO₃ (100) пластина (a – вид сбоку; в - вид сверху)

Энергия образования TiO₂- и BaO-терминированной (100) плоскостей BaTiO₃ составила 1,12 эВ и 1,24 эВ, соответственно. Данные значения поверхностных энергий были чуть больше значений аналогичных величин из работы [40]. Для дальнейших расчетов была выбрана TiO₂-терминированная (100) плоскость BaTiO₃, которая является более стабильной (2 рисунок).

Во всех системах величина вакуумного промежутка составила 25 Å для предотвращения взаимодействия образов ячеек пластин, связанных с использованием периодических граничных условий. В g-C₃N₄ атом азота является не эквивалентным, атомы углерода эквивалентны. Существуют два типа этих атомов — N1 и N2. Как показано на рисунке 3, атомы N1 расположены в центре равносторонних треугольников, в вершинах которых расположены атомы углерода. Длина связи C-N1 1,46201 Å, C-N2 1,32712 Å. Атомы N2 не компланарны с тремя атомами, которые полностью их окружают, N1-N1 и N2-N2. Расстояние между ними составляет 2,46 и 2,69 Å, соответственно.

Для C_3N_4 на титанате бария выполнялась реконструкция $\sqrt{3} \times 5\sqrt{3}R30$ (3 рисунок), что соответствует 1×5 ячейкам нитрида углерода.



**Рисунок 3. $\sqrt{3} \times \sqrt{3}R30$ реконструкция C_3N_4 .
а-примитивная гексогональная ячейка; б-ортогональная ячейка.**

Для соответствия ячеек структур перовскита и нитрида углерода было выбрано 12 поверхностных ячеек титаната бария (2×6). Параметр ячейки ВТО $a=b=3,94513 \text{ \AA}$, параметр ячейки графитового нитрида углерода $a=8,28688 \text{ \AA}$, $b=4,78443 \text{ \AA}$. Таким образом, несоответствие постоянных решетки при использовании этой модели составляет порядка 2,5%. Гибридная структура образовалась из 296 атомов. Уменьшить напряжение в системе позволяет одновременное растяжение $g-C_3N_4$ и сжатие $BaTiO_3$.

Рассчитанная плотность состояний (100) $BaTiO_3$ представлена на рисунке 4.

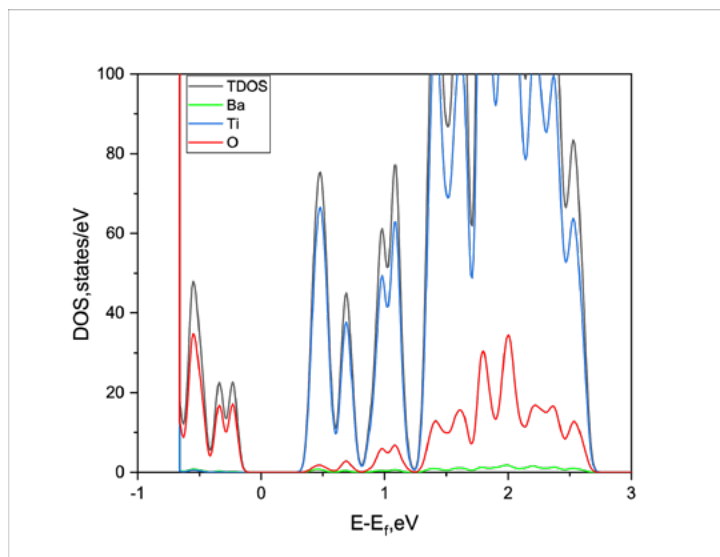


Рисунок 4. Электронный DOS (плотность состояний) (100) поверхности $BaTiO_3$. Уровень Ферми приведен к нулю

Как видно из рис.4, величина рассчитанной с функционалом PBE оптической ширины запрещенной зоны $BaTiO_3$ 2,5 эВ хорошо согласуется с результатами работы [28], в которой аналогичное значение составило 2,7 эВ. Далее была смоделирована интерфейс гибридной структуры ВТО/ C_3N_4 (смотрите 5 рисунок).

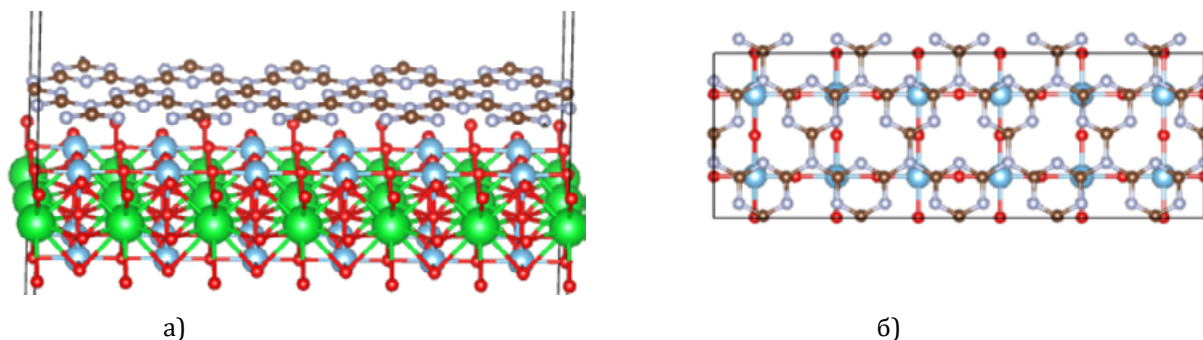


Рисунок 5. Смоделированный начальный интерфейс между графитовым нитридом углерода и BaTiO₃ (100) поверхностью. А - вид сбоку; б - вид сверху.

В таблице 2 приведены абсолютные смещения ионов по трем направлениям.

(Å) атомов 1-го и 2-го слоев (100) поверхности BaTiO₃ с C₃N₄ от начального положения, из которой видно, что атомы (100) BaTiO₃ релаксируют довольно слабо. Третий слой не релаксируется, оставаясь в начальном положении.

Таблица 2. Расчетная релаксация атомов верхних двух слоев TiO₂-терминированной (100) BaTiO₃ поверхности. Положительные (отрицательные) значения относятся к смещениям в направлении наружу (внутри) поверхности.

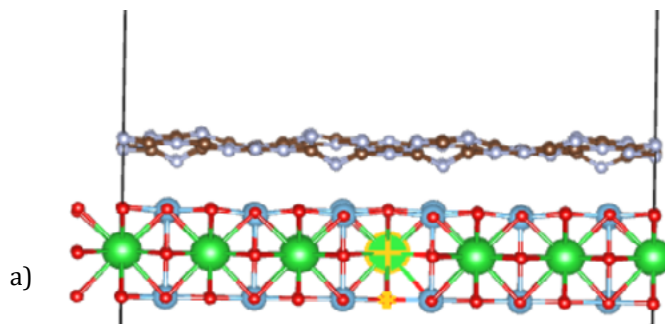
слой	ион	Абсолютные смещения, Å		
		Δx	Δy	Δz
1	Ti	0,01	0	-0,005
	O (1)	-0,01	0	-0,008
	O (2)	-0,008	0	-0,002
2	Ba	0,005	0	0,005
	O	0,005	0	-0,03

Из анализа релаксации геометрии атомарной структуры следует, что боковое смещение атомов Ti и O (1) решетки больше, чем вдоль (100) направления (вдоль оси с). Наиболее большие смещения наблюдаются для атомов Ti и O(1) первого слоя, которые равны 0,01 Å и -0,01 Å. Для всех атомов двух слоев по направлению оси у смещение не наблюдается.

Энергия адгезии интерфейса ВТО/С₃Н₄ была рассчитана по следующему выражению:

$$E_{ад} = E_{гетеро} - E_{нит.угл.} - E_{ВТО(100)} \quad (1)$$

где $E_{гетеро}$, $E_{нит.угл.}$, $E_{ВТО(100)}$ представляет полную энергию релаксированного ВТО/С₃Н₄ нанокompозита, чистой пленки g-C₃N₄ и BaTiO₃ (100) поверхности, соответственно. Энергия связи интерфейса на одну поверхностную ячейку графитового нитрида углерода составило ~1 эВ.



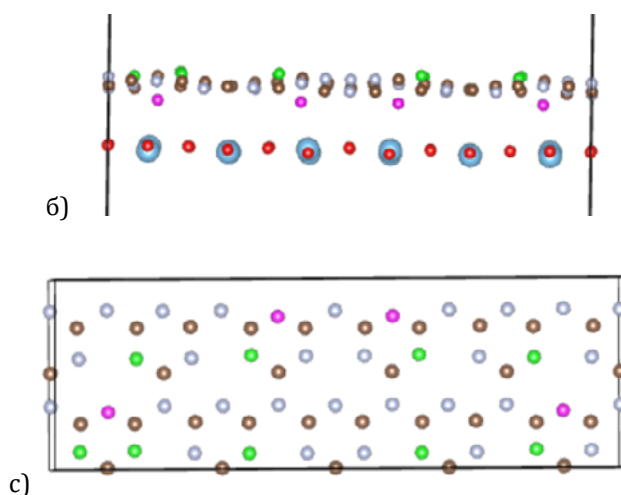


Рисунок 6. Релаксированный интерфейс между графитовым нитридом углерода и BaTiO_3 (100) поверхностью. А - вид сбоку (с связями); б - вид сбоку (без связи), с - вид сверху.

Ковалентно связанные атомы азота релаксируют по направлению к поверхности перовскита, образуя Ti-N связь в $2,35 \text{ \AA}$. Сравнительный анализ смещения атомов на идеальной поверхности ВТО выявил, что вертикальные смещения атомов Ba, Ti и O первого слоя поверхности (100) BaTiO_3 при формировании интерфейса $\text{BaTiO}_3/\text{C}_3\text{N}_4$ составляют $0,01 \text{ \AA}$ в направлении наружу. Смещения в вертикальном направлении ионов следующего слоя не наблюдалось вообще. Ионы слоя C_3N_4 при релаксации смещаются вертикально неоднозначно. Как указано на рисунке 6, ионы азота релаксируют внутрь (выделено розовым), а некоторые ионы смещаются в направлении наружу. При этом замечено, что направление смещения для ионов C в интерфейсном слое происходит к поверхности. За счет смещения ионов слоя C_3N_4 в двух направлениях образуется волнистый слой. Было выявлено, что азоты образуют ковалентную связь с подложкой. Энергия связи компенсирует упругое напряжение на границе раздела, что делает ковалентный механизм превосходящим ван-дер-ваальсовскую связь. Предполагается, что связь с подложкой устраняет электронные особенности нитрида углеродного типа из энергетической области вокруг уровня Ферми.

Заключение

Образование связи Ti-N оказалось весьма выгодным для создания интерфейса $\text{BaTiO}_3/\text{C}_3\text{N}_4$. Тесный контакт или ковалентные связи между двумерными нанокompозитными материалами и полупроводниковыми наночастицами имеют решающее значение для достижения улучшенных фотокаталитических характеристик.

Анализ литературных данных показывает, что большинство исследователей приходит к пониманию того, что экономические характеристики катализаторов оказываются зачастую ключевыми при выборе таких систем. Поэтому дальнейшее исследование $\text{BaTiO}_3/\text{C}_3\text{N}_4$ как сравнительно доступный и экономичный материал для процессов на основе окислительно-восстановительных реакций и тестирование для подобных технологических процессов является весьма актуальным. Поскольку катализаторные материалы имеют большое значение для многих высокоэффективных способов преобразования энергии, разработка и создание стабильной гибридной структуры $\text{BaTiO}_3/\text{C}_3\text{N}_4$ делает хорошие предпосылки ее оптимального применения.

Вклад авторов

Байкадамова Л., Каптагай Г. – подготовка текста статьи и списка литературы, обработка расчетных данных.

Копенбаева А., Далелханқызы А. – руководство исследованием, утверждение окончательной версии статьи и согласование её публикации.

Сандибаева Н. – проведение исследований, подготовка входных данных для DFT расчетов, организация и контроль сбора данных в ходе исследований.

Койлык Н. – участие в разработке концепции исследования.

Муратбек Т. – выполнение расчетов, представленных в статье, получение результатов в виде выражений и формул, подготовка сопроводительного письма и направление его в редакцию.

Список литературы

1. Y. Zhang, J. Liu, G. Wu, W. Chen, Investigation of photo-electrochemical response of iron oxide/mixed-phase titanium oxide heterojunction toward possible solar energy conversion, *Nanoscale* 4, 5300-5303 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2NR30948C>
2. G. Zhang, Z.-A. Lan, X. Wang, Single-atom heterogeneous photocatalysts, *Chem. Sci.* 8, 5261-5274 (2017). <https://doi.org/10.1039/C7SC01747B>
3. F. Cheng, H. Yin, and Q. Xiang, Engineering of g-C₃N₄ for photocatalytic hydrogen production: A review, *Appl. Surf. Sci.* 391, 432-439 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.06.169>
4. S. Barman, M. Sadhukhan, Graphitic carbon nitride (g-C₃N₄) in photocatalytic hydrogen production, *J. Mater. Chem.* 22, 21832-21837 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2JM35501A>
5. Y. Zheng, J. Liu, J. Liang, M. Jaroniec, S. Z. Qiao, Efficient synthesis of monolayer carbon nitride 2D nanosheet with tunable concentration and enhanced visible-light photocatalytic activities, *Energy Environ. Sci.* 5, 6717-6731 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2EE03479D>
6. H. Wang, X. Yuan, Y. Wu, G. Zeng, X. Chen, L. Leng, H. Li, Synthesis and applications of novel graphitic carbon nitride/metal-organic frameworks mesoporous photocatalyst for dyes removal, *Applied Catalysis B: Environmental*, 174-175, pp. 445-454 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.03.037>
7. Z. Tong, D. Yang, J. Shi, Y. Nan, Y. Sun, Z. Jiang, Three-Dimensional Porous Aerogel Constructed by g-C₃N₄ and Graphene Oxide Nanosheets with Excellent Visible-Light Photocatalytic Performance, *ACS Applied Materials Interfaces*, 7, pp. 25693-25701 (2015). <https://doi.org/10.1021/acsami.5b09503>
8. S. Guo, Z. Deng, M. Li, B. Jiang, C. Tian, Q. Pan, H. Fu, Phosphorus-Doped Carbon Nitride Tubes with a Layered Micro-nanostructure for Enhanced Visible-Light Photocatalytic Hydrogen Evolution, *Angewandte Chemie International Edition*, 55, pp. 1830-1834 (2016). <https://doi.org/10.1002/anie.201508505>
9. L. Shi, L. Liang, F. Wang, M. Liu, S. Zhong, J. Sun, Tetraethylorthosilicate induced preparation of mesoporous graphitic carbon nitride with improved visible light photocatalytic activity, *Catalysis Communications*, 59, pp. 131-135 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2014.10.014>
10. Q. Lin, L. Li, S. Liang, M. Liu, J. Bi, L. Wu, Efficient synthesis of monolayer carbon nitride 2D nanosheet with tunable concentration and enhanced visible-light photocatalytic activities, *Applied Catalysis B: Environmental*, 163, pp. 135-142 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2014.07.053>
11. Q. Li, N. Zhang, Y. Yang, G. Wang, D. H. L. Ng, High efficiency photocatalysis for pollutant degradation with MoS₂/C₃N₄ heterostructures, *Langmuir*, vol. 30, pp. 8965-8972 (2014). <https://doi.org/10.1021/la502033t>
12. Y. Li, Z. Xia, Q. Yang, L. Wang, Y. Xing, Review on g-C₃N₄-based S-scheme heterojunction photocatalysts, *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 125, pp. 128-144 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2022.02.035>
13. Y. Li, J. Hou, T. Li, Y. Wang, C. Liu, T. Zhou, W. Jiang, D. Wang, G.-B. Che, Tremella-like integrated carbon nitride with polyvinylimine-doped for enhancing photocatalytic degradation and hydrogen evolution performances, *Separation and Purification Technology*, vol. 279, 119766 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.119766>
14. S. Patnaik, D. R. Sahoo, K. M. Parida, Recent advances in anion doped g-C₃N₄ photocatalysts: A review, *Carbon*, vol. 172, pp. 682-711 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.10.073>
15. P. Su, B. Tan, X. Ma, X. Zhang, C. Huang, P. Wang, Z. Tong, G. Li, A. Yadav, Z. Liu, Defective ultra-thin two-dimensional g-C₃N₄ photocatalyst for enhanced photocatalytic H₂ evolution activity, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 581, Pt A, pp. 159-166 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.07.119>
16. Y. Xing, X. Wang, S. Hao, X.-L. Zhang, X. Wang, W. Ma, G. Zhao, X.-J. Xu, Recent advances in the improvement of g-C₃N₄ based photocatalytic materials, *Chinese Chemical Letters*, vol. 32, no. 1, pp. 13-20 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ccllet.2020.11.011>
17. C. Zhu, W. Tian, W. Yang, L. Wang, M. Lu, Y. Yuan, L. Yin, L. Huang, Unravelling intramolecular charge transfer in donor-acceptor structured g-C₃N₄ for superior photocatalytic hydrogen evolution, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 9, no. 2, pp. 1207-1212 (2021). <https://doi.org/10.1039/d0ta08609f>
18. R. Zhang, J. Wen, S. Zhang, Y. Zhai, Tremella-like porous carbon nitride co-doped with oxygen and carbon towards efficient visible-light-driven purification of wastewater, *Separation and Purification Technology*, vol. 257, 117984 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117984>
19. C. Q. Xu, W.-D. Zhang, K. Deguchi, S. Ohki, T. Shimizu, R. Ma, T. Sasaki, Construction of a push-pull system in g-C₃N₄ for efficient photocatalytic hydrogen evolution under visible light, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 8, no. 26, pp. 13299-13310 (2020). <https://doi.org/10.1039/c9ta13513h>

20. H. Dong, X. Zhang, J. Li, P. Zhou, S. Yu, N. Song, C. Liu, G. Che, C. Li, Construction of morphology-controlled nonmetal 2D/3D homojunction towards enhancing photocatalytic activity and mechanism insight, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 263, 118270 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.118270>
21. Y. Huang, D. Li, Z. Fang, R. Chen, B. Luo, W. Shi, Controlling carbon self-doping site of g-C₃N₄ for highly enhanced visible-light-driven hydrogen evolution, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 254, pp. 128-134 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.04.082>
22. E. Grabowska, Selected perovskite oxides: Characterization, preparation and photocatalytic properties – A review, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 186, pp. 97-126 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.12.035>
23. S. Feng and F. Li, Photocatalytic dyes degradation on suspended and cement paste immobilized TiO₂/g-C₃N₄ under simulated solar light, *Journal of Environmental Chemical Engineering*, vol. 9, no. 4, 105488 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105488>
24. M. Rakibuddin, H. Kim & M. E. Khan, Graphite-like carbon nitride (C₃N₄) modified N-doped LaTiO₃ nanocomposite for higher visible light photocatalytic and photo-electrochemical performance, *Appl. Surf. Sci.* 452, 400–412 (2018). https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/2018ApSS..452..400R/doi:10.1016/j.apsusc.2018.05.018
25. A.Kumar, C.Schuerings, S.Kumar, A.Kumar, V.Krishnan, Perovskite-structured CaTiO₃ coupled with g-C₃N₄ as a heterojunction photocatalyst for organic pollutant degradation, *Beilstein J. Nanotechnol.* 9, 671–685 (2018). <https://10.3762/bjnano.9.62>. eCollection 2018
26. S.Kumar, S. Tonda, A.Baruah, B. Kumar, V. Shanker, Synthesis of novel and stable gC₃N₄/N-doped SrTiO₃ hybrid nanocomposites with improved photocurrent and photocatalytic activity under visible light irradiation, *Dalton Trans.* 43, 16105–16114 (2014). <https://doi.org/10.1039/C4DT01076K>
27. P.-S. Konstas, I. Konstantinou, D. Petrakis, T. Albanis, Synthesis, characterization of g-C₃N₄/SrTiO₃ heterojunctions and photocatalytic activity for organic pollutants degradation, *Catalysts* 8, 554 (2018). <https://doi.org/10.3390/catal8110554>
28. R. Konta, R. Ishii, H.Kato, A. Kudo, Photocatalytic activities of noble metal ion doped SrTiO₃ under visible light irradiation, *J. Phys. Chem. B* 108, 8992–8995 (2004). <https://doi.org/10.1002/CHIN.200437021>
29. Y.-Q. Wang, Y. Liu, M.-X. Zhang, F.-F. Min, Electronic structure and visible-light absorption of transition metals (Tm = Cr, Mn, Fe, Co) and Zn-codoped SrTiO₃: A first-principles study, *Chin. Phys. Lett.* 35, 017101 (2018). <https://doi.org/10.1088/0256-307X/35/1/017101>
30. X. Chen et al., A green and facile strategy for preparation of novel and stable Cr-doped SrTiO₃/g-C₃N₄ hybrid nanocomposites with enhanced visible light photocatalytic activity, *J. Alloys Compd.* 647, 456–462 (2015). <https://doi.org/10.3390/catal8110554>
31. M. Ahmadi, M. S. Dorraji, M. H. Rasoulifard, A. R. Amani-Ghadim, The effective role of reduced-graphene oxide in visible light photocatalytic activity of wide band gap SrTiO₃ semiconductor, *Sep. Purif. Technol.* 228, 115771 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.115771>
32. T. S. Natarajan, J. Y. Lee, H. C. Bajaj, W.-K. Jo, R. J. Tayade, Synthesis of multiwall carbon nanotubes/TiO₂ nanotube composites with enhanced photocatalytic decomposition efficiency, *Catal. Today* 282, 13–23 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2016.03.018>
33. R. Hao et al., Template-free preparation of macro/mesoporous g-C₃N₄/TiO₂ heterojunction photocatalysts with enhanced visible light photocatalytic activity, *Appl. Catal. B Environ.* 187, 47–58 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2016.01.026>
34. G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Physical Review B*, Vol. 59, 1758-1775 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
35. G. Kresse, J. Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Physical Review B*, Vol. 54, pp. 11169-11186 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
36. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, Vol. 13, 5188-5192 (1976). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
37. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters*, Vol. 77, 3865-3868 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.386>
38. Manual of VaspKit. Доступно по адресу: <https://vaspkit.com/tutorials.html>
39. Manual of Vesta. Доступно по адресу: <http://jp-minerals.org/vesta/en/doc.html>
40. R.I.Eglitis and D.Vanderbilt, Ab initio calculations of BaTiO₃ and PbTiO₃ (001) and (011) surface structures, *PHYSICAL REVIEW B*, Vol. 76, pp.155439 (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.155439>

Байкадамова Л.С.¹, Қаптағай Г.Ә.^{*1}, Көпенбаева А.С.¹,
Дәлелханқызы А.¹, Қойлық Н.О.², Сандибаева Н.А.¹, Мұратбек Т.¹

¹Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы, Қазақстан

²Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университет, Алматы, Қазақстан

(E-mail: bajkadamovalaura@gmail.com, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz,
kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, dalelkhankyzy.d@gmail.com,
nurgali.koilyk@mail.ru, nazirasandibaeva@gmail.com, muratbektursyngull@gmail)

BaTiO₃/g-C₃N₄ гибриді құрылымын DFT зерттеу

Аңдатпа. Соңғы онжылдықта үш-s-триазин бірлікті биметал полимер органикалық жартылай өткізгіш көміртекті графит нитриді (g-C₃N₄) оңтайлы фотокаталитикалық қасиеттер мен қолайлы аймақтық құрылым, көрінетін жарықты жұту белсенділігі және жоғары химиялық және термиялық тұрақтылық сияқты бірегей сипаттамалар арқылы зерттеу үшін перспективалы тақырып болып табылады. Алайда, таза g-C₃N₄ құрылымының фотокаталитикалық тиімділігі фотогенерацияланған зарядтардың жоғары рекомбинация жылдамдығына, жарықтың жеткіліксіз жұтылуына және бетінің аз меншікті аймағына байланысты оның фотокаталитикалық жүйелерде қолданылуына мүмкіндік бермейді. Графит көміртегі нитридінің перовскиттермен үйлесуі бұл кемшіліктерді түзетуге жақсы мүмкіндік береді. Бұл зерттеу g-C₃N₄/BaTiO₃ гибриді құрылымын теориялық модельдеуді қарастырды.

Барий титанатының кубтық фазасынан (100) беті жасалды. (100) BaTiO₃ беттері үшін TiO₂ –терминацияланған беті термодинамикалық тиімді екендігі анықталды. Гибриді құрылымның релаксация процесі зерттелді. Өзірленген интерфейс термодинамикалық орнықты болып табылады, бұл оны тотығу-тотықсыздану реакцияларына негізделген әртүрлі процестерде энергияны фотогенерациялау үшін одан әрі қолдануға алғышарт болады. BaTiO₃/g-C₃N₄ нанокөмірдің термодинамикалық орнықтылығын BaTiO₃ нанобөлшектерінің g-C₃N₄-пен Ti-N байланысы арқылы өзара әрекеттесуімен, көрінетін диапазонда жұтудың күшеюіне әкелетін гибриделген күйлерді енгізу арқылы жолақ енінің азаюымен және жарықты тиімді жұту үшін көбірек белсенді орталықтарды қамтамасыз ететін үлкен бетінің ауданымен түсіндіруге болады.

Түйін сөздер: Графитті көміртегі нитриді (g-C₃N₄), интерфейс, гибриді құрылым, төмен өлшемді құрылымдар, гетероқұрылым, нанокөмір

Baikadamova L.¹, Kaptagay G.^{*1}, Kopenbaeva A.¹, Dalelkhankyzy A.¹,
Koylyk N.², Sandibaeva N.¹, Muratbek T.¹

¹Kazakh National Women's Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

²Abay Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: bajkadamovalaura@gmail.com, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz,
kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, dalelkhankyzy.d@gmail.com,
nurgali.koilyk@mail.ru, nazirasandibaeva@gmail.com, muratbektursyngull@gmail)

DFT research hybrid structure BaTiO₃/g-C₃N₄

Abstract. In recent decades, carbon graphite nitride (g-C₃N₄), a bimetallic polymer organic semiconductor with tri-s-triazine units, has been a promising research topic due to its optimal photocatalytic properties and unique characteristics such as a suitable band structure, visible light absorption activity, and high chemical and thermal stability. However, the photocatalytic efficiency of pure g-C₃N₄ limits its use in photocatalytic systems due to the high recombination rate of photogenerated charges, insufficient light absorption, and small specific surface area. The combination of graphite carbon nitride with perovskites provides a good opportunity to correct these deficiencies. In this study, the theoretical modeling

of the $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{BaTiO}_3$ hybrid structure was considered. A (100) surface was created from the cubic phase of barium titanate. For (100) BaTiO_3 surfaces, it was found that a TiO_2 -terminated surface is more thermodynamically favorable. The relaxation process of the hybrid structure was investigated. The developed interface is thermodynamically stable, which provides prerequisites for its further application for the photogeneration of energy in various processes based on redox reactions. Thermodynamic stability of the $\text{BaTiO}_3/g\text{-C}_3\text{N}_4$ nanocomposite can be explained by the interaction of BaTiO_3 nanoparticles with $g\text{-C}_3\text{N}_4$ through the Ti-N bond, a decrease in the band gap due to the introduction of hybridized states leading to increased absorption in the visible range, and a large surface area that provides more active sites for effective light absorption.

Keywords: Graphitic carbon nitride ($g\text{-C}_3\text{N}_4$), interface, hybrid structure, low-dimensional structures, heterostructure, nanocomposite

References

1. Y. Zhang, J. Liu, G. Wu, W. Chen, Investigation of photo-electrochemical response of iron oxide/mixed-phase titanium oxide heterojunction toward possible solar energy conversion, *Nanoscale* 4, 5300-5303 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2NR30948C>
2. G. Zhang, Z.-A. Lan, X. Wang, Single-atom heterogeneous photocatalysts, *Chem. Sci.* 8, 5261-5274 (2017). <https://doi.org/10.1039/C7SC01747B>
3. F. Cheng, H. Yin, and Q. Xiang, Engineering of $g\text{-C}_3\text{N}_4$ for photocatalytic hydrogen production: A review, *Appl. Surf. Sci.* 391, 432-439 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.06.169>
4. S. Barman, M. Sadhukhan, Graphitic carbon nitride ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) in photocatalytic hydrogen production, *J. Mater. Chem.* 22, 21832-21837 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2JM35501A>
5. Y. Zheng, J. Liu, J. Liang, M. Jaroniec, S. Z. Qiao, Efficient synthesis of monolayer carbon nitride 2D nanosheet with tunable concentration and enhanced visible-light photocatalytic activities, *Energy Environ. Sci.* 5, 6717-6731 (2012). <https://doi.org/10.1039/C2EE03479D>
6. H. Wang, X. Yuan, Y. Wu, G. Zeng, X. Chen, L. Leng, H. Li, Synthesis and applications of novel graphitic carbon nitride/metal-organic frameworks mesoporous photocatalyst for dyes removal, *Applied Catalysis B: Environmental*, 174-175, pp. 445-454 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.03.037>
7. Z. Tong, D. Yang, J. Shi, Y. Nan, Y. Sun, Z. Jiang, Three-Dimensional Porous Aerogel Constructed by $g\text{-C}_3\text{N}_4$ and Graphene Oxide Nanosheets with Excellent Visible-Light Photocatalytic Performance, *ACS Applied Materials Interfaces*, 7, pp. 25693-25701 (2015). <https://doi.org/10.1021/acsami.5b09503>
8. S. Guo, Z. Deng, M. Li, B. Jiang, C. Tian, Q. Pan, H. Fu, Phosphorus-Doped Carbon Nitride Tubes with a Layered Micro-nanostructure for Enhanced Visible-Light Photocatalytic Hydrogen Evolution, *Angewandte Chemie International Edition*, 55, pp. 1830-1834 (2016). <https://doi.org/10.1002/anie.201508505>
9. L. Shi, L. Liang, F. Wang, M. Liu, S. Zhong, J. Sun, Tetraethylorthosilicate induced preparation of mesoporous graphitic carbon nitride with improved visible light photocatalytic activity, *Catalysis Communications*, 59, pp. 131-135 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.catcom.2014.10.014>
10. Q. Lin, L. Li, S. Liang, M. Liu, J. Bi, L. Wu, Efficient synthesis of monolayer carbon nitride 2D nanosheet with tunable concentration and enhanced visible-light photocatalytic activities, *Applied Catalysis B: Environmental*, 163, pp. 135-142 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2014.07.053>
11. Q. Li, N. Zhang, Y. Yang, G. Wang, D. H. L. Ng, High efficiency photocatalysis for pollutant degradation with $\text{MoS}_2/\text{C}_3\text{N}_4$ heterostructures, *Langmuir*, vol. 30, pp. 8965-8972 (2014). <https://doi.org/10.1021/la502033t>
12. Y. Li, Z. Xia, Q. Yang, L. Wang, Y. Xing, Review on $g\text{-C}_3\text{N}_4$ -based S-scheme heterojunction photocatalysts, *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 125, pp. 128-144 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2022.02.035>
13. Y. Li, J. Hou, T. Li, Y. Wang, C. Liu, T. Zhou, W. Jiang, D. Wang, G.-B. Che, Tremella-like integrated carbon nitride with polyvinylimine-doped for enhancing photocatalytic degradation and hydrogen evolution performances, *Separation and Purification Technology*, vol. 279, 119766 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2021.119766>
14. S. Patnaik, D. R. Sahoo, K. M. Parida, Recent advances in anion doped $g\text{-C}_3\text{N}_4$ photocatalysts: A review, *Carbon*, vol. 172, pp. 682-711 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.10.073>
15. P. Su, B. Tan, X. Ma, X. Zhang, C. Huang, P. Wang, Z. Tong, G. Li, A. Yadav, Z. Liu, Defective ultra-thin two-dimensional $g\text{-C}_3\text{N}_4$ photocatalyst for enhanced photocatalytic H_2 evolution activity, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 581, Pt A, pp. 159-166 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.07.119>

16. Y. Xing, X. Wang, S. Hao, X.-L. Zhang, X. Wang, W. Ma, G. Zhao, X.-J. Xu, Recent advances in the improvement of g-C₃N₄ based photocatalytic materials, *Chinese Chemical Letters*, vol. 32, no. 1, pp. 13-20 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ccllet.2020.11.011>
17. C. Zhu, W. Tian, W. Yang, L. Wang, M. Lu, Y. Yuan, L. Yin, L. Huang, Unravelling intramolecular charge transfer in donor-acceptor structured g-C₃N₄ for superior photocatalytic hydrogen evolution, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 9, no. 2, pp. 1207-1212 (2021). <https://doi.org/10.1039/d0ta08609f>
18. R. Zhang, J. Wen, S. Zhang, Y. Zhai, Tremella-like porous carbon nitride co-doped with oxygen and carbon towards efficient visible-light-driven purification of wastewater, *Separation and Purification Technology*, vol. 257, 117984 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117984>
19. C. Q. Xu, W.-D. Zhang, K. Deguchi, S. Ohki, T. Shimizu, R. Ma, T. Sasaki, Construction of a push-pull system in g-C₃N₄ for efficient photocatalytic hydrogen evolution under visible light, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 8, no. 26, pp. 13299-13310 (2020). <https://doi.org/10.1039/c9ta13513h>
20. H. Dong, X. Zhang, J. Li, P. Zhou, S. Yu, N. Song, C. Liu, G. Che, C. Li, Construction of morphology-controlled nonmetal 2D/3D homojunction towards enhancing photocatalytic activity and mechanism insight, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 263, 118270 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.118270>
21. Y. Huang, D. Li, Z. Fang, R. Chen, B. Luo, W. Shi, Controlling carbon self-doping site of g-C₃N₄ for highly enhanced visible-light-driven hydrogen evolution, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 254, pp. 128-134 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2019.04.082>
22. E. Grabowska, Selected perovskite oxides: Characterization, preparation and photocatalytic properties – A review, *Applied Catalysis B: Environmental*, vol. 186, pp. 97-126 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2015.12.035>
23. S. Feng and F. Li, Photocatalytic dyes degradation on suspended and cement paste immobilized TiO₂/g-C₃N₄ under simulated solar light, *Journal of Environmental Chemical Engineering*, vol. 9, no. 4, 105488 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105488>
24. M. Rakibuddin, H. Kim & M. E. Khan, Graphite-like carbon nitride (C₃N₄) modified N-doped LaTiO₃ nanocomposite for higher visible light photocatalytic and photo-electrochemical performance, *Appl. Surf. Sci.* 452, 400–412 (2018). https://ui.adsabs.harvard.edu/link_gateway/2018ApSS..452..400R/doi:10.1016/j.apsusc.2018.05.018
25. A. Kumar, C. Schuerings, S. Kumar, A. Kumar, V. Krishnan, Perovskite-structured CaTiO₃ coupled with g-C₃N₄ as a heterojunction photocatalyst for organic pollutant degradation, *Beilstein J. Nanotechnol.* 9, 671–685 (2018). <https://10.3762/bjnano.9.62>. eCollection 2018
26. S. Kumar, S. Tonda, A. Baruah, B. Kumar, V. Shanker, Synthesis of novel and stable gC₃N₄/N-doped SrTiO₃ hybrid nanocomposites with improved photocurrent and photocatalytic activity under visible light irradiation, *Dalton Trans.* 43, 16105–16114 (2014). <https://doi.org/10.1039/C4DT01076K>
27. P.-S. Konstas, I. Konstantinou, D. Petrakis, T. Albanis, Synthesis, characterization of g-C₃N₄/SrTiO₃ heterojunctions and photocatalytic activity for organic pollutants degradation, *Catalysts* 8, 554 (2018). <https://doi.org/10.3390/catal8110554>
28. R. Konta, R. Ishii, H. Kato, A. Kudo, Photocatalytic activities of noble metal ion doped SrTiO₃ under visible light irradiation, *J. Phys. Chem. B* 108, 8992–8995 (2004). <https://doi.org/10.1002/CHIN.200437021>
29. Y.-Q. Wang, Y. Liu, M.-X. Zhang, F.-F. Min, Electronic structure and visible-light absorption of transition metals (Tm = Cr, Mn, Fe, Co) and Zn-codoped SrTiO₃: A first-principles study, *Chin. Phys. Lett.* 35, 017101 (2018). <https://doi.org/10.1088/0256-307X/35/1/017101>
30. X. Chen et al., A green and facile strategy for preparation of novel and stable Cr-doped SrTiO₃/g-C₃N₄ hybrid nanocomposites with enhanced visible light photocatalytic activity, *J. Alloys Compd.* 647, 456–462 (2015). <https://doi.org/10.3390/catal8110554>
31. M. Ahmadi, M. S. Dorraji, M. H. Rasoulifard, A. R. Amani-Ghadim, The effective role of reduced-graphene oxide in visible light photocatalytic activity of wide band gap SrTiO₃ semiconductor, *Sep. Purif. Technol.* 228, 115771 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.115771>
32. T. S. Natarajan, J. Y. Lee, H. C. Bajaj, W.-K. Jo, R. J. Tayade, Synthesis of multiwall carbon nanotubes/TiO₂ nanotube composites with enhanced photocatalytic decomposition efficiency, *Catal. Today* 282, 13–23 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2016.03.018>
33. R. Hao et al., Template-free preparation of macro/mesoporous g-C₃N₄/TiO₂ heterojunction photocatalysts with enhanced visible light photocatalytic activity, *Appl. Catal. B Environ.* 187, 47–58 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2016.01.026>

34. G. Kresse, D. Joubert, From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Physical Review B*, Vol. 59, pp. 1758-1775 (1999). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
35. G. Kresse, J. Furthmüller, Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set, *Physical Review B*, Vol. 54, pp. 11169-11186 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
36. H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Physical Review B*, Vol. 13, pp. 5188-5192 (1976). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
37. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Physical Review Letters*, Vol. 77, pp. 3865-3868 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.386>
38. Manual of VaspKit. Available at: <https://vaspkit.com/tutorials.html>
39. Manual of Vesta. Available at: <http://jp-minerals.org/vesta/en/doc.html>
40. R.I.Eglitis and D.Vanderbilt, Ab initio calculations of BaTiO₃ and PbTiO₃ (001) and (011) surface structures, *PHYSICAL REVIEW B*, Vol. 76, pp.155439 (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.155439>

Сведения об авторах:

Байкадамова Л.С. – PhD докторант 3 курса, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, bajkadamovalaura@gmail.com, +7707 151 7909

Қаптағай Г.Ә. – автор для корреспонденции, ассоциированный профессор, PhD, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz, +7778 7888739

Көпенбаева А.С. – старший преподаватель, PhD, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, +7 707 193 3667

Далелханқызы А. – ассоциированный профессор, PhD, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, dalelkhankyzy.d@gmail.com, +7 702 563 1383

Қойлық Н.О. – старший преподаватель, к.ф.-м.н., Казахский национальный педагогический университет имени Абая, Достық, 13, 050000, Алматы, Казахстан, nurgali.koilyk@mail.ru, +77016557704

Сандибаева Н.А. – ассоциированный профессор, кандидат педагогических наук, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, nazirasandibaeva@gmail.com, +7 775 751 8654

Мұратбек Т. – магистрант 1 курса, Казахский национальный женский педагогический университет, Богенбай батыр, 102, 050000, Алматы, Казахстан, muratbektursyngull@gmail.com, +7 705 257 3818

Байкадамова Л.С. – 3 курс докторанты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000, Алматы, Қазақстан, bajkadamovalaura@gmail.com, +7707 151 7909

Қаптағай Г.Ә. – хат-хабар авторы, PhD, қауымдастырылған профессор, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000 Алматы, Қазақстан, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz, +7778 7888739

Көпенбаева А.С. – аға оқытушы, PhD, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000 Алматы, Қазақстан, kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, +7 707 193 3667

Далелханқызы А. – PhD, қауымдастырылған профессор, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000, Алматы, Қазақстан, dalelkhankyzy.d@gmail.com, +7 702 563 1383

Қойлық Н.О. – ф.-м.ғ.к., аға оқытушы, Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Достық 13, 050000 Алматы, Қазақстан, nurgali.koilyk@mail.ru, +77016557704

Сандибаева Н.А. – қауымдастырылған профессор, педагогикалық ғылымдар кандидаты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000, Алматы, Қазақстан, nazirasandibaeva@gmail.com, +7 775 751 8654

Мұратбек Т. – 1 курс магистранты, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Бөгенбай батыр 102, 050000, Алматы, Қазақстан, muratbektursyngull@gmail.com, +7 705 257 3818

Baikadamova L. – Doctoral student, Kazakh National Women's Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, bajkadamovalaura@gmail.com, +7707 151 7909

Qaptagay G. –corresponding author, PhD, Associate Professor, Kazakh National Women's Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, qaptagay.g@qyzpu.edu.kz, +7778 7888739

Kopenbaeva A. – PhD, Senior Teacher, Kazakh National Women’s Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, kopenbaeva.a@qyzpu.edu.kz, +7 707 193 3667

Dalelkhankyzy A. – PhD, Associate Professor, Kazakh National Women’s Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, dalelkhankyzy.d@gmail.com, +7 702 563 1383

Koilyk N.O. – senior teacher, Candidate of Physics-Mathematics Science, Abay Kazakh National Pedagogical University, Dostyk 13, Almaty, Kazakhstan, nurgali.koilyk@mail.ru, +77016557704

Sandibayeva N. – Associate Professor, Candidate of Pedagogical Science, Kazakh National Women’s Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, nazirasandibaeva@gmail.com, +7 775 751 8654

Muratbek T. – Master student, Kazakh National Women’s Pedagogical University, Bogenbay batyr 102, 050000, Almaty, Kazakhstan, muratbektursyngull@gmail.com, +7 705 257 3818



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/>).



III-ші және V-ші мұз күйлерінің серпімділік қасиеттеріне температура мен қысымның әсерін зерттеу

Т. Бижигитов *1 , Э. Мадалиева¹ , Л. Бижигитова²

¹М.Х. Дулати атындағы Тараз университеті, Тараз, Қазақстан

²Қазақ ұлттық су шаруашылығы және ирригация университеті, Тараз, Қазақстан

E-mail: bizhigitov_temirhan@bk.ru, elmirabegali@mail.ru, lyazzat.bizhigitova@gmail.com

Аңдатпа. Мақалада алғаш рет екі рет дистилляцияланған судан кристалданған, авторлар тұрғызған мұздың Р-Т координатасындағы фазалық диаграммасында III-ші және VI-ші түрлеріндегі 2,50-9,00 кбар қысым аралығындағы 250 К, 230 К, 210 К, 190 К температуралардағы серпімді кума, көлденең, толқындардың жылдамдықтарының, көлемдерінің қысымға тәуелділіктері тәжірибелік зерттеулер жүргізу арқылы өлшенді. Кума және көлденең толқын жылдамдықтарын пайдаланып, зерттелетін үлгілерде ультрадыбыс толқындарының орташа жылдамдықтарының қысымға тәуелділігі есептелді.

Зерттеу жұмыстарын жүргізу үшін 0-25 кбар қысым мен 90-250 К температураға арналған автоматтандырылған қондырғы жинастырылып, физикалық параметрлерді өлшеу әдістері жан-жақты талқыланып көрсетілген.

Тәжірибе жүзінде және теориялық есептеулерден алынған нәтижелер бойынша тұрақты температураларда үлгілерде тарайтын серпімді толқындардың орташа жылдамдықтарының, Дебайдың сипаттамалық температураларының қысымға тәуелділіктері графиктер тұрғызу арқылы кескінделіп, теориялық тұрғыдан түсініктеме берілген. Қатты денелердегі ультрадыбыс толқындарының кума, көлденең және орташа жылдамдықтарының қысымға тәуелділіктерін зерттеу олардың серпімділік сипаттамаларын, сығылғыштығын, Дебайдың сипаттамалық температурасын анықтауға, бірқатар термодинамикалық шамалардың қысым мен температураға тәуелділіктерін есептеуге мүмкіндік туғызады. Сондықтан мақалада алғаш рет алынып отырған нәтижелердің физикалық үдерістердің механизмдері мен практикалық маңыздылығын ұғынуға үлкен ықпалын тигізеді.

Түйін сөздер: камера, көлденең және кума толқын жылдамдықтары, орташа жылдамдық, фазалық диаграмма.

Жіберілді 28.04.2026. Өзгертілді 19.05.2026. Қабылданды 26.05.2026. Онлайн қол жетімді 30.06.2026.

*хат-хабар авторы

Кіріспе

Антарктидада, Гренландияда және басқа арктикалық тау аралдары мен Күн жүйесіндегі планеталарда массалары өте үлкен Жер бетінде, атмосферасында өтетін физикалық, химиялық, биологиялық үдерістер мен экологияға әсер ететін тұщы су, табиғи газ бен мұнай қатты күйінде табылып отыр. Сондықтан қазіргі таңда тұщы судың жоғары қысым мен төменгі температурадағы [1,2,3] P-T координатасындағы фазалық диаграммасындағы мұз түрлерінің физикалық қасиеттерін зерттеу ғылымның өзекті мәселелеріне жатады. Мысалы, Антарктидада мұздың қалыңдығы 5000 метрге жететіндіктен, оның қабаттарында үлкен қысымдар туындайды. Демек қысым мен температураға тәуелді мұз қабаттары фазалық диаграммадағы физикалық қасиеттері әртүрлі мұз түрлерінен тұрады. Поликристалл мұздардың тығыздықтарының, көлемдік ұлғаю және адиабаталық сығылу коэффициенттерінің, олардағы ультрадыбыс толқындарының жылдамдықтары мен орташа жылдамдықтарының, термодинамикалық сипаттамалық функциялардың, Дебайдың сипаттамалық температурасының сыртқы параметрлерге тәуелділігін зерттеу үшін ғалымдар радиофизикалық, электромагниттік, акустикалық әдістерді қолданулары қажет. Өкінішке орай, осы уақытқа дейін тұщы судан кристалданған мұз түрлерін зерттеуге арналған жұмыстар шамалы. Баспадан жарық көрген мақалалар теңіз, мұхит суларынан кристалданған мұздарға арналған. Ғылыми еңбектердің [4,5,6,7] авторлары теңіз және мұхит суларының физикалық қасиеттерін (268-253)K температура мен 0-1,5 кбар аралығында зерттеген. [8] мақалада 240K температурадан жоғары және 1,5 кбар қысымнан төменгі қысымдарда пайда болған мұз түрлерінің құрылымдары анықталған. Ал, [9] ғылыми мақалада авторлар VI-шы мұз түрінің жан-жақты сығылу модульдерінің температура мен қысым бойынша алынған дербес туындыларының қысымға және температураға тәуелділіктерін есептеп тапқан [10] мақаланың авторлары VI-шы мұз түрінің Юнг және ығысу модульдері мен онда тарайтын серпімді толқындардың жылдамдықтарының әртүрлі қысымдардағы температураға тәуелділігін зерттеген.

Материалдар мен зерттеу әдістері. Дебайдың теориясы бойынша оның сипаттамалық температурасын поликристалл денелерде таралатын ультрадыбыс толқындарының жылдамдықтарының орташа мәні арқылы бағалай аламыз. Теория сонымен қатар сипаттамалық температураларды қатты денелердің серпімді тұрақтыларын қолданып Дебайдың температурасын есептеуге мүмкіндік береді. Сипаттамалық температура серпімді толқындардың таралу жылдамдықтарының орташа мәніне пропорционал болғандықтан, [11,12] тәжірибе жүзінде қума және көлденең толқындардың жылдамдықтарын анықтау, зерттеліп отырған дененің серпімділік тұрақтылары мен термодинамикалық функцияларын есептеуге мүмкіндік туғызады:

$$\theta_D = \frac{\beta v}{\sqrt[3]{V}} = \frac{h}{k} \left(\frac{9N}{4\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{\bar{v}}{\sqrt[3]{V}} = 3.6 \times 10^{-5} \frac{\bar{v}}{\sqrt[3]{V}} \quad (1)$$

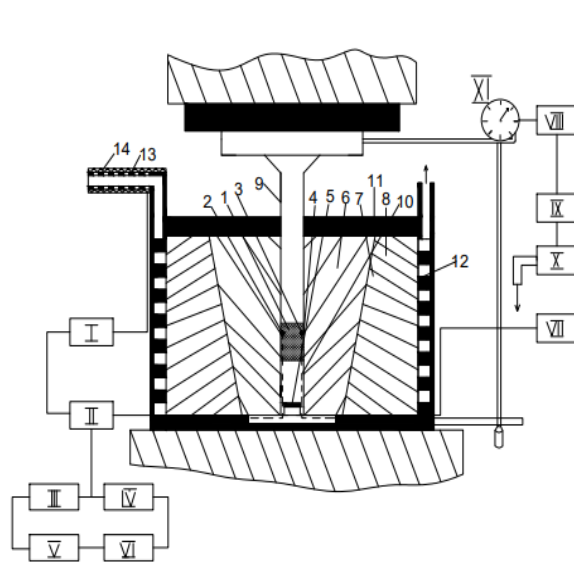
Мұндағы, $\beta = \frac{1}{P_0} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$ қысымның термиялық коэффициенті, - серпімді толқынның орташа жылдамдығы, V – зерттеліп отырған III-ші, V-ші мұз түрлерінің көлемдерінің әртүрлі температуралардағы қысымға тәуелді өзгерісі, $h=6,62$ Планк тұрақтысы, $k = 1,38 \times 10^{-23} \frac{Дж}{К}$ Больцман тұрақтысы. Қатты денелерде тарайтын серпімді толқын қума және көлденең толқындардан тұрады. Олардың орташа жылдамдығы төменде келтірілген формуламен есептелінді:

Бұдан
$$\frac{1}{v_{\perp}^3} + \frac{2}{v_{\parallel}^3} = \frac{3}{v^3} \quad (2)$$

Немесе
$$v^3 = \frac{3}{\frac{1}{v_{\perp}^3} + \frac{2}{v_{\parallel}^3}} \quad (3)$$

$$\bar{v} = \left(\frac{3}{\frac{1}{v_{\perp}^3} + \frac{2}{v_{\parallel}^3}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4)$$

Тәжірибелік өлшеулер жүргізетін қондырғының сызбасы 1-суретте көрсетілген.



1-сурет. Жоғары қысым мен төменгі температураларда үлгінің көлемнің өзгерісі мен онда тарайтын серпімді толқындардың жылдамдықтарын өлшейтін қондырғының құрылымы

1-зерттелетін үлгі, 2-мыс-константан термोजұбы, 3-(Sn) қалайлы және (Ga) галлий өткізгіштері, 4-графит жалатылған қабырғасы жұқа фторопласт, 5-резонанстың жиілігі 10МГц кварцтан жасалған пьезоэлемент, 6,7,8 – үшқабатты камераның термоөңделген маркалары X12M(HRC=58÷60), P18(HRC=60÷62), X12M(HRC=48÷50) құрыштардан жасалған бөлшектері, 9,10 камераның жоғары және төменгі поршеньдері, 11-шыны текстолит жылу оқшаулағыш, 12-камерадағы үлгіні суытатын азот буы өтетін арналар, 13-қыздырғыш, 14-пенопласт жылу оқшаулағыш, I-айнымалы тоқ көзі, II-температура реттейтін жүйе, III-генератор, IV-күшейткіш, V-өлшеуіш құрал, VI- осциллограф, VII-Sn, Ga өткізгіштерінің электр кедергісін өлшейтін құрал, VIII-цифрларды басатын құрылғы және цифрлық табло, IX-қысымды түрлендіргіш, X-сыққышқа май арқылы баяу қысым беретін қондырғы, XI-поршеннің ілгермелі қозғалысын электр импульстеріне айналдыратын түрлендіргіш. Үлгінің көлемі мен оның ішінде туындайтын қысымның арасындағы тәуелділікті цифрларды басатын (цифрлық табло) анықтайды. III-ші және V мұз түрлері екі рет дистилляцияланған судан көлемі 1,4 см³ цилиндр ішінде кристалданған 1h мұз түрін төменгі температураларда сығу арқылы алынды.

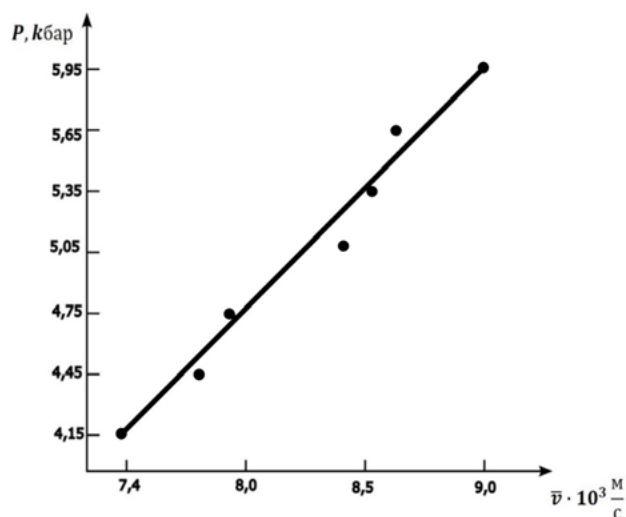
Поршеннің ілгермелі қозғалысын электр импульстеріне айналдыратын түрленгішті калибрлеу камераның сыртында орналасқан микрометрлік бұрандамен жабдықталған арнайы құрал арқылы іске асырылды. Поршеннің ΔL орын ауыстыруын өлшегенде түрлендіргішті калибрлеудің кездейсоқ қателігін ескердік. Оның шекті мәні $\Delta L = \pm 5 \cdot 10^{-3}$ мм тең. Поршень 8мм орын ауыстырғанда $\Delta L = \pm 7 \cdot 10^{-3}$ мм, ал салыстырмалы қателігі $\varepsilon = 0,055\%$ құрайды. 30 кбар қысым ауқымында поршеннің біртекті емес деформациясы орын ауыстыруын өлшегенде жүйелі түрде жіберетін қателігі $5 \cdot 10^{-3}$ мм, салыстырмалы қателігі 0,03%. Маркасы P18 болаттың термиялық ұлғаю коэффициентінің енгізетін қателігін $\pm 0,3 \cdot 10^{-5}$ тең [13] деп анықтамадан алдық. Қысымды өлшегендегі қателік 1h→мұз III, мұз VI→мұз VII, қалайы II→1-ге өткенде, галлий I→II түрленулерді градуирлегенде жүйелі [14,15] жіберетін қателіктердің қосындыларынан тұрады. 30 кбар қысымда үлгі манометрдің дәлділігімен өлшенетін оның мәні 0,2% құрайды. Камераның поршенінің үйкеліс күшінен туындайтын қателік $T = \text{const}$ болғандағы графигіндегі нүктелердің ауытқуы арқылы бағаланды. Біздің есептеуіміз бойынша ол 1,2% артық емес [16]. Ғылыми мақалада жоғары қысым мен төменгі температурада 1h мұз түрінің серпімділік қасиеттеріне сыртқы параметрлердің әсері зерттелген. Қысым 40 кбар болғанда 1000С температурада мыс – константан термोजұбына енгізілетін түзету ± 20 С. Температура төмендеген сайын түзету кемитіндіктен біздің тәжірибемізде мыс-константан термोजұбына қысымның әсері [17] ескерілмеді.

Импульстік ультрадыбыстық қондырғының жұмыс істеу принципі тәжірибелік өлшеулерде жиі қолданылатын қондырғылардың негізінде [18] құрастырылған. Ультрадыбыстық толқындардың көзі және шағылған толқындарды қабылдайтын қабылдағыш ретінде резонанстық жиілігі 10 МГц кварцтан жасалған қума және көлденең толқындарды тарататын пьезоэлементті қолдандық. Биіктіктері белгілі үлгілерде тарайтын толқындардың жүріп өткен жолына кеткен уақыт осциллограф экранындағы импульстерді беттестіру әдісімен анықтадық.

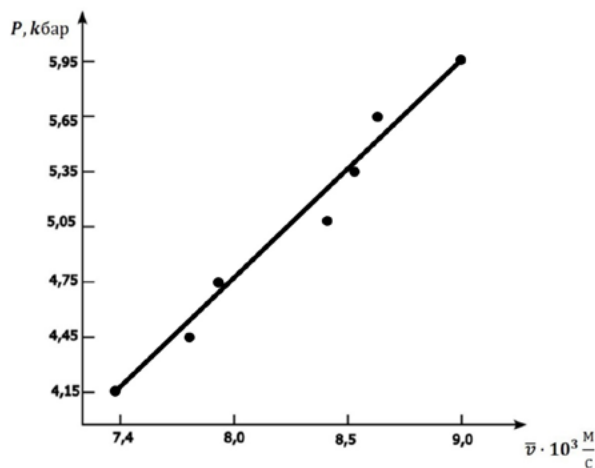
Нәтижелер мен талдаулар. 1-кестеде поликристалл III-ші, V-ші мұз күйлерінде тарайтын серпімді қума және көлденең толқындардың жылдамдықтары мен орташа жылдамдықтарының, көлемдері мен Дебайдың сипаттамалық келтірілген температураларының 250 К, 230 К, 210 К, 190 К, температуралардағы қысымға тәуелділіктері келтірілген.

1-кесте. III-ші және V-ші мұз түрлеріндегі әртүрлі температуралардағы $v_{\parallel} = v_{\parallel}(P)T$, $v_{\perp} = v_{\perp}(P)$, $\bar{v} = \bar{v}(P)$, $V = V(P)_T$, $\theta_D = \theta_D(P)_T$ тәуелділіктері

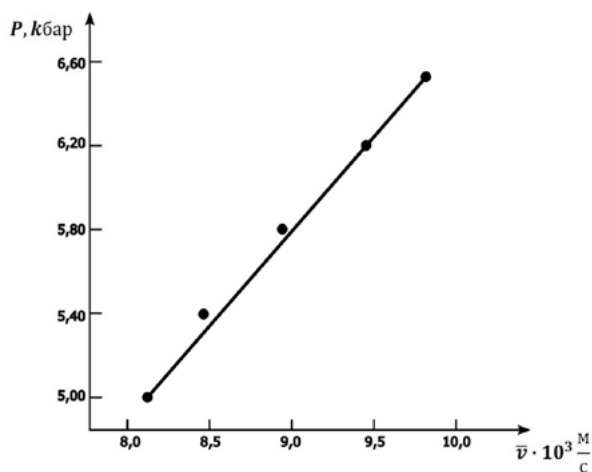
Фаза	T, К	P, кБар	$v_{\parallel} \times 10^2 \frac{M}{c}$	$v_{\perp} \times 10^2 \frac{M}{c}$	$\bar{v} \times 10^3 \frac{M}{c}$	$V \times 10^{-3} M^3$	θ_D, K	$\frac{T}{\theta_D}$
III	250	2,50	50,10	38,90	4,15	1,112	144	1,73
		2,60	50,60	39,40	4,21	1,089	147	1,70
		2,70	51,30	40,17	4,28	1,065	151	1,65
		2,80	51,90	40,77	4,34	1,043	154	1,62
		2,90	52,18	40,98	4,40	1,022	157	1,59
V	250	4,15	82,00	70,50	7,36	1,085	258	0,96
		4,45	86,00	74,50	7,76	1,084	272	0,91
		4,75	87,50	76,00	7,93	1,082	278	0,89
		5,10	93,00	81,49	8,49	1,081	298	0,83
		5,35	94,00	82,47	8,56	1,079	300	0,83
		5,65	96,00	84,48	8,72	1,078	306	0,81
		5,95	98,10	89,46	9,20	1,076	318	0,78
	230	5,00	96,00	76,81	8,14	1,084	285	0,80
		5,20	98,00	78,80	8,34	1,083	292	0,78
		5,40	99,20	79,72	8,47	1,081	297	0,77
		5,60	102,10	82,80	8,79	1,080	309	0,74
		5,80	105,01	85,73	9,06	1,079	318	0,72
		6,00	106,15	86,62	9,12	1,077	320	0,71
		6,20	109,10	89,70	9,46	1,076	332	0,69
		6,40	110,15	90,73	9,57	1,075	335	0,68
	210	6,40	112,30	92,75	9,78	1,073	337	0,68
		5,50	103,50	87,61	9,18	1,084	322	0,65
		6,00	110,41	94,00	9,84	1,083	345	0,60
		6,50	120,11	104,12	10,86	1,082	380	0,55
		7,00	123,50	107,50	11,60	1,081	407	0,51
	190	7,50	140,21	119,45	12,51	1,080	439	0,47
		7,55	140,40	98,52	10,69	1,185	366	0,51
		8,50	147,50	115,00	12,00	1,186	411	0,46
		9,00	157,62	131,53	12,80	1,186	438	0,43



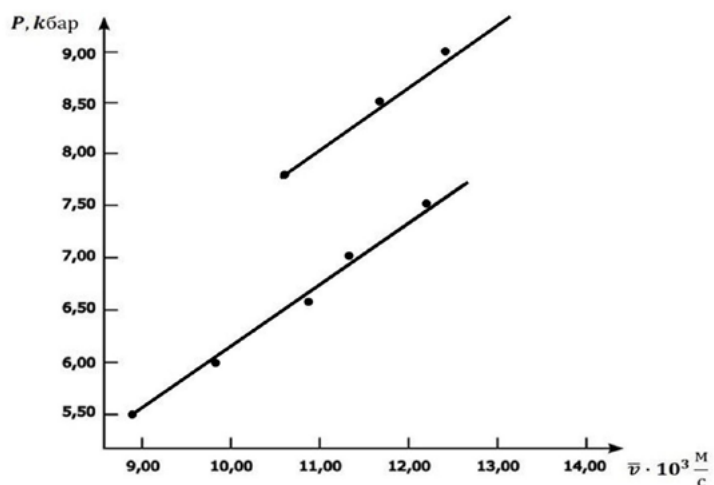
2-сурет. III-мүз күйінде тарайтын серпімді толқынның 250 К температурадағы орташа жылдамдығының қысымға тәуелділігі



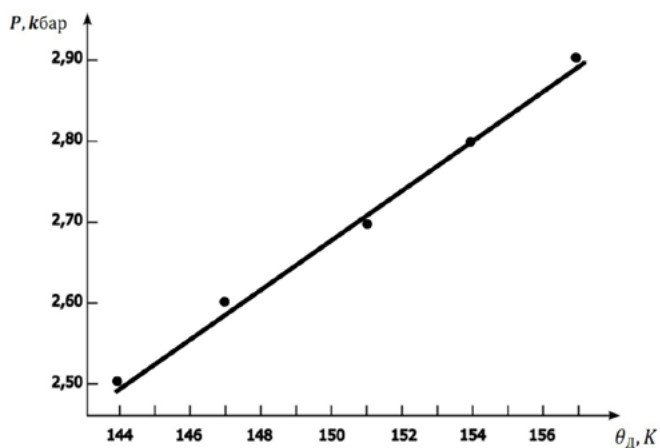
3-сурет. V-ші мүз күйінде тарайтын серпімді толқынның 250 К температурадағы орташа жылдамдығының қысымға тәуелділігі



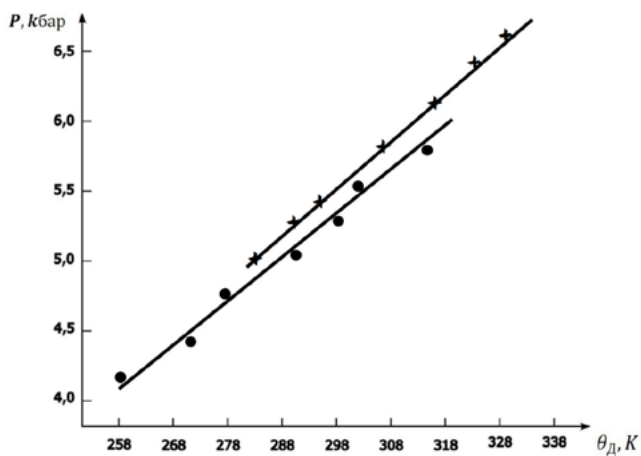
4-сурет. V-ші мүз күйінде тарайтын серпімді толқынның 230 К температуралардағы орташа жылдамдығының қысымға тәуелділігі



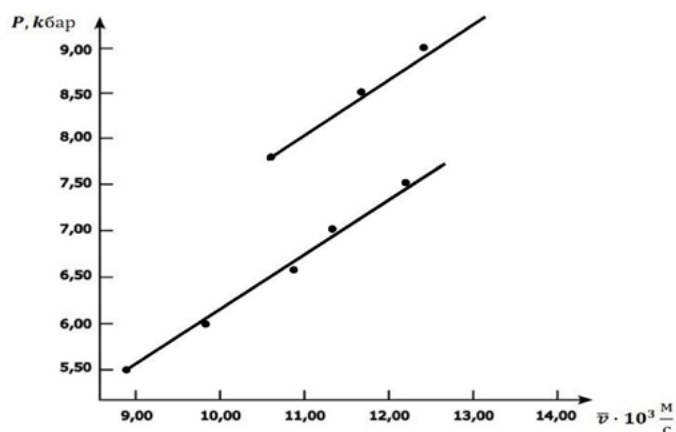
5-сурет. V-ші мұз күйінде тарайтын серпімді толқынның 190 К, 210 К температуралардағы орташа жылдамдықтарының қысымға тәуелділігі



6-сурет. III-ші мұз күйінің 250 К температурадағы Дебайдың сипаттамалық температураның қысымға тәуелділігі



7-сурет. V-ші мұз күйінің +250 К, +230 К температуралардағы Дебайдың сипаттамалық температурасының қысымға тәуелділігі



8-сурет. V-ші мұз күйінің +210К, +190 К температуралардағы Дебайдың сипаттамалық температурасының қысымға тәуелділігі

Келтірілген кестелер мен графиктерден тұрақты 250 К, 230 К, 210 К, 190 К температураларда серпімді толқындардың қума, көлденең және орташа жылдамдықтарының артатындығын көреміз. Ал V-ші мұз күйінде 190 К, 210 К температураларда тарайтын серпімді толқындардың орташа жылдамдықтары шамамен бірдей болғанда температура 20К төмендегенде қысым 1,10 кбар артады. III мұз түрінде 250 К температурада Дебайдың сипаттамалық температурасы қысым артқанда ұлғаяды. V-ші мұз түрінде қысымдар теңеліп, температура 20 К төмендегенде Дебай температурасы шамамен оңға қарай 3,33 К ығысып артады. Ал III-ші және V мұз түрлерінің әртүрлі температуралардағы сан мәндері қысым артқанда шамалы ұлғаяды. Тәжірибелік өлшеулер мен теориялық есептеулерден алынған нәтижелер физиканың заңдарына сәйкес келеді. Зерттеу барысында аномальді құбылыстарды байқамадық.

Поликристалдарда қатты денелердегі сияқты температура төмендегенде ультрадыбыс жылдамдықтары мен орташа жылдамдық артады. Өйткені серпімді толқындардың поликристалдардағы таралу жылдамдығы Юнг модулі мен тығыздығына тәуелді. Сығылған кезде кристалдық тор сығылып, атомдардың арақашықтықтары кеміп атомаралық байланыстары күшейеді. Нәтижесінде, серпімділік модулі тығыздықпен салыстырғанда едәуір жылдам артады. Сондықтан ультрадыбыс импульсі атомнан атомға жылдам беріледі.

Қорытынды

1. P-T координатасындағы мұз түрлерінің жоғары 0-25 кбар қысым мен төменгі 90-250 К температурада көлемдерінің өзгерістерін және оларда тарайтын серпімді толқындардың әртүрлі температуралардағы қысымға тәуелділігін анықтайтын қондырғы жинастырылды.

2. Алғаш рет III-ші және V-ші мұз түрлерінде тарайтын серпімді толқындардың 250 К, 230 К, 210 К, 190 К, температуралардағы жылдамдықтарының қысымға тәуелділік графиктері тұрғызылып зерттелді.

3. Тәжірибелік өлшеулер мен теориялық есептеулерден алынған мұз күйлерінде тарайтын серпімді толқынның орташа жылдамдықтары мен көлемдерінің өзгерістерін пайдаланып келтірілген температураның Дебайдың температурасына қатынасының қысымға тәуелділігі алғаш рет анықталды.

4. Поликристалдардағы ультрадыбыс толқындарының қума, көлденең және орташа жылдамдықтарының қысымға тәуелділіктерін зерттеу олардың серпімділік сипаттамаларын, сығылғыштығын, Дебайдың сипаттамалық температурасын анықтауға, бірқатар термодинамалық шамалардың қысым мен температураға тәуелділіктерін есептеуге мүмкіндік туғызады. Сондықтан мақалада алғаш рет алынып отырған нәтижелердің физикалық үдерістердің механизмдерін ұғынуға және арктикалық тау аралдары мен Күн жүйесіндегі планеталарда орналасқан мұздықтардағы тұщы судан кристалданған мұз қабаттарының қандай тереңдікте, қабаттарының биіктігін анықтау үшін қолдануға болады.

Алғыс

Қаржыландыру көздері және басқа жарналар, алғыстар, сондай-ақ мүдделер қақтығысы жоқ.

Авторлардың қосқан үлесі

Т.Бижигитов – «III-ші және V-ші мұз күйлерінің серпімділік қасиеттеріне температура мен қысымның әсерін зерттеу» тақырыбында жазылған шетелдік ғылыми мақалаларға талдаулар жасап, аталған мұз түрлеріне жоғарғы қысым мен төменгі температураларда серпімділік қасиеттерін жоспарлау.

Э.Мадалиева – зерттеу мақсатында жинастырылған қондырғыдан алынған тәжірибелік нәтижелерді пайдаланып Юнг, ығысу модульдерін есептеу әдістерін көрсету.

Л.Бижигитова – тәжірибеден алынған физикалық параметрлерді пайдаланып, олардың арасындағы тәуелділіктер графиктерін тұрғызып, оларға теориялық тұрғыдан түсініктеме беру.

Әдебиеттер тізімі

1. P.V.Hobbs, Ice physics. Oxford, Clarendon Press, (1974).
2. N.Bizhigitov, A.Sembiyeva, Study the Diagram of the Thermodynamic state of ice at High-Pressure and how temperature in the P-T Coordinate, Journal of Adv Research in Dynamical control systems, vol.11, No.6 (2019).
3. Д.Эйзенберг, В.Кауцман, Структура и свойства воды, /пер. с англ./ Под ред. В.В.Богородского. Л: Гидрометеоиздат, Ил., 280 б. (1975).
4. С.М. Ковалев, В.А. Бородкин, Н.В.Колабутин, А.А.Ньюбом, Основные физические и механические характеристики льда по результатам работы экспедиции «Трансарктика-2019», қолжетімді адресі: <https://doi.org/10.30758/0555-2648-2020-66-3-293-320>
5. А.В.Марченко, Е.Б. Карулин, П.В. Чистяков, Экспериментальное определение упругих характеристик морского ледяного покрова, Вестник газовый науки (2020).
6. Johnston M.E. Strength, Temperature Relationships for First-year, second-year and Multi-year Sea, Ice Proceedings of the Twenty-ninth, International Ocean and Polar Engineering Conference. Honolulu, Hawaii, USA, June 16-21, 707-714 (2019).
7. Korulina M., Full-Scale Flexural Strength of Sea Ice and freshwater Ice in Spitsbergen Fjords and North-west Barents Sea, Applied Ocean Research 90, 101-106, (2019)
8. Е.С.Шокомбалова, Ю.Н.Журавлев, Структура и свойства фазовых состояний льда, Журнал структурной химии ДАН. том 60, №1, 64-70 (2019).
9. T.Bizhigitov, A.Yelibayeva, The dependence of the ice-six compression modules and the volumetric expansion coefficient on pressure and temperature, Bulletin of KAZNPU named after Abay, Kazakh National Pedagogical University "Physical and mathematical Sciences". Series 2 (70) (2020).
10. T. Bizhigitov, E. Zhumadilov, Study the dependence of Young's shear modulus and ultrasonic waves propagation of the VI ICE modification to the pressure at a constant temperature. Bulletin of L. N. Gumiyov Eurasian National University. Physics, Astronomy Series 4(133) (2020).
11. Т. Бижигитов, Молекулалық физика, Оқулық, Алматы, ЛантарBooks, 728 б. (2026)
12. Т. Бижигитов, Статистикалық физика. Физикалық кинетика негіздері. Оқулық, Алматы, Альмонахъ, 250 б. (2022).
13. Кушербаева М.Р., Бижигитов Т., Устройство для получения давления до 3000МПа. [Механика и технологии. Научный журнал] 1, 162-167. (2017).
14. Бижигитов Т., Кушербаева М.Р., Измерение давления, температуры и объемных изменений в камере высокого давления при низких температурах, Механика и технологии. Научный журнал 1, 167-171 (2017).
15. Бижигитов Т., Кушербаева М.Р., Электроводы для камеры высокого давления на 3000Мпа, Механика и технологии. Научный журнал 1, 171-173 (2017).
16. Т.Бижигитов, М.Р.Кушербаева, Л.Т.Бижигитова, Мұз 1h түрінің сыртқы параметрлердің серпімділік қасиеттеріне әсерін зерттеу, Торайғыров университетінің Хабаршысы. Физика, математика және компьютерлік ғылымдар сериясы 1, 142-152 б. (2025).
17. Т.Бижигитов, Э.Мадалиева, Мұздың фазалық диаграммасын физика-химиялық талдауларды қолданып зерттеу, Механика және технологиялар. Ғылыми журнал 4(86), 317-324б. (2024).
18. Т.Бижигитов, Э.Мадалиева, Құрылыс материалдарының физика-механикалық қасиеттерінің температураға тәуелділігін зерттеу, Механика және технологиялар. Ғылыми журнал 4(86), 201-208б. (2024).

Т. Бижигитов^{*1}, Э. Мадалиева¹, Л. Бижигитова²

¹Таразский университет им. М. Х. Дулати, Тараз, Казахстан

²Казахский Национальный Университета водных ресурсов и ирригации,
Тараз, Казахстан

(E-mail: bizhigitov_temirhan@bk.ru, elmirabegali@mail.ru, lyazzat.bizhigitova@gmail.com)

Исследование влияния температуры и давления на упругие свойства III-й и V-й фаз льда

Аннотация. В статье впервые представлены результаты экспериментального исследования зависимостей скоростей продольных и поперечных упругих волн, а также объемов льда III и льда VI, кристаллизованных из дважды дистиллированной воды, в интервале давлений 2,50–9,00 кбар при температурах 250, 230, 210 и 190 К. Исследования проводились на фазовой диаграмме льда в координатах P–T, построенной авторами. На основе измеренных значений скоростей продольных и поперечных волн были рассчитаны зависимости средней скорости распространения ультразвуковых волн от давления в исследуемых образцах.

Для выполнения экспериментальных исследований была разработана и собрана автоматизированная установка, предназначенная для работы в диапазоне давлений 0–25 кбар и температур 90–250 К. В статье подробно рассмотрены и описаны методы измерения физических параметров.

На основе экспериментальных данных и результатов теоретических расчетов построены графики зависимостей средней скорости распространения упругих волн и характеристической температуры Дебая от давления при постоянных температурах. Полученные закономерности получили теоретическое объяснение. Исследование зависимостей скоростей продольных, поперечных и средних ультразвуковых волн от давления в твердых телах позволяет определять их упругие характеристики, сжимаемость, характеристическую температуру Дебая, а также рассчитывать зависимости ряда термодинамических параметров от давления и температуры.

Полученные впервые результаты имеют важное значение для понимания механизмов физических процессов, протекающих в высокобарических фазах льда, и обладают значительной практической ценностью.

Ключевые слова: камера высокого давления, скорости поперечных и продольных волн, средняя скорость, фазовая диаграмма.

T. Bizhigitov^{*1}, E. Madaliyeva¹, L. Bizhigitova²

¹M.H. Dulaty Taraz University, Taraz, Kazakhstan

²Kazakh National University of Water Resources and Irrigation, Taraz, Kazakhstan

(E-mail: bizhigitov_temirhan@bk.ru, elmirabegali@mail.ru, lyazzat.bizhigitova@gmail.com)

Study of the Influence of Temperature and Pressure on the Elastic Properties of Ice III and Ice V

Abstract. This paper presents, for the first time, the results of an experimental investigation of the pressure dependences of the velocities of longitudinal and transverse elastic waves, as well as the volumes of Ice III and Ice VI crystallized from double-distilled water, within the pressure range of 2.50–9.00 kbar at temperatures of 250, 230, 210, and 190 K. The studies were carried out using the ice phase diagram in the P–T coordinates constructed by the authors. Based on the measured velocities of longitudinal and transverse waves, the pressure dependences of the average ultrasonic wave velocity in the investigated samples were calculated.

To perform the experimental studies, an automated setup operating in the pressure range of 0–25 kbar and the temperature range of 90–250 K was designed and assembled. The methods used for measuring the physical parameters are described and discussed in detail.

Using both experimental data and theoretical calculations, the pressure dependences of the average velocity of elastic wave propagation and the Debye characteristic temperature at constant temperatures were determined and presented graphically. The obtained results are interpreted from a theoretical standpoint. The investigation of the pressure

dependences of longitudinal, transverse, and average ultrasonic wave velocities in solids makes it possible to determine their elastic properties, compressibility, and Debye characteristic temperature, as well as to calculate the pressure and temperature dependences of a number of thermodynamic parameters.

The results obtained for the first time are of significant importance for understanding the mechanisms of physical processes occurring in high-pressure phases of ice and possess considerable practical value.

Keywords: high-pressure chamber, longitudinal and transverse wave velocities, average velocity, phase diagram.

References

1. P.V. Hobbs, Ice physics. Oxford, Clarendon Press, (1974).
2. N. Bizhigitov, A. Sembiyeva, Study the Diagram of the Thermodynamic state of ice at High-Pressure and how temperature in the P-T Coordinate, Journal of Adv Research in Dynamical control systems vol.11, No.6 (2019).
3. D.Ejzenberg, V.Kaucman, Struktura i svojstva vody [Structure and Properties of Water,] Ed. by V.V. Bogorodsky. L.:Gidrometeoizdat, Il., 280 p. (1975). [In Russian]
4. S.M. Kovalev, V.A. Borodkin, N.V.Kolabutin, A.A.N'yubom, Osnovnye fizicheskie i mekhanicheskie harakteristiki l'da po rezul'tatam raboty ekspedicii «Transarktika-2019» [Main physical and mechanical characteristics of ice based on the results of the Transarktika-2019 expedition], available at: <https://doi.org/10.30758/0555-2648-2020-66-3-293-320>. [In Russian]
5. A.V.Marchenko, E.B. Karulin, P.V. Chistyakov, Eksperimental'noe opredelenie uprugih harakteristik morskogo ledyanogo pokrova [Experimental Determination of the Elastic Characteristics of Sea Ice Cover], Vestnik gazovoy nauki [Gas Science Bulletin] (2020). [In Russian]
6. Johnston M.E. Strength, Temperature Relationships for First-year, second-year and Multi-year Sea, Ice Proceedings of the Twenty- ninth, International Ocean and Polar Engineering Conference. Honalulu, Hawau, USA, June 16-21, p.707-714 (2019).
7. Korulina M., Full-Scale Ficzurat Strength of Sca Ice and freshwater Ice in Spitsbergen Fjards and North-west Barents Sea, Applied Ocean Research 90, p. 101-106, (2019)
8. E.S.SHokombalova, YU.N.ZHuravlev, Struktura i svojstva fazovyh sostoyanii l'da [Structure and Properties of Phase States of Ice], ZHurnal strukturnyj himii DAH [Russian Journal of Structural Chemistry] 60, №1, p.64-70 (2019). [In Russian]
9. T.Bizhigitov, A.Yelibaeva, The dependence of the ice-six compression modules and the volumetric expansion coefficient on pressure and temperature, Bulletin of KAZNPU named after Abay, Kazakh National Pedagogical University "Physical and mathematical Sciences" Series 2(70), (2020).
10. T. Bizhigitov, E. Zhumadilov, Study the dependence of Young's shear modulus and ultrasonic waves propagation of the VI ICE modification to the pressure at a constant temperature, Bulletin of L. N. Gumilyov Eurasian National University. Physics, Astronomy Series 4(133) (2020).
11. T. Bizhigitov, Molekulalyk fizika [Molecule of Physics], Almaty, LantarBooks, 728 p. (2026). [In Kazakh]
12. T. Bizhigitov, Statistikalyyk fizika. Fizikalyyk kinetika negizderi [Statistical Physics. Fundamentals of Physical Kinetics], Textbook, Almaty, Almonakh, 250 p. (2022). [In Kazakh]
13. Kuserbaeva M.R., Bizhigitov T., Ustrojstvo dlya polucheniya davleniya do 3000MPa [Device for obtaining pressure up to 3000 MPa], Mekhanika i tekhnologii. Nauchnyj zhurnal [Mechanics and technology. Scientific journal] 1, p.162-167 (2017). [In Russian]
14. Bizhigitov T., Kuserbaeva M.R., Izmerenie davleniya, temperatury i ob'emnyh izmenenij v kamere vysokogo davleniya pri nizkizkih temperaturah [Measurement of Pressure, Temperature, and Volumetric Changes in a High-Pressure Chamber at Low Temperatures], Mekhanika i tekhnologii. Nauchnyj zhurnal [Mechanics and technology. Scientific journal]1, p.167-171(2017). [In Russian]
15. Bizhigitov T., Kuserbaeva M.R., Elektrovvody dlya kamery vysokogo davleniya na 3000MPa [Electrical inputs for a high-pressure chamber at 3000 MPa], Mekhanika i tekhnologii. Nauchnyj zhurnal [Mechanics and technology. Scientific journal]1, №1, p.171-173 (2017). [In Russian]
16. T.Bizhigitov, M.R.Kuserbaeva, L.T.Bizhigitova, Muz 1h turinin syrtyky parametrlerdin serpimdilik kasiyetterine aserin zertteu [Study of the Influence of External Parameters on the Elastic Properties of Ice Type 1h], Torajgyrov universitetiniñ Habarshysy. Fizika, matematika zhane komp'yuterlik gylymdar seriyasy [Bulletin of Toraigyrov University. Physics, Mathematics and Computer Sciences Series]1, p.142-152 (2025). [In Kazakh]

17. T.Bizhigitov, E.Madaliyeva, Мыздың fazalyk diagrammasyn fizika-himiyalyk taldaulardy koldanyp zertteu [Study of the Phase Diagram of Ice Using Physicochemical Analysis], Mekhanika i tekhnologii. Nauchnyj zhurnal [Mechanics and technology. Scientific journal] 4(86), p.317-324 (2024). [In Kazakh]
18. T.Bizhigitov, E.Madaliyeva, Kyrylys materialdarynyn fizika-mekhanikalyk kasiyterinin temperaturaga taueldiligin zertteu [Study of the dependence of physical and mechanical properties of building materials on temperature], Mekhanika i tekhnologii. Nauchnyj zhurnal [Mechanics and technology. Scientific journal] 4(86), p.201-208 (2024). [In Kazakh]

Авторлар туралы мәлімет:

Бижигитов Т. – хат-хабар авторы, физика-математика ғылымдарының кандидаты, М.Х.Дулати атындағы Тараз университетінің профессоры, 5-бұрылыс Бульвар 8, 080001, Тараз, Қазақстан, bizhigitov_temirhan@bk.ru, +77015578541

Мадалиева Э. Б. – PhD, М.Х.Дулати атындағы Тараз университетінің қауымдастырылған профессор, Айтеке би көшесі, 5/45, 080012, Тараз, Қазақстан, elmirabegali@mail.ru, +77019431523

Бижигитова Л. Т. – экономика ғылымдарының кандидаты, Қазақ Ұлттық су шаруашылығы және ирригация университетінің доценті, Сатпаев көшесі 2, 080003, Тараз, Қазақстан, lyazzat.bizhigitova@gmail.com, +77772027282

Бижигитов Т. – автор для корреспонденции, кандидат физико-математических наук, профессор Таразского университета им.М. Х. Дулати, 5-й Бульвар, 8, 080001, Тараз, Казахстан, bizhigitov_temirhan@bk.ru, +77015578541

Мадалиева Э. Б. – PhD, автор статьи, Таразский университет им. М. Х. Дулати, ул. Айтеке би, 5/45, 080012, Тараз, Казахстан, elmirabegali@mail.ru, +77019431523

Бижигитова Л.Т. - кандидат экономических наук, доцент, Казахский Национальный Университета водных ресурсов и ирригации, ул. Сатбаева, 2, 080003, Тараз, Казахстан, lyazzat.bizhigitova@gmail.com, +77772027282

Bizhigitov T. – the corresponding author, Candidate of Physic-Mathematical Sciences, Professor, M. H. Dulati Taraz University, 8 5th Boulevard, 080001, Taraz, Kazakhstan, bizhigitov_temirhan@bk.ru, +77015578541

Madaliyeva E. B. – PhD, M. H. Dulati Taraz University, 5/45 Aiteke bi str., 080012, Taraz, Kazakhstan, elmirabegali@mail.ru, +77019431523

Bizhigitova L. T. - Candidate of Economic Sciences, Associate Professor, Kazakh National University of Water Resources and Irrigation, Satbayeva str., 2, 080003, Taraz, Kazakhstan, lyazzat.bizhigitova@gmail.com, +77772027282



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/>).



Упругое рассеяние дейтрона на ядре ^{12}C при энергии 35 МэВ

К.О. Мендибаев^{1,2}, **А.К. Әжібеков^{1,2,3}**, **К.С. Дюсебаева^{1,4*}**,
Т.Е. Исатаев^{1,2}, **С.М. Лукьянов²**, **Т.К. Жолдыбаев¹**,
Ә.Ә. Теміржанов^{1,5}

¹Республиканское государственное предприятие на праве хозяйственного ведения
«Институт ядерной физики» Агентства Республики Казахстан по атомной энергии
(РГП на ПХВ ИЯФ РК), Алматы, Казахстан

²Объединенный институт ядерных исследований ОИЯИ, Дубна, Россия

³Кызылординский университет имени КORKYТ АТА, Кызыл Орда, Казахстан

⁴Казахский национальный университет им аль-Фараби, Алматы, Казахстан

⁵Казахский национальный исследовательский технический университет имени К.И.
Сатпаева, Алматы, Казахстан

E-mail: kayrat1988@bk.ru, azhibekoaidos@mail.ru, kura15@mail.ru, talgat_136@mail.ru,
lukyan@jinr.ru, timjol@yandex.ru, alik-25.01.97@mail.ru

Аннотация. Измерены угловые распределения дифференциальных сечений упругого рассеяния дейтронов на ядрах ^{12}C при энергии 35 МэВ. Экспериментальная работа была проведена на ускорительном комплексе К130 с применением Большой камеры рассеяния (БКР), установленной в Ускорительной лаборатории университета Ювяскюля (Финляндия). Идентификация лёгких заряженных частиц и продуктов реакций осуществлялась методом ДЕ-Е, основанным на измерении потерь энергии в двух первых детекторах (ДЕ) и остаточной энергии в третьем (Е). Во время эксперимента для малых углов измерения использовалась конфигурация детекторов толщиной 100 мкм, 300 мкм и 4000 мкм, тогда как для больших углов – 12 мкм, 700 мкм и 4000 мкм соответственно. Экспериментальные данные проанализированы в рамках оптической модели с использованием глобальных параметризаций оптического потенциала. Выполнена подгонка параметров глубины действительной и мнимой частей потенциала к экспериментальным данным. Для действительной части потенциала дополнительно использован микроскопический двойной фолдинг-подход. Показано, что наилучшее описание экспериментальных данных достигается при использовании модифицированных параметров глобальных оптических потенциалов, для которых получены значения χ^2/N 1.438 и 1.526 соответственно. Для фолдинг-потенциала получен нормировочный коэффициент 0.785, что свидетельствует о влиянии динамических эффектов, связанных с распадом дейтрона и связью с неупругими каналами.

Ключевые слова: упругое рассеяние, оптическая модель, фолдинг потенциал, FRESCO, DFPOТ.

Поступила 15.04.2026. После доработки 1.06.2026. Принята к печати 2.06.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

*автор для корреспонденции

Введение

Исследование механизмов взаимодействия лёгких ядер остаётся одной из актуальных задач ядерной физики, поскольку измерения сечений ядерных реакций позволяют установить связь между фундаментальным нуклон-нуклонным взаимодействием и наблюдаемыми свойствами ядер. Для описания взаимодействия лёгких ядер наряду с феноменологическими подходами активно развиваются микроскопические модели, включая оптическую модель, фолдинг-подходы и методы связанных каналов, позволяющие исследовать как структуру ядер, так и динамику ядерных реакций [1-3].

Особый интерес представляют ядерные реакции с участием слабосвязанного ядра ${}^2\text{H}$ – дейтрона. Энергия связи протона и нейтрона в дейтроне составляет всего 2.224 МэВ. Благодаря сильной пространственной корреляции между нуклонами дейтрон является чувствительным зондом распределения ядерной материи и динамики взаимодействия в системе «дейтрон-ядро». Вследствие этого упругое рассеяние дейтронов широко используется для определения параметров оптического потенциала и исследования механизмов поглощения в ядерных реакциях.

Ядро ${}^{12}\text{C}$ является одной из наиболее важных мишеней в исследованиях реакций с лёгкими ионами и традиционно используется для тестирования параметризаций оптического потенциала и фолдинг-подходов. Несмотря на наличие значительного объёма экспериментальных данных по реакции $d + {}^{12}\text{C}$, результаты в области энергий порядка 30-40 МэВ представлены ограниченно, особенно в контексте сопоставления различных глобальных параметризаций оптического потенциала и микроскопических моделей взаимодействия. Энергия 35 МэВ представляет особый интерес, поскольку в данном диапазоне возрастает влияние процессов распада дейтрона и связи упругого канала с неупругими процессами, что делает систему чувствительной к выбору параметров оптического потенциала.

При энергиях порядка десятков МэВ упругое рассеяние дейтрона на ядре ${}^{12}\text{C}$ удобно описывать в рамках оптической модели. В этом подходе взаимодействие задаётся комплексным потенциалом, включающим действительную, мнимую и кулоновскую составляющие. Радиальная зависимость компонент потенциала обычно задаётся формой Вудса-Саксона, а параметры определяются либо из глобальных параметризаций, либо путём подгонки к экспериментальным данным. Среди наиболее широко используемых глобальных оптических потенциалов для дейтрона можно выделить параметризации An-Cai [4], Wojowald et al. [5], Han-Shi-Shen [6] и Daehnick et al. [7], применяемые в широком диапазоне энергий и масс ядер.

С точки зрения теории рассеяния, структура ядер может проявляться в измеряемых угловых распределениях сечений реакций. В микроскопических подходах действительная часть потенциала взаимодействия напрямую связана с распределениями плотностей сталкивающихся ядер. В частности, в рамках фолдинг-модели потенциал взаимодействия выражается через свёртку эффективного нуклон-нуклонного взаимодействия с плотностями налетающей частицы и ядра-мишени [8]. Такой подход позволяет связать параметры взаимодействия с микроскопическими характеристиками системы и уменьшить степень феноменологичности описания.

Связь упругого канала с неупругими каналами и каналами распада, включая распад дейтрона, приводит к перенормировке эффективного взаимодействия и может быть описана введением динамического поляризационного потенциала [9-11]. Эти эффекты проявляются в изменении величины поглощения и модификации дифракционной структуры угловых распределений, включая положение и глубину интерференционных минимумов.

Несмотря на наличие экспериментальных данных по упругому рассеянию $d + {}^{12}\text{C}$ при энергиях порядка 25-35 МэВ, систематический анализ современных глобальных параметризаций оптического потенциала для данной системы остаётся ограниченным. В частности, недостаточно исследована применимость современных параметризаций оптического потенциала и микроскопических фолдинг-подходов к описанию дифракционной структуры угловых распределений в области средних энергий, где возрастает влияние динамических эффектов, связанных с распадом дейтрона и связью с неупругими каналами.

В настоящей работе выполнено измерение угловых распределений дифференциальных сечений упругого рассеяния дейтронов на ядрах ${}^{12}\text{C}$ при энергии 35 МэВ. Целью работы является анализ полученных экспериментальных данных в рамках оптической модели, сопоставление различных глобальных параметризаций оптического потенциала, а также применение микроскопического двойного фолдинг-подхода для описания действительной части взаимодействия. Дополнительно рассматривается возможность использования полученных параметров для описания данных при близкой энергии 28 МэВ без повторной оптимизации.

Полученные результаты могут быть использованы при дальнейшем анализе неупругого рассеяния и реакций передачи нуклонов с участием дейтрона, в том числе в расчётах в рамках формализмов DWBA и CRC, ранее применявшихся авторами при исследовании реакций передачи нуклонов и кластерных механизмов в лёгких ядрах [12, 13].

Методология (Эксперимент)

Экспериментальные работы проведены на ускорительном комплексе К130 с применением Большой камеры рассеяния (БКР), установленной в Ускорительной лаборатории университета Ювясюля (Финляндия). В качестве пучка использовались дейтроны с энергией 35 МэВ, которыми облучалась самоподдерживающаяся углеродная мишень ^{12}C , изготовленная в виде фольги толщиной 2 мкм и чистотой 99%. В зарегистрированных энергетических спектрах отсутствовали признаки примесных изотопов.

Перед мишенью параллельный пучок формировался с помощью системы коллиматоров, включавшей трубу с тремя позициями для установки диафрагм, расположенными на расстояниях 36 см и 30 см от мишени. Стандартный комплект диафрагм имел размеры 9-9-10 мм, при этом диафрагма с наибольшим диаметром размещалась ближе к мишени, что обеспечивало точность позиционирования пучка порядка 3 мм. Для установки коллиматоров была изготовлена стальная труба диаметром 30 мм из тантала. Дополнительная юстировка пучка проводилась с использованием сцинтилляционных пластин, позволявших визуально контролировать положение пучка.

Конструкция камеры и выбранная геометрия эксперимента позволили изменять угол установки детекторов относительно направления пучка в диапазоне от 5° до 175° в лабораторной системе координат. Средний ток пучка в ходе эксперимента поддерживался на уровне около 20 нА.

Позиционирование детекторов обеспечивалось с точностью до ± 0.25 мм, что соответствовало угловой неопределённости менее 0.1° в используемой геометрии эксперимента. Неопределённость телесного угла детекторов не превышала 3%. Основной вклад в систематическую неопределённость вносили погрешности нормировки пучка, определение телесного угла, нестабильность тока пучка, неопределённость толщины мишени, а также вклад мёртвого времени электронной аппаратуры.

Нормировка экспериментальных сечений выполнялась с учётом интегрального заряда пучка, контролируемого по показаниям цилиндра Фарадея, установленного в системе ускорительного канала и камеры рассеяния. Нестабильность тока пучка оценивалась по изменению интегрального заряда за время набора спектров при различных углах. Толщина мишени контролировалась по паспортным данным изготовителя и дополнительно проверялась по энергетическим потерям заряженных частиц. Указанные вклады учитывались при оценке суммарной систематической неопределённости дифференциальных сечений, которая составляла порядка 7-10%. Статистические погрешности определялись числом зарегистрированных событий и для большинства экспериментальных точек не превышали размеров символов на графиках.

Идентификация лёгких заряженных частиц и продуктов реакций осуществлялась методом ДЕ-Е, основанном на измерении потерь энергии в двух первых детекторах (ДЕ) и остаточной энергии в третьем (Е). На рисунке 1 представлены соответствующие локусы идентификации, полученные с использованием полупроводниковых ДЕ-Е телескопов для всех зарегистрированных частиц. Для регистрации энергетических спектров внутри камеры рассеяния на вращающейся платформе были установлены четыре кремниевых телескопа трёхслойной структуры. Для малых углов использовалась конфигурация детекторов толщиной 100 мкм, 300 мкм и 4000 мкм, тогда как для больших углов – 12 мкм, 700 мкм и 4000 мкм соответственно.

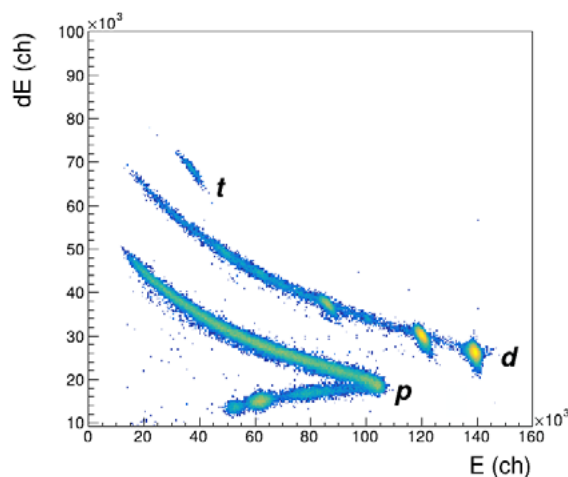


Рисунок 1. Идентификационная матрица для продуктов реакции $d + ^{12}\text{C}$ при энергии пучка 35 МэВ, $\theta_{\text{лаб}} = 45^\circ$

На рисунке 2 представлен спектр полной выделенной энергии дейтронов, измеренный при $\theta_{\text{лаб}} = 45^\circ$. В спектре отчетливо выделяются несколько пиков, соответствующих заселению основного и возбужденных состояний ядра ^{12}C . Наиболее интенсивный пик при энергии вылета дейтрона около 26-27 МэВ соответствует основному состоянию ядра ^{12}C (0^+), тогда как пики при энергиях около 23 МэВ и 16-17 МэВ соответствуют возбужденным состояниям с энергиями 4.44 МэВ (2^+) и 9.64 МэВ (3^-) соответственно. Наблюдается хорошее энергетическое разрешение, обеспечивающее четкое разделение уровней. Низкоэнергетическая часть спектра характеризуется уменьшением статистики и повышенным фоном, что может быть связано с вкладом неупругих процессов. Плавный фон под пиками обусловлен многотельными каналами реакций. Подписанные значения энергий соответствуют энергиям возбуждения ядра ^{12}C и используются для идентификации соответствующих состояний.

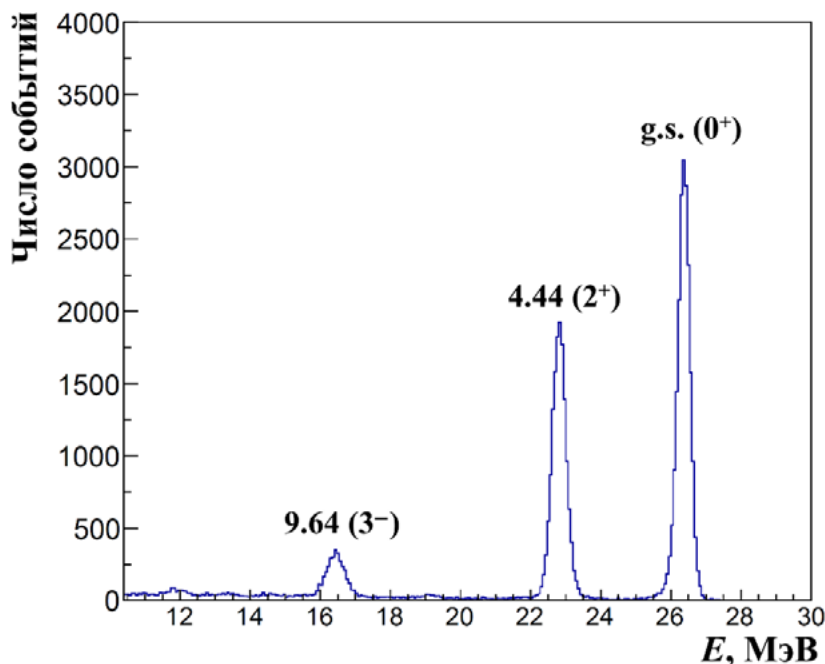


Рисунок 2. Спектр полной выделенной энергии дейтрона, измеренный при $\theta_{\text{лаб}} = 45^\circ$
Пики соответствуют основному и возбужденным состояниям ядра ^{12}C

Результаты и анализ

В данном разделе представлены результаты измерений угловых распределений дифференциальных сечений упругого рассеяния дейтронов на ядрах ^{12}C при энергии 35 МэВ и их сравнение с расчётами в рамках оптической модели. Расчёты угловых распределений дифференциальных сечений упругого рассеяния в рамках оптической модели выполнялись с использованием программного кода FRESKO [14]. Программа использовалась для численного решения уравнения Шрёдингера с комплексным оптическим потенциалом и расчёта дифференциальных сечений упругого рассеяния. В качестве входных параметров использовались глобальные параметризации оптического потенциала [4-7] с последующей подгонкой параметров действительной и мнимой частей потенциала к экспериментальным данным. Для расчётов с микроскопической действительной частью потенциала использовался двойной фолдинг-потенциал, рассчитанный программой DFPOT [15], который затем использовался в качестве входного потенциала в FRESKO.

Оптический потенциал в настоящей работе включает объёмную действительную, объёмную и поверхностную мнимые, а также кулоновскую части:

$$U(\mathbf{r}) = V_V(\mathbf{r}) + iW_V(\mathbf{r}) + iW_S(\mathbf{r}) + V_C(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Объёмная действительная часть потенциала задаётся формой Вудса–Саксона:

$$V_V(r) = V_0 \left[1 + \exp \left(\frac{r - R_V}{a_V} \right) \right]^{-1} \quad (2)$$

где параметры V_0 , r_0 и a_V приведены в Таблице 1. В зависимости от выбранного набора [4-7] глубина потенциала изменяется в диапазоне от -85 до -76 МэВ.

Объёмная мнимая часть $W_V(r)$, отвечающая за поглощение в объёме ядра, также задаётся формой Вудса–Саксона:

$$W_V(r) = W_0 \left[1 + \exp \left(\frac{r - R_W}{a_W} \right) \right]^{-1} \quad (3)$$

Поверхностная мнимая часть $W_S(r)$, описывающая поглощение в приповерхностной области, имеет производную форму Вудса–Саксона:

$$W_S(r) = -4a_S W_S^0 \frac{d}{dr} \left[1 + \exp \left(\frac{r - R_S}{a_S} \right) \right]^{-1} \quad (4)$$

Кулоновская часть потенциала $V_C(r)$ описывается потенциалом однородно заряженной сферы радиуса R_C :

$$V_C(r) = \begin{cases} \frac{Z_p Z_t e^2}{2R_C} \left(3 - \frac{r^2}{R_C^2} \right), & r \leq R_C, \\ \frac{Z_p Z_t e^2}{r}, & r > R_C \end{cases} \quad (5)$$

Радиусы всех компонент потенциала определяются стандартным образом:

$$R_i = r_i \left(A_p^{1/3} + A_t^{1/3} \right), \quad i = V, W, S, C \quad (6)$$

где параметры r_i берутся из Таблицы 1 для соответствующих частей потенциала.

Здесь V_0 – глубина действительной части ядерного потенциала, W – глубина мнимой части, R_i – радиусы соответствующих компонент потенциала, а a_i – параметры диффузии, характеризующие степень «размытия» ядерной поверхности. Увеличение параметра диффузии a_i приводит к более плавному изменению потенциала в периферийной области ядра, что отражает конечную толщину ядерной границы. Радиусы R_i определяют эффективный размер области взаимодействия и зависят от массовых чисел взаимодействующих частиц. Величины Z_p и Z_t обозначают зарядовые числа налетающей частицы и ядра-мишени соответственно, а A_p и A_t – их массовые числа. Эти параметры входят в выражение для кулоновского потенциала и определяют вклад кулоновского взаимодействия в полное эффективное поле. Такое параметрическое представление оптического потенциала обеспечивает достаточную гибкость при анализе экспериментальных данных и позволяет независимо варьировать вклад различных физических механизмов.

В настоящей работе спин-орбитальная составляющая оптического потенциала явно не включалась, поскольку анализ был сосредоточен на описании угловых распределений дифференциальных сечений без привлечения данных о спиновой зависимости рассеяния. Для рассматриваемых данных основной вклад в положение и глубину дифракционных минимумов определяется центральными действительной и мнимой частями потенциала. Вместе с тем спин-орбитальное взаимодействие может вносить вклад при больших углах рассеяния, поэтому его учёт представляет интерес для последующего более детального анализа системы $d + ^{12}\text{C}$.

Таблица 1. Параметры оптического потенциала.

Курсивом обозначены значения, полученные в результате подгонки параметров. Значения χ^2/N при 28 МэВ приведены для расчётов, выполненных с параметрами потенциала, оптимизированными по данным при 35 МэВ, без дополнительной подгонки.

	N_R	V_0 , МэВ	r_v , фм	a_v , фм	W_v , МэВ	r_w , фм	a_w , фм	W_s , МэВ	r_s , фм	a_s , фм	r_c , фм	χ^2/N	
												35 МэВ	28 МэВ
[4]	0.785	84.960	0.740	0.748	3.281	0.869	0.626	9.759	0.903	0.673	0.840	6.314	94.52
		<i>84.787</i>						<i>8.541</i>				<i>1.815</i>	<i>113.9</i>
[5]	0.785	76.432	0.761	0.716	-	-	-	10.181	0.819	0.816	0.838	6.284	34.39
		<i>77.935</i>			<i>2.703</i>	<i>0.819</i>	<i>0.816</i>	<i>8.140</i>				1.438	<i>42.91</i>
[6]	0.785	78.687	0.757	0.809	18.189	0.857	0.568	0.000	1.008	0.803	1.095	489	942.4
		<i>78.626</i>			<i>2.787</i>			<i>2.505</i>				<i>80.53</i>	
[7]	0.785	80.401	0.755	0.759	1.509	0.850	0.666	11.576	0.850	0.666	0.839	9.009	79.01
		<i>83.115</i>			<i>13.284</i>			<i>6.418</i>				<i>1.526</i>	<i>124.3</i>

Подгонка параметров оптического потенциала выполнялась путём минимизации величины χ^2 , определяемой как

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(\sigma_i^{\text{exp}} - \sigma_i^{\text{calc}})^2}{(\Delta\sigma_i)^2} \tag{7}$$

где σ_i^{exp} и σ_i^{calc} – экспериментальные и расчётные значения дифференциальных сечений соответственно, $\Delta\sigma_i$ – экспериментальные неопределённости, а N – число экспериментальных точек. В Таблице 1 приведены значения приведённого критерия χ^2/N , использовавшегося для оценки качества описания экспериментальных данных. Оптимизация параметров проводилась с использованием программы FRESKO [14]. В процессе подгонки варьировались глубины действительной и мнимой частей потенциала.

Для расчёта действительной части оптического потенциала в настоящей работе также использовался микроскопический подход с расчётом двойного фолдинг-потенциала. В рамках этого метода потенциал взаимодействия вычисляется путем свёртки распределений ядерной плотности налетающего ядра-снаряда и ядра-мишени с эффективным нуклон-нуклонным взаимодействием. Такой подход позволяет связать ядро-ядерный потенциал с микроскопическими характеристиками взаимодействующих систем и потому является более физически обоснованным по сравнению с чисто феноменологическими параметризациями. В программе DFPOT [15] потенциал вычисляется в импульсном пространстве с использованием преобразования Фурье, что делает возможным расчёт как потенциалов упругого, так и неупругого рассеяния.

Действительная часть потенциала определялась выражением

$$V_F(\mathbf{R}) = \int \rho_p(\mathbf{r}_1)\rho_t(\mathbf{r}_2)v_{NN}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_1d\mathbf{r}_2 \tag{8}$$

где ρ_p, ρ_t – плотности налетающей частицы и ядра-мишени были взяты из работ [16, 17], а v_{NN} эффективное нуклон-нуклонное взаимодействие. В расчётах использовалось эффективное нуклон-нуклонное взаимодействие типа МЗУ, задаваемое в параметризованной форме в программе DFPOT. Двойной фолдинг-потенциал использовался только для действительной части оптического потенциала, тогда как мнимая часть задавалась феноменологически в форме (3) и (4).

Полный оптический потенциал записывался в виде

$$U(\mathbf{r}) = N_R \cdot V_F(\mathbf{r}) + iW_V(\mathbf{r}) + iW_S(\mathbf{r}) + V_C(\mathbf{r}) \quad (9)$$

где $V_F(r)$ – двойной фолдинг-потенциал, N_R – коэффициент нормировки потенциала. Нормировочный коэффициент ($N_R = 0.785$) использовался только для действительной части двойного фолдинг-потенциала и не являлся параметром глобальных феноменологических потенциалов [4-7]. Значение N_R определялось из условия наилучшего воспроизведения экспериментальных угловых распределений в рамках фолдинг-подхода и затем фиксировалось при сравнении различных вариантов мнимой части потенциала. Полученное значение ($N_R < 1$) указывает на необходимость уменьшения глубины микроскопического фолдинг-потенциала примерно на 20%, что связано с динамическими эффектами, не учитываемыми в статической модели, включая распад дейтрона, связь с неупругими каналами и динамическую поляризацию канала. Следует отметить, что значение N_R зависит от выбранных распределений плотности налетающего ядра и ядра-мишени. В настоящей работе использовался единый набор плотностей из работ [16, 17], что обеспечивает согласованность всех расчётов. Поэтому полученное значение $N_R = 0.785$ следует интерпретировать в рамках данного выбора плотностей. Оценка чувствительности N_R к альтернативным параметризациям плотностей является предметом дальнейшего исследования.

Анализ угловых распределений дифференциальных сечений упругого рассеяния $d + ^{12}\text{C}$ при энергии 35 МэВ (рис. 3) демонстрирует высокую чувствительность наблюдаемой дифракционной структуры к параметрам оптического потенциала. Экспериментальные данные характеризуются выраженной осциллирующей структурой с чередованием максимумов и минимумов, обусловленной интерференцией кулоновского и ядерного вкладов, а также вкладом различных парциальных волн. Положение интерференционных минимумов определяется главным образом геометрией действительной части потенциала, тогда как их глубина и абсолютный уровень сечений существенно зависят от параметров мнимой части, характеризующей поглощение в открытые реакционные каналы.

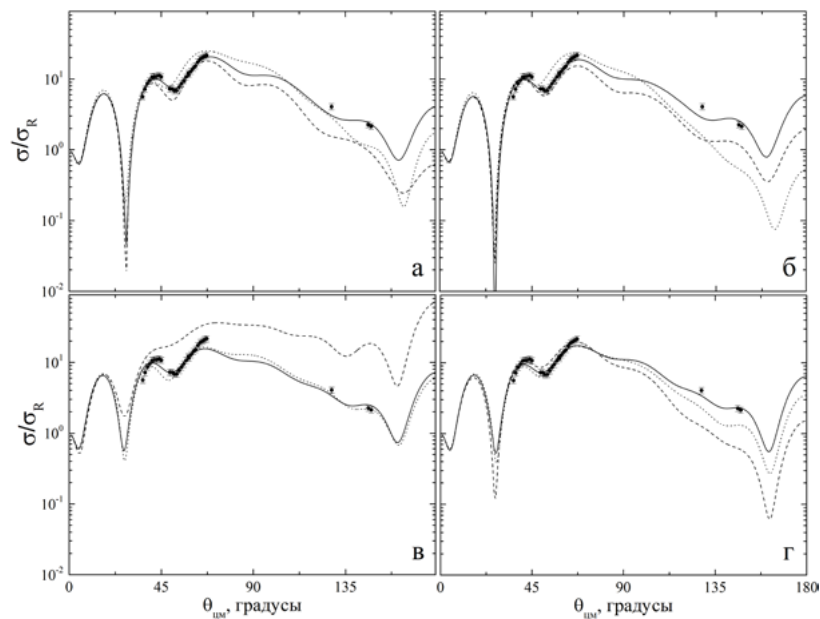


Рисунок 3. Угловые распределения дифференциального сечения упругого рассеяния $d + ^{12}\text{C}$ при энергии 35 МэВ

Экспериментальные данные показаны точками.

Сплошные линии соответствуют расчётам с параметрами оптического потенциала, полученными в результате подгонки к эксперименту. Штриховые линии – расчёты с использованием параметризаций из работы [4] – (а), [5] – (б), [6] – (в), и [7] – (г).

Точечные кривые получены в рамках двойного фолдинг подхода для действительной части потенциала при использовании мнимой части с параметрами, полученными в результате подгонки.

Как видно из Таблицы 1, исходные глобальные параметризации [4-7] демонстрируют заметные различия в качестве описания экспериментальных данных при энергии 35 МэВ. Наиболее близкое согласие до подгонки достигается для параметризаций [4] и [5], для которых χ^2/N составляет 6.314 и 6.284 соответственно. В то же время исходная глобальная параметризация [6] приводит к существенно худшему описанию данных при 35 МэВ, что соответствует значению $\chi^2/N = 489$. Следует подчеркнуть, что это значение относится именно к расчёту при энергии 35 МэВ с параметрами глобального потенциала до подгонки. После оптимизации параметров все используемые потенциалы демонстрируют существенное улучшение согласия с экспериментом. Для параметризаций [5] и [7] значения χ^2/N уменьшаются до 1.438 и 1.526 соответственно, что соответствует наилучшему описанию экспериментальных данных. Для потенциала [4] после подгонки также достигается удовлетворительное согласие с экспериментом, $\chi^2/N = 1.815$. Для параметризации [6] оптимизация приводит к значительному улучшению описания: значение χ^2/N уменьшается с 489 до 2.505 при энергии 35 МэВ.

Для параметров из работы [4] (рис. 3а) наблюдается хорошее воспроизведение экспериментальных данных в области малых и средних углов. Подгонка параметров приводит к корректному описанию положения основных минимумов и фазы осцилляций, однако при больших углах сохраняются небольшие отклонения по абсолютной величине сечений. Для параметров [5] (рис. 3б) достигается наиболее стабильное описание дифракционной структуры во всём угловом диапазоне. В частности, данный набор параметров обеспечивает корректное воспроизведение как положения минимумов, так и их глубины, что указывает на адекватное соотношение действительной и мнимой частей потенциала.

Параметризация [6] (рис. 3в) в исходном виде демонстрирует существенное расхождение с экспериментальными данными, прежде всего в области средних и больших углов. Наличие сильной объёмной мнимой части при практически отсутствующем поверхностном поглощении приводит к переоценке интерференционной структуры и смещению минимумов. После подгонки параметров описание заметно улучшается, однако остаточные расхождения сохраняются, особенно в области больших углов рассеяния. Для потенциала [7] (рис. 3г) наблюдается удовлетворительное согласие с экспериментом уже на уровне исходной параметризации, а последующая оптимизация параметров обеспечивает одно из лучших описаний данных среди рассмотренных потенциалов.

Результаты расчётов с использованием двойного фолдинг-потенциала для действительной части (точечные кривые на рис. 3) показывают, что микроскопический подход в целом корректно воспроизводит форму углового распределения, особенно при малых углах рассеяния, где доминирует периферийное взаимодействие. Однако при переходе к средним и большим углам наблюдаются заметные отклонения, проявляющиеся в смещении интерференционных минимумов и изменении амплитуды осцилляций. Это указывает на то, что статическое микроскопическое описание действительной части потенциала не учитывает связь с неупругими состояниями.

Для дополнительной проверки адекватности и устойчивости полученных параметров оптического потенциала был выполнен расчёт углового распределения при близкой энергии 28 МэВ (рис. 4). При этом использовались параметры, определённые по данным при энергии 35 МэВ, без их повторной оптимизации. Такой подход позволяет оценить, сохраняют ли найденные параметры способность описывать основную дифракционную структуру при изменении энергии налетающего дейтрона.

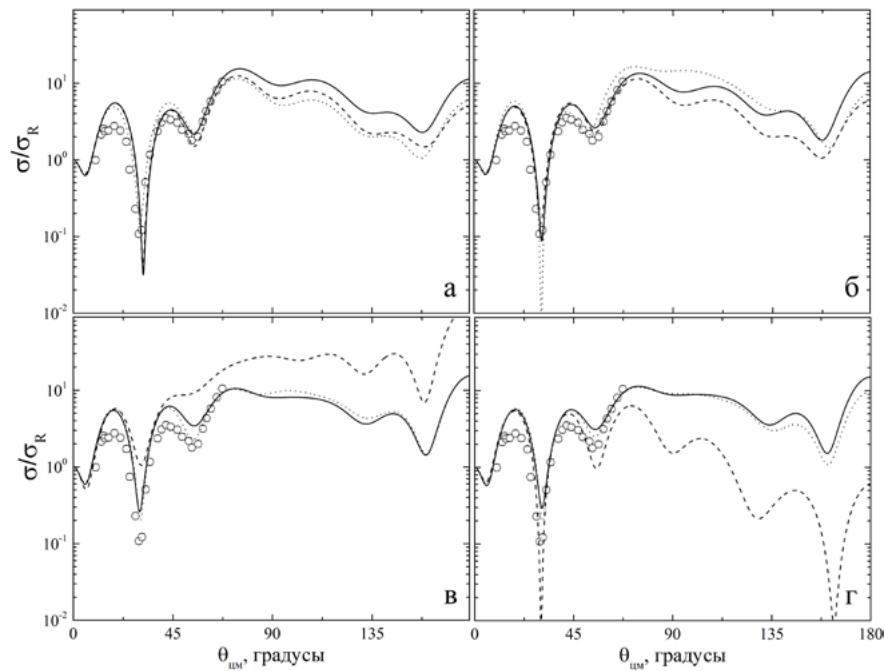


Рисунок 4. Угловые распределения дифференциального сечения упругого рассеяния $d + ^{12}\text{C}$ при энергии 28 МэВ [18]. Экспериментальные данные показаны точками.

Кривые соответствуют расчетам с использованием тех же параметров потенциала, что и на рисунке 3, полученных при энергии 35 МэВ, без дополнительной оптимизации.

На рисунке 4 представлено сравнение расчётов, выполненных с использованием одних и тех же параметров потенциала, с экспериментальными данными для реакции $d + ^{12}\text{C}$ при энергии 28 МэВ [18]. Для исходных потенциалов [4] и [5] значения χ^2/N при 28 МэВ составляют соответственно 94.52 и 34.39, тогда как для потенциалов [6] и [7] получены значения: $\chi^2/N = 942.4$ и 79.01 соответственно. После использования параметров потенциала, оптимизированных по данным при 35 МэВ без дополнительной подгонки к энергии 28 МэВ, значения χ^2/N составляют 113.9, 42.91, 80.53 и 124.3 для потенциалов [4-7] соответственно. При этом потенциал [5] демонстрирует наилучшее согласие с экспериментальными данными при 28 МэВ, тогда как для потенциалов [4], [6] и [7] наблюдаются более заметные отклонения. Полученный результат свидетельствует о физической устойчивости параметров, определённых в настоящей работе, и подтверждает важную роль как объёмного, так и поверхностного поглощения при описании упругого рассеяния дейтронов на лёгких ядрах в области средних энергий.

Таким образом, проведённый анализ показывает, что непосредственная оптимизация параметров оптического потенциала является необходимой для количественного описания угловых распределений упругого рассеяния $d + ^{12}\text{C}$ при энергиях порядка нескольких десятков МэВ. Использование глобальных параметризаций обеспечивает лишь качественное согласие с экспериментом и требует дополнительной корректировки параметров, прежде всего мнимой части потенциала. Полученные в работе параметры могут рассматриваться как уточнение существующих глобальных оптических потенциалов для системы $d + ^{12}\text{C}$ в области средних энергий и использоваться в дальнейшем при анализе неупругого рассеяния и реакций передачи нуклонов.

Заключение

Проведённое исследование показало, что угловые распределения упругого рассеяния дейтронов на ядрах ^{12}C при энергии 35 МэВ чувствительны к выбору параметров оптического потенциала, прежде всего его мнимой части. Прямое применение глобальных параметризаций обеспечивает лишь качественное описание экспериментальных данных, тогда как количественное воспроизведение дифракционной структуры требует дополнительной оптимизации параметров. Параметры поглощения существенно влияют на глубину интерференционных минимумов и поведение сечений при средних и больших углах рассеяния, что указывает на важную роль связи упругого канала с неупругими и другими открытыми каналами реакции. Использование микроскопического двойного фолдинг-подхода для действительной части потенциала показало необходимость её перенормировки. Полученное

значение нормировочного коэффициента $NR = 0.785$ может быть связано с динамическими эффектами, не учитываемыми в статическом фолдинг-описании, включая распад дейтрона и динамическую поляризацию канала. Полученные параметры оптического потенциала могут быть использованы в дальнейших расчётах неупругого рассеяния и реакций передачи нуклонов, в том числе в рамках формализмов DWBA и CRC.

Благодарность: Эта исследовательская работа была выполнена при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (Грант № AP 26198161)

Вклад авторов

Мендибаев К.О. – написание введения, проведение эксперимента (постановка задач и целей), обработка и анализ данных, а также написание заключение.

Әжібеков А.Қ. – написание и корректировка введения, проведение эксперимента (постановка целей), теоретическая обработка и анализ данных различными моделями, редактирование заключения.

Дюсебаева К.С. – проведение эксперимента (подготовка мишени, проверка детекторов), обработка и анализ экспериментальных данных, редактирование заключения и оформление статьи к публикации.

Исатаев Т.Ғ. – проведение эксперимента (калибровка детекторов, систему набоа данных), обработка и анализ экспериментальных данных программе ROOT.

Лукьянов С.М. - написание и корректировка введения, проведение эксперимента (постановка задач), теоретическая обработка и анализ данных, заключение.

Жолдыбаев Т.К. – написание введения, проведение эксперимента (подготовка электронного тракта эксперимента), обработка и анализ экспериментальных данных.

Теміржанов А.А. – проведение эксперимента (подготовка вакуумной системы, цилиндра Фарадея), обработка и экспресс анализ экспериментальных данных, составление библиографии.

Заявление об использовании генеративного ИИ и технологий, использующих ИИ, в процессе подготовки рукописи

В процессе подготовки данной работы авторы использовали Яндекс редактор текста и переводчик с функцией AI для повышения качества текста статьи и перевода обзорных статей в написание введения. После использования этого инструмента/сервиса авторы проверили и отредактировали содержание по мере необходимости и несут полную ответственность за содержание опубликованной статьи.

Список литературы

1. W. H. Dickhoff, R. J. Charity. Recent developments for the optical model of nuclei, *Progress in Particle and Nuclear Physics*, T. 105, с. 252-299 (2019).
2. A. M. Moro, J. Casal, M. Gómez-Ramos. The art of modeling nuclear reactions with weakly bound nuclei: status and perspectives, *European Physical Journal A*, T. 61, с. 47 (2025).
3. R. Satchler. *Direct Nuclear Reactions*, Oxford: Oxford University Press, (1983).
4. H. An, C. Cai. Global deuteron optical model potential for the energy range up to 183 MeV, *Physical Review C*, T. 73, с. 054605 (2006).
5. I. Bojowald et al. Elastic deuteron scattering and optical model parameters at energies up to 100 MeV, *Physical Review C*, T. 38, с. 1153-1163 (1988).
6. Y. Han, Y. Shi, Q. Shen. Deuteron global optical model potential for energies up to 200 MeV, *Physical Review C*, T. 74, с. 044615 (2006).
7. W. W. Daehnick, J.D. Childs, Z. Vrcelj. Global optical model potential for elastic deuteron scattering from 12 to 90 MeV, *Physical Review C*, T. 21, с. 2253-2274 (1980).
8. G. R. Satchler, W. G. Love. Folding model potentials from realistic interactions for heavy-ion scattering, *Physics Reports*, T. 55, с. 183–254 (1979).
9. H. Feshbach. A unified theory of nuclear reactions, *Annals of Physics*, T. 19, с. 287-313 (1962).
10. N. Keeley et al. Dynamic polarization potential and dynamical nonlocality, *Physical Review C*, T. 90, с. 044602 (2014).
11. D.Y. Pang, R. S. Mackintosh. Dynamic polarization potential due to breakup, *Physical Review C*, T. 84, с. 064611 (2011).
12. A. K. Azhibekov et al. Study of one-step and two-step neutron transfer in the reaction $6\text{Li} + 9\text{Be}$, *Chinese Physics C*, T. 48, № 11, с. 114101 (2024).

13. K. Mendibayev et al. Direct and sequential transfer mechanisms in the $^9\text{Be}(6\text{Li},4\text{He})^{11}\text{B}$ reaction: Probing cluster dynamics in light nuclei, *Physical Review C*, Т. 113, с. 034616 (2026).
14. I. J. Thompson. Coupled reaction channels calculations in nuclear physics, *Computer Physics Reports*, Т. 7, с. 167-212 (1988).
15. J. Cook. DFPOT – a program for the calculation of double folded potentials, *Computer Physics Communications*, Т. 25, с. 125-139 (1982).
16. G.-L. Zhang et al. Double folding model calculation applied to the real part of interaction potential, *High Energy Physics and Nuclear Physics*, Т. 31, № 7, с. 634-641 (2007).
17. H. De Vries, C.W. De Jager, C. De Vries. Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, Т. 36, № 3, с. 495-536, (1987).
18. J.-P. Burq, G. Hadinger, J. Kouloumjan, J. Meyer. Asymétries produites par les deutons de 28 MeV polarisés vectoriellement dans les diffusions élastiques $^{12}\text{C}(d, d)^{12}\text{C}$, $^{28}\text{Si}(d, d)^{28}\text{Si}$ et $^{40}\text{Ca}(d, d)^{40}\text{Ca}$, *Nuclear Physics A*, Т. 149, с. 488-500 (1970).

**К.О. Мендибаев^{1,2}, А.К. Әжібеков^{1,2,3}, К.С. Дюсебаева^{1,4*},
Т.Г. Исатаев^{1,2}, С.М. Лукьянов², Т.К. Жолдыбаев¹, Ә.Ә. Теміржанов^{1,5}**

¹Қазақстан Республикасы Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің «Ядролық физика институты» шаруашылық жүргізу құқығындағы республикалық мемлекеттік кәсіпорны
(ҚР ШЖҚ РМК ЯФИ), Алматы, Қазақстан

²Біріккен ядролық зерттеулер институты (БЯЗИ), Дубна, Ресей

³Қорқыт Ата атындағы Қызылорда университеті, Қызылорда, Қазақстан

⁴Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан

⁵Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті, Алматы, Қазақстан

(E-mail: kayrat1988@bk.ru, azhibekoaidos@mail.ru, kura15@mail.ru, talgat_136@mail.ru, lukyan@jinr.ru, timjol@yandex.ru, alik-25.01.97@mail.ru)

35 МэВ энергиясы кезінде ^{12}C ядрода дейтронның серпімді шашырауы

Аңдатпа. 35 МэВ энергиясы кезінде ^{12}C ядроларында дейтрондардың серпімді шашырауының дифференциалдық қималарының бұрыштық үлестірулері өлшенді. Эксперименттік жұмыс Финляндиядағы Ювяскюля университетінің Акселераторлық зертханасында орнатылған Үлкен шашырау камерасын (ҮШК) пайдалана отырып, К130 үдеткіш кешенінде жүргізілді. Жеңіл зарядталған бөлшектер мен реакция өнімдерін сәйкестендіру алғашқы екі детектордағы (ДЕ) энергия шығынын және үшінші детектордағы (Е) қалдық энергияны өлшеуге негізделген ДЕ-Е әдісі арқылы жүзеге асырылды. Эксперимент барысында кіші бұрыштар үшін өлшеулерге 100 мкм, 300 мкм және 4000 мкм қалыңдығындағы детекторлар конфигурациясы пайдаланылса, үлкен бұрыштар үшін сәйкесінше 12 мкм, 700 мкм және 4000 мкм детекторлар қолданылды. Эксперименттік деректер оптикалық потенциалдың жаһандық параметрленуін пайдалана отырып, оптикалық модель шеңберінде талданды. Потенциалдың нақты және жорамал бөліктерінің тереңдік параметрлерін эксперименттік деректерге бейімдеу орындалды. Потенциалдың нақты бөлігі үшін қосымша микроскопиялық қосарлы фолдинг-тәсілі қолданылды. Эксперименттік деректердің үздік сипаттамасы жаһандық оптикалық потенциалдардың модификацияланған параметрлерін пайдаланған кезде қол жеткізілетіні көрсетілді, олар үшін χ^2/N мәндері сәйкесінше 1.438 және 1.526 алынды. Фолдинг-потенциал үшін нормалау коэффициенті 0.785 мәніне ие болды, бұл дейтронның ыдырауына және серпімсіз арналармен байланысуына байланысты динамикалық әсерлердің ықпалын куәландырады.

Түйін сөздер: серпімді шашырау, оптикалық модель, қосарлы потенциал (фолдинг потенциал), FRESCO, DFPOT.

**K.O. Mendibayev^{1,2}, A.K. Azhibekov^{1,2,3}, K.S. Dyussebayeva^{1,4*}, T.G. Issatayev^{1,2}, S.M. Lukyanov²,
T.K. Zholdybayev¹, A.A. Temirzhanov^{1,5}**

¹Republican State Enterprise for the Right of Economic Management "Institute of Nuclear Physics" of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy (RSE on the RHV INP RK), Almaty, Kazakhstan

²Joint Institute for Nuclear Research JINR, Dubna, Russia

³Kyzylorda University named after Korkyt Ata, Kyzyl Orda, Kazakhstan

⁴Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan

⁵Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: kayrat1988@bk.ru, azhibekoaidos@mail.ru,

kura15@mail.ru, talgat_136@mail.ru, lukyan@jinr.ru, timjol@yandex.ru, alik-25.01.97@mail.ru)

Elastic scattering of a deuteron on a ^{12}C nucleus at an energy of 35 MeV

Abstract. Angular distributions of differential cross sections for elastic scattering of deuterons on ^{12}C nuclei at an energy of 35 MeV have been measured. The experiment was performed at the K130 accelerator facility using the Large Scattering Chamber (LSC) installed at the Accelerator Laboratory of the University of Jyväskylä (Finland). Identification of light charged particles and reaction products was carried out using the ΔE -E technique, based on measurements of the energy losses in the first two detectors (ΔE) and the residual energy deposited in the third detector (E). For measurements at forward angles, a detector configuration consisting of 100 μm , 300 μm , and 4000 μm silicon detectors was employed, whereas for larger scattering angles the detector thicknesses were 12 μm , 700 μm , and 4000 μm , respectively. The experimental data were analyzed within the framework of the optical model using global optical-potential parameterizations. The depth parameters of the real and imaginary parts of the potential are adjusted to the experimental data. In addition, the real part of the interaction potential was calculated using a microscopic double-folding approach. It was shown that the best agreement with the experimental data is achieved using modified parameters of the global optical potentials, yielding χ^2/N values of 1.438 and 1.526, respectively. For the folding potential, a normalization factor of 0.785 was obtained, indicating the influence of dynamical effects associated with deuteron breakup and coupling to inelastic channels.

Key words: elastic scattering, optical model, folding potential, FRESKO, DFPOT.

References

1. W. H. Dickhoff, R. J. Charity. Recent developments for the optical model of nuclei, *Progress in Particle and Nuclear Physics*, T. 105, c. 252-299 (2019).
2. A. M. Moro, J. Casal, M. Gómez-Ramos. The art of modeling nuclear reactions with weakly bound nuclei: status and perspectives, *European Physical Journal A*, T. 61, c. 47 (2025).
3. R. Satchler. *Direct Nuclear Reactions*, Oxford: Oxford University Press, (1983).
4. H. An, C. Cai. Global deuteron optical model potential for the energy range up to 183 MeV, *Physical Review C*, T. 73, c. 054605 (2006).
5. I. Bojowald et al. Elastic deuteron scattering and optical model parameters at energies up to 100 MeV, *Physical Review C*, T. 38, c. 1153-1163 (1988).
6. Y. Han, Y. Shi, Q. Shen. Deuteron global optical model potential for energies up to 200 MeV, *Physical Review C*, T. 74, c. 044615 (2006).
7. W. W. Daehnick, J.D. Childs, Z. Vrcelj. Global optical model potential for elastic deuteron scattering from 12 to 90 MeV, *Physical Review C*, T. 21, c. 2253-2274 (1980).
8. G. R. Satchler, W. G. Love. Folding model potentials from realistic interactions for heavy-ion scattering, *Physics Reports*, T. 55, c. 183-254 (1979).
9. H. Feshbach. A unified theory of nuclear reactions, *Annals of Physics*, T. 19, c. 287-313 (1962).
10. N. Keeley et al. Dynamic polarization potential and dynamical nonlocality, *Physical Review C*, T. 90, c. 044602 (2014).
11. D.Y. Pang, R. S. Mackintosh. Dynamic polarization potential due to breakup, *Physical Review C*, T. 84, c. 064611 (2011).
12. A. K. Azhibekov et al. Study of one-step and two-step neutron transfer in the reaction $6\text{Li} + 9\text{Be}$, *Chinese Physics C*, T. 48, № 11, c. 114101 (2024).

13. K. Mendibayev et al. Direct and sequential transfer mechanisms in the $^9\text{Be}(6\text{Li},4\text{He})^{11}\text{B}$ reaction: Probing cluster dynamics in light nuclei, *Physical Review C*, Т. 113, с. 034616 (2026).
14. I. J. Thompson. Coupled reaction channels calculations in nuclear physics, *Computer Physics Reports*, Т. 7, с. 167-212 (1988).
15. J. Cook. DFPOT – a program for the calculation of double folded potentials, *Computer Physics Communications*, Т. 25, с. 125-139 (1982).
16. G.-L. Zhang et al. Double folding model calculation applied to the real part of interaction potential, *High Energy Physics and Nuclear Physics*, Т. 31, № 7, с. 634-641 (2007).
17. H. De Vries, C.W. De Jager, C. De Vries. Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, Т. 36, № 3, с. 495-536, (1987).
18. J.-P. Burq, G. Hadinger, J. Kouloumjan, J. Meyer. Asymétries produites par les deutons de 28 MeV polarisés vectoriellement dans les diffusions élastiques $^{12}\text{C}(d, d)^{12}\text{C}$, $^{28}\text{Si}(d, d)^{28}\text{Si}$ et $^{40}\text{Ca}(d, d)^{40}\text{Ca}$, *Nuclear Physics A*, Т. 149, с. 488-500 (1970).

Сведения об авторах:

Мендибаев К.О. – PhD, старший научный сотрудник лаборатории ядерных процессов Института ядерной физики (г. Алматы, Казахстан) и Объединенного института ядерных Исследований (г. Дубна, Россия), kayrat1988@bk.ru

Әжібеков А.Қ. – PhD, ведущий научный сотрудник лаборатории ядерных процессов Института ядерной физики (г. Алматы, Казахстан) и старший научный сотрудник Объединенного института ядерных Исследований (г. Дубна, Россия), azhibekoaidos@mail.ru

Дюсебаева К.С. – автор для корреспонденции, докторант, старший преподаватель кафедры теоретической и ядерной физики Казахского Национального Университета имени аль-Фараби, пр. аль-Фараби 71, Алматы, Казахстан, kura15@mail.ru

Исатаев Т.Ғ. – научный сотрудник лаборатории ядерных процессов Института ядерной физики (г. Алматы, Казахстан), докторант кафедры ядерной физики Евразийского Национального Университета имени Л. Н. Гумилева, ул. Сатпаева 2, г. Астана, Казахстан, talgat_136@mail.ru

Лукьянов С.М. – старший научный сотрудник Лаборатории ядерных реакций Объединенного института ядерных исследований, Жолио-Кюри 6, г. Дубна, Россия, lukyuan@jinr.ru

Жолдыбаев Т.К. – заведующий отдела ядерной физики РГП «Институт ядерной физики», Ибрагимова 1, г. Алматы, Казахстан, timjol@yandex.ru

Темиржанов А.А. – младший научный сотрудник Института ядерной физики (г. Алматы, Казахстан), докторант по образовательной программе робототехника КазНИТУ им. К.И. Сатпаева, alik-25.01.97@mail.ru

Мендибаев Қ.О. – PhD, Ядролық процестер зертханасының аға ғылыми қызметкері (Алматы қ., Қазақстан) және Біріккен ядролық зерттеулер институты (Дубна қ., Ресей), kayrat1988@bk.ru

Әжібеков А.Қ. – PhD, Ядролық процестер зертханасының жетекші ғылыми қызметкері (Алматы қ., Қазақстан) және Біріккен ядролық зерттеулер институтының аға ғылыми қызметкері (Дубна қ., Ресей), azhibekoaidos@mail.ru

Дюсебаева Қ.С. – хат-хабар авторы, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің теориялық және ядролық физика кафедрасының докторанты, аға оқытушысы, әл-Фараби даңғылы 71, Алматы қ., Қазақстан, kura15@mail.ru

Исатаев Т.Ғ. – Ядролық процестер зертханасының ғылыми қызметкері (Алматы қ., Қазақстан), Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің ядролық физика кафедрасының докторанты, Сәтбаев көшесі 2, Астана қ., Қазақстан, talgat_136@mail.ru

Лукьянов С.М. – Біріккен ядролық зерттеулер институтының Ядролық реакциялар зертханасының аға ғылыми қызметкері, Жолио-Кюри көшесі 6, Дубна қ., Ресей, lukyuan@jinr.ru

Жолдыбаев Т.Қ. – «Ядролық физика институты» РМК ядролық физика бөлімінің меңгерушісі, Ибрагимов көшесі 1, Алматы қ., Қазақстан, timjol@yandex.ru

Темиржанов Ә.Ә. – Ядролық физика институтының кіші ғылыми қызметкері (Алматы қ., Қазақстан), К.И. Сәтбаев атындағы ҚазҰТУ-дың робототехника білім беру бағдарламасының докторанты, alik-25.01.97@mail.ru

Mendibayev K.O. – Senior Researcher in the Nuclear Processes Laboratory at the Institute of Nuclear Physics in Almaty, PhD, kayrat1988@bk.ru

Azhibekov A. K. - Leading researcher in the nuclear processes laboratory at the Institute of Nuclear Physics in Almaty, holds a PhD, azhibekoaidos@mail.ru

Dyussebayeva K.S. – corresponding author, PhD student, Senior Lecturer at the Department of Theoretical and Nuclear Physics, Farabi University, Al-Farabi Kazakh National University, Al-Farabi Ave. 71, Almaty, Kazakhstan, kura15@mail.ru

Issatayev T.G.– Researcher in the Nuclear Processes Laboratory at the Institute of Nuclear Physics in Almaty and a doctoral candidate in the Nuclear Physics Department at the L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2 Satpayev Street, Astana, Kazakhstan, talgat_136@mail.ru

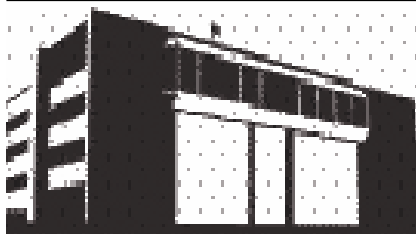
Lukyanov S.M. – Senior Researcher in the Nuclear Reactions Laboratory of the Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie Street, Dubna, Russia, lukyan@jinr.ru

Zholdybayev T.K. – Head of the Nuclear Physics Department, RSE «Institute of Nuclear Physics», Ibragimova 1, Almaty, Kazakhstan, timjol@yandex.ru

Temirzhanov A.A. - Junior researcher at the Institute of Nuclear Physics in Almaty, is pursuing a doctoral degree in robotics at K. Satpayev Kazakh National Technical University, alik-25.01.97@mail.ru



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/>).



${}^7\text{Li}$ ядросының ${}^{12}\text{C}$ ядросымен серпімді әсерлесуінің эксперименттік нәтижелері мен теориялық талдау жолдарына шолу

**Н. Амангелді¹ , Ғ. Ергалиұлы¹ , Б.Б. Балабеков^{1,2*} ,
А. Жумадил¹**

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²Қазақстан Республикасы Президентінің Іс басқармасы Медициналық орталығының Ауруханасы, Астана, Қазақстан

E-mail: nurlan.amangeldi1979@gmail.com, yergaliuly.gani@gmail.com, baglanbalabekov95@gmail.com, aminazhumadil403@gmail.com

Аңдатпа. ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесінің серпімді шашырауы бойынша жүргізілген эксперименттік және теориялық зерттеулерге кең шолу жасалған. Жеңіл ядро болып саналатын ${}^7\text{Li}$ кластерлік құрылымға ие және ыдырауға бейім болғандықтан, оның көміртеппен әсерлесуін талдау ядроның ішкі құрылымын, реакция механизмдерін және астрофизикалық процестердегі литийдің рөлін нақтылауға мүмкіндік береді. Авторлар Poling (1972), Schumacher (1973), Vineyard (1984), Katori (1988), Nadasen (1995), Parkar (2007) және Jun (2010) еңбектерін жүйелеп, энергияға тәуелді әртүрлі процестерді сипаттайды: төмен энергияларда кулондық әсер мен параметрлік белгісіздік, орташада – дифракциялық минимумдар мен ыдырау ықтималдығы, жоғарыда – бірегей потенциалдар, ал тосқауыл маңында – қосылу процесінің басымдығы. Оптикалық модельдер мен CDCC әдісі арқылы алынған нәтижелер ${}^7\text{Li}$ ядросының ыдырау әсерін, жұтылу потенциалының энергияға сызықтық тәуелділігін және толық қосылу реакциясының маңызын көрсетеді. Сонымен қатар, литийдің астрофизикалық аномалиясын түсіндіру үшін бұл жүйенің деректері ерекше мәнге ие. Шолу жұмысы әртүрлі энергия диапазондарындағы эксперименттік деректерді салыстырып, олардың эволюциясын көрсетеді және ядролық құрылым мен астрофизикалық процестерді тереңірек түсінуге қосымша үлес қосады. Бұл зерттеу литийдің бастапқы нуклеосинтез кезіндегі молшылықтарын түсіндіруде маңызды дерек көзі болып табылады.

Түйін сөздер: ядролық шашырау, серпімді шашырау, ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі, оптикалық модель, ыдырау әсері, астрофизикалық процестер, литий аномалиясы.

Жіберілді 16.04.2026. Өзгертілді 8.06.2026. Қабылданды 10.06.2026. Онлайн қол жетімді 30.06.2026.

*хат-хабар авторы

Кіріспе

Ядролық шашырау – ядро мен ядро немесе ядро мен бөлшек өзара әсерлескенде олардың қозғалыс бағыты мен энергиясының өзгеруі арқылы сипатталатын негізгі процесс. Бұл құбылыс ядролық күштердің табиғатын, ядроның құрылымдық ерекшеліктерін және реакция механизмдерін зерттеуде аса маңызды рөл атқарады. Әсіресе серпімді шашырау деректері ядроның потенциалдық өрісін, радиусын, диффузиялық қасиеттерін және кластерлік құрылымдағы қанығу әсерін анықтауға мүмкіндік береді.

${}^7\text{Li}$ ядросының басқа ядроларда шашырауын зерттеу ерекше мәнге ие. ${}^7\text{Li}$ жеңіл ядро болғанымен, оның құрылымы кластерлік сипатқа ие және ыдырауға бейім. Сондықтан ${}^7\text{Li}$ серпімді әсерлесуін талдау ядроның ішкі құрылымын нақтылауға, реакция механизмдерін ашуға және астрофизикалық процестердегі литийдің рөлін түсіндіруге мүмкіндік береді. Бұл әсіресе литийдің молшылықтарын түсіндіруде маңызды, себебі ${}^6\text{Li}$ және ${}^7\text{Li}$ изотоптарының бастапқы нуклеосинтез кезіндегі мөлшері мен қазіргі бақылаулар арасындағы айырмашылық әлі күнге дейін ядролық астрофизиканың басты мәселелерінің бірі болып отыр.

Астрофизикалық тұрғыдан литий аномалиясы — ${}^6\text{Li}$ және ${}^7\text{Li}$ изотоптарының бастапқы нуклеосинтез кезіндегі болжанған молшылықтары мен қазіргі бақылаулар арасындағы айырмашылықты білдіреді. Бұл айырмашылықты түсіндіру үшін ядролық реакциялардың нақты механизмдерін зерттеу қажет. ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі осы тұрғыда ерекше маңызды, себебі көміртеппен серпімді әсерлесу литийдің кластерлік құрылымын, ыдырау ықтималдығын және қосылу процестерін айқындауға мүмкіндік береді. Мұндай талдау литийдің астрофизикалық процестердегі рөлін нақтылауға және литий аномалиясын түсіндіруге қосымша дерек береді.

Осыған байланысты ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі көптеген зерттеулерде әртүрлі энергия диапазондарында қарастырылды. Poling (1972) еңбегінде оптикалық модельдің тиімділігі көрсетіліп, ${}^7\text{Li}$ үшін минималық потенциалдың тереңдігі көбірек болуы қажет екені анықталды. Schumacher (1973) жұмысы 36 МэВ энергияда серпімді шашырауды зерттеп, кластерлік құрылымдағы қанығу әсерін көрсетті. Vineyard (1984) зерттеуі 34 МэВ энергияда жүргізіліп, ыдырау әсерлерінің маңызы айқындалды. Katori (1988) және Nadasen (1995) еңбектері орташа және жоғары энергияларда ыдырау әсерін және бірегей потенциалдарды анықтауға бағытталды. Parkar (2007) жұмысы энергияға байланысты әртүрлі механизмдердің басым болатынын көрсетті: төмен энергияларда параметрлік анықталмағандық, орташада – ыдырау әсері, жоғарыда – бірегей потенциалдар, ал тосқауыл маңында – қосылу (синтез/қосылу) негізгі процесс. Jun (2010) еңбегінде ${}^7\text{Li}({}^6\text{Li}, {}^6\text{Li}){}^7\text{Li}$ серпімді шашырауы мен беріліс реакциялары зерттеліп, спектроскопиялық факторлар анықталды және астрофизикалық реакция жылдамдықтары есептелді.

Біздің жұмыс ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесінің серпімді шашырауын талдауға арналған. Бұл жүйе бойынша әртүрлі энергияларда жүргізілген эксперименттік және теориялық зерттеулердің нәтижелері жинақталып, олардың ерекшеліктері мен кемшіліктері салыстырмалы түрде қарастырылады. Шолудың басты ерекшелігі – осы уақытқа дейін жасалған эксперименттік мәндер мен теориялық талдауларды жүйелеп, олардың эволюциясын көрсету. Бұл талдау ${}^7\text{Li}$ ядросының серпімді әсерлесуін түсіндіруде энергияға тәуелді әртүрлі механизмдердің рөлін ашып көрсетеді және ядролық құрылым мен астрофизикалық процестерді түсінуге қосымша үлес қосады.

Негізгі бөлім

Осы жүйеге байланысты алғашқы экспериментті Poling et al. (1972) жүргізіп төмен энергиялардағы (4.5–13 MeV) серпімді шашырау деректері алынып, оптикалық модель арқылы талданды. Радиус пен диффузия параметрлері екі изотопқа ортақ болғанымен, ${}^7\text{Li}$ үшін жұтылу потенциалының тереңдігі көбірек екені анықталды. Бұл энергияға тәуелді абсорбцияның маңызын көрсетті. Радиус (R) және диффузия (a) мәндері екі изотоп үшін бірдей таңдалған. Реалды потенциалдың тереңдігі (V) шамалас: мысалы, жиын В үшін ${}^6\text{Li}$ — 148 МэВ, ${}^7\text{Li}$ — 166 МэВ. жұтылу потенциалының тереңдігі (W) ${}^7\text{Li}$ үшін айтарлықтай көбірек. Бұл айырмашылық нақты сандарда да көрінеді. Мысалы, Кесте 1-де ${}^6\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ және ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ потенциалдық параметрлер жиындары көрсетілген [1].

Poling (1972) жұмысы төмен энергиялардағы серпімді шашырауды оптикалық модель арқылы сипаттаудың тиімділігін көрсетті. Бұл нәтижелер кейінгі зерттеулерге негіз болды. Мысалы, Schumacher (1973) осы модельдік тәсілді орташа энергияларда (36 МэВ) қолданып, кластерлік құрылымдағы қанығу әсерін айқындады. Осылайша, Poling жұмысы бастапқы параметрлерді анықтап берсе, Schumacher зерттеуі оларды кеңейтіп, литий ядросының құрылымдық ерекшеліктерін нақтылауға мүмкіндік берді. Бұл екі зерттеу арасындағы сабақтастық ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесін әртүрлі энергия диапазондарында біртіндеп тереңірек түсінуге жол ашты.

Кесте 1. Оптикалық модельдің параметрлік жиынтықтары [1]

Жиын	R (фм)	a (фм)	V (МэВ)	W ₄₋₅ (МэВ)	W ₁₃ (МэВ)	V (МэВ)	W ₄₋₅ (МэВ)	W ₁₃ (МэВ)
			⁶ Li + ¹² C			⁷ Li + ¹² C		
A	3.50	0.65	138	6.5	8.8	157	12.0	25.0
B	3.37	0.65	148	6.9	8.5	166	12.0	26.0
C	3.21	0.63	209	7.9	10.2	232	9.0	32.0
D	3.21	0.59	332	7.8	14.5	350	18.0	35.0
E	3.21	0.58	403	13.0	18.0	420	19.0	40.0

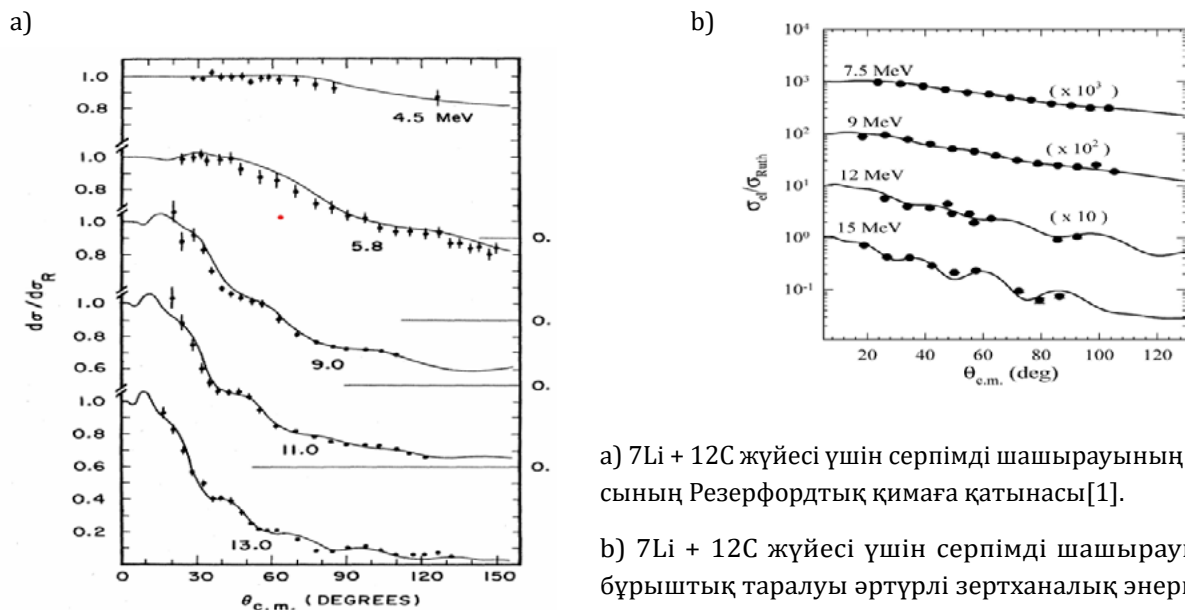
Осы нәтижелерден көрініп тұрғандай, радиус пен диффузия параметрлері екі изотопқа ортақ болғанымен, ⁷Li үшін жұтылу потенциалының тереңдігі әлдеқайда үлкен болуы қажет. Бұл ⁷Li ядросының көміртеппен соқтығысу кезінде жұтылу ықтималдығы жоғары екенін көрсетеді және оның бұрыштық таралуы ⁶Liге қарағанда «тегіс (тегістелген)» сипатқа ие болатынын түсіндіреді.

Бұдан бөлек жүргізілген тәжірибелер мен оптикалық модельдік есептеулер көрсеткендей, ⁶Li және ⁷Li изотоптарының көміртеппен соқтығысуын сипаттау үшін жұтылу потенциалының тереңдігі энергияға сызықтық тәуелділікпен өзгеруі қажет. Авторлар бұл туралы тікелей атап өтеді: «Барлық энергиялар үшін сәйкестік жақсы сақталады, егер жұтылу потенциалы тереңдігі энергияға сызықты түрде тәуелді болса» [1-5].

Сонымен қатар, есептеулерде: «жұтылу потенциалының тереңдігі W энергияға сызықты түрде тәуелді болады және ол 1-кестеде көрсетілген шектері арасында өзгереді: W4.5 — 4.5 МэВ-тағы тереңдік; W13 — 13.0 МэВ-тағы тереңдік» [1-5]. Бұл тұжырымдардан көрініп тұрғандай, энергия артқан сайын жұтылу ықтималдығы да артады, ал модельдің тәжірибелік деректермен сәйкесуі үшін жұтылу тереңдігінің сызықтық өсуін ескеру қажет.

Энергияға тәуелді абсорбция — оптикалық модельдің негізгі элементі. Ол әсіресе ⁷Li үшін маңызды, себебі бұл изотоптың реакция кезінде жұтылу ықтималдығы жоғарырақ. Сондықтан энергияға тәуелді жұтылу потенциалын енгізу деректерді дұрыс сипаттаудың шешуші шарты болып табылады.

Parkar et al. (2007) зерттеулерінде 7.5–15 MeV энергияларда серпімді шашырау және альфа-бөлшектердің бұрыштық таралуы өлшенді, синтез/қосылу қималары реакция қималарына тең болып, тікелей реакция үлесі мардымсыз. Оптикалық модель арқылы реакция қималары талданды. Бұл энергияларда тікелей реакциялар үлесі аз (<6%), ал негізгі процесс — толық қосылу (синтез/қосылу) [6]. Parkar (2007) тосқауыл маңында синтез/қосылу негізгі процесс екенін дәлелдеді, ал тікелей реакция үлесі өте аз екенін көрсетті.



Сурет 1. Төмен энергиялар – Кулондық шашырау басым.

a) ⁷Li + ¹²C жүйесі үшін серпімді шашырауының қимасының Резерфордтық қимаға қатынасы [1].

b) ⁷Li + ¹²C жүйесі үшін серпімді шашырауының бұрыштық таралуы әртүрлі зертханалық энергияда. Үздік емес сызықтар - оптикалық модель есептеулері [6].

Parkar (2007) еңбегінде тікелей реакция үлесі <6% деп көрсетілгенімен, нақты қандай процестердің осы санатқа жататыны ашылмаған. Әдетте тікелей реакцияға нуклон тасымалдау (transfer) және ыдырау (breakup) арналары кіреді. Бұл энергия диапазонында олардың үлесі мардымсыз болып шыққан, сондықтан негізгі процесс толық қосылу (синтез/қосылу) екені анықталды. Осылайша, Parkar жұмысы тікелей реакциялардың серпімді шашырауға қосқан үлесінің аз екенін сандық тұрғыдан көрсетті, ал синтез/қосылу тосқауыл маңында басым процесс болып табылады

Schumacher et al. (1973) жұмыстарында 34–36 MeV энергияларда серпімді және серпімсіз шашыраулар өлшенді. DWBA әдісі арқылы бір нуклонды тасымалдау реакциялары талданды. Нәтижелер ${}^7\text{Li}$ ядросының құрылымдық ерекшеліктерін ескергенде серпімді шашырауды жақсы сипаттауға болатынын көрсетті.

Schumacher et al. (1973) зерттеуіндегі эксперименттік нәтижелер

- ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін 36 МэВ энергияда абсолюттік дифференциалдық қималар өлшенді.
- Спектрлерде ${}^7\text{Li}$ ядросының негізгі күйі мен 0,48 МэВ-тағы бірінші қозған күйі дублет ретінде көрінді [7].
- Ал теориялық талдау жолдары: қолданылған потенциал — Вудс–Саксон түріндегі оптикалық модель (реалды және жұтылу бөліктері бар). Параметрлер бірнеше «жиын» түрінде анықталды (Кесте 2 және 3):
- Мысалы, «III» параметрлер жиыны: $V \approx 188$ МэВ, $r_r \approx 1.21$ фм, $a_r \approx 0.82$ фм, $W \approx 12.9$ МэВ.
- «IV» жиыны: $V \approx 245$ МэВ, $r_r \approx 1.21$ фм, $a_r \approx 0.76$ фм, $W \approx 14.7$ МэВ [7].
- Авторлар бірнеше параметрлік шешімдер бірдей сапалы сәйкестік беретінін атап өтеді, бірақ физикалық тұрғыдан негізделген мәндер «байланысқан күй» есептеулерімен салыстыру арқылы таңдалды.

Кесте 2. ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін оптикалық модельдің Вудс–Саксон потенциалының параметрлері (алғашқы іздеу нәтижелері) [7]

Жүйе	Энергия (МэВ)	V (МэВ)	r_r (фм)	a_r (фм)	W (МэВ)	r_v (фм)	a_v (фм)
${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$	36	139.1	1.62	0.58	18.8	1.99	0.93

Кесте 3. ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін оптикалық модельдің Вудс–Саксон потенциалының параметрлері (кеңейтілген іздеу нәтижелері) [7]

Жүйе	Энергия (МэВ)	Потенциал тобы	V (МэВ)	r_r (фм)	a_r (фм)	W (МэВ)	r_v (фм)	a_v (фм)
${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$	36	III	187.8	1.208	0.824	12.9	2.17	0.770
		IV	245.0	1.210	0.759	14.7	2.00	0.909

Нәтижелер ${}^7\text{Li}$ үшін реалды потенциалдың салыстырмалы түрде таяз екенін көрсетті, бұл литийдің кластерлік құрылымындағы ядролық күштердің ішінара қанығу эффектісімен түсіндіріледі.

Vineyard et al. (1984) зерттеулерінде 24–34 MeV энергияларда кең бұрыштық диапазонда деректер алынды. Вудс–Саксон және Қосарланған потенциалдары қолданылды. Үлкен бұрыштардағы деректер потенциалды нақтылауға мүмкіндік берді. Қосарланған потенциалдар тәжірибемен жақсы сәйкеседі, бірақ нормализация коэффициентінің <1 болуы ядроның бұзылу әсерін көрсетеді.

Эксперимент нәтижелері:

- ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін серпімді шашырау деректері 34 МэВ энергияда өлшенді.
- Бұрыштық диапазон кең болды (10° – 170°), сондықтан үлкен бұрыштардағы қималар да сенімді тіркелді.
- Алдыңғы бұрыштарда (80° дейін) деректерді оптикалық модель жақсы сипаттады, бірақ үлкен бұрыштарда сәйкестік нашар болды.
- ${}^6\text{Li}$ мен ${}^7\text{Li}$ салыстырғанда, ${}^7\text{Li}$ үшін үлкен бұрыштардағы қималар шамамен бір тәртіпке (order of magnitude) аз болып шықты. Бұл екі изотоптың потенциалдық сипаттамаларының айырмашылығын көрсетті [8].

- Теориялық талдау жолдары Вудс-Саксон потенциалдары қолданылып:
- Бірнеше параметрлік жиындар (VII, VIII, IX) алынды (Кесте 4).
- Барлық жиындар деректерді ұқсас сапада сипаттады, бірақ үлкен бұрыштардағы қималарды толық түсіндіре алмады.
- Реалды потенциалдардың тереңдігі 159–290 МэВ аралығында өзгерді, ал жұтылу бөлігі 7–11 МэВ шамасында болды [8-12].

Кесте 4. ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін Вудс-Саксон оптикалық модель параметрлері ($E = 34$ МэВ) [8]

Жиын	V_0 (МэВ)	r_r (фм)	a_r (фм)	W_0 (МэВ)	r_i (фм)	a_i (фм)
VII	159	0.63	0.73	7.20	1.38	0.85
VIII	223	0.63	0.68	8.64	1.31	0.92
IX	290	0.64	0.64	10.71	1.22	0.97

V_0 – нақты потенциал тереңдігі, W_0 – мнималық потенциал тереңдігі, r_r , a_r – нақты потенциалдың радиус және диффузиялық параметрлері, r_i , a_i – жұтылу потенциалының радиус және диффузиялық параметрлері

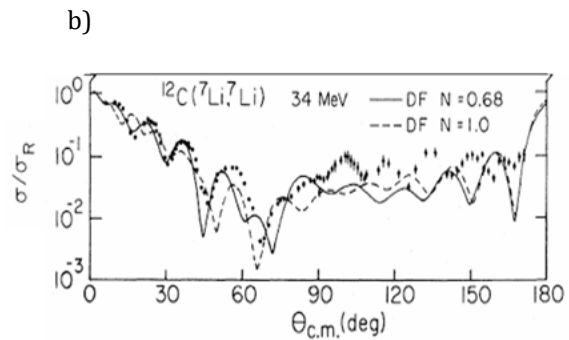
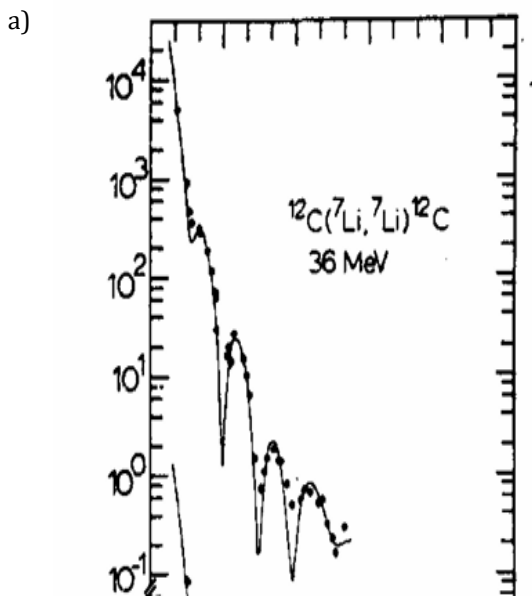
Қосарланған потенциалдар да қолданылып:

- Нормализация коэффициенті $N \approx 0.68$ болып шықты (Кесте 5).
- Бұл коэффициенттің бірліктен төмен болуы ${}^7\text{Li}$ ядросының ыдырау әсерлерімен түсіндірілді.
- Квадрупольдік бөлік қосылғанда да сәйкестік жақсармады, керісінше осцилляциялық құрылым әлсіреп кетті.

Кесте 5. ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін қосарланған оптикалық модель параметрлері ($E = 34$ МэВ) [8]

Жүйе	Энергия (МэВ)	N (норм. фактор)	W_0 (МэВ)	r_i (фм)	a_i (фм)
${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$	34	0.68	10.67	1.21	1.14

N – нақты қосарланған потенциалды масштабтау үшін қолданылатын нормализация коэффициенті, W_0 – жұтылу потенциалының тереңдігі, r_i , a_i – жұтылу потенциалының радиус және диффузиялық параметрлері.



a) серпімді шашырау және оптикалық модельге сәйкес келтіру [7].

b) Вудс-Саксон потенциалдарының негізінде ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін серпімді шашыраудың қоздыру функциясының болжамдары [8]. Эксперименттік деректер - [9].

Сурет 2. Орташа энергиялар – дифракциялық минимумдар айқын.

Katori et al. (1988) зерттеулерінде 18–28 MeV/нуклон энергияларда серпімді және инеластикалық шашыраулар өлшенді. CDCC әдісі қолданылып, ${}^7\text{Li}$ ядросының бұзылу әсері талданды. Реалды потенциалдың шамамен 25% әлсіреуі ${}^7\text{Li}$ ядросының бұзылуымен түсіндірілді.

Katori et al. (1988) эксперимент нәтижелері:

- ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін серпімді шашырау қималары 131.8 МэВ энергияда өлшенді.
- Бұрыштық диапазон кеңейтіліп, өте алдыңғы бұрыштарда (2° – 10°) және әдеттегі бұрыштарда (10° – 37°) деректер жиналды [10].
- Энергия рұқсаттылығы шамамен 400 кэВ болғандықтан, ${}^7\text{Li}$ дің 0.478 МэВ қозған күйі негізгі күйден ажыратылмады, сондықтан оның серпімді каналға қосқан үлесі кейін талқыланды.
- Қималардың белгісіздігі шамамен 15%-дан төмен болды [10-17].

Теориялық талдау жолдары: Бір арналы қосарланған моделі қолданылып, деректерді сипаттау үшін қосарлы потенциалдың реалды бөлігін айтарлықтай азайту ($\text{NR} \approx 0.6$) қажет екені белгілі болды. CDCC (coupled discretized continuum channels) әдісі қолданылып, $\text{NR} = 1.0$ кезінде деректерді жақсы сипаттады және бұл $\text{NR} < 1$ азаюының себебі — ${}^7\text{Li}$ ядросының ыдырау (breakup) әсері екенін көрсетті [10-17].

Vineyard (1984) және Katori (1988) еңбектерінде ${}^7\text{Li}$ ядросының ыдырау әсерінің маңызы көрсетілгенімен, нақты қай арналардың басым екені толық ашылмаған. Әдетте ${}^7\text{Li} \rightarrow \alpha + t$ ыдырау каналы негізгі үлес қосады, себебі бұл бөлшектердің байланысы әлсіз және ыдырау ықтималдығы жоғары. CDCC әдісінің артықшылығы — дәл осы ыдырау арналарының серпімді шашырауға сандық үлесін есептеуге мүмкіндік беруінде. Бұл тәсіл арқылы серпімді қималарды дұрыс сипаттау үшін folded-потенциалдың реалды бөлігін азайту қажеттілігі түсіндірілді. Сонымен қатар, CDCC әдісі ыдырау каналдарының серпімді шашырауға қосқан үлесін сандық тұрғыдан бағалауға мүмкіндік беріп, ${}^7\text{Li}$ ядросының құрылымдық ерекшеліктерін нақтылауда шешуші рөл атқарды.

Nadasen et al. (1995) 350 MeV энергияда серпімді шашырау деректері бірегей оптикалық потенциалдарды анықтауға мүмкіндік берді. ${}^7\text{Li}$ квадруполь моментінің әсері байқалмады. Жоғары энергияда бірегей потенциалдар алынып, төмен энергиядағы көпмәнділікті жоюға мүмкіндік берді.

Nadasen et al. (1995) зерттеу нәтижелері:

- ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі 350 МэВ энергияда зерттелді.
- Бұрыштық диапазон: 3° – 43° (орталық масса жүйесінде).
- Қималар сегіз реттік шаманы қамтыды.
- Алдыңғы бұрыштарда аз ғана дифракциялық осцилляциялар байқалды, ал үлкен бұрыштарда қималар тегіс экспоненциалды түрде азайды. Бұл «farside» шашыраудың басымдылығымен түсіндірілді.
- ${}^7\text{Li}$ квадрупольдік моментінің әсері байқалмады: дифракциялық минимумдардың тереңдігі ${}^6\text{Li}$ нәтижелерімен ұқсас болды [18].

Теориялық оптикалық модельдік талдау арқылы:

- ECIS79 бағдарламасы қолданылды.
- Реалды және көлемдік жұтылу потенциалдары қарастырылды.
- Алты параметр бойынша іздеу жүргізіліп, бірегей шешімдер алынды.
- Үлкен бұрыштардағы деректер бірегей потенциалдарды таңдауда шешуші рөл атқарды.
- Қосарланған модельдік есептеулер нәтижесінде:
- МЗ Y-типті нуклон-нуклондық күш қолданылды.
- ${}^7\text{Li}$ және ${}^{12}\text{C}$ тығыздықтары Вудс–Саксон толқындық функцияларымен сипатталды.
- Есептелген қосарланған потенциалдар феноменологиялық бірегей потенциалдарға өте ұқсас болды
- ${}^{12}\text{C}$ үшін нормализация қажет болмады ($N = 1.0$) [18-24].

Su Jun et al. (2010) 23.7 MeV энергияда серпімді шашырау және тасымалдау реакциялары өлшенді. DWBA арқылы спектроскопиялық факторлар анықталды (0.73 және 0.90). Бұл деректер астрофизикалық тұрғыдан маңызды ${}^6\text{Li}(n,\gamma){}^7\text{Li}$ реакциясының қималарын есептеуге мүмкіндік берді. Su Jun et al. (2010) мақаласынан эксперименттік нәтижелерге көз жүгіртсек:

- Жұмыста ${}^7\text{Li}({}^6\text{Li}, {}^6\text{Li}) {}^7\text{Li}$ серпімді шашырауы және беріліс реакциялары $E_{\text{cm}} = 23.7$ МэВ энергияда өлшенді.
- Серпімді шашырау қималары оптикалық модельмен талданды, беріліс үлесі өте аз (<1%).
- Бұрыштық таралулар DWBA әдісімен қарастырылды [25].

Теориялық талдау жолдары

Оптикалық потенциал параметрлері Вудс–Саксон формасында анықталды (Кесте 6).

Кесте 6. ${}^6\text{Li} + {}^7\text{Li}$ жүйесі үшін оптикалық потенциал параметрлері ($E_{\text{c.m.}} = 23.7$ МэВ) [25]

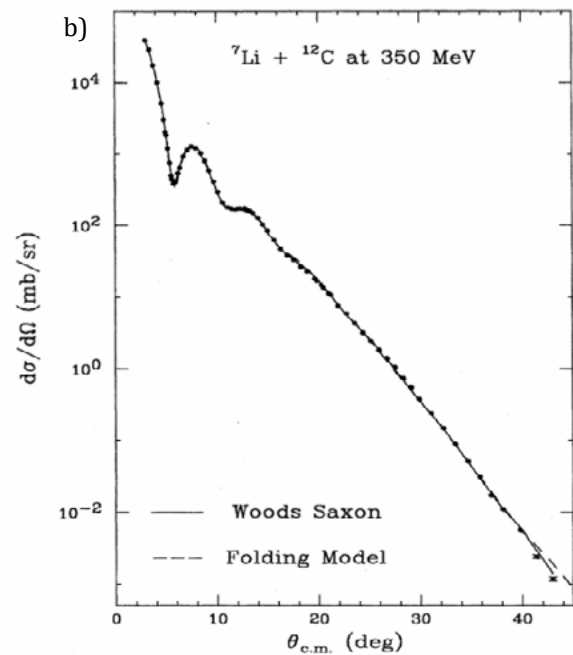
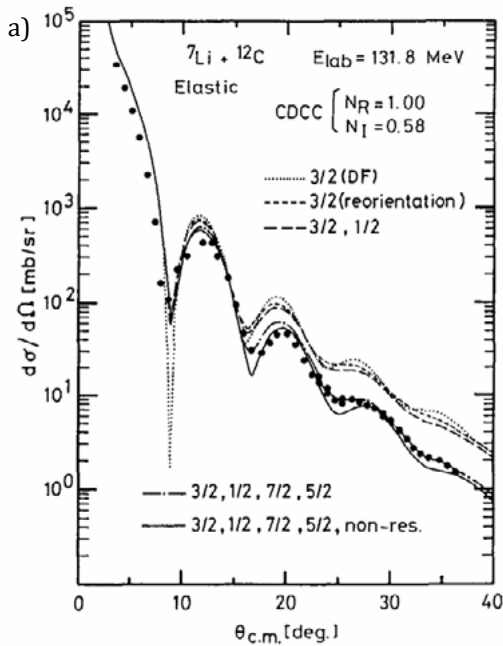
V (МэВ)	r_R (фм)	a_R (фм)	W (МэВ)	r_I (фм)	a_I (фм)	r_C (фм)	$\chi^2/\text{нүкте}$
73.4	0.50	0.92	32.6	1.00	0.80	1.25	4.0

V – нақты (real) потенциалдың тереңдігі, r_R , a_R – нақты потенциалдың радиус және диффузиялық параметрлері, W – жұтылу потенциалдың тереңдігі, r_I , a_I – жұтылу потенциалының радиус және диффузиялық параметрлері, r_C – Кулондық радиус параметрі, $\chi^2/\text{нүкте}$ – эксперименттік деректерге сәйкестік сапасы DWBA талдауымен ${}^7\text{Li} + n$ спектроскопиялық факторлары есептелді:

- Негізгі күй үшін: 0.73 ± 0.05 .
- Бірінші қозған күй үшін: 0.90 ± 0.09 [25].

Бұл мәндер бұрынғы теориялық және тәжірибелік нәтижелермен жақсы сәйкеседі.

Jun (2010) еңбегінде DWBA әдісі арқылы алынған спектроскопиялық факторлар (негізгі күй үшін 0.73 ± 0.05 және бірінші қозған күй үшін 0.90 ± 0.09) астрофизикалық реакция қималарын есептеуде шешуші рөл атқарады. Бұл факторлар тікелей ${}^6\text{Li}(n,\gamma){}^7\text{Li}$ реакциясының қималарын нормалауға енгізіледі. Мысалы, негізгі күй үшін алынған 0.73 мәні реакция қимасын шамамен 27%-ға азайтады, ал бірінші қозған күй үшін 0.90 мәні қиманы тек 10%-ға төмендетеді. Осылайша, спектроскопиялық факторлардың айырмашылығы астрофизикалық G-фактордың энергияға тәуелді қисығын қалыптастыруда маңызды: негізгі күй үлесі азайғанымен, қозған күй үлесі жоғарырақ болып, жалпы реакция жылдамдығының энергияға тәуелділігін нақтылайды. Бұл нәтижелер литий аномалиясын түсіндіруде қолданылатын астрофизикалық модельдерге сандық түзету енгізуге мүмкіндік береді.



a) ${}^7\text{Li}$ нің қозған күйлерінің әртүрлі қосылыстарының (резонанстық және резонанстық емес бөліктер) серпімді арнаға әсері. Ең үлкен үлес 4.63 МэВ және 6.68 МэВ резонанстық күйлерден келеді; ал жергілікті күйді қайта бағдарлау және 0.478 МэВ күйінің үлестері олардан аз және шамамен бірдей тәртіпте болады [10].

b) ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ 350 МэВ энергияда серпімді шашырауы үшін дифференциалды қиманың бұрыштық таралуы. Үзік емес сызық — берілген бірегей потенциал параметрлеріне сәйкес оптикалық модельдің сәйкес келтіруі; үзік сызық — қосарланған модельінің есептеулері [18].

Сурет 3. Жоғары энергиялар – экспоненциалды азаю байқалады.

Салыстырмалы талдау бөлімі

Жалпы алғанда, ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесін зерттеу біртіндеп дамып, әр кезеңде жаңа қырларын ашты. Poling (1972) төмен энергияларда оптикалық модельдің тиімділігін көрсетіп, бастапқы параметрлерді анықтады. Schumacher (1973) осы негізді орташа энергияларда кеңейтіп, кластерлік құрылымдағы қанығу әсерін айқындады. Vineyard (1984) үлкен бұрыштардағы деректерді енгізіп, ыдырау әсерінің маңызын көрсетті. Katori (1988) CDCC әдісін қолданып, ${}^7\text{Li}$ ядросының бұзылу ықтималдығын нақтылады. Nadasen (1995) жоғары энергияларда бірегей потенциалдарды анықтап, төмен энергиядағы көпмәнділікті жоюға мүмкіндік берді. Parkar (2007) тосқауыл маңында қосылу процесінің басым екенін дәлелдеді. Соңында Su Jun (2010) тасымалдау реакцияларын зерттеп, спектроскопиялық факторларды есептеп, астрофизикалық тұрғыдан маңызды нәтижелерге қол жеткізді. Осылайша, зерттеулердің хронологиясы төмен энергиядан жоғары энергияға дейінгі процестерді біртіндеп ашып, литийдің құрылымдық ерекшеліктерін және астрофизикалық рөлін толық сипаттауға мүмкіндік берді.

Poling et al. (1972) жүргізілген зерттеу көрсеткендей, оптикалық модель литийдің көміртеппен соқтығысуын сипаттауда тиімді құрал болып табылады. ${}^6\text{Li}$ және ${}^7\text{Li}$ үшін радиус пен диффузия параметрлері ортақ, ал реалды потенциалдың тереңдігі шамалас мәндер береді. Алайда, ${}^7\text{Li}$ үшін жұтылу потенциалының тереңдігі айтарлықтай көбірек болуы қажет, бұл оның реакция кезінде жұтылуға бейімділігін көрсетеді. Сонымен қатар, энергияға тәуелді абсорбцияның маңызы ерекше: модельдің тәжірибелік деректермен сәйкесуі үшін жұтылу тереңдіктің энергияға сызықтық тәуелділігін енгізу қажет. Бұл әсіресе ${}^7\text{Li}$ үшін маңызды, себебі энергия артқан сайын оның жұтылу ықтималдығы өседі. Жалпы алғанда, ${}^6\text{Li}$ дің бұрыштық таралуы дифракциялық сипатқа ие болса, ${}^7\text{Li}$ дің бұрыштық таралуы біршама «тегістелген» болып келеді. Бұл айырмашылық парциальдық амплитудаларда да көрінеді: ${}^6\text{Li}$ үшін амплитудалар үлкенірек және жұп-тақ толқындар әртүрлі траекториямен дамиды, ал ${}^7\text{Li}$ үшін амплитудалар біртекті түрде азаяды. Осылайша, литий изотоптарының көміртеппен соқтығысуын талдау олардың реакциялық қасиеттеріндегі айырмашылықты айқын көрсетеді: ${}^6\text{Li}$ — дифракциялық құрылымға бейім, ал ${}^7\text{Li}$ — энергияға тәуелді жұтылуы жоғарырақ және бұрыштық таралуы біркелкі сипатқа ие.

Schumacher (1973) еңбегінде ${}^7\text{Li}$ ядросының ${}^{12}\text{C}$ ядросымен серпімді әсерлесуі 36 МэВ энергияда зерттелді. Эксперименттік бұрыштық таралуы оптикалық модель арқылы жақсы сипатталды. Авторлар бірнеше параметрлік шешімдер ұсынғанымен, физикалық тұрғыдан негізделген мәндер байланысқан күй есептеулерімен салыстыру арқылы таңдалды. Бұл талдау ${}^7\text{Li}$ үшін реалды потенциалдың таяз екенін және кластерлік құрылымдағы ядролық күштердің қанығу әсерін көрсетеді.

Vineyard (1984) еңбегінде ${}^7\text{Li}$ ядросының ${}^{12}\text{C}$ ядросымен серпімді әсерлесуі 34 МэВ энергияда зерттелді. Эксперименттік деректер алдыңғы бұрыштарда оптикалық модельмен жақсы сипатталса да, үлкен бұрыштарда сәйкестік жеткіліксіз болды. Вудс-Саксон және қосарланған потенциалдар қолданылып, бірнеше параметрлік шешімдер алынды. Реалды потенциалдың тереңдігі 159–290 МэВ аралығында, ал нормализация коэффициенті $N \approx 0.68$ болды. Бұл нәтижелер ${}^7\text{Li}$ үшін ыдырау әсерлерінің маңызды рөл атқаратынын және үлкен бұрыштардағы қималарды түсіндіру үшін күрделірек модельдер қажет екенін көрсетті.

Katori (1988) еңбегінде ${}^7\text{Li}$ ядросының ${}^{12}\text{C}$ ядросымен серпімді әсерлесуі 131.8 МэВ энергияда зерттелді. Эксперименттік деректерді бір арналы қосарланған моделі арқылы сипаттау үшін реалды потенциалдың шамамен 40% азаюы қажет болды. Ал CDCC әдісі $NR = 1.0$ кезінде деректерді жақсы сипаттап, бұл азаюдың себебі ${}^7\text{Li}$ ядросының ыдырау әсері екенін дәлелдеді. Осылайша, ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесінде серпімді шашырауды түсіндіруде проективтің ыдырауы негізгі фактор болып табылады.

Nadasen (1995) еңбегінде ${}^7\text{Li}$ ядросының ${}^{12}\text{C}$ ядросымен серпімді әсерлесуі 350 МэВ энергияда зерттелді. Эксперименттік деректер үлкен бұрыштарда тегіс экспоненциалды азаюды көрсетті, бұл бірегей оптикалық модельдік потенциалдарды анықтауға мүмкіндік берді. Алынған потенциалдар ${}^6\text{Li}$ нәтижелерімен ұқсас болып шықты, сондықтан ${}^7\text{Li}$ дің квадрупольдік моменті бұл энергияда айтарлықтай әсер етпейді. Doublefolding модельдік есептеулер феноменологиялық потенциалдармен жақсы сәйкесіп, нормализациясыз деректерді сипаттады (${}^{12}\text{C}$ үшін). Осылайша, жоғары энергияларда ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі үшін бірегей потенциалдар алғаш рет анықталды.

Parkar et al. (2007) « ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесі бойынша зерттеулердің эволюциясы төмен энергиядағы феноменологиялық сипаттамадан бастап, орташа энергияларда ыдырау әсерін ескеруге, ал жоғары энергияларда бірегей потенциалдарды анықтауға дейінгі даму жолын көрсетеді. Тосқауыл маңындағы энергияларда (Parkar, 2007) қосылу қималары реакция қималарына тең болып, тікелей реакция үлесі мардымсыз екені дәлелденді. Осылайша, ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесінде серпімді әсерлесуді түсіндіруде энергияға байланысты әртүрлі механизмдер басым болады: төменде — параметрлік анықталмағандық, ортада — ыдырау әсері, жоғарыда — бірегей потенциалдар, ал тосқауыл маңында — синтез/қосылу негізгі процесс.

Jun (2010) еңбегінде ⁷Li(⁶Li,⁶Li)⁷Li серпімді шашырауы және беріліс реакциялары $E_{c.m.} = 23.7$ МэВ энергияда зерттелді. DWBA талдауымен ⁷Li = ⁶Li + n спектроскопиялық факторлары сенімді түрде анықталды. Алынған мәндер ⁶Li(n, γ)⁷Li реакциясының қималарын есептеуге қолданылып, астрофизикалық энергияларда реакция жылдамдығы тұрақты екенін көрсетті. Бұл зерттеу ⁷Li ядросының құрылымын нақтылау мен астрофизикалық литий молшылықтарын түсіндіру үшін маңызды.

Кесте 7. ⁷Li + ¹²C жүйесі бойынша салыстырмалы эволюциялық талдау

Мақала	Энергия	Эксперименттік ерекшеліктер	Теориялық талдау жолдары	Негізгі тұжырым
Poling (1972)	4.5–13 МэВ	Төмен энергияларда серпімді шашырау қималары өлшенді.	Оптикалық модель, энергияға тәуелді параметрлер.	Төмен энергияларда деректерді сипаттау мүмкін болды, бірақ үлкен бұрыштарда жеткіліксіз.
Schumacher (1973)	36 МэВ	Серпімді шашырау қималары, дублет құрылымы (негізгі күй және 0.48 МэВ қозған күй).	Оптикалық модель (Вудс–Саксон). Бірнеше параметрлік шешімдер.	Оптикалық модель деректерді жақсы сипаттады, бірақ параметрлердің бірнеше шешімі бар.
Vineyard (1984)	34 МэВ	Кең бұрыштық диапазонда (10°–170°) деректер жиналды.	Вудс–Саксон және қосарланған потенциалдар. $N \approx 0.68$.	Folding потенциалдар тәжірибемен жақсы сәйкеседі, бірақ $N < 1$ ыдырау әсерін көрсетті.
Katori (1988)	131.8 МэВ	Алдыңғы бұрыштарда (2°–10°) және әдеттегі бұрыштарда (10°–37°) деректер жиналды.	Қосарланған және CDCC әдістері.	$NR < 1$ азаюының себебі — ⁷ Li ядросының ыдырауы екенін дәлелдеді.
Nadasen (1995)	350 МэВ	Жоғары энергияда (3°–43°) деректер сегіз реттік шаманы қамтыды.	Бірегей оптикалық модельдік потенциалдар анықталды. Folding модель нормализациясыз деректерді сипаттады.	⁷ Li квадрупольдік моментінің әсері байқалмады. Бірегей потенциалдар алғаш рет анықталды.
Parkar (2007)	7.5–15 МэВ (тосқауыл маңы)	Серпімді шашырау және альфабөлшектердің бұрыштық таралулары өлшенді.	Оптикалық модель (SNOOPY), статистикалық модель (PACE), FRDWBA.	Синтез/қосылу қималары реакция қималарына тең, тікелей реакция үлесі <6%. Синтез/қосылу негізгі процесс.

Jun (2010)	23.7 МэВ (${}^6\text{Li} + {}^7\text{Li}$)	Серпімді шашырау және беріліс реакциялары өлшенді.	Оптикалық модель (PTOLEMY), DWBA талдау.	${}^7\text{Li} = {}^6\text{Li} + n$ спектроскопиялық факторлары анықталды (0.73 және 0.90). ${}^6\text{Li}(n,\gamma){}^7\text{Li}$ реакциясының астрофизикалық жылдамдығы есептелді.
------------	--	--	--	---

7-кестедегі параметрлерді талдау көрсеткендей, әр автордың нәтижелері энергияға және қолданылған әдіске байланысты ерекшеленеді. Poling (1972) төмен энергияларда жұтылу потенциалының сызықтық тәуелділігін көрсетті. Schumacher (1973) орташа энергияларда DWBA әдісі арқылы нуклон тасымалдау арналарын ескеріп, кластерлік қанығу әсерін ашты. Vineyard (1984) үлкен бұрыштардағы қималардың азаюын тіркеп, ыдырау әсерінің маңызын көрсетті. Katori (1988) CDCC әдісін қолданып, ${}^7\text{Li} \rightarrow \alpha + t$ ыдырау арнасының серпімді шашырауға қосқан үлесін сандық тұрғыдан бағалады. Nadasen (1995) жоғары энергияларда бірегей потенциалдарды анықтап, төмен энергиядағы көпмәнділікті жоюға мүмкіндік берді. Parkar (2007) тосқауыл маңында синтез/қосылу процесінің басым екенін дәлелдеп, тікелей реакция үлесінің (<6%) мардымсыз екенін көрсетті. Соңында Su Jun (2010) тасымалдау реакцияларын зерттеп, спектроскопиялық факторларды есептеп, астрофизикалық тұрғыдан маңызды нәтижелерге қол жеткізді. Осылайша, кестедегі параметрлерді талдау зерттеулердің бір-бірімен сабақтастығын және энергияға тәуелді механизмдердің эволюциясын айқын көрсетеді.

Қорытынды

${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесінің серпімді шашырауын әртүрлі энергия диапазондарында қарастырған зерттеулер көрсеткендей, қолданылған теориялық модельдердің тиімділігі энергияға тәуелді болып келеді:

- Төмен энергиялар (4–13 МэВ): Оптикалық модель (ОМ) ең қолайлы, себебі жұтылу потенциалының сызықтық тәуелділігі деректерді дұрыс сипаттаудың негізгі шарты болып табылады.
- Орташа энергиялар (30–40 МэВ): DWBA әдісі тиімді, өйткені нуклон тасымалдау арналары мен кластерлік қанығу әсерін ескергенде серпімді шашырау дәл сипатталады.
- Орташа-жоғары энергиялар (20–130 МэВ/нуклон): CDCC әдісі басым, себебі ол ${}^7\text{Li} \rightarrow \alpha + t$ ыдырау арнасының серпімді шашырауға қосқан үлесін сандық тұрғыдан бағалауға мүмкіндік береді.
- Жоғары энергиялар (350 МэВ және одан жоғары): байланысқан арналар және бірегей оптикалық потенциалдар тиімді, өйткені көпмәнділікті жоюға және деректерді бірегей шешімдермен сипаттауға мүмкіндік береді.
- Тосқауыл маңы (7–15 МэВ): Синтез/қосылу процесін сипаттау үшін ОМ негізінде толық қосылу қималары қарастырылды, ал тікелей реакциялар үлесі мардымсыз (<6%).
- Астрофизикалық тұрғыдан (23–24 МэВ): DWBA әдісі спектроскопиялық факторларды есептеуде тиімді болып шықты, бұл факторлар Gфактордың энергияға тәуелді қисығын нақтылауға мүмкіндік берді.

Осылайша, әр энергия диапазонында қолданылған модельдер бір-бірін толықтырып, ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ жүйесінің серпімді шашырауын жан-жақты сипаттауға мүмкіндік береді. Бұл талдау литийдің құрылымдық ерекшеліктерін ашуға және астрофизикалық процестердегі рөлін нақтылауға қосымша үлес қосады.

Алғыс айту

Бұл зерттеуді Қазақстан Республикасы Ғылым және жоғары білім министрлігі (Грант № AP26194167 «Бірнеше нысана өрісінде Li изотоптарының ыдырауы мен тритонның тасымалдануының әсері») қаржыландырады.

Авторлардың қосқан үлесі

Амангелді Н. –зерттеуге жетекшілік етті, мақаланың соңғы нұсқасын бекітті.

Ерғалиұлы Ғ. –мақаланың тұжырымдамасына өз үлесін қосты.

Балабеков Б.Б. –мәтінді және библиографияны жазып, деректерді өңдеді. Ілеспе хатты әзірлеп, редакцияға жолдауды іске асырды.

А. Жумадил –мақаланың безендірілуіне үлес қосты.

Қолжазбаны дайындау процесінде генеративті ЖИ және ЖИ пайдаланатын технологияларды пайдалану туралы мәлімдеме

Осы жұмысты дайындау процесінде автор Балабеков Б.Б. таблица құру барысында, кей тіркестерді дұрыс түсіндіре алу үшін, жұмыстың мазмұнын дұрыс жеткізу мақсатында Copilot пайдаланды. Осы құралды/сервисті пайдаланғаннан кейін автор Балабеков Б.Б. мазмұнды қажеттілігіне қарай тексерді, редакциялады және жарияланған мақаланың мазмұны үшін толық жауапты болады.

Әдебиеттер тізімі

1. J. E. Poling, E. Norbeck, and R. R. Carlson, Elastic Scattering of Lithium by Carbon, *Phys. Rev. C* 5, 1819 (1972). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.5.1819>
2. Bethge, K. Meier-Ewert, and K. O. Pfeiffer, Elastic scattering of Li6 by C12 at 20 MeV, *Z. Physik* 208, 486 (1968). <https://doi.org/10.1007/BF01393055>
3. Johnson and M. A. Waggoner, Elastic scattering of Li6 by C12 at 13 MeV, *Phys. Rev. C* 2, 41 (1970). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.2.41>
4. Bennett and I. S. Grant, Elastic scattering of Li7 by C12 at 7.3 MeV, in *Proceedings of the Third Conference on Reactions Between Complex Nuclei*, edited by A. Ghiorso, R. M. Diamond, and H. E. Conzett (University of California Press, Berkeley, 1963), p. 50.
5. Watson, Optical Potentials for the Elastic Scattering of 6Li Ions, *Nucl. Phys. A* 198, 129 (1972). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(72\)90775-0](https://doi.org/10.1016/0375-9474(72)90775-0)
6. V. V. Parkar, K. Mahata, S. Santra, S. Kailas, A. Shrivastava, K. Ramachandran, A. Chatterjee, V. Jha, and P. Singh, *Fusion cross sections for 7Li + 12C system at near barrier energies*, *Nucl. Phys. A* 792, 187 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2007.05.013>
7. Schumacher, N. Ueta, H. H. Duhm, K.-I. Kubota, and W. J. Klages, Lithium elastic and inelastic scattering and lithium-induced single nucleon transfer reactions, *Nucl. Phys. A* 212, 573 (1973). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(73\)90300-7](https://doi.org/10.1016/0375-9474(73)90300-7)
8. M. F. Vineyard, J. Cook, K. W. Kemper, and M. N. Stephens, *Optical potentials for the elastic scattering of 6Li+12C, 6Li+16O, and 7Li+12C*, *Phys. Rev. C* 30, 916 (1984). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.30.916>
9. B. R. Fulton and T. M. Cormier, *Phys. Lett. B* 97, 209 (1980). [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(80\)90633-4](https://doi.org/10.1016/0370-2693(80)90633-4)
10. Katori, T. Shimoda, T. Fukuda, S. Shimoura, A. Sakaguchi, M. Tanaka, T. Yamagata, N. Takahashi, H. Ogata, M. Kamimura, and Y. Sakuragi, Breakup effects of 6,7Li on elastic and inelastic scattering from 12C at 18–28 MeV/nucleon, *Nucl. Phys. A* 480, 323 (1988). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(88\)90387-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(88)90387-1)
11. Z. Majka, H. Gils, and H. Rebel, *Z. Phys. A* 288, 139 (1978). <https://doi.org/10.1007/BF01408585>
12. V. Hinzdo, K. W. Kemper, and J. Szymakowski, *Phys. Rev. Lett.* 46, 590 (1981). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.46.590>
13. J. Cook, N. M. Clarke, J. Coopersmith, and R. J. Griffiths, *Nucl. Phys. A* 386, 346 (1982). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(82\)90457-0](https://doi.org/10.1016/0375-9474(82)90457-0)
14. J. S. Eck, T. R. Ophel, P. D. Clark, J. Nurzynski, and D. C. Weissner, *Phys. Rev. C* 25, 2391 (1982). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.25.2391>
15. I. J. Thompson and M. A. Nagarajan, *Phys. Lett. B* 106, 163 (1981). [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(81\)90136-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(81)90136-6)
16. H. Amakawa, A. Mori, H. Nishioka, K. Yazaki, and S. Yamaji, *Phys. Rev. C* 23, 583 (1981). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.23.583>
17. R. S. Mackintosh and A. M. Kobos, *Phys. Lett. B* 116, 95 (1982). [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(82\)90584-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(82)90584-6)
18. Nadasen, J. Brusoe, J. Farhat, T. Stevens, J. Williams, L. Nieman, J. S. Winfield, R. E. Warner, F. D. Becchetti, J. W. Jänecke, T. Annakkage, J. Bajema, D. Roberts, and H. S. Govinden, Unique potentials for the elastic scattering of 350 MeV 7Li from 12C and 28Si, *Phys. Rev. C* 52, 1894 (1995). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.52.1894>

19. L. T. Chua, F. D. Becchetti, J. Janecke, and F. L. Milder, Nucl. Phys. A 273, 243 (1976). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(76\)90253-4](https://doi.org/10.1016/0375-9474(76)90253-4)
20. C. B. Fulmer et al., Nucl. Phys. A 356, 235 (1981). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(81\)90246-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(81)90246-1)
21. R. Huffman, A. Galonsky, R. Markham, and C. Williamson, Phys. Rev. C 22, 1522 (1980). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.22.1522>
22. A. Nadasen et al., Phys. Rev. C 37, 132 (1988). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.37.132>
23. A. Nadasen et al., Phys. Rev. C 39, 536 (1989). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.39.536>
24. A. Nadasen et al., Phys. Rev. C 47, 674 (1993). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.47.674>
25. Su Jun, Z.-H. Li, B. Guo, X.-X. Bai, Z.-C. Li, J.-C. Liu, Y.-B. Wang, G. Lian, S. Zeng, B.-X. Wang, S.-Q. Yan, Y.-J. Li, E.-T. Li, Q.-W. Fan, and W.-P. Liu, Neutron spectroscopic factors of ${}^7\text{Li}$ and astrophysical ${}^6\text{Li}(n,\gamma){}^7\text{Li}$ reaction rates, Chin. Phys. Lett. 27, 052101 (2010). <https://doi.org/10.1088/0256-307X/27/5/052101>

N. Amangeldi¹, G. Yergaliuly¹, B.B. Balabekov^{1,2*}, A. Zhumadil¹

¹ *L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan*

² *Hospital of the Medical Center of the Administrative Department
of the President of the Republic of Kazakhstan, Astana, Kazakhstan*

(E-mail: nurlan.amangeldi1979@gmail.com ; yergaliuly.gani@gmail.com ;
baglanbalabekov95@gmail.com ; aminazhumadil403@gmail.com)

A Review of Experimental Results and Theoretical Approaches to the Elastic Interaction between ${}^7\text{Li}$ and ${}^{12}\text{C}$ Nuclei

Abstract. The article provides a comprehensive review of experimental and theoretical studies on the elastic scattering of the ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ system. The light nucleus ${}^7\text{Li}$ has a cluster structure and is prone to breakup, making its interaction with carbon crucial for clarifying nuclear structure, reaction mechanisms, and the role of lithium in astrophysical processes. The authors systematize the works of Poling (1972), Schumacher (1973), Vineyard (1984), Katori (1988), Nadasen (1995), Parkar (2007), and Jun (2010), highlighting the energy-dependent nature of different processes: at low energies Coulomb effects and parameter uncertainties dominate, at intermediate energies diffraction minima and breakup probabilities appear, at higher energies unique potentials are observed, and near the barrier fusion processes prevail. Results obtained using optical models and the CDCC method demonstrate the significance of ${}^7\text{Li}$ breakup, the linear dependence of absorption potential depth on energy, and the importance of complete fusion. Furthermore, data on this system are particularly relevant for explaining the astrophysical lithium anomaly. The review compares experimental findings across different energy ranges, traces their evolution, and contributes to a deeper understanding of nuclear structure and astrophysical processes. This study serves as an important source for clarifying lithium abundances in primordial nucleosynthesis.

Keywords: nuclear scattering; elastic scattering; ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ system; optical model; breakup effects; astrophysical processes; lithium abundance

Н. Амангелди¹, Ғ. Ергалиұлы¹, Б.Б. Балабеков^{1,2*}, А. Жумади¹

¹ *Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилёва, Астана, Казахстан*

² *Больница Медицинского центра Управления делами Президента Республики Казахстан, Астана, Казахстан*

(E-mail: nurlan.amangeldi1979@gmail.com , yergaliuly.gani@gmail.com ,
baglanbalabekov95@gmail.com , aminazhumadil403@gmail.com)

Обзор экспериментальных результатов и методов теоретического анализа упругого взаимодействия ядра ${}^7\text{Li}$ с ядром ${}^{12}\text{C}$

Аннотация. В статье представлен широкий обзор экспериментальных и теоретических исследований по упругому рассеянию системы ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$. Лёгкое ядро ${}^7\text{Li}$ обладает кластерной структурой и склонно к распаду,

поэтому его взаимодействие с углеродом позволяет уточнить внутреннее строение ядра, механизмы реакций и роль лития в астрофизических процессах. Авторы систематизируют работы Poling (1972), Schumacher (1973), Vineyard (1984), Katori (1988), Nadasen (1995), Parkar (2007) и Jun (2010), показывая зависимость различных процессов от энергии: на низких энергиях доминируют кулоновское взаимодействие и параметрическая неопределённость, на средних — дифракционные минимумы и вероятность распада, на высоких — уникальные потенциалы, а вблизи барьера — процессы слияния. Результаты, полученные с помощью оптических моделей и метода CDCC, демонстрируют влияние распада ядра ${}^7\text{Li}$, линейную зависимость глубины поглощающего потенциала от энергии и важность полного слияния. Кроме того, данные по этой системе имеют особое значение для объяснения литиевой астрофизической аномалии. Обзор сопоставляет экспериментальные результаты в разных диапазонах энергий, показывает их эволюцию и вносит вклад в более глубокое понимание ядерной структуры и астрофизических процессов. Исследование служит важным источником для объяснения избыточности лития в первичном нуклеосинтезе.

Ключевые слова: ядерное рассеяние; упругое рассеяние; система ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$; оптическая модель; эффекты распада; астрофизические процессы; литиевая аномалия

References

1. J. E. Poling, E. Norbeck, and R. R. Carlson, Elastic Scattering of Lithium by Carbon, *Phys. Rev. C* 5, 1819 (1972). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.5.1819>
2. Bethge, K. Meier-Ewert, and K. O. Pfeiffer, Elastic scattering of Li6 by C12 at 20 MeV, *Z. Physik* 208, 486 (1968). <https://doi.org/10.1007/BF01393055>
3. Johnson and M. A. Waggoner, Elastic scattering of Li6 by C12 at 13 MeV, *Phys. Rev. C* 2, 41 (1970). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.2.41>
4. Bennett and I. S. Grant, Elastic scattering of Li7 by C12 at 7.3 MeV, in *Proceedings of the Third Conference on Reactions Between Complex Nuclei*, edited by A. Ghiorso, R. M. Diamond, and H. E. Conzett (University of California Press, Berkeley, 1963), p. 50.
5. Watson, Optical Potentials for the Elastic Scattering of 6Li Ions, *Nucl. Phys. A* 198, 129 (1972). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(72\)90775-0](https://doi.org/10.1016/0375-9474(72)90775-0)
6. V. V. Parkar, K. Mahata, S. Santra, S. Kailas, A. Shrivastava, K. Ramachandran, A. Chatterjee, V. Jha, and P. Singh, *Fusion cross sections for ${}^7\text{Li} + {}^{12}\text{C}$ system at near barrier energies*, *Nucl. Phys. A* 792, 187 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2007.05.013>
7. Schumacher, N. Ueta, H. H. Duhm, K.-I. Kubota, and W. J. Klages, Lithium elastic and inelastic scattering and lithium-induced single nucleon transfer reactions, *Nucl. Phys. A* 212, 573 (1973). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(73\)90300-7](https://doi.org/10.1016/0375-9474(73)90300-7)
8. M. F. Vineyard, J. Cook, K. W. Kemper, and M. N. Stephens, *Optical potentials for the elastic scattering of $6\text{Li}+{}^{12}\text{C}$, $6\text{Li}+{}^{16}\text{O}$, and ${}^7\text{Li}+{}^{12}\text{C}$* , *Phys. Rev. C* 30, 916 (1984). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.30.916>
9. B. R. Fulton and T. M. Cormier, *Phys. Lett. B* 97, 209 (1980). [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(80\)90633-4](https://doi.org/10.1016/0370-2693(80)90633-4)
10. Katori, T. Shimoda, T. Fukuda, S. Shimoura, A. Sakaguchi, M. Tanaka, T. Yamagata, N. Takahashi, H. Ogata, M. Kamimura, and Y. Sakuragi, Breakup effects of $6,7\text{Li}$ on elastic and inelastic scattering from ${}^{12}\text{C}$ at 18–28 MeV/nucleon, *Nucl. Phys. A* 480, 323 (1988). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(88\)90387-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(88)90387-1)
11. Z. Majka, H. Gils, and H. Rebel, *Z. Phys. A* 288, 139 (1978). <https://doi.org/10.1007/BF01408585>
12. V. Hinzdo, K. W. Kemper, and J. Szymakowski, *Phys. Rev. Lett.* 46, 590 (1981). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.46.590>
13. J. Cook, N. M. Clarke, J. Coopersmith, and R. J. Griffiths, *Nucl. Phys. A* 386, 346 (1982). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(82\)90457-0](https://doi.org/10.1016/0375-9474(82)90457-0)
14. J. S. Eck, T. R. Ophel, P. D. Clark, J. Nurzynski, and D. C. Weissner, *Phys. Rev. C* 25, 2391 (1982). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.25.2391>
15. I. J. Thompson and M. A. Nagarajan, *Phys. Lett. B* 106, 163 (1981). [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(81\)90136-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(81)90136-6)
16. H. Amakawa, A. Mori, H. Nishioka, K. Yazaki, and S. Yamaji, *Phys. Rev. C* 23, 583 (1981). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.23.583>
17. R. S. Mackintosh and A. M. Kobos, *Phys. Lett. B* 116, 95 (1982). [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(82\)90584-6](https://doi.org/10.1016/0370-2693(82)90584-6)
18. Nadasen, J. Brusoe, J. Farhat, T. Stevens, J. Williams, L. Nieman, J. S. Winfield, R. E. Warner, F. D. Becchetti, J. W. Jänecke, T. Annakkage, J. Bajema, D. Roberts, and H. S. Govinden, Unique potentials for the elastic scattering of 350 MeV ${}^7\text{Li}$

- from ^{12}C and ^{28}Si , Phys. Rev. C 52, 1894 (1995). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.52.1894>
19. L. T. Chua, F. D. Becchetti, J. Janecke, and F. L. Milder, Nucl. Phys. A 273, 243 (1976). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(76\)90253-4](https://doi.org/10.1016/0375-9474(76)90253-4)
20. C. B. Fulmer et al., Nucl. Phys. A 356, 235 (1981). [https://doi.org/10.1016/0375-9474\(81\)90246-1](https://doi.org/10.1016/0375-9474(81)90246-1)
21. R. Huffman, A. Galonsky, R. Markham, and C. Williamson, Phys. Rev. C 22, 1522 (1980). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.22.1522>
22. A. Nadasen et al., Phys. Rev. C 37, 132 (1988). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.37.132>
23. A. Nadasen et al., Phys. Rev. C 39, 536 (1989). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.39.536>
24. A. Nadasen et al., Phys. Rev. C 47, 674 (1993). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.47.674>
25. Su Jun, Z.-H. Li, B. Guo, X.-X. Bai, Z.-C. Li, J.-C. Liu, Y.-B. Wang, G. Lian, S. Zeng, B.-X. Wang, S.-Q. Yan, Y.-J. Li, E.-T. Li, Q.-W. Fan, and W.-P. Liu, Neutron spectroscopic factors of ^7Li and astrophysical $^6\text{Li}(n,\gamma)^7\text{Li}$ reaction rates, Chin. Phys. Lett. 27, 052101 (2010). <https://doi.org/10.1088/0256-307X/27/5/052101>

Авторлар туралы мәлімет:

Амангелді Н. – PhD, қауымдастырылған профессор, Еуразия Ұлттық университеті, Қажымұқан к-сі, 13, 010008, Астана, Қазақстан, +7 707 951 10 18.

Ергалиұлы Ғ. – PhD, Еуразия Ұлттық университеті, Қажымұқан к-сі, 13, 010008, Астана, Қазақстан, +7 777 743 82 11.

Балабеков Б.Б. – хат-хабар авторы, докторант, Еуразия Ұлттық университеті, Қажымұқан к-сі, 13, 010008, Астана, Қазақстан, +7 702 276 11 12 .

А. Жумадил – магистрант, Еуразия Ұлттық университеті, Қажымұқан к-сі, 13, 010008, Астана, Қазақстан, +7 775 938 04 83 .

Амангелді Н. –PhD, доцент, Евразийский национальный университет, ул. Кажымукана, 13, 010008, Астана, Казахстан, +7 707 951 10 18.

Ергалиұлы Ғ. –PhD, Евразийский национальный университет, ул. Кажымукана, 13, 010008, Астана, Казахстан, +7 777 743 82 11.

Балабеков Б.Б. – автор для корреспонденции, докторант, Евразийский национальный университет, ул. Кажымукана, 13, 010008, Астана, Казахстан, +7 702 276 11 12.

А. Жумадил – магистрант, Евразийский национальный университет, ул. Кажымукана, 13, 010008, Астана, Казахстан, +7 775 938 04 83.

Amangeldi N. – PhD, Associate Professor, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhymukan St. 13, 010008, Astana, Kazakhstan, +7 707 951 10 18.

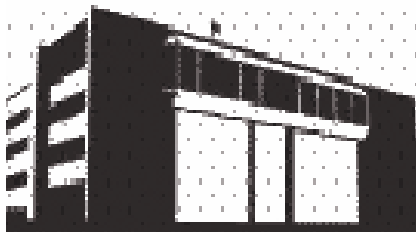
Yergaliuly G. – PhD, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhymukan St. 13, 010008, Astana, Kazakhstan, +7 777 743 82 11.

Balabekov B.B. – the corresponding author, doctoral student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhymukan St. 13, 010008, Astana, Kazakhstan, +7 702 276 11 12.

A. Zhumadil – Master’s student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazhymukan St. 13, 010008, Astana, Kazakhstan, +7 775 938 04 83.



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/>).



Влияние механохимической активации и отжига на структуру и морфологию системы WO_3-NiO

М.А.Сайдүллаева

Лаборатория физики твердого тела, Институт ядерной физики Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Алматы, Казахстан

E-mail: mila.ibragimova1306@gmail.com

Аннотация. В работе исследованы процессы фазообразования и морфологической эволюции в системе WO_3-NiO при механохимическом синтезе и последующем термическом отжиге. Цель исследования заключалась в установлении влияния времени механической активации и температуры термообработки на фазовый состав и морфологические характеристики материалов, а также в определении условий формирования вольфрамата никеля $NiWO_4$.

Исследование выполнено с использованием рентгенофазового анализа, рамановской спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии. Установлено, что изменение продолжительности механического помола не приводит к образованию новых фаз и сопровождается сохранением исходного фазового состава смеси WO_3-NiO . Рамановская спектроскопия неотожжённых образцов подтверждает присутствие моноклинной фазы WO_3 . Показано, что термический отжиг при температуре 500 °C и выше инициирует образование моноклинной фазы $NiWO_4$.

Морфологические исследования показали, что исходные порошки представлены агрегатами сферических наночастиц. Формирование фазы $NiWO_4$ сопровождается изменением морфологии частиц, тогда как дальнейшее повышение температуры отжига способствует росту зерен и повышению степени структурного упорядочения. При температуре 1000°C наблюдается формирование крупных зерен сферической формы с дендритоподобными выростами.

Установлено, что механохимическая активация способствует накоплению структурных дефектов и увеличению площади контакта между реагентами, что облегчает последующее протекание твёрдофазной реакции между NiO и WO_3 при термической обработке. Полученные результаты расширяют представления о механизмах формирования вольфраматов переходных металлов и могут быть использованы при разработке функциональных оксидных материалов для каталитических, фотокаталитических и энергетических применений.

Ключевые слова: наноккомпозит, керамика, оксид вольфрама, механохимический синтез, вольфрамат никеля

Поступила 11.02.2026. После доработки 10.06.2026. Принята к печати 11.06.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

Введение

В настоящее время эффективное создание наноматериалов на основе смешанных оксидов металлов приобрело огромное значение благодаря их широкому применению в междисциплинарных областях. Среди различных смешанных оксидов металлов особое внимание привлекают вольфраматы переходных металлов с формулой MWO_4 благодаря их уникальным химическим, физическим, структурным и фотолюминесцентным свойствам. Они могут использоваться в качестве фотоанодов, матриц для лазеров, оптических волокон, сцинтилляционных детекторов, катализаторов, датчиков влажности и пигментов [1–3]. В этой группе MWO_4 вольфрамат никеля ($NiWO_4$) является важной неорганической солью благодаря своему потенциалу применения в различных отраслях промышленности, таких как катализаторы [4] и датчики влажности [5]. Кроме того, $NiWO_4$ может широко использоваться в других областях, таких как микроволновые устройства [6], фотоаноды [7], сцинтилляционные материалы [8] и микроволновые приложения [9].

Химические и физические свойства оксидов металлов и, в частности, вольфраматов, как правило, зависят от способа синтеза. До настоящего времени были предложены различные процессы для синтеза наноразмерных кристаллов $NiWO_4$ с различной морфологией. Эти предложенные методы, включая соосаждение [10], метод полимерных прекурсоров [11], модифицированная цитратно-комплексная техника [12], гидротермальный метод [13], метод расплавленных солей [14], распылительный пиролиз [6] и синтез методом жидкостного сжигания [15] имеют свои преимущества и связанные с ними ограничения.

Согласно источникам, механохимическая активация является подходящим методом для получения сложных керамик и обладает рядом преимуществ по сравнению с традиционными методами. Процесс позволяет получать чистую фазу при более низких температурах, обеспечивает высокую химическую однородность и чистоту конечного продукта [16], а также предоставляет возможность регулировать размер кристаллитов и морфологические характеристики образцов. В отличие от методов соосаждения или золь-гель синтеза, здесь нет необходимости в удалении анионов, характерных для солей металлов, используемых в качестве сырья, метод позволяет проводить синтез без использования растворителей, что соответствует принципам устойчивого развития (SDGs).

В связи с этим целью настоящей работы являлось изучение процесса фазообразования вольфрамата никеля ($NiWO_4$) в ходе механохимического синтеза. Особое внимание уделено анализу эволюции фазового состава и структурного состояния исходных оксидных компонентов в зависимости от параметров механической активации. Также исследовано влияние последующего термического отжига на формирование целевой фазы $NiWO_4$. Полученные результаты направлены на углубление понимания механизмов механохимического синтеза и оптимизацию условий получения наноструктурированных вольфраматов никеля.

Материалы и методы

Для получения керамики на основе вольфрамата никеля $NiWO_4$ использовались оксид вольфрама (WO_3) и оксид никеля (NiO). Исходные оксиды смешивались в равном мольном соотношении. Все исходные компоненты были приобретены у компании Sigma Aldrich, химическая чистота реактивов составляла порядка 99.95 %.

Непосредственно сам твердофазный синтез керамики проводился в планетарной шаровой мельнице Fritsch Premium line Pulverisette №7. Смесь подвергалась интенсивной механической обработке. Для измельчения применялись флаконы и шары из нержавеющей стали. Процесс проводился в воздушной среде при скорости вращения 500 об/мин, при этом соотношение массы шаров к массе порошка составляло 10:1. Время обработки изменялось в диапазоне 3–10 ч. Во избежание перегрева камеры после каждых 30 мин работы выдерживались паузы продолжительностью 60 мин.

Полученные после механической обработки аморфные образцы подвергались термическому отжигу в атмосфере воздуха при температурах 600–1000 °С. Термический отжиг проводился в муфельной печи Nabertherm LE 4/11/R6 (Nabertherm, Лилиенталь, Германия) при скорости нагрева 10 °С/мин. При достижении необходимой температуры образцы выдерживались в течение 6 часов.

Морфология и размеры наночастиц были исследованы методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на сканирующем электронном микроскопе Helios 5 CX, Thermo Fisher. Элементный анализ образцов был проведён с помощью энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии.

Определение деформационных искажений, связанных с изменением фазового состава синтезированных керамик, было изучено с применением метода рамановской спектроскопии. Съёмка спектров проводилась на Enspecr M532, работающего на длине волны 532 нм.

Изучение структурных параметров и фазового состава полученных образцов проводилось методом рентгеновской дифракции на дифрактометре Rigaku SmartLab с CuK α излучением в геометрии Брегга-Брентано. Съёмка дифрактограмм осуществлялась на рентгеновском дифрактометре D8 ADVANCE ECO (Bruker, Карлсруэ, Германия) в геометрии Брегг – Брентано в угловом диапазоне $2\theta=20-80^\circ$, с шагом 0.03° и временем набора дифрактограммы в одной точке 1 сек.

Результаты и обсуждения

На рисунке 1 представлены результаты рентгенофазового анализа порошков системы WO₃-NiO после механохимической обработки различной продолжительности. Установлено, что после механохимического синтеза образцы содержат смесь фаз оксида никеля (PDF-01-071-1179) и оксида вольфрама (PDF-01-072-0677). Сохранение формы и относительных интенсивностей дифракционных пиков для образцов, перемалываемых при различной продолжительности помола, указывает на стабильность фазового состава и отсутствие процессов фазовых превращений в условиях длительного механического воздействия.

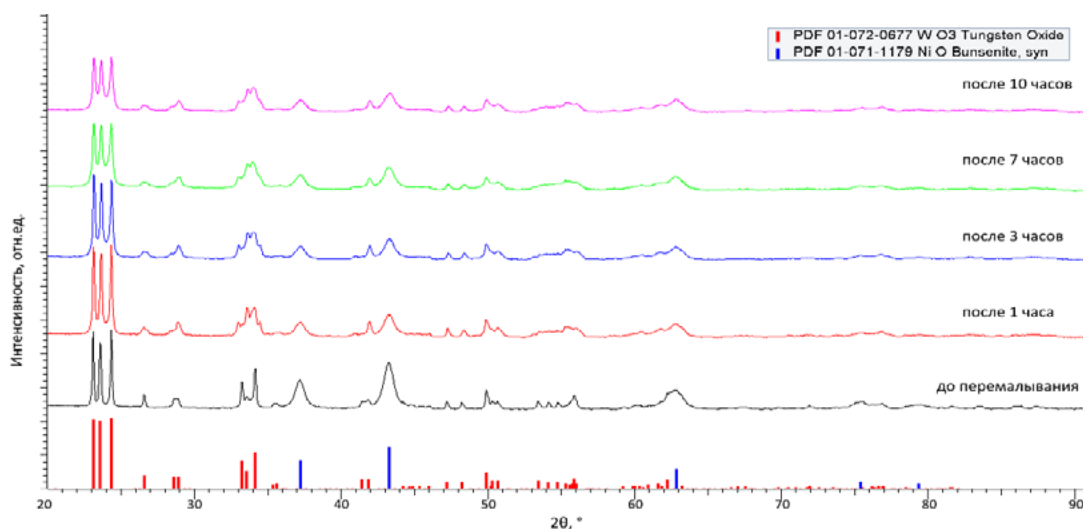


Рисунок 1. Результаты рентгенофазового анализа порошков WO₃-NiO до помола и после 1, 3, 7, 10 часов перемалывания

Следует отметить, что механохимическая активация не приводит к непосредственному образованию фазы NiWO₄. Увеличение времени механического помола исходных порошков оказывает существенное влияние на процессы их структурно-морфологической эволюции. Продолжительный помол приводит к интенсификации дробления частиц, снижению их среднего размера и увеличению количества структурных дефектов на поверхностях и в объёме зерен. При этом важно отметить, что, несмотря на высокую степень механического воздействия, исходные компоненты сохраняют свою фазовую и структурную стабильность, что свидетельствует о достаточной устойчивости их кристаллических решёток к процессам механохимической активации.

Несмотря на сохранение набора дифракционных максимумов WO₃ и NiO при увеличении времени механической активации до 10ч, наблюдается снижение интенсивности и уширение рефлексов, что может быть связано с уменьшением размера кристаллитов, накоплением дефектов и частичной аморфизацией материала.

На рисунке 2 представлены СЭМ изображения порошков после механохимического синтеза. Из представленных данных видно, что из-за действия электростатических сил и высокой поверхностной энергии образцы представляют собой крупные конгломераты, состоящие из шароподобных наночастиц. Изменение условий механохимического синтеза приводит к изменению морфологии и размеров исследуемого образцов.

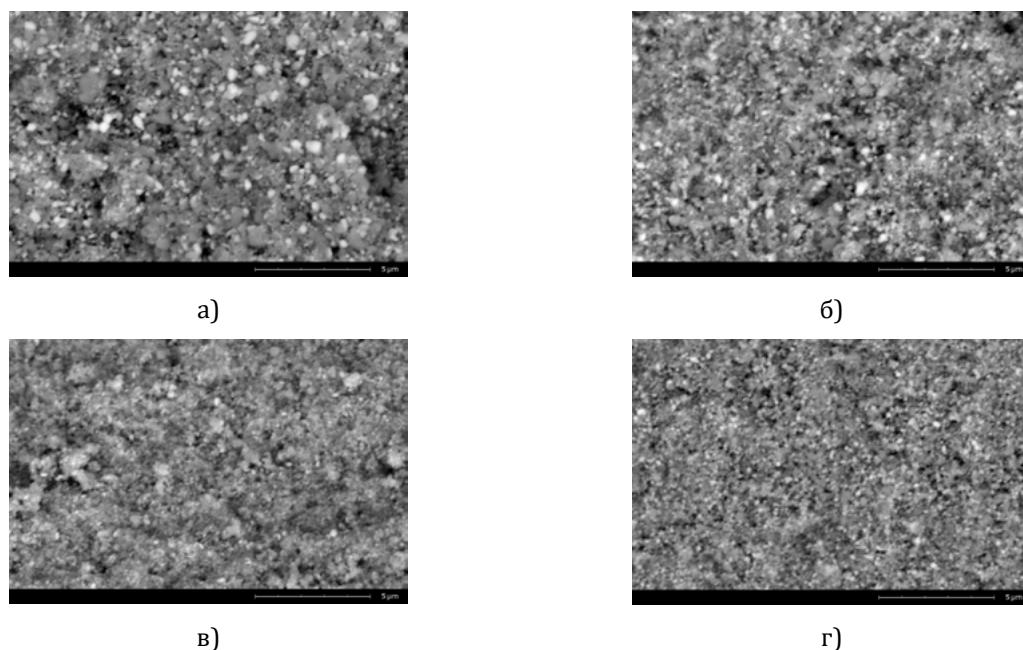


Рисунок 2. РЭМ изображения исследуемых порошков после механосинтеза
а) после 1 часа помола; б) после 3 часов помола;
в) после 7 часов помола; г) после 10 часов помола

Для уточнения структурного состояния образцов была проведена рамановская спектроскопия. На рисунке 3 (а) показаны рамановские спектры неотожжённых порошков WO_3-NiO с разными длительностями помола. На спектрах исходных порошков наблюдаются пики при 137, 275, 718 и 808 cm^{-1} , которые соответствуют моноклинной фазе $m-WO_3$, что хорошо согласуется с результатами рентгеноструктурного анализа. Пик при 808 cm^{-1} характеризует O-W-O растягивающие колебания, при 718 cm^{-1} растягивающие колебания W-O, а при 275 cm^{-1} W-O-W деформационные колебания. Мода при 137 cm^{-1} может указывать на дефекты в WO_3 . Существенных изменений положения и интенсивности полос при увеличении времени механической обработки не наблюдается, что подтверждает результаты рентгенофазового анализа о сохранении исходного фазового состава.

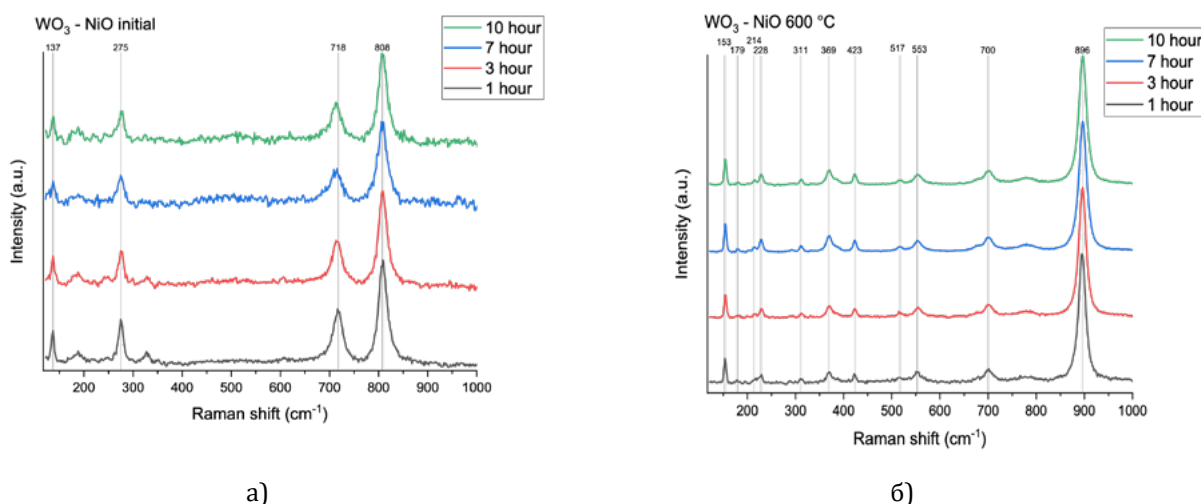


Рисунок 3. Рамановские спектры порошков WO_3-NiO :
а - неоттоженные; б - отжиг 600°C

Для исследования процессов фазообразования образцы подвергались последующему термическому отжигу. На рисунке 3 (б) приведены рамановские спектры порошков, отожжённых при температуре 600°C.

После термической обработки в спектрах появляются полосы при 153, 179, 214, 228, 311, 369, 423, 517, 553, 700 и 896 cm^{-1} (таблица 1), которые относятся к $NiWO_4$. Колебательные моды в рамановских спектрах воль-

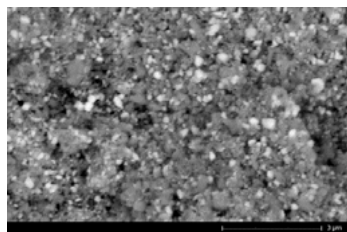
фрагментов могут быть разделены на внешние ($< 600 \text{ см}^{-1}$), связанные с движением искажённых октаэдров NiO₆, и внутренние ($> 600 \text{ см}^{-1}$), обусловленные колебаниями октаэдров WO₆. Пик с максимальной интенсивностью, наблюдаемый при 896 см^{-1} , соответствует моде Ag и обусловлен симметричным растяжением наиболее короткой связи W-O.

Анализ спектров образцов, отожжённых в диапазоне температур 700–1000 °С, показал сохранение набора колебательных мод, характерных для фазы NiWO₄. Отсутствие существенных изменений положения полос свидетельствует о структурной стабильности сформированной фазы в исследуемом температурном диапазоне.

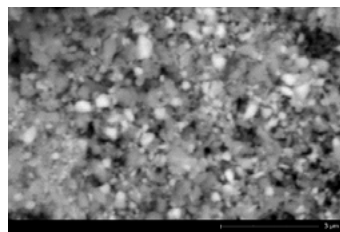
Таблица 1. Колебательные моды WO₃ – NiO 600°С

Рамановский сдвиг, см ⁻¹	Мода	Рамановский сдвиг, см ⁻¹	Мода
153	Ag	423	Ag
179	Bg	517	Bg
214	Bg	553	Ag
228	Ag	700	Ag
311	Ag	896	Ag
369	Ag		

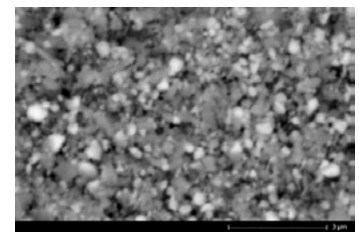
Морфологические особенности образцов после термической обработки представлены на рисунке 4. При температурах отжига до 400 °С существенных изменений морфологии частиц не наблюдается. Образцы сохраняют агломерированное состояние, характерное для механически активированных порошков. Данный результат хорошо согласуется с данными рентгенофазового анализа, согласно которым в указанном температурном диапазоне фазовый состав остаётся представленным смесью WO₃ и NiO.



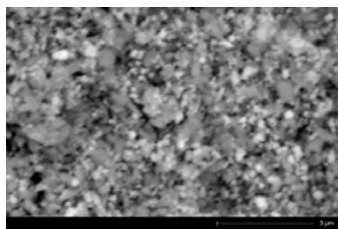
а)



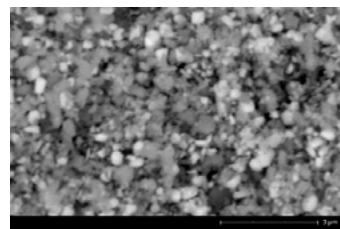
б)



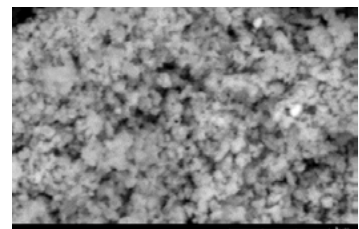
в)



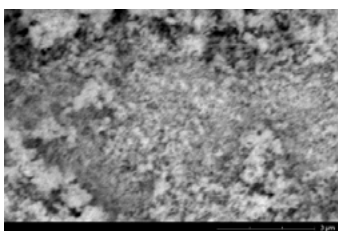
г)



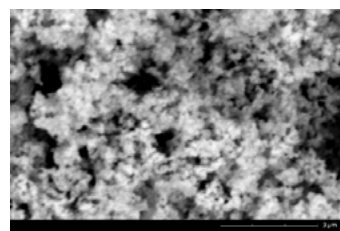
д)



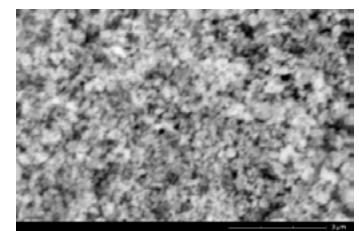
е)



ж)



з)



и)



к)

л)

Рисунок 4. РЭМ изображения исследуемых образцов керамик при вариации температуры отжига
а) после перемалывания; отжиг при температурах:
а) 100 °С; в) 200 °С; г) 300 °С; д) 400 °С; е) 500 °С; ж) 600 °С; з) 700 °С; и) 800 °С; к) 900 °С; л) 1000 °С

Наиболее значительные изменения наблюдаются при температуре 500 °С. В этот момент происходит формирование преобладающей фазы NiWO_4 , сопровождающееся изменением морфологии частиц и появлением более однородной структуры. Согласно данным рентгенофазового анализа, в образце сохраняется небольшое количество остаточной фазы NiO .

Формирование NiWO_4 при температуре около 500 °С связано с протеканием твёрдофазной реакции между оксидом никеля и оксидом вольфрама. В процессе механохимической обработки происходит накопление дефектов кристаллической структуры, включая дислокации, вакансии и области локальных напряжений. Кроме того, измельчение порошков приводит к существенному увеличению площади контакта между реагентами. Известно, что подобные дефекты служат дополнительными путями ускоренной диффузии и снижают энергетический барьер протекания твёрдофазных реакций. В результате последующий нагрев обеспечивает взаимную диффузию катионов Ni^{2+} и W^{6+} через межфазные границы и образование термодинамически стабильной моноклинной фазы NiWO_4 . Аналогичные механизмы фазообразования ранее были описаны для механохимически активированных оксидных систем и вольфраматов переходных металлов [16–18].

При дальнейшем повышении температуры отжига происходит развитие процессов кристаллизации и структурного упорядочения образующейся фазы. Это сопровождается ростом зерен вследствие повышения диффузионной подвижности атомов и уменьшения общей поверхностной энергии системы. При температуре 1000 °С формируются крупные зерна сферической формы с характерными дендритоподобными выростами.

Данный результат согласуются со спектрами рентгеноструктурного анализа, которые отражают кинетику изменений фазового состава нанокompозитных керамик. Согласно полученным данным, основные изменения наблюдаются при температуре отжига 500 °С и выше, при которых происходит образование фазы NiWO_4 (PDF-00-015-0755) с моноклинным типом кристаллической структуры. В случае термического отжига при температурах ниже 500 °С фазовый состав исследуемых порошков представлен смесью двух фаз оксида никеля и оксида вольфрама.

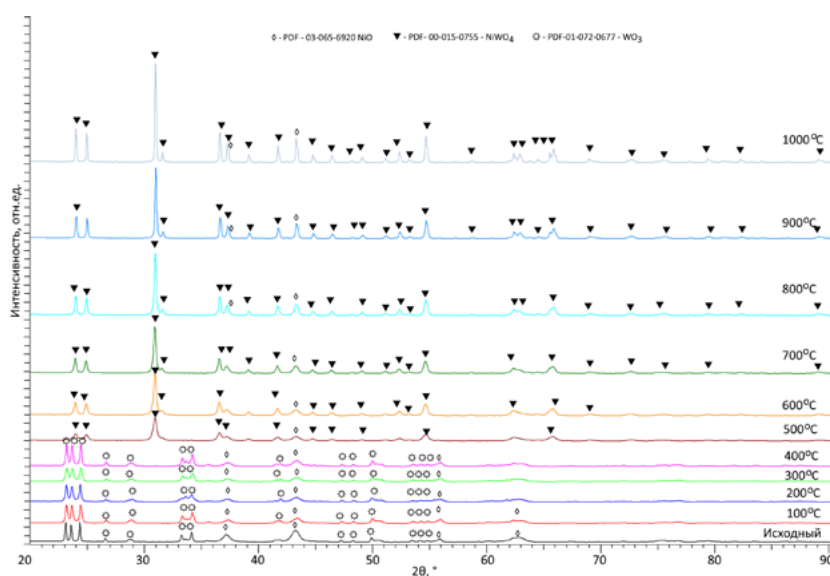


Рисунок 5. Результаты рентгенофазового анализа
исследуемых порошков в зависимости от температуры отжига

На рисунке 6 представлены результаты количественного фазового анализа образцов, отражающие изменение весовых долей фаз в зависимости от температуры отжига. Количественная оценка содержания фаз была выполнена на основании данных рентгенофазового анализа методом вычисления весовых вкладов, в основе которого лежит определение площадей дифракционных рефлексов каждой фазы с последующим определением площади всей дифрактограммы. Для оценки использовались также корундовые числа, использование которых позволяет определить более точно весовые вклады каждой фазы.

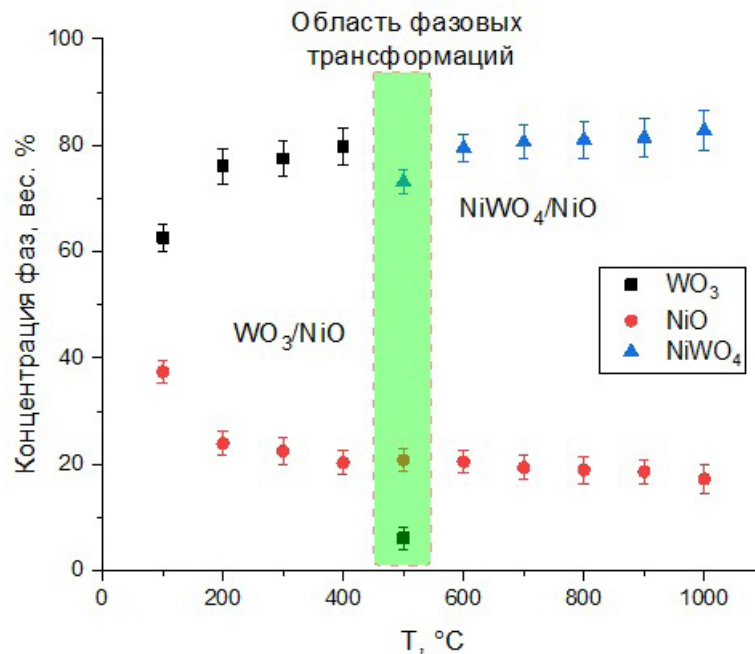


Рисунок 6. Результаты оценки весовых вкладов установленных фаз в составе порошков при вариации температуры отжига

Установлено, что в диапазоне температур 100–400 °C фазовый состав представлен смесью WO_3 и NiO . При этом содержание WO_3 возрастает от 62 до 80 вес. %, тогда как доля NiO уменьшается от 38 до 20 вес. %. В области температур около 500 °C наблюдается резкое изменение фазового состава, связанное с началом формирования фазы NiWO_4 .

После образования вольфрамата никеля основную часть материала составляет фаза NiWO_4 , весовой вклад которой увеличивается от 74 до 83 вес. % при повышении температуры отжига от 500 до 1000 °C. Одновременно наблюдается постепенное уменьшение содержания остаточной фазы NiO с 20 до 17 вес. %, что свидетельствует о дальнейшем протекании твёрдофазной реакции между исходными оксидными компонентами.

Полученные результаты подтверждают наличие температурного интервала 450–550 °C, в котором происходит основная стадия фазообразования. Формирование NiWO_4 связано с активацией диффузионных процессов между частицами NiO и WO_3 , предварительно активированными в ходе механической обработки. Накопление дефектов кристаллической структуры и увеличение площади контакта между реагентами способствуют снижению энергетического барьера твёрдофазной реакции и обеспечивают образование термодинамически стабильной фазы NiWO_4 при сравнительно низкой температуре отжига.

Дальнейшее повышение температуры сопровождается увеличением степени кристалличности образующейся фазы и уменьшением содержания остаточных исходных компонентов, что хорошо согласуется с результатами рамановской спектроскопии и морфологических исследований.

Таким образом, механохимическая обработка смеси $\text{WO}_3\text{-NiO}$ обеспечивает эффективную активацию реагентов за счёт накопления структурных дефектов и увеличения площади контакта между частицами. Последующий отжиг при температуре 500 °C и выше инициирует образование фазы NiWO_4 , а дальнейшее повышение температуры способствует структурному упорядочению материала и росту зерен.

Заключение

В ходе проведённых исследований установлено, что продолжительность механического помола исходных порошков NiO-WO₃ оказывает значительное влияние на их структурно-морфологические характеристики. Продленный помол приводит к уменьшению среднего размера частиц и увеличению концентрации структурных дефектов, при этом фазовая стабильность исходных компонентов сохраняется, что свидетельствует о высокой устойчивости их кристаллических решёток к механохимической активации.

Рентгенофазовый анализ показал, что формирование устойчивой фазы NiWO₄ начинается при температуре около 500 °С, обеспечивая протекание твёрдофазных реакций и рост кристаллитов новой фазы, что хорошо согласуется с результатами рамановской спектроскопии. Повышение температуры отжига способствует структурному упорядочению, уменьшению дефектов и укрупнению зерен, что отражает термическую стабилизацию материала и закономерное снижение удельной поверхности. При этом следует также отметить, что формирование фазы NiWO₄ при температуре 500°C и выше происходит с формированием включений в виде фазы оксида никеля, однако весовой вклад данных включений снижается с 20 вес. % до 15 вес. % в зависимости от температуры отжига.

Таким образом, выявлены закономерности взаимосвязи между временем механического помола, условиями термообработки и структурно-фазовыми изменениями, позволяющие прогнозировать морфологию и фазовый состав конечного NiWO₄ материала в зависимости от параметров технологического процесса.

Благодарность

Исследование финансируется Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (No.BR28713281).

Вклад авторов

Автор провела механохимический синтез и отжиг нанокмполитов на основе WO₃-NiO, рентгеноструктурный анализ (XRD) и морфологические исследования (SEM/AFM). Обработала и проанализировала полученные данные, выявив влияние времени помола и температуры отжига на структуру и морфологию наноматериалов. Автор также подготовила текст статьи, оформила графики и таблицы, представив результаты в виде научной публикации.

Список литературы

1. F. A. Alharthi, H. S. Alanazi, A. A. Alsyahi, and N. Ahmad, Hydrothermal Synthesis, Characterization and Exploration of Photocatalytic Activities of Polyoxometalate: Ni-CoWO₄ Nanoparticles, *Crystals* 11, 456 (2021). <https://doi:10.3390/cryst11050456>
2. J. U. Lee, J. H. Kim, and J. S. Lee, Emergent CuWO₄ Photoanodes for Solar Fuel Production: Recent Progress and Perspectives, *Catalysts* 13, 1408 (2023). <https://doi:10.3390/catal13111408>
3. H. Eranjaneya and G. T. Chandrappa, Selective synthesis of scheelite/perovskite CdWO₄ nanoparticles: a mechanistic investigation of phase formation and property correlation, *J. Solgel Sci. Technol.* 85, 585–594 (2018). <https://doi:10.1007/s10971-017-4545-2>
4. R. C. Pullar, S. Farrah, and N. McN. Alford, MgWO₄, ZnWO₄, NiWO₄ and CoWO₄ microwave dielectric ceramics, *J. Eur. Ceram. Soc.* 27, 1059–1063 (2007). <https://doi:10.1016/j.jeurceramsoc.2006.05.085>
5. G. Alpysova et al., Characterization of ZnWO₄, MgWO₄, and CaWO₄ Ceramics Synthesized in the Field of a Powerful Radiation Flux, *Ceramics* 7, 1085–1099 (2024). <https://doi:10.3390/ceramics7030071>
6. M.I. Osotsi et al., Synthesis of ZnWO₄-x nanorods with oxygen vacancy for efficient photocatalytic degradation of tetracycline, *Progress in Natural Science: Materials International* 28, 408–415 (2018). <https://doi:10.1016/j.pnsc.2018.01.007>
7. V.B. Mikhailik and H. Kraus, Performance of scintillation materials at cryogenic temperatures, *Physica Status Solidi B* 247, 1583–1599 (2010). <https://doi:10.1002/pssb.200945500>
8. H. Farsi and S. A. Hosseini, The electrochemical behaviors of methylene blue on the surface of nanostructured NiWO₄ prepared by coprecipitation method, *Journal of Solid State Electrochemistry* 17, 2079–2086 (2013). <https://doi:10.1007/s10008-013-2068-5>
9. M. Kozan, J. Thangala, R. Bogale, M. P. Mengüç, and M. K. Sunkara, In-situ characterization of dispersion stability of WO₃ nanoparticles and nanowires, *Journal of Nanoparticle Research* 10, 599–612 (2008). <https://doi:10.1007/s11051-007-9290-y>

10. T. Montini, V. Gombac, A. Hameed, L. Felisari, G. Adami, and P. Fornasiero, Synthesis, characterization and photocatalytic performance of transition metal tungstates, *Chem. Phys. Lett.* 498, 113–119 (2010). <https://doi:10.1016/j.cplett.2010.08.026>.
11. H. Eranjaneya, P. S. Adarakatti, A. Siddaramanna, and C. G. Thimmanna, Nickel tungstate nanoparticles: synthesis, characterization and electrochemical sensing of mercury(II) ions, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 30, 3574–3584 (2019). <https://doi:10.1007/s10854-018-00635-9>.
12. W. Xiang et al., One-Step Molten Salt Constructing Double S-Scheme K_{0.2}WO₃/NiO/NiWO₄ Heterojunction for Photocatalytic CO₂ Reduction, *Molecules* 30, 1804 (2025). <https://doi:10.3390/molecules30081804>.
13. M. Senna, The Optimization of Mechanochemical Processes toward Functional Nanocomposite Materials, *Powders* 2, 659–677 (2023). <https://doi:10.3390/powders2030041>.
14. R. Lozano-Rosas, D. G. Lamas, F. Sánchez-Ochoa, G. H. Cocolletzi, T. V. K. Karthik, and M. J. Robles-Águila, CO₂ sensing properties of WO₃ powder: experimental and theoretical studies, *Applied Physics A* 127, 815 (2021). <https://doi:10.1007/s00339-021-04960-5>.
15. N. A. Lima et al., NiWO₄ powders prepared via polymeric precursor method for application as ceramic luminescent pigments, *Journal of Advanced Ceramics* 9, 55–63 (2020). <https://doi:10.1007/s40145-019-0347-z>.
16. H. Harshan, K. P. Priyanka, A. Sreedevi, A. Jose, and T. Varghese, Structural, optical and magnetic properties of nanophase NiWO₄ for potential applications, *Eur. Phys. J. B* 91, 287 (2018). <https://doi:10.1140/epjb/e2018-90382-3>.
17. M.N Mancheva., R.S., Iordanova. D.G. Klissurski, G.T. Tyuliev, B.N. Kunev, Direct Mechanochemical Synthesis of Nanocrystalline NiWO₄, *Journal of Physical Chemistry C*, 111(3), 1101–1104, (2007). <https://doi:10.1021/jp065071k>.
18. V. Sepelak, A. Duvel, M. Wilkening, K.-D. Becker, P. Heitjans Mechanochemical reactions and syntheses of oxides, *Chemical Society Reviews*, 42, 7507–7520, (2013). <https://doi:10.1039/C2CS35462D>.

М.А. Сайдуллаева

**Қатты дене физикасы зертханасы, Қазақстан Республикасы Атом энергиясы жөніндегі агентті-
гінің Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан**

(E-mail: mila.ibragimova1306@gmail.com)

WO₃-NiO жүйесінің құрылымы мен морфологиясына механохимиялық активация және күйдірудің әсері

Аңдатпа. Бұл зерттеу механохимиялық синтез және кейінгі термиялық күйдіру кезінде WO₃-NiO жүйесіндегі фазалық түзілу және морфологиялық эволюция процестерін зерттеді. Зерттеудің мақсаты механикалық белсендіру уақыты мен термиялық өңдеу температурасының материалдардың фазалық құрамы мен морфологиялық сипаттамаларына әсерін анықтау, сондай-ақ никель вольфраматты NiWO₄ түзілу шарттарын анықтау болды.

Зерттеу рентгендік дифракциялық талдау, Раман спектроскопиясы және сканерлеуші электронды микроскопияны қолдану арқылы жүргізілді. Механикалық фрезерлеу ұзақтығын өзгерту жаңа фазалардың түзілуіне әкелмейтіні және WO₃-NiO қоспасының бастапқы фазалық құрамының сақталуымен қатар жүретіні анықталды. Күйдірілмеген үлгілердің Раман спектроскопиясы моноклиндік WO₃ фазасының бар екенін растайды. 500°C және одан жоғары температурада термиялық күйдіру моноклиндік NiWO₄ фазасының түзілуін бастайтыны көрсетілген.

Морфологиялық зерттеулер бастапқы ұнтақтардың сфералық нанобөлшектердің агломераттарынан тұратынын көрсетті. NiWO₄ фазасының түзілуі бөлшектер морфологиясының өзгеруімен қатар жүреді, ал күйдіру температурасының одан әрі жоғарылауы дәннің өсуіне және құрылымдық реттілік дәрежесінің артуына ықпал етеді. 1000°C температурада дендриттік өсінділері бар ірі сфералық түйіршіктердің түзілуі байқалады.

Механохимиялық белсендіру құрылымдық ақаулардың жиналуына ықпал ететіні және реактивтер арасындағы жанасу аймағын арттыратыны, термиялық өңдеу кезінде NiO мен WO₃ арасындағы кейінгі қатты фазалық реакцияны жеңілдететіні анықталды. Бұл нәтижелер өтпелі металл вольфраматтарының түзілу механизмдері туралы түсінігімізді кеңейтеді және каталитикалық, фотокаталитикалық және энергетикалық қолданбалар үшін функционалды оксид материалдарын әзірлеуде қолданылуы мүмкін.

Түйін сөздер: нанокөмпит, керамика, вольфрам оксиді, механохимиялық синтез, никель вольфраматы.

M.A. Saidullaeva

Laboratory of Solid State Physics, Institute of Nuclear Physics of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, Almaty, Kazakhstan

(E-mail: mila.ibragimova1306@gmail.com)

The effect of mechanochemical activation and annealing on the structure and morphology of the WO₃-NiO system

Abstract. This study investigated the processes of phase formation and morphological evolution in the WO₃-NiO system during mechanochemical synthesis and subsequent thermal annealing. The aim of the study was to establish the influence of mechanical activation time and heat treatment temperature on the phase composition and morphological characteristics of the materials, as well as to determine the conditions for the formation of nickel tungstate NiWO₄.

The study was conducted using X-ray diffraction analysis, Raman spectroscopy, and scanning electron microscopy. It was found that changing the duration of mechanical milling does not lead to the formation of new phases and is accompanied by the preservation of the initial phase composition of the WO₃-NiO mixture. Raman spectroscopy of unannealed samples confirms the presence of a monoclinic WO₃ phase. Thermal annealing at 500°C and above is shown to initiate the formation of the monoclinic NiWO₄ phase.

Morphological studies revealed that the initial powders consisted of agglomerates of spherical nanoparticles. The formation of the NiWO₄ phase is accompanied by a change in particle morphology, while further increasing the annealing temperature promotes grain growth and an increase in the degree of structural ordering. At 1000°C, the formation of large spherical grains with dendritic outgrowths is observed.

It was found that mechanochemical activation promotes the accumulation of structural defects and increases the contact area between the reactants, facilitating the subsequent solid-phase reaction between NiO and WO₃ during heat treatment. These results expand our understanding of the formation mechanisms of transition metal tungstates and can be used in the development of functional oxide materials for catalytic, photocatalytic, and energy applications.

Keywords: nanocomposite, ceramic, tungsten oxide, mechanochemical synthesis, nickel tungstate.

References

1. F. A. Alharthi, H. S. Alanazi, A. A. Alsyahi, and N. Ahmad, Hydrothermal Synthesis, Characterization and Exploration of Photocatalytic Activities of Polyoxometalate: Ni-CoWO₄ Nanoparticles, *Crystals* 11, 456 (2021). <https://doi:10.3390/cryst11050456>
2. J. U. Lee, J. H. Kim, and J. S. Lee, Emergent CuWO₄ Photoanodes for Solar Fuel Production: Recent Progress and Perspectives, *Catalysts* 13, 1408 (2023). <https://doi:10.3390/catal13111408>
3. H. Eranjaneya and G. T. Chandrappa, Selective synthesis of scheelite/perovskite CdWO₄ nanoparticles: a mechanistic investigation of phase formation and property correlation, *J. Solgel Sci. Technol.* 85, 585–594 (2018). <https://doi:10.1007/s10971-017-4545-2>
4. R. C. Pullar, S. Farrah, and N. McN. Alford, MgWO₄, ZnWO₄, NiWO₄ and CoWO₄ microwave dielectric ceramics, *J. Eur. Ceram. Soc.* 27, 1059–1063 (2007). <https://doi:10.1016/j.jeurceramsoc.2006.05.085>
5. G. Alpysova et al., Characterization of ZnWO₄, MgWO₄, and CaWO₄ Ceramics Synthesized in the Field of a Powerful Radiation Flux, *Ceramics* 7, 1085–1099 (2024). <https://doi:10.3390/ceramics7030071>
6. M.I. Osotsi et al., Synthesis of ZnWO₄-x nanorods with oxygen vacancy for efficient photocatalytic degradation of tetracycline, *Progress in Natural Science: Materials International* 28, 408–415 (2018). <https://doi:10.1016/j.pnsc.2018.01.007>
7. V.B. Mikhailik and H. Kraus, Performance of scintillation materials at cryogenic temperatures, *Physica Status Solidi B* 247, 1583–1599 (2010). <https://doi:10.1002/pssb.200945500>
8. H. Farsi and S. A. Hosseini, The electrochemical behaviors of methylene blue on the surface of nanostructured NiWO₄ prepared by coprecipitation method, *Journal of Solid State Electrochemistry* 17, 2079–2086 (2013). <https://doi:10.1007/s10008-013-2068-5>
9. M. Kozan, J. Thangala, R. Bogale, M. P. Mengüç, and M. K. Sunkara, In-situ characterization of dispersion stability of WO₃ nanoparticles and nanowires, *Journal of Nanoparticle Research* 10, 599–612 (2008). <https://doi:10.1007/>

s11051-007-9290-y

10. T. Montini, V. Gombac, A. Hameed, L. Felisari, G. Adami, and P. Fornasiero, Synthesis, characterization and photocatalytic performance of transition metal tungstates, *Chem. Phys. Lett.* 498, 113–119 (2010). <https://doi:10.1016/j.cplett.2010.08.026>.
11. H. Eranjaneya, P. S. Adarakatti, A. Siddaramanna, and C. G. Thimmanna, Nickel tungstate nanoparticles: synthesis, characterization and electrochemical sensing of mercury(II) ions, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 30, 3574–3584 (2019). <https://doi:10.1007/s10854-018-00635-9>.
12. W. Xiang et al., One-Step Molten Salt Constructing Double S-Scheme K_{0.2}WO₃/NiO/NiWO₄ Heterojunction for Photocatalytic CO₂ Reduction, *Molecules* 30, 1804 (2025). <https://doi:10.3390/molecules30081804>.
13. M. Senna, The Optimization of Mechanochemical Processes toward Functional Nanocomposite Materials, *Powders* 2, 659–677 (2023). <https://doi:10.3390/powders2030041>.
14. R. Lozano-Rosas, D. G. Lamas, F. Sánchez-Ochoa, G. H. Cocolenzi, T. V. K. Karthik, and M. J. Robles-Águila, CO₂ sensing properties of WO₃ powder: experimental and theoretical studies, *Applied Physics A* 127, 815 (2021). <https://doi:10.1007/s00339-021-04960-5>.
15. N. A. Lima et al., NiWO₄ powders prepared via polymeric precursor method for application as ceramic luminescent pigments, *Journal of Advanced Ceramics* 9, 55–63 (2020). <https://doi:10.1007/s40145-019-0347-z>.
16. H. Harshan, K. P. Priyanka, A. Sreedevi, A. Jose, and T. Varghese, Structural, optical and magnetic properties of nanophase NiWO₄ for potential applications, *Eur. Phys. J. B* 91, 287 (2018). <https://doi:10.1140/epjb/e2018-90382-3>.
17. M.N Mancheva, R.S., Iordanova. D.G. Klissurski, G.T. Tyuliev, B.N. Kunev, Direct Mechanochemical Synthesis of Nanocrystalline NiWO₄, *Journal of Physical Chemistry C*, 111(3), 1101–1104, (2007). <https://doi:10.1021/jp065071k>.
18. V. Sepelak, A. Duvel, M. Wilkening, K.-D. Becker, P. Heitjans Mechanochemical reactions and syntheses of oxides, *Chemical Society Reviews*, 42, 7507–7520, (2013). <https://doi:10.1039/C2CS35462D>.

Сведения об авторах:

Сайдуллаева М.А. - автор для корреспонденции, инженер Лаборатории физики твердого тела, Астанинский филиал Института ядерной физики Агентства Республики Казахстан по атомной энергии, Алматы, Казахстан.

Сайдуллаева М.А. – хат-хабар авторы, Қазақстан Республикасы Атом энергиясы жөніндегі агенттігінің Ядролық физика институтының Астана филиалы Қатты дене физикасы зертханасының инженері, Алматы, Қазақстан.

M.A. Saidullaeva – the corresponding author, Engineer, Laboratory of Solid State Physics, Astana Branch of the Institute of Nuclear Physics of the Agency of the Republic of Kazakhstan for Atomic Energy, 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/>).



The role of variation of the stabilizing magnesium oxide dopant on phase transformations in the composition of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics

Zikirina A.¹, Kenzhina I.^{1,2,3*}, Zaurbekova Z.^{1,2},
Ilyasheva K.⁴, Seitmaganbet G.³, Kozlovskiy A.^{1,3}

¹Satbayev University, Almaty, Kazakhstan

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

³Institute of Nuclear Physics, Almaty, Kazakhstan

⁴Nazarbayev University, Astana, Kazakhstan

E-mail: agun_zikirina@mail.ru, kenzhina@physics.kz, zaurbekova@physics.kz, ilyasheva.semey@gmail.com,
gaukhar14.05@mail.ru, kozlovskiy.a@inp.kz

Abstract. The aim of this work is to determine the role of the addition of a stabilizing magnesium oxide dopant to the composition of composite $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics in changing the kinetics of phase transformations that occur during high-temperature sintering of ceramics, depending on the variation in the concentration of the dopant. According to the assessment of the microstructural features of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics, it was found that the addition of MgO in low concentrations leads to the formation of finely dispersed grains of a globular shape that are tightly packed, while an increase in the concentration of MgO above 0.05 M leads to an enlargement of the grains and a change in their shape from globular to polyhedral with the formation of MgO inclusions, the presence of which is due to exceeding the solubility limit of magnesium oxide in the $ZrO_2 - CeO_2$ matrix. It has been established that variation in the MgO content allows for effective control of the morphology of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics from a loose porous structure to a dense fine-grained heterogeneous system with controlled grain size, high defectivity and developed intergranular boundaries. Using X-ray phase analysis methods, it was established that the introduction of MgO leads to a restructuring of the phase composition: from the initial two-phase state to a single-phase cubic structure at 0.01 M MgO and the subsequent formation of a mixture of two cubic and tetragonal phases at higher concentrations, with the dominance of the cubic phase in the composition.

Key words: stabilizing dopant, magnesium oxide, phase transformations, composite ceramics, zirconium dioxide

Received 26.05.2026. Revised 9.06.2026. Accepted 10.06.2026. Available online 30.06.2026.

*the corresponding author

Introduction

As is known, zirconium dioxide is one of the promising functional ceramic materials for solid oxide fuel cells, the interest in which is due to the combination of high thermal stability, chemical inertness and mixed type of conductivity, which makes it possible to use it in extreme high-temperature operating conditions [1-3]. Zirconium dioxide plays a key role in solid oxide fuel cells as a solid electrolyte, capable of providing transport of oxygen ions between the cathode and anode at operating temperatures of 700 – 1000 °C. At the cathode, molecular oxygen is reduced to form oxygen ions, which diffuse through the crystal lattice of the electrolyte. At the anode, oxygen ions interact with fuel - hydrogen, methane or synthesis gas, forming water or carbon dioxide with the release of electrons. This process results in the generation of electrical energy with a high efficiency factor. In this regard, much attention in solid oxide fuel cells is paid to oxygen-ion conductivity, which plays a key role in charge transfer mechanisms and electrochemical reactions [4,5]. The most commonly used ceramics are those based on zirconium dioxide stabilized with yttrium oxide, the addition of which leads to cationic substitution of the $Y^{3+} \rightarrow Zr^{4+}$ type, which is accompanied by the formation of oxygen vacancies, the appearance of which is necessary to maintain charge neutrality. The formation of oxygen vacancies plays a key role in ensuring high oxygen-ion conductivity of the material [6,7]. Vacancies serve as free positions for the migration of oxygen ions O^{2-} through the crystal lattice under the influence of a temperature gradient or electric potential. The higher the concentration of oxygen vacancies, the more intense the oxygen diffusion processes and the higher the electrical conductivity of the electrolyte. However, at high concentrations of oxygen vacancies in the structure of ceramics, resistance to external influences may decrease, including an increase in the embrittlement of ceramics and a tendency to fracture. This leads to the occurrence of internal stresses, the formation of microcracks and the destruction of ceramics. When exposed to high temperatures or cyclic thermal loads for a long time, such defects can initiate processes of local deformation and phase instability [8,9]. This is especially true for materials based on stabilized zirconium dioxide, in which an excess of oxygen vacancies contributes to the weakening of interatomic bonds and an increase in the sensitivity of the structure to thermal expansion. During the cooling process after sintering or operation, significant internal stress gradients arise due to the non-uniform distribution of phases and differences in thermal expansion coefficients [10,11]. In addition, a high concentration of oxygen vacancies can promote the agglomeration of defects and the formation of localized regions with increased defectiveness [12]. Such regions are characterized by reduced stability of the crystal lattice and can act as centers for the initiation of phase transformations, including the reverse transition of the tetragonal phase to the monoclinic phase [13,14]. This transition is accompanied by a volumetric expansion of the structure, which further increases internal stresses and accelerates the destruction of the material. Although the formation of oxygen vacancies is a key mechanism for enhancing the oxygen-ion conductivity of stabilized ceramics, their excessive concentration can have a negative impact on the mechanical and phase stability of the material [15,16]. Therefore, in the development of ceramic electrolytes, special attention is paid to the selection of the optimal stabilizing additive content, ensuring a balance between high ionic conductivity and sufficient mechanical strength of the ceramics [17,18].

The use of magnesium oxide as a stabilizing dopant for introduction into the composition of composite ZrO₂–CeO₂ ceramics is considered as one of the methods for controlling the kinetics of phase transformations during high-temperature sintering in order to purposefully change the ratio of phases in the composition, as well as the density of oxygen vacancies and the distribution of electron density. As is known, zirconium dioxide exhibits polymorphism and can exist in monoclinic, tetragonal and cubic modifications, the transition between which is accompanied by a change in the volume of the crystal lattice, which leads to changes in the properties of ceramics, as well as their resistance to external influences [19]. Cerium dioxide, in turn, due to its high oxygen mobility and the ability of cerium to change its oxidation state between the Ce^{3+}/Ce^{4+} states, promotes the formation of oxygen vacancies and increases the stability of high-temperature phases of zirconium dioxide due to partial cationic substitution. The introduction of CeO₂ into the composition of ZrO₂ leads to the formation of substitution solid solutions in which Ce^{4+} ions partially replace Zr^{4+} ions in the crystal lattice [19,20]. Moreover, the differences in the ionic radii of Ce^{4+} and Zr^{4+} lead to the fact that, during substitution, additional local distortions of the crystal structure, accompanied by an increase in the lattice parameters, are formed. An increase in the concentration of local structural distortions during cationic substitution promotes the stabilization of the tetragonal and cubic phases of zirconium dioxide at room temperature and prevents the formation of a monoclinic phase, which is characterized by volume expansion and can cause a decrease in resistance to external influences. Thus, the stabilization of zirconium dioxide and composite ceramics based on it is a fundamental mechanism for the formation of the functional properties of solid oxide electrolytes capable of operating under extreme conditions and withstanding high loads during operation. The study of the mechanisms of phase transformations with variations in the ratio of the main components and the stabilizing dopant

in the composition of composite ceramics makes it possible to better understand the properties of composite ceramics, as well as determine the optimal conditions for their modification.

Materials and methods

The synthesis of composite ceramics based on compounds of cerium dioxide, zirconium dioxide and magnesium oxide was carried out by mechanochemical grinding followed by thermal annealing of samples in a muffle furnace. A mixture of cerium and zirconium oxides in equal molar proportions was used as the base for the composite ceramics, and magnesium oxide was used as a stabilizer, which was added at the stage of weighing the samples before grinding. The concentration of magnesium oxide varied from 0.01 to 0.15 M. The choice of the concentration range was based on the possibility of changing the kinetics of phase transformations of composite ceramics during their thermal sintering. Grinding was carried out in a PULVERISETTE 6 planetary mill (Fritsch, Berlin, Germany). The grinding speed was 250 rpm, the grinding time was 30 minutes. Slow milling speeds were used to reduce the cold welding effect that occurs during vigorous mixing, which causes the powders being ground to stick together and become welded to the walls of the grinding bowl. This effect slows down the grinding process and deformation-induced crushing. After grinding, the resulting powders were removed from the grinding jar and subjected to thermal annealing in a Nabertherm muffle furnace (Nabertherm, Lilienthal, Germany). Annealing was carried out in air at a temperature of 1500 °C for 5 hours. The heating rate was 20 °C/min. After reaching the set temperature, the heating of the samples was maintained constantly; temperature fluctuations in the furnace were no more than $\pm 10^\circ$. After the annealing time had elapsed, the furnace heating was switched off and the samples were cooled to room temperature without being exposed to air. The resulting powders, after thermal annealing, were placed in plastic containers and hermetically sealed to prevent oxidation processes or exposure to the atmosphere. Figure 1 shows a schematic representation of the main stages of the synthesis of composite ceramics.

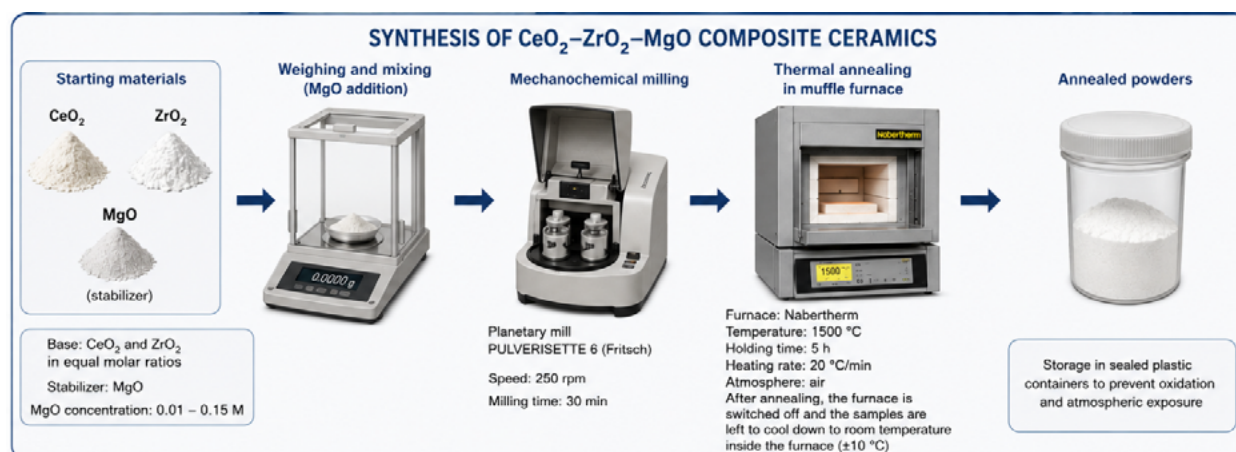


Figure 1. Schematic representation of the main stages of synthesis

Determination of the morphological features of composite ceramics depending on the concentration of the added stabilizing component in the form of magnesium oxide was carried out using the scanning electron microscopy method. Images were acquired on a Phenom™ ProX microscope (Thermo Fisher Scientific, Eindhoven, The Netherlands). All images were obtained using the same imaging modes, maintaining the image scale to enable determination of grain morphology and size.

The study of the kinetics of phase transformations depending on the ratio of components upon the addition of magnesium oxide was carried out using the X-ray structural analysis method. The diffraction patterns for subsequent processing were obtained on a D8 ADVANCE ECO powder diffractometer (Bruker, Karlsruhe, Germany). The survey was carried out in Bragg-Brentano geometry, the angular range was $2\theta = 20 - 100^\circ$, the survey step was 0.03° , and the data acquisition time at a point was 1 sec. The assessment of structural parameters and changes in phase composition depending on the variation in the ratio of components in the composition was carried out using the DiffracEVA v.4.2 software code with standard processing procedures, including subtraction of $\kappa\alpha_2$, smoothing of lines and their scaling for comparative analysis. The weight contributions of each phase in the samples were determined using a method for estimating the areas of diffraction reflections for each phase, followed by calculating the total area of the diffraction pattern. The weight contributions were estimated using corundum numbers determined from literature data for each identified phase. Structural

parameters were determined using a comparative analysis of peak positions obtained experimentally with the results of map values taken from the PDF-2 database. Parameter refinement was performed taking into account the cation sizes and their concentration dependences within the ceramics.

The optical properties of the studied ZrO₂ – CeO₂ ceramics were studied by a comprehensive analysis of the optical absorption spectra and calculation of the optical spectra of induced absorption depending on the concentration of magnesium oxide in the ceramics. Optical spectra were obtained on a SPECORD 200/210/250 PLUS spectrophotometer (Analytik Jena, Jena, Germany). Optical properties of ceramics were measured using an integral sphere, in which samples are placed in a special cuvette filled with barium sulfate, an optically transparent powder. Measurements are performed in a wavelength range from 190 to 10,000 nm with a 1 nm resolution.

Results and discussion

Figure 2 shows the results of the morphological features of the studied ZrO₂ – CeO₂ ceramics with the addition of magnesium oxide to the composition, a change in the concentration of which contributes, as can be seen from the data presented, to changes in the packing density of grains and crystallization processes during thermal sintering. In the case of ZrO₂ – CeO₂ ceramics without the addition of magnesium oxide (see data in Figure 2a), the microstructure is characterized by heterogeneous grains agglomerated into irregularly shaped dendrite-like processes with a highly developed surface and voids due to the loose structure formed by interconnected micron and submicron-sized particles. The presence of dendrite-like agglomerates consisting of spherical and elongated grains surrounded by a finely dispersed fraction indicates incomplete compaction of the ceramics during sintering of the particles, which in turn forms a developed porous surface in which the pores are unevenly distributed and formed by grain junctions and agglomerates. The presence of pores in the structure of ceramics is direct evidence of incomplete recrystallization processes, and the absence of faceted edges in agglomerates and the globular shape of grains, together with a high degree of aggregation of grains into dendritic inclusions, indicate that grain growth occurs by the mechanism of coalescence of small particles during sintering. This grain shape is typical for two-phase ceramics, which are represented by a solid solution of two phases, the presence of which leads to the formation of local structural stresses that prevent the formation of densely packed grains. When 0.01 – 0.03 M MgO is added to ZrO₂ – CeO₂ ceramics, the observed changes in the microstructure of the ceramics indicate an increase in the degree of compaction and structural uniformity due to the formation of finer grains with clearly defined intergranular contacts formed by rounded grains. Such changes in grain morphology are associated with the activation of sintering processes due to an increase in the mobility of grain boundaries, due to the dissolution of Mg²⁺ in the ZrO₂ – CeO₂ lattice with the formation of a large number of oxygen vacancies, the presence of which increases the diffusion mobility of oxygen and cations, which in turn accelerates mass transfer processes during high-temperature sintering. Acceleration of mass transfer processes leads to the formation of a more homogeneous structure, and intergranular contacts acquire a more pronounced continuous nature, indicating improved consolidation of ceramic grains during sintering. Moreover, the fine-grained fraction indicates that at low concentrations, MgO in the composition of ceramics does not cause intensive abnormal grain growth, and the absence of contrasting differences indicates that magnesium oxide is uniformly dissolved in the ZrO₂ – CeO₂ matrix, and the solubility limit is not exceeded. With an increase in the concentration of MgO in the composition of ZrO₂ – CeO₂ ceramics, the morphology of the grains is characterized by a transition to larger grains that have a polyhedral multifaceted shape with clearly defined boundaries, while having a densely packed structure. An assessment of the morphological features of the obtained ceramics indicates the presence of small grains having a clearly different phase from the main matrix, which, according to energy-dispersive analysis data, indicates the formation of inclusions in the form of MgO grains, the presence of which is due to exceeding the solubility limit of magnesium oxide in the ZrO₂ – CeO₂ matrix and the subsequent segregation of excess MgO in the intergranular space. With an increase in the concentration of magnesium oxide in the composition of ZrO₂ – CeO₂ ceramics, in addition to the process of dissolution of Mg²⁺ cations in the crystal lattice of ZrO₂ – CeO₂ and the formation of oxygen vacancies, the excess of magnesium oxide leads to the segregation of MgO grains into individual grains in the intergranular space in the form of a secondary phase, which affects the movement of grain boundaries and, as a consequence, the manifestation of heterogeneity in the sizes of polyhedral grains of the main ZrO₂ – CeO₂ matrix.

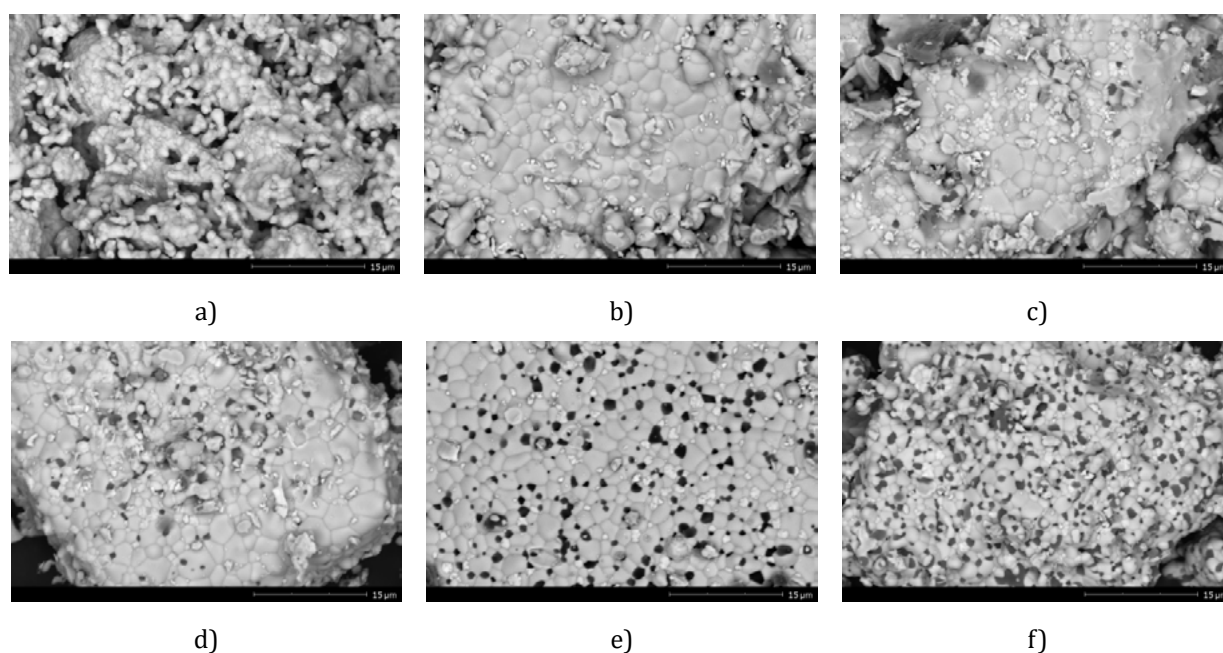


Figure 2. Results of morphological features of the studied $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics depending on the variation of the MgO component in the composition: a) 0.0 M; b) 0.01 M; c) 0.03 M; d) 0.05 M; e) 0.10 M; f) 0.15 M

The growth of grains of the $ZrO_2 - CeO_2$ matrix, in turn, is caused by an increase in the concentration of oxygen vacancies, the formation of which is associated with cationic substitution and the need to maintain charge electroneutrality. The appearance of clearly defined grain boundaries, in turn, indicates an increase in the degree of recrystallization at high concentrations of MgO, which is accompanied by a restructuring of the morphology and compaction of ceramics. An increase in the MgO concentration to 0.10 M and above leads to an increase in the number of secondary inclusions and intergranular defects, as well as compaction of ceramics, which indicates an increase in the efficiency of sintering processes due to the intensive migration of intergranular boundaries, as well as the suppression of grain growth due to the pinning effect. Moreover, this pinning effect manifests itself more intensely at concentrations of 0.15 M MgO, which is expressed in the restraint of grain position, which leads to increased grain fragmentation, as well as a decrease in the average grain size with clearly defined smoothed boundaries.

Figure 3 shows a schematic representation illustrating the trend of changes in the shape of grains and intergranular boundaries in the composition of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics at the addition of MgO to the composition with different concentrations, the change of which leads to variations in the sintering mechanisms of grains, and also has a significant impact on the kinetics of recrystallization processes. Analyzing the presented data on the morphological features of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics, shown in Figures 2 and 3, it can be concluded that at low concentrations of MgO, the dominant role in the processes of recrystallization and grain formation is played by the processes of magnesium oxide dissolution in the $ZrO_2 - CeO_2$ matrix and cationic substitution, which is accompanied by the formation of oxygen vacancies, a change in the concentration of which can influence the processes of polymorphic transformations and the subsequent rearrangement of the phase composition of ceramics.

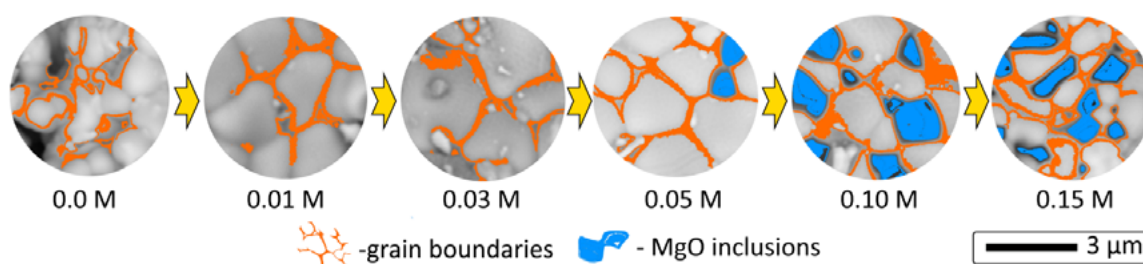


Figure 3. Results of the evaluation of the morphological features of the formation of grains in the composition of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics with the addition of MgO components with different ratios of components

When the solubility threshold of magnesium oxide is reached, which is achieved at concentrations above 0.05 M, segregation of secondary phases in the form of MgO inclusions formed in the intergranular space is observed in the composition of ceramics. An increase in the concentration of these inclusions leads to the initialization of grain growth inhibition processes due to the pinning effect, which leads to the formation of a heterogeneous structure consisting of polyhedral grains having an elongated or polyhedral shape, and the inclusions of the secondary phase themselves acquire a coalesced shape, which leads to increased fragmentation of intergranular boundaries.

Figure 4 demonstrates the results of X-ray phase analysis of the studied samples of ZrO₂ – CeO₂ ceramics depending on the variation of the concentration of MgO in the composition, the addition of which leads to an increase in the processes of phase transformations caused by the mechanisms of cation substitution, accompanied by the formation of oxygen vacancies.

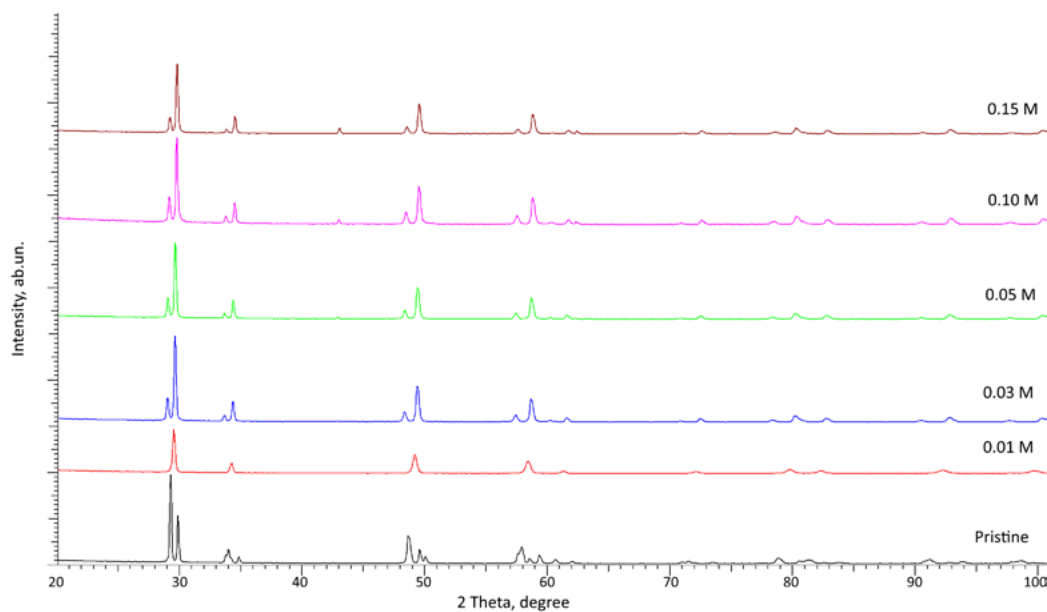


Figure 4. Results of X-ray diffraction of the studied ZrO₂ – CeO₂ ceramics with the addition of MgO in different concentrations

The initial composition of the ceramics is a mixture of a solid solution of two phases: tetragonal Ce_{0.2}Zr_{0.8}O₂ (PDF-01-080-6303) and cubic Ce_{0.5}Zr_{0.5}O₂ (PDF-01-076-8752). When 0.01 M MgO is added to the composition, according to X-ray diffraction data, a phase transformation, expressed in the formation of the cubic phase Ce_{0.33}Zr_{0.67}O₂ (PDF-01-082-9829), which in turn indicates the homogenization of the structure due to the low content of the modifier and leads to the stabilization of the ZrO₂ – CeO₂ solid solution by forming a cubic phase, occurs. With an increase in the MgO concentration to 0.03 M and higher, according to X-ray diffraction data, destabilization of the cubic phase Ce_{0.33}Zr_{0.67}O₂ occurs, followed by displacement of the secondary tetragonal phase Zr_{0.35}Ce_{0.65}O₂ (PDF-01-074-8062) from it, the formation of which leads to the formation of a solid solution of two phases that differ in the cationic ratio Ce⁴⁺/Zr⁴⁺, which occurs as a result of cationic substitution, as well as a change in the thermodynamic stability of the phases. According to the analysis of the presented results of X-ray diffraction for samples of ZrO₂ – CeO₂ ceramics, the composition contains MgO from 0.05 M and higher, in the region of 2θ=43-44° and 2θ=62-63°, the appearance of diffraction reflections characteristic of the MgO phase, the identification of which is in good agreement with the results of the assessment of morphological features, in which it was established that when the solubility limit of MgO in the composition is reached, there is a segregation of MgO inclusions in the interboundary space, is observed. A comparison of the density of MgO inclusions and the change in the intensity of diffraction reflections characteristic of the MgO phase makes it possible to conclude that there is a good agreement between the data, indicating that an increase in the concentration of MgO above the solubility limit leads to an increase in the concentration of inclusions that initiate pinning, an effect that leads to inhibition of grain growth.

Figure 5 shows the assessment results of changes in the phase composition of the studied ZrO₂ – CeO₂ ceramics, reflecting the kinetics of phase transformations in the composition of ceramics with variations in the ratio of components in the composition. According to the assessment of the weight contributions in the initial ZrO₂ – CeO₂ ceramics, the ratio of the tetragonal Ce_{0.2}Zr_{0.8}O₂ and cubic Ce_{0.5}Zr_{0.5}O₂ phases is 46/54 wt. %, and the formation of a solid solution from two phases is due to the limited homogeneity of the distribution of Ce⁴⁺ and Zr⁴⁺ ions during the sintering process, which leads

to the emergence of a local separation of regions with different component ratios. The addition of 0.01 M MgO, according to X-ray diffraction data, leads to the formation of the cubic phase $\text{Ce}_{0.33}\text{Zr}_{0.67}\text{O}_2$ in the composition, with its subsequent dominance in the composition with an increase in the MgO concentration. The main mechanism of formation of this phase and polymorphic transformation of the $t - \text{Ce}_{0.2}\text{Zr}_{0.8}\text{O}_2 \rightarrow c - \text{Ce}_{0.33}\text{Zr}_{0.67}\text{O}_2$ type is associated with cationic substitution $\text{Mg}^{2+} \rightarrow \text{Zr}^{4+} (\text{Ce}^{4+}) + V_{\text{O}}^*$, which is accompanied by the formation of oxygen vacancies (V_{O}^*), the presence of which leads to an increase in the mobility of the anionic subsystem and acceleration of the diffusion of Ce^{4+} and Zr^{4+} cations, leading to a decrease in chemical heterogeneity, as well as a decrease in elastic stresses and stabilization of the cubic structure. With an increase in the concentration of MgO to 0.03 M and above, a displacement of the secondary tetragonal phase $\text{Zr}_{0.35}\text{Ce}_{0.65}\text{O}_2$ from the cubic phase is observed, the formation of which is due to reaching the solubility limit of Mg^{2+} in the composition of ceramics, which leads to the fact that charge compensation cannot occur only due to the formation of oxygen vacancies, the density of which increases, which leads to an increase in local distortions and energy destabilization of the homogeneous solid solution $\text{Ce}_{0.33}\text{Zr}_{0.67}\text{O}_2$, which leads to the release of the tetragonal phase $\text{Zr}_{0.35}\text{Ce}_{0.65}\text{O}_2$, the weight contribution of which is no more than 25 wt. %.

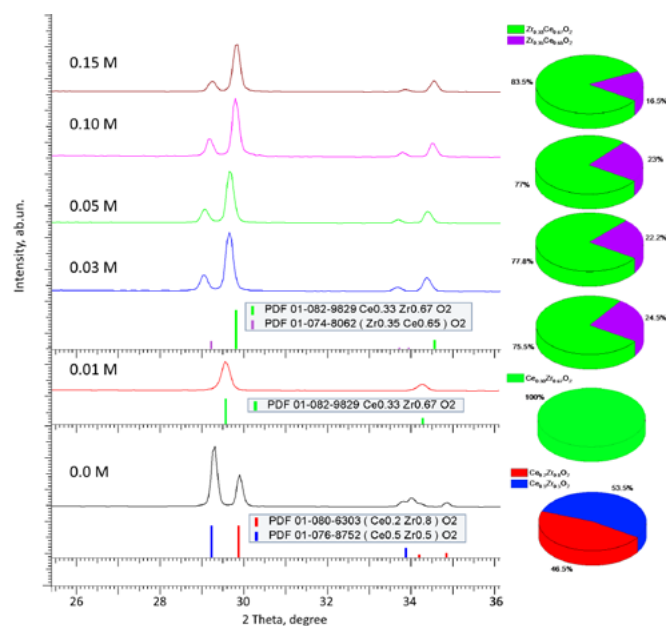


Figure 5. Results of the phase composition evaluation of composite $\text{ZrO}_2 - \text{CeO}_2$ ceramics, determined on the basis of the weight contributions of the phases in the composition with variations in the ratio of the MgO component

At the same time, the assessment of the shape of diffraction reflections for samples with a MgO content in the composition above 0.05 M indicates that during the formation of the tetragonal phase of $\text{Zr}_{0.35}\text{Ce}_{0.65}\text{O}_2$, a decrease in local structural distortions and stresses is observed, which indicates that such phase separation leads to a change in the differences in the binding energy of $\text{Ce} - \text{O}$, $\text{Zr} - \text{O}$, as well as stabilization of the structure. It should also be noted that in the case of high concentrations of MgO in the composition, at which the formation of MgO inclusions occurs in the form of individual well-structured grains, acting as barriers that inhibit grain growth, a decrease in the proportion of the tetragonal phase $\text{Zr}_{0.35}\text{Ce}_{0.65}\text{O}_2$ (at an MgO concentration of 0.15 M) is observed from 23 – 25 wt. % to 16 wt. %. Such a decrease indicates the inhibition of not only grain growth observed during the analysis of morphological features but also the initialization of phase transformations in the structure.

Table 1 presents the data on the structural parameters of the studied samples of $\text{ZrO}_2 - \text{CeO}_2$ ceramics, in the evaluation of which the ionic radii of $\text{Zr}^{4+} \sim 0.84 \text{ \AA}$, $\text{Ce}^{4+} \sim 0.97 \text{ \AA}$ and $\text{Mg}^{2+} \sim 0.72 \text{ \AA}$ were taken into account. According to the assessment of the crystal lattice parameters of the cubic phase $\text{Ce}_{0.33}\text{Zr}_{0.67}\text{O}_2$ formed by the addition of MgO to the composition of ceramics, the observed decrease in the lattice parameters can be explained both by the effect of cationic substitution of the $\text{Mg}^{2+} \rightarrow \text{Zr}^{4+}$ or $\text{Mg}^{2+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$ type, which, due to differences in ionic radii, will lead to a decrease in the lattice size, and by a change in the $\text{Zr}^{4+}/\text{Ce}^{4+}$ ratio in the lattice associated with an increase in the proportion of Zr^{4+} , which has a smaller ionic radius.

Table 1. Data on the structural parameters of ZrO₂ – CeO₂ ceramics with variations in the ratio of components in the composition

hase	Concentration of MgO, M					
	0.0	0.01	0.03	0.05	0.10	0.15
Ce _{0.2} Zr _{0.8} O ₂ – Tetragonal P42/nmc(137)	a=3.6375±0.0015 Å, c=5.2395±0.0019 Å	-	-	-	-	-
Ce _{0.5} Zr _{0.5} O ₂ – Cubic Fm-3m(225)	a=5.2869±0.0021 Å	-	-	-	-	-
Ce _{0.33} Zr _{0.67} O ₂ Cubic Fm-3m(225)	-	a=5.2276±0.0024 Å	a=5.2124±0.0016 Å	a=5.2145±0.0015 Å	a=5.1916±0.0024 Å	a=5.1854±0.0022 Å
Zr _{0.35} Ce _{0.65} O ₂ Tetragonal P42/nmc(137)	-	-	a=3.7594±0.0022 Å, c=5.3156±0.0019 Å	a=3.7616±0.0017 Å, c=5.3157±0.0022 Å	a=3.7371±0.0013 Å, c=5.3211±0.0019 Å	a=3.7319±0.0019 Å, c=5.3115±0.0015 Å
Degree of structural ordering, %	90.4	89.7	89.5	91.5	86.5	88.3

However, an assessment of the trend of changes in the crystal lattice parameters for the Ce_{0.33}Zr_{0.67}O₂ phase, especially at high concentrations of MgO in the composition, makes it possible to conclude that the dominant process is cationic substitution in the composition, which leads to an increase in the concentration of oxygen vacancies, since the substitution process is accompanied by the formation of oxygen vacancies in the structure to maintain charge electroneutrality. At the same time, the formation of oxygen vacancies leads to the facilitation of the processes of mutual diffusion of Zr⁴⁺ ↔ Ce⁴⁺ ions, which makes it possible to reduce chemical heterogeneity and accelerate the processes of phase transformations, the result of which is an increase in the proportion of the cubic phase in the composition of ceramics.

Figure 6 shows the assessment results of changes in the optical properties of ceramics, expressed in absorption spectra, as well as calculated spectra of induced absorption, reflecting the kinetics of changes in structural defects and oxygen vacancies depending on the concentration of MgO in the composition, as well as the processes of phase transformations arising as a result of cationic substitution, accompanied by the formation of oxygen vacancies and structural distortions. According to the presented optical absorption spectra, in the case of the initial ZrO₂ – CeO₂ ceramics, a smooth increase in absorption is observed in the region of 3.5 – 5.3 eV and a subsequent sharp decline near 5.5 – 5.6 eV, and the optical spectrum itself is characteristic of two-phase ceramics, in which the optical response is formed by the contribution of both structural modifications, in this case a mixture of cubic and tetragonal phases. When MgO is added to the composition of ZrO₂ – CeO₂ ceramics, the change in the optical absorption spectra indicates a structural rearrangement associated with a variation in the phase composition of the ceramics, as well as changes in the local cationic environment of Zr⁴⁺/Ce⁴⁺. The increase in absorption intensity in the range of 4.4 – 5.6 eV upon the addition of 0.01 M MgO to the composition of ZrO₂ – CeO₂ ceramics is due to the phase transformation of the solid solution of two phases into a cubic phase, the stabilization of which is accompanied by a sharp increase in the concentration of oxygen vacancies, as well as changes in the valence-coordination state of cerium ions, which enhances optical absorption. The addition of 0.03 M MgO to the composition of ZrO₂ – CeO₂ ceramics leads to the appearance of a pronounced absorption band in the region of 3.9 – 4.1 eV, the presence of which is associated with the formation of defect states, as well as local transitions caused by the redistribution of Ce⁴⁺ and Zr⁴⁺ cations that arise during the formation of the tetragonal Zr_{0.35}Ce_{0.65}O₂ phase. Moreover, a decrease in the intensity of the absorption spectrum in the region of 4.5 – 5.4 eV indicates a change in the electronic structure caused by a change in the concentration of oxygen vacancies and a redistribution of the charge density. An increase in the MgO concentration above 0.05 M in the composition of ZrO₂ – CeO₂ ceramics leads to a decrease in the absorption intensity of the spectra, which is due to the stabilization of two phases with different cationic distribution Zr⁴⁺/Ce⁴⁺, which leads to a more heterogeneous distribution of cations, but does not cause strong absorption due to the stabilization of the structure and compensation of charge electroneutrality.

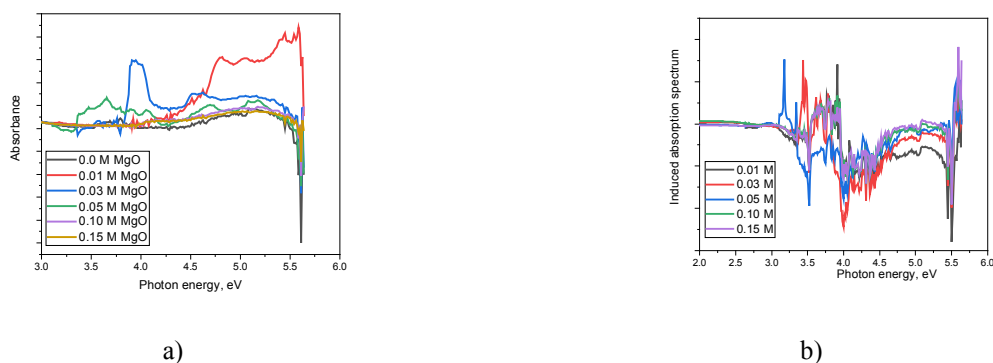


Figure 6. Results of optical properties of ceramics:

a) Absorption spectra of the studied composite ceramics depending on the ratio of components in the composition; b) Induced absorption spectra calculated for modified ceramics relative to the initial $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics

Figure 6b shows the results of a comparative analysis of the effect of the addition of MgO to the composition of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics on the change in the intensity of induced absorption spectra depending on the concentration of magnesium oxide in the composition, according to which a change in the MgO content in the composition leads to a change not only in the number and concentration of defects, but also in their type. The optical absorption spectrum of the original sample without the addition of magnesium oxide was used as a comparison spectrum. A general analysis of the obtained induced absorption spectra made it possible to identify three characteristic regions characterizing different types of defects: the region of 3.1 – 3.5 eV is typical for defect levels associated with oxygen vacancies and Ce^{3+} centers; the region of 3.6 – 4.3 eV is typical for complex defects of the $Ce^{3+} - V_o^*$, $Mg - V_o^*$ type and $Ce - O - Zr$ disorder; the region of 5.4 – 5.7 eV is typical for interband transitions and changes in the band gap. When 0.01 M MgO is added to the composition of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics, the observed changes in the region of 3.3 – 4.2 eV indicate a low concentration of defect centers, as well as the formation of oxygen vacancies arising from the cationic substitution $Mg^{2+} \rightarrow Zr^{4+}$ or $Mg^{2+} \rightarrow Ce^{4+}$. An increase in the MgO concentration to 0.03 M leads to an increase in oscillations in the range of 3.3 – 4.1 eV, indicating an increase in the concentration of defects associated with oxygen vacancies, as well as partial reduction of $Ce^{4+} \rightarrow Ce^{3+}$. The addition of 0.05 M MgO leads to the appearance of spectral absorption lines in the region of 3.5 – 4.2 eV, associated with the formation of MgO inclusions, which leads to a decrease in the concentration of optically active vacancies in the structure. At a MgO concentration of 0.10 M, defect bands are preserved in the optical spectra, but their intensity does not increase in direct proportion to the content of MgO inclusions in the ceramics, which indicates that excess MgO forms individual inclusions rather than new vacancies in the structure of the main phase. At a MgO concentration of 0.15 M, the main changes in the spectrum are associated with changes in the high-energy region (5.5 – 5.7 eV), which are associated not only with defects, but also with an increased role of MgO inclusions in the composition, which inhibit grain growth and also affect the change in the ratio of tetragonal and cubic phases.

Conclusion

The paper presents the results of the effect of the addition of MgO to the composition of $ZrO_2 - CeO_2$ ceramics on the change in the morphological features and kinetics of phase transformations of ceramics with a change in the ratio of components during thermal sintering. According to the data from the assessment of morphological features, it was established that the addition of a low concentration of MgO to the composition of ceramics leads to a compaction of the structure, a decrease in porosity, and the formation of a homogeneous fine-grained fraction, the formation of which is due to the activation of diffusion processes due to the formation of oxygen vacancies and an increase in the consolidation of ceramics. At low concentrations, MgO acts as a structural modifier, leading to the stabilization of the $ZrO_2 - CeO_2$ solid solution and increasing the mobility of grain boundaries. An increase in the MgO concentration above 0.05 M leads to a transition to a denser polyhedral structure of grains with clearly defined intergranular boundaries, as well as the formation of secondary MgO inclusions, the appearance of which indicates that the solubility limit has been exceeded and two processes are competing: acceleration of grain growth due to high defectiveness and partial fixation of grain boundaries with secondary inclusions in the form of MgO grains. At high MgO concentrations, a stabilized fine-grained structure with a high density of grain boundaries and a significant number of defective areas is formed. Moreover, it was established that

the evolution of the morphological features of ZrO₂ – CeO₂ ceramics is determined by the competition of two mechanisms: MgO – induced activation of diffusion processes associated with the formation of oxygen vacancies and the fixation of intergranular boundaries by MgO – inclusions, which inhibit grain growth.

Analysis of X-ray diffraction data revealed that the addition of MgO leads to a restructuring of the phase composition, accompanied by a transition from the initial two-phase state to a single-phase cubic structure at 0.01 M MgO and the subsequent formation of a mixture of two phases at higher concentrations. It is shown that the introduction of MgO promotes the formation of oxygen vacancies and defect complexes, which determine the change in the optical and induced absorption spectra. According to the assessment of the optical properties of ceramics, it was found that at low concentrations of MgO equal to 0.01–0.03 M, Mg²⁺ actively enters the ZrO₂ – CeO₂ lattice, which leads to the formation of oxygen vacancies initiating phase transformation processes. At concentrations of 0.05 M and higher, the release of MgO inclusions begins, which leads to a disproportionate increase in defects in the matrix and a change in the optical spectra. It was established that the evolution of the microstructure is determined by the competition between the activation of diffusion processes due to oxygen vacancies and the pinning effect caused by the release of MgO inclusions. The obtained results demonstrate the possibility of effective control of the phase state, defect structure and optical characteristics of ZrO₂ – CeO₂ ceramics by variation of the concentration of MgO.

Funding: This research was funded by the Committee of Science of the Ministry of Science and Higher Education of the Republic of Kazakhstan (No.AP26104011).

The contribution of the authors

A.Z. Zikirina, I. Kenzhina, Z. Zaurbekova, K. Ilyasheva, G. Seitmaganbet and A. Kozlovskiy contributed to the synthesis, characterization, and analysis of composite ZrO₂ – CeO₂ – MgO ceramics.

A.Z. Zikirina and I. Kenzhina performed the synthesis of composite ceramics by mechanochemical grinding and thermal annealing, including preparation of samples, optimization of MgO concentration, and experimental procedures.

Z. Zaurbekova and G. Seitmaganbet conducted scanning electron microscopy investigations and analyzed the morphological features and grain structure of the obtained ceramics.

I. Kenzhina and A. Kozlovskiy performed X-ray diffraction measurements, phase composition analysis, and interpretation of structural parameters.

K. Ilyasheva contributed to the study of optical properties, including the acquisition and analysis of optical absorption spectra. All authors participated in data interpretation, discussion of results, and preparation and revision of the manuscript. All authors read and approved the final version of the manuscript.

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

In preparing this paper, the author(s) used ChatGPT to construct general experimental flow charts, reflecting the sequence of steps in ceramic synthesis and illustrating the main technological processes. After using this ChatGPT, the author(s) reviewed and edited the content as necessary and bear full responsibility for the content of the published article.

References

1. Z. Y. Deng, J. M. Ferreira, Y. Tanaka, Y. Isoda, Microstructure and thermal conductivity of porous ZrO₂ ceramics, *Acta materialia* 55(11), p.3663-3669 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.02.014>
2. D. Liu, J. Fan, K. Zhao, J. Liu, L. An, Preparation of super-strong ZrO₂ ceramics using dynamic hot forging, *Journal of the European Ceramic Society* 43(2), p.733-737 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2022.10.004>
3. K. Zhang, R. He, G. Ding, C. Feng, W. Song, D. Fang, Digital light processing of 3Y-TZP strengthened ZrO₂ ceramics, *Materials Science and Engineering: A* 774, p.138768 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2019.138768>
4. M. A. Daud, R. Ahmed, M. N. Islam, M. M. Hassan Parvez, M. S. Islam, M. A. Gafur, A. N. Ahmed, Influence of ZrO₂ content on the mechanical, electrical, and microstructural characteristics of La_{1-x}Zr_xCo_{1-y}Mn_yO₃ perovskites for IT-SOFC cathodes, *PloS one* 20(6), p.e0320562 (2025). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0320562>
5. A. Heel, A. Vital, P. Holtappels, T. Graule, Flame spray synthesis and characterisation of stabilised ZrO₂ and CeO₂ electrolyte nanopowders for SOFC applications at intermediate temperatures, *Journal of electroceramics* 22(1), p.40-46 (2009). <https://doi.org/10.1007/s10832-007-9384-z>
6. E. AHM, S. Islam, J. H. Kim, B. T. Lee, Fabrication and characterization of t-ZrO₂ supported small tubular SOFC, *Journal of the Ceramic Society of Japan* 117(1370), p.1131-1133 (2009). <https://doi.org/10.2109/jcersj2.117.1131>

7. F. C. Antunes, J. P. de Oliveira, J. R. Verza, R. Cesar, M. R. Morelli, T. Dias, H. Zanin, Boosting ionic conductivity of Y2O3 co-doped ZrO2–CeO2 electrolyte of SOFCs by successive thermal-treatments, *Ceramics International* 51(5), p.6815-6823 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.12.099>
8. G. Paściak, J. Chmielowiec, P. Bujło, New ceramic superionic materials for IT-SOFC applications, *Materials Science-Poland* 23(1), p.209-219 (2005).
9. X. Mantzouris, N. Zouvelou, D. Skarmoutsos, P. Nikolopoulos, F. Tietz, Interfacial properties and structure stability of Ni/Y2O3-ZrO2-TiO2 cermet anodes for solid oxide fuel cells, *Journal of materials science* 40(9), p.2471-2475. (2005). <https://doi.org/10.1007/s10853-005-1977-9>
10. D. A. Osinkin, E. P. Antonova, A. S. Lesnichyova, E. S. Tropin, M. E. Chernov, E. I. Chernov, M. V. Ananyev, Application of promising electrode materials in contact with a thin-layer ZrO2-based supporting electrolyte for solid oxide fuel cells, *Energies* 13(5), p.1190 (2020). <https://doi.org/10.3390/en13051190>
11. M. Guo, X. Zhang, Y. Li, M. Andersson, Z. Yang, S. Peng, High gas tightness ZrO2-added silicate glass sealant with low thermal stress for solid oxide fuel cells, *Ceramics International* 49(12), p.19708-19716 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.03.088>
12. V. Kulyk, B. Vasylyv, Z. Duriagina, P. Lyuty, V. Vavruk, A. Kostyryzh, The effect of sintering temperature on phase-related peculiarities of the microstructure, flexural strength, and fracture toughness of fine-grained ZrO2–Y2O3–Al2O3–CoO–CeO2–Fe2O3 ceramics, *Crystals* 14(2), p.175. (2024). <https://doi.org/10.3390/cryst14020175>
13. X. Song, Y. Ding, J. Zhang, C. Jiang, Z. Liu, C. Lin, Y. Zeng Thermophysical and mechanical properties of cubic, tetragonal and monoclinic ZrO2, *Journal of Materials Research and Technology* 23, p.648-655 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.01.040>
14. O. Y. Kurapova, A. G. Glukharev, O. V. Glumov, V. G. Konakov, The effect of the sintering parameters on the structure and oxygen ion conductivity of Y2O3–ZrO2–CeO2 ceramics, *Open Ceramics* 5, p.100086 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.oceram.2021.100086>
15. E. M. Köck, M. Kogler, B. Klötzer, M. F. Noisternig, S. Penner, Structural and electrochemical properties of physisorbed and chemisorbed water layers on the ceramic oxides Y2O3, YSZ, and ZrO2, *ACS applied materials & interfaces* 8(25), p.16428-16443 (2016). <https://doi.org/10.1021/acsami.6b03566>
16. Z. Shen, X. Zhu, S. Le, W. Sun, K. Sun, Co-sintering anode and Y2O3 stabilized ZrO2 thin electrolyte film for solid oxide fuel cell fabricated by co-tape casting, *International journal of hydrogen energy* 37(13), p.10337-10345 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.04.022>
17. X. T. Wang, G. M. Kale, Microwave sintering of YSZ electrolyte materials for SOFC, (*Key Engineering Materials* 368, 2008), p.238-240
18. Z. Yang, J. Tian, F. Li, L. Cao, M. Zhang, H. Luo, Y. Zhou, Crystallization process of (ZrO2) 0.9 (Sc2O3) 0.1 nanoparticles synthesized by a sol–gel method for SOFC electrolyte, *Journal of the American Ceramic Society* 109(1), p.e70430 (2026). <https://doi.org/10.1111/jace.70430>
19. N. Laosiripojana, S. Assabumrungrat, Catalytic steam reforming of dimethyl ether (DME) over high surface area Ce–ZrO2 at SOFC temperature: The possible use of DME in indirect internal reforming operation (IIR-SOFC), *Applied Catalysis A: General* 320, p.105-113 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2006.12.018>
20. K. Ahn, H. He, J. M. Vohs, R. J. Gorte, Enhanced thermal stability of SOFC anodes made with CeO2-ZrO2 solutions, *Electrochemical and Solid-State Letters* 8(8), p.A414-A417 (2005). <https://doi.org/10.1149/1.1945374>

**Зикирина А.¹, Кенжина И.^{1,2,3*}, Заурбекова З.^{1,2}, Ильяшева К.⁴,
Сейтмаганбет Г.³, Козловский А.^{1,3}**

¹*Satbayev University, Алматы, Қазақстан*

²*Эксперименттік және теориялық физика институты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы, Қазақстан*

³*Ядролық физика институты, Алматы, Қазақстан*

⁴*Nazarbayev University, Астана, Қазақстан*

(E-mail: agun_zikirina@mail.ru, kenzhina@physics.kz, zaurbekova@physics.kz, ilyasheva.semey@gmail.com,
gaukhar14.05@mail.ru, kozlovskiy.a@inp.kz)

ZrO₂ – CeO₂ керамикасының құрамындағы фазалық түрленулерге тұрақтандырушы магний оксиді қоспасының мөлшерінің әсері

Аңдатпа. Бұл жұмыстың мақсаты композиттік ZrO₂ – CeO₂ керамикасының құрамына енгізілетін тұрақтандырушы магний оксиді қоспасының жоғары температуралық күйдіру кезінде жүретін фазалық түрленулер кинетикасының өзгеруіндегі рөлін қоспа концентрациясына байланысты анықтау болып табылады. ZrO₂ – CeO₂ керамикасының микроструктуралық ерекшеліктерін зерттеу нәтижесінде MgO қоспасының төмен концентрацияларда енгізілуі тығыз орналасқан ұсақ дисперсті глобулалық пішінді түйіршіктердің түзілуіне әкелетіні анықталды. Ал MgO концентрациясы 0,05 М-ден жоғары болған жағдайда түйіршіктердің іріленуі және олардың пішінінің глобулалықтан полигональды түрге өзгеруі байқалады, сондай-ақ MgO қосындылары түзіледі. Бұл құбылыс магний оксидінің ZrO₂ – CeO₂ матрицасындағы ерігіштік шегінен асып кетуімен түсіндіріледі. MgO мөлшерін өзгерту ZrO₂ – CeO₂ керамикасының морфологиясын тиімді басқаруға мүмкіндік беретіні анықталды: борпылдақ кеуекті құрылымнан бастап, бақыланатын түйіршік өлшемі, жоғары ақаулылық және дамыған түйіршік шекаралары бар тығыз ұсақ түйіршікті гетерогенді жүйеге дейін өзгертуге болады. Рентгендік фазалық талдау әдістері арқылы MgO енгізу фазалық құрамның қайта құрылуына әкелетіні анықталды: бастапқы екі фазалы күйден 0,01 М MgO кезінде бір фазалы кубтық құрылым түзіледі, ал жоғары концентрацияларда кубтық және тетрагональды екі фазаның қоспасы қалыптасады, мұнда құрамда кубтық фаза басым болады.

Түйін сөздер: тұрақтандырушы қоспа, магний оксиді, фазалық түрленулер, композиттік керамика, цирконий диоксиді

Зикирина А.¹, Кенжина И.^{1,2,3*}, Заурбекова З.^{1,2}, Ильяшева К.⁴,
Сейтмаганбет Г.³, Козловский А.^{1,3}

¹Satbayev University, Алматы, Казахстан

²Институт экспериментальной и теоретической физики, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Алматы, Казахстан

³Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

⁴Nazarbayev University, Астана, Казахстан

(E-mail: agun_zikirina@mail.ru, kenzhina@physics.kz, zaurbekova@physics.kz, ilyasheva.semey@gmail.com,
gaukhar14.05@mail.ru, kozlovskiy.a@inp.kz)

Роль изменения содержания стабилизирующей добавки оксида магния в фазовых превращениях состава керамики ZrO₂ – CeO₂

Аннотация. Целью данной работы является определение роли введения стабилизирующей добавки оксида магния в состав композитной керамики ZrO₂ – CeO₂ в изменении кинетики фазовых превращений, происходящих при высокотемпературном спекании керамики, в зависимости от концентрации добавки. В результате оценки микроструктурных особенностей керамики ZrO₂ – CeO₂ установлено, что добавление MgO в низких концентрациях приводит к формированию мелкодисперсных зерен глобулярной формы с плотной упаковкой. При увеличении концентрации MgO выше 0,05 М наблюдается укрупнение зерен и изменение их формы от глобулярной к полигональной с образованием включений MgO, наличие которых обусловлено превышением предела растворимости оксида магния в матрице ZrO₂ – CeO₂. Установлено, что изменение содержания MgO позволяет эффективно контролировать морфологию керамики ZrO₂ – CeO₂ от рыхлой пористой структуры до плотной мелкозернистой гетерогенной системы с регулируемым размером зерен, высокой дефектностью и развитой межзеренной структурой. Методами рентгенофазового анализа установлено, что введение MgO приводит к перестройке фазового состава: от исходного двухфазного состояния к однофазной кубической структуре при содержании 0,01 М MgO и последующему формированию смеси двух фаз – кубической и тетрагональной – при более высоких концентрациях, с преобладанием кубической фазы в составе.

Ключевые слова: стабилизирующая добавка, оксид магния, фазовые превращения, композитная керамика, диоксид циркония

References

1. Z. Y. Deng, J. M. Ferreira, Y. Tanaka, Y. Isoda, Microstructure and thermal conductivity of porous ZrO₂ ceramics, *Acta materialia* 55(11), p.3663-3669 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.02.014>
2. D. Liu, J. Fan, K. Zhao, J. Liu, L. An, Preparation of super-strong ZrO₂ ceramics using dynamic hot forging, *Journal of the European Ceramic Society* 43(2), p.733-737 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2022.10.004>
3. K. Zhang, R. He, G. Ding, C. Feng, W. Song, D. Fang, Digital light processing of 3Y-TZP strengthened ZrO₂ ceramics, *Materials Science and Engineering: A* 774, p.138768 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2019.138768>
4. M. A. Daud, R. Ahmed, M. N. Islam, M. M. Hassan Parvez, M. S. Islam, M. A. Gafur, A. N. Ahmed, Influence of ZrO₂ content on the mechanical, electrical, and microstructural characteristics of La_{1-x}Zr_xCo_{1-y}Mn_yO₃ perovskites for IT-SOFC cathodes, *PloS one* 20(6), p.e0320562 (2025). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0320562>
5. A. Heel, A. Vital, P. Holtappels, T. Graule, Flame spray synthesis and characterisation of stabilised ZrO₂ and CeO₂ electrolyte nanopowders for SOFC applications at intermediate temperatures, *Journal of electroceramics* 22(1), p.40-46 (2009). <https://doi.org/10.1007/s10832-007-9384-z>
6. E. AHM, S. Islam, J. H. Kim, B. T. Lee, Fabrication and characterization of t-ZrO₂ supported small tubular SOFC, *Journal of the Ceramic Society of Japan* 117(1370), p.1131-1133 (2009). <https://doi.org/10.2109/jcersj2.117.1131>
7. F. C. Antunes, J. P. de Oliveira, J. R. Verza, R. Cesar, M. R. Morelli, T. Dias, H. Zanin, Boosting ionic conductivity of Y2O₃ co-doped ZrO₂-CeO₂ electrolyte of SOFCs by successive thermal-treatments, *Ceramics International* 51(5), p.6815-6823 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.12.099>
8. G. Paściak, J. Chmielowiec, P. Bujło, New ceramic superionic materials for IT-SOFC applications, *Materials Science-Poland* 23(1), p.209-219 (2005).
9. X. Mantzouris, N. Zouvelou, D. Skarmoutsos, P. Nikolopoulos, F. Tietz, Interfacial properties and structure stability of Ni/Y₂O₃-ZrO₂-TiO₂ cermet anodes for solid oxide fuel cells, *Journal of materials science* 40(9), p.2471-2475. (2005). <https://doi.org/10.1007/s10853-005-1977-9>
10. D. A. Osinkin, E. P. Antonova, A. S. Lesnichyova, E. S. Tropin, M. E. Chernov, E. I. Chernov, M. V. Ananyev, Application of promising electrode materials in contact with a thin-layer ZrO₂-based supporting electrolyte for solid oxide fuel cells, *Energies* 13(5), p.1190 (2020). <https://doi.org/10.3390/en13051190>
11. M. Guo, X. Zhang, Y. Li, M. Andersson, Z. Yang, S. Peng, High gas tightness ZrO₂-added silicate glass sealant with low thermal stress for solid oxide fuel cells, *Ceramics International* 49(12), p.19708-19716 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2023.03.088>
12. V. Kulyk, B. Vasylyv, Z. Duriagina, P. Lyutyy, V. Vavruk, A. Kostryzhev, The effect of sintering temperature on phase-related peculiarities of the microstructure, flexural strength, and fracture toughness of fine-grained ZrO₂-Y₂O₃-Al₂O₃-CoO-CeO₂-Fe₂O₃ ceramics, *Crystals* 14(2), p.175. (2024). <https://doi.org/10.3390/cryst14020175>
13. X. Song, Y. Ding, J. Zhang, C. Jiang, Z. Liu, C. Lin, Y. Zeng Thermophysical and mechanical properties of cubic, tetragonal and monoclinic ZrO₂, *Journal of Materials Research and Technology* 23, p.648-655 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.01.040>
14. O. Y. Kurapova, A. G. Glukharev, O. V. Glumov, V. G. Konakov, The effect of the sintering parameters on the structure and oxygen ion conductivity of Y₂O₃-ZrO₂-CeO₂ ceramics, *Open Ceramics* 5, p.100086 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.oceram.2021.100086>
15. E. M. Köck, M. Kogler, B. Klötzer, M. F. Noisternig, S. Penner, Structural and electrochemical properties of physisorbed and chemisorbed water layers on the ceramic oxides Y₂O₃, YSZ, and ZrO₂, *ACS applied materials & interfaces* 8(25), p.16428-16443 (2016). <https://doi.org/10.1021/acsami.6b03566>
16. Z. Shen, X. Zhu, S. Le, W. Sun, K. Sun, Co-sintering anode and Y₂O₃ stabilized ZrO₂ thin electrolyte film for solid oxide fuel cell fabricated by co-tape casting, *International journal of hydrogen energy* 37(13), p.10337-10345 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2012.04.022>
17. X. T. Wang, G. M. Kale, Microwave sintering of YSZ electrolyte materials for SOFC, (*Key Engineering Materials* 368, 2008), p.238-240
18. Z. Yang, J. Tian, F. Li, L. Cao, M. Zhang, H. Luo, Y. Zhou, Crystallization process of (ZrO₂)_{0.9}(Sc₂O₃)_{0.1} nanoparticles synthesized by a sol-gel method for SOFC electrolyte, *Journal of the American Ceramic Society* 109(1), p.e70430 (2026). <https://doi.org/10.1111/jace.70430>
19. N. Laosiripojana, S. Assabumrungrat, Catalytic steam reforming of dimethyl ether (DME) over high surface area Ce-ZrO₂ at SOFC temperature: The possible use of DME in indirect internal reforming operation (IIR-SOFC), *Applied Catalysis A: General* 320, p.105-113 (2007). <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2006.12.018>

20. K. Ahn, H. He, J. M. Vohs, R. J. Gorte, Enhanced thermal stability of SOFC anodes made with CeO₂-ZrO₂ solutions, *Electrochemical and Solid-State Letters* 8(8), p.A414-A417 (2005). <https://doi.org/10.1149/1.1945374>

Information about the authors:

Zikirina A. – Senior Researcher, PhD, NJSC “Satbayev University”, 22A Satpayev Street, 050000, Almaty, Kazakhstan

Kenzhina I. – the corresponding author, PhD, Associate Professor, Research Professor, NJSC «Satbayev University», 22A Satpayev Street, 050000, Almaty, Kazakhstan, i.kenzhina@satbayev.university, +7 705 543 5855

Zaurbekova Z. – Senior Researcher, Institute of Experimental and Theoretical Physics, Al-Farabi Kazakh National University, 71 Al-Farabi Avenue, 050000, Almaty, Kazakhstan

Ilyasheva K. – Senior Researcher, Nazarbayev University, 53 Kabanbay Batyr Avenue, 010000, Astana, Kazakhstan

Seitmaganbet G. – Senior Researcher, Laboratory of Solid State Physics, Institute of Nuclear Physics, 1 Ibrayev Street, 050000, Almaty, Kazakhstan

Kozlovskiy A. – PhD, Professor, Head of the Laboratory of Solid State Physics at the Institute of Nuclear Physics, Ibraeva 1, 050000, Almaty, Kazakhstan, artem88sddt@mail.ru, +7 702 441 3368

Зикирина А. – аға ғылыми қызметкер, PhD, «Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті» КеАҚ, Сәтбаев көшесі, 22А, 050000, Алматы, Қазақстан

Кенжина И. – хат-хабар авторы, PhD, Қауымдастырылған профессор, зерттеуші-профессор, «Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық зерттеу университеті» КеАҚ, Сәтбаев көшесі, 22А, 050000, Алматы, Қазақстан, i.kenzhina@satbayev.university, +7 705 543 5855

Заурбекова З. – аға ғылыми қызметкер, Эксперименттік және теориялық физика институты, әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, әл-Фараби даңғылы, 71, 050000, Алматы, Қазақстан

Ильяшева К. – аға ғылыми қызметкер, Nazarbayev University, Қабанбай батыр даңғылы, 53, 010000, Астана, Қазақстан

Сейтмағанбет Г. – аға ғылыми қызметкер, Қатты дене физикасы зертханасы, Ядролық физика институты, Ибраев көшесі, 1, 050000, Алматы, Қазақстан

Козловский А. – PhD, Профессор, ядролық физика институтының қатты дене физикасы зертханасының меңгерушісі, Ибраева 1, 050000, Алматы, Қазақстан, artem88sddt@mail.ru, +7 702 441 3368

Зикирина А. – СНС, PhD, НАО «КазНИТУ им. Сатпаева», ул. Сатпаева 22А, 050000, Алматы, Казакстан

Кенжина И. – автор для корреспонденции, PhD, ассоциированный профессор, профессор-исследователь НАО «КазНИТУ им. Сатпаева», ул. Сатпаева 22А, 050000, Алматы, Казакстан, i.kenzhina@satbayev.university, +7 705 543 5855

Заурбекова З. – СНС, Институт экспериментальной и теоретической физики, Казахский национальный университет имени аль-Фараби, проспект аль-Фараби 71, 050000, Алматы, Казахстан

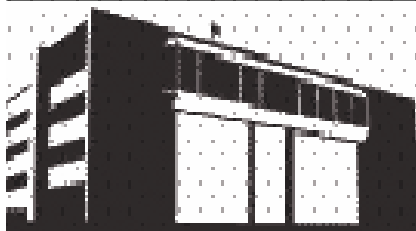
Ильяшева К. – СНС Nazarbayev University, проспект Кabanбай батыра 53, 010000, Астана, Казахстан

Сейтмағанбет Г. – СНС лаборатории физики твёрдого тела Института ядерной физики, Ибраева 1, 050000, Алматы, Казакстан

Козловский А. – PhD, Профессор, Заведующий лаборатории физики твёрдого тела Института ядерной физики, Ибраева 1, 050000, Алматы, Казакстан, artem88sddt@mail.ru, +7 702 441 3368



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/>).



Определение радиоактивных изотопов свинца в окружающей среде Казахстана

А.С. Муса¹, К.Ш. Жумадилов^{*1}, М.Т. Касымжанов¹,
А.А. Баграмова¹, Ф.В. Степаненко², А. Сакагучи³, М. Хоши⁴

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

²МРНЦ им. А.Ф. Цыба филиал ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава России, г. Обнинск

³Университет Хиросима, Хиросима, Япония

⁴Университет Цукуба, Цукуба, Япония

E-mail: musa.aigerim01@mail.ru, zhumadilovk@gmail.com, kasymzhanov@pnt.kz, assel.yaf.enu@gmail.com,
valerifs@yahoo.com, ayaskgc@ied.tsukuba.ac.jp, mhoshi@hiroshima-u.ac.jp

Аннотация. Промышленность Казахстана, включая сжигание высокозольного угля, добычу и переработку урана, цветную металлургию, нефтедобычу и последствия ядерных испытаний, создает уникальную среду для существования радиоактивных изотопов свинца. В отличие от стабильных изотопов свинца, используемых для определения источников загрязнения, радиоактивные изотопы ^{210}Pb ($T_{1/2} = 22, 3$ года), ^{212}Pb ($T_{1/2} = 10, 6$ часа) и ^{214}Pb ($T_{1/2} = 26, 8$ минуты) напрямую связаны с выделением радона (^{222}Rn) и торона (^{220}Rn), а также с динамикой аэрозолей, что делает их превосходными индикаторами как естественного, так и технологически усиленного радиационного излучения. В данной работе впервые предпринята попытка оценки комплексной картины наличия радиоактивных изотопов свинца в атмосферных аэрозолях, почвах и водах Казахстана и их вклад в мировую окружающую среду.

По итогам исследования определены основные пробелы, требующие решения: 1) отсутствие общенационального пространственного кадастра ^{210}Pb в воздухе и почве; 2) отсутствие каких-либо измерений ^{212}Pb и ^{214}Pb вблизи угольных электростанций и урановых отвалов; и 3) неизвестная химическая форма (биодоступность) ^{210}Pb в шлейфах выбросов. Предлагаются конкретные решения для устранения каждого пробела.

Ключевые слова: радиоактивные изотопы свинца, ^{210}Pb , атмосферный аэрозоль, продукты распада радона, оценка радиологической дозы.

Поступила 4.06.2026. После доработки 11.06.2026. Принята к печати 12.06.2026. Доступно онлайн 30.06.2026.

*автор для корреспонденции

Введение

Радиоактивные изотопы свинца являются важным компонентом природной радиоактивности и перспективным индикатором техногенного воздействия на окружающую среду. Наиболее экологически значимыми среди них считаются ^{210}Pb , ^{212}Pb и ^{214}Pb , образующиеся в цепочках распада урана (^{238}U) и тория (^{232}Th). В отличие от стабильных изотопов свинца, широко применяемых для идентификации источников загрязнения, радиоактивные изотопы напрямую связаны с процессами выделения радона и торона из почв, горных пород, промышленных отходов и объектов добывающей промышленности. После образования они быстро адсорбируются на аэрозольных частицах, преимущественно субмикронного размера, способны переноситься на значительные расстояния и осажаться в атмосфере, почвах, водоемах и растительности [1–6].

Особую радиологическую значимость представляет ^{210}Pb благодаря относительно длительному периоду полураспада (22,3 года), способности накапливаться в организме человека и вносить вклад во внутреннее облучение населения. Согласно оценкам UNSCEAR, ^{210}Pb и продукт его распада ^{210}Po формируют заметную долю дозы от природных радионуклидов, поступающих в организм человека. Наибольшую чувствительность к воздействию этих радионуклидов проявляют дети, поскольку доза на единицу поступления у них выше вследствие особенностей дыхательной системы и обменных процессов [7–9]. В условиях промышленного загрязнения концентрации ^{210}Pb в атмосферном воздухе могут существенно превышать естественный фон, что делает его важным объектом радиэкологического мониторинга.

Казахстан представляет собой уникальный регион для изучения радиоактивных изотопов свинца благодаря сочетанию крупных природных и техногенных источников радона. Одним из основных факторов является высокая зависимость энергетики страны от угольных тепловых электростанций. Около 67% электроэнергии Казахстана вырабатывается за счет сжигания угля Экибастузского, Карагандинского и Борлинского бассейнов, характеризующегося высоким содержанием золы и природных радионуклидов [10, 11]. В процессе сжигания угля продукты распада урана и тория, включая ^{210}Pb , концентрируются в летучей золе и золошлаковых отходах. Общий объем накопленных золошлаковых материалов в Казахстане превышает 750 млн тонн, что создает долговременные источники выделения радона и вторичного образования радиоактивных аэрозолей [12, 13].

Существенный вклад в формирование радиэкологической обстановки вносят районы добычи и переработки урана. Казахстан обладает значительными запасами урана и с 2010 года занимает лидирующие позиции в мире по его добыче [14]. На территории Северного Казахстана расположены многочисленные хвостохранилища, отвалы и объекты гидрометаллургической переработки, продолжающие выделять радон в окружающую среду. В частности, хвостохранилища Степногорского гидрометаллургического комбината содержат десятки миллионов тонн радиоактивных отходов и являются потенциальным источником поступления ^{210}Pb в атмосферу и прилегающие населенные пункты [15–18].

Дополнительное значение имеет наследие Семипалатинского испытательного полигона, где в 1949–1989 гг. проводились ядерные испытания. Нарушение геологических структур в результате подземных и наземных взрывов способствовало усиленному выделению радона и формированию вторичных радионуклидов, включая ^{210}Pb [19–22]. Кроме того, в Восточном Казахстане предприятия цветной металлургии являются крупными источниками мелкодисперсных аэрозолей, на поверхности которых может адсорбироваться радиоактивный свинец, усиливая его перенос и потенциальное воздействие на население [23–25].

Несмотря на наличие значительных источников радиоактивных изотопов свинца, существующая система экологического мониторинга Казахстана преимущественно ориентирована на контроль общего содержания свинца и отдельных искусственных радионуклидов. Данные по ^{210}Pb остаются ограниченными и охватывают лишь отдельные регионы и компоненты окружающей среды. При этом систематические исследования короткоживущих изотопов ^{212}Pb и ^{214}Pb практически отсутствуют. Недостаточно изучены пространственное распределение радиоактивных изотопов свинца, их связь с дисперсным составом аэрозолей, химические формы нахождения и особенности миграции в природных средах [26–31].

В связи с этим целью настоящей работы является систематизация и критический анализ существующих данных о радиоактивных изотопах свинца в окружающей среде Казахстана, а также выявление основных научных и мониторинговых пробелов. Особое внимание уделено оценке содержания ^{210}Pb в атмосферных аэрозолях, почвах и объектах техногенного воздействия, анализу потенциальных источников поступления радионуклидов и определению перспективных направлений дальнейших исследований. Полученные результаты могут стать научной основой для совершенствования системы радиэкологического мониторинга, повышения точности оценки радиационных рисков и разработки мер экологической безопасности в промышленно развитых регионах Казахстана.

Материалы и методы

Ограничения исследования и потенциальная предвзятость

Необходимо признать ряд ограничений, присущих имеющейся литературе:

1. Географическая ограниченность: Подавляющее большинство данных по ^{210}Pb получено только из двух мест – Астаны [13, 27] и Степногорска [9, 11]. Опубликованные данные по аэрозолям ^{210}Pb для западных, южных и восточных регионов Казахстана, включая крупный промышленный город Алматы, единичны либо не существуют.

2. Временные промежутки: Отбор проб проводился почти исключительно в теплые месяцы (апрель-октябрь), поскольку пробоотборники большого объема не могли работать при температурах ниже -20°C [9, 13]. Таким образом, уровни ^{210}Pb в середине зимы (декабрь-февраль) совершенно неизвестны, хотя ожидается, что зимние инверсии приведут к самым высоким концентрациям.

3. Изотопный состав: Ни в одном исследовании в Казахстане не измерялись концентрации ^{212}Pb или ^{214}Pb ни в одной из экологических матриц. Следовательно, вклад радиоактивного свинца, полученного из торона, и краткосрочная изменчивость продуктов распада радона остаются неизученными.

^{210}Pb образцы казахстанского аэрозоля не подвергались изучению по экстракции или растворению.

4. Фоновое влияние при измерениях: В большинстве исследований измеряли ^{210}Pb без одновременных данных по ^{222}Rn или химическому составу аэрозолей, что затрудняет отделение вклада выделения радона из почвы от промышленных источников (например, сжигания угля).

5. Недостаточная комплексность мониторинга. В большинстве работ измерения ^{210}Pb проводились без одновременного определения концентраций ^{222}Rn , ^{220}Rn , химического состава аэрозолей и содержания мелко-дисперсных частиц (PM_{2.5} и PM₁₀). Это существенно затрудняет разделение вкладов природных и техногенных источников, включая радоновую эманацию из почв, выбросы угольной энергетики, уранодобывающей промышленности и других промышленных объектов.

6. Возможная публикационная предвзятость. Обзор основан преимущественно на опубликованных научных работах, отчетах и диссертациях. Не исключено существование неопубликованных данных мониторинга, ведомственных отчетов и локальных исследований, результаты которых не представлены в открытом доступе. Это может приводить к неполному отражению фактического состояния изученности радиоактивных изотопов свинца в Казахстане.

Указанные ограничения свидетельствуют о необходимости расширения географии наблюдений, внедрения комплексных программ мониторинга радиоактивных изотопов свинца и проведения систематических исследований ^{212}Pb и ^{214}Pb в различных природных средах Казахстана.

Результаты. Радиоактивный свинец в Казахстане

1. Характеристика радиоактивных изотопов свинца Казахстанского происхождения

Радиоактивные изотопы свинца образуются в цепочках распада урана-238 и тория-232 – двух предшественников-радионуклидов [3, 4], которые в значительных концентрациях присутствуют в углях казахстанских месторождений (Экибастуз, Караганда, Борлы) [10] и в урановых рудах Северного Казахстана [14]. Их свойства определяют как методы детектирования, так и экологическую значимость.

1.1. Свинец-210 (^{210}Pb)

^{210}Pb является конечным долгоживущим продуктом распада ^{222}Rn в ряду ^{238}U . Схема образования включает следующие ключевые стадии [3, 5]:

^{238}U ($4,468 \times 10^9$ лет) $\rightarrow \dots \rightarrow ^{226}\text{Ra}$ (1600 лет) $\rightarrow ^{222}\text{Rn}$ (3,82 дня) $\rightarrow ^{218}\text{Po}$ (3,05 мин) $\rightarrow ^{214}\text{Pb}$ (26,8 мин) $\rightarrow ^{214}\text{Bi}$ (19,7 мин) $\rightarrow ^{214}\text{Po}$ (164 мкс) $\rightarrow ^{210}\text{Pb}$ (22,3 года) $\rightarrow ^{210}\text{Bi}$ (5,01 дня) $\rightarrow ^{210}\text{Po}$ (138,4 дня) \rightarrow стабильный ^{206}Pb .

После выхода ^{222}Rn из почвы или промышленных материалов в атмосферу его короткоживущие производные продукты быстро прикрепляются к аэрозольным частицам. Время достижения устойчивого равновесия между ^{222}Rn и ^{210}Pb в замкнутом объеме составляет около 100 дней, но в открытой атмосфере равновесие никогда не достигается из-за непрерывного вымывания и осаждения [5, 6]. Поэтому концентрация ^{210}Pb в приземном воздухе определяется тремя факторами: скоростью эксхалляции (или потоком эманации) ^{222}Rn , концентрацией аэрозольных частиц-носителей и метеорологическими условиями (вертикальное перемешивание, инверсии, осадки).

Для Казахстана ^{210}Pb является наиболее важным радиоактивным изотопом свинца по следующим причинам:

1. Длительный период полураспада (22,3 года) позволяет ему накапливаться в почвах и донных отложениях, а также переноситься на дальние расстояния (включая трансграничный перенос) [9, 27].

2. Метод определения – гамма-спектрометрия по линии 46,5 кэВ – относительно проста и может быть реализована на стандартном оборудовании, имеющемся в Казахстане (например, в лабораториях НЯЦ РК, Казгидромет) [12, 13, 28].

3. Радиологическая значимость – ^{210}Pb и его производный ^{210}Po являются основными дозообразующими радионуклидами при ингаляции аэрозолей после радона [7, 8]. Оценки доз для населения промышленных городов Казахстана (Степногорск, Астана) показывают ощутимый вклад в годовую эффективную дозу [9, 27].

1.2. Свинец-212 (^{212}Pb)

^{212}Pb образуется в цепочке распада ^{232}Th через ^{220}Rn (торон)

^{232}Th ($1,405 \times 10^{10}$ лет) $\rightarrow \dots \rightarrow ^{224}\text{Ra}$ (3,66 дня) $\rightarrow ^{220}\text{Rn}$ (55,6 секунд) $\rightarrow ^{216}\text{Po}$ (0,15 с) $\rightarrow ^{212}\text{Pb}$ (10,6 часов) $\rightarrow ^{212}\text{Bi}$ (60,6 мин) $\rightarrow ^{212}\text{Po}$ (299 нс) \rightarrow стабильный ^{208}Pb .

- Короткий период полураспада (10,6 часов) означает, что ^{212}Pb может быть обнаружен только вблизи источника ^{220}Rn (торона), т.е. в радиусе нескольких километров от торий-содержащих материалов.

- Обнаружение возможно как по гамма-линии 238,6 кэВ (43,6% выход), так и по гамма-линии 300,1 кэВ (3,2%) при гамма-спектрометрии, или через его производный ^{212}Bi .

- Значимость для Казахстана: угли Карагандинского бассейна содержат повышенные концентрации ^{232}Th (до 42,5 Бк/кг) [10, 11]. Золошлаковые отвалы ТЭЦ, а также территории урановых месторождений могут быть локальными источниками ^{220}Rn и, следовательно, ^{212}Pb . Однако ни одного измерения ^{212}Pb в объектах окружающей среды Казахстана не опубликовано.

1.3. Свинец-214 (^{214}Pb)

^{214}Pb является короткоживущим продуктом распада ^{222}Rn (образуется через ^{218}Po). Период полураспада – 26,8 минут. Обнаруживается преимущественно по гамма-линиям 295,2 кэВ (18,5%) и 351,9 кэВ (35,8%) [3, 5].

Значимость для Казахстана:

- Из-за крайне малого периода полураспада ^{214}Pb может использоваться как индикатор концентрации ^{222}Rn в воздухе. Соотношение активностей $^{214}\text{Pb}/^{210}\text{Pb}$ в аэрозольной пробе позволяет оценить время транспорта от источника до точки отбора.

- В условиях зимних температурных инверсий, характерных для городов Северного и Центрального Казахстана (Астана, Степногорск, Караганда), накопление ^{222}Rn должно сопровождаться пропорциональным ростом ^{214}Pb [9, 27]. Измерения ^{214}Pb могут дать информацию о свежем поступлении радона из локальных источников (угольные котельные, отвалы, трещины в грунте), в отличие от ^{210}Pb , который отражает усреднённую за длительный период картину.

- Ни одного измерения ^{214}Pb в Казахстане не проводилось.

В Таблице 1 обобщены физико-химические и радиоактивные свойства изотопов свинца на территории Казахстана. Также приведены типичные методы обнаружения, достижимые на стандартном оборудовании.

Таблица 1. Радиоактивные изотопы свинца: свойства, методы обнаружения.

Изотоп	Период полураспада	Тип распада, E_{max} , кэВ	Основные гамма-линии (кэВ), выход (%)	Типичный метод измерения	MDA (достижимая)	Источник образования	Экологическая значимость для Казахстана
^{210}Pb	22,3 года	β^- (16,7); $^{210}\text{Bi} \rightarrow ^{210}\text{Po}$	46,5 (4,25%)	Гамма-спектрометрия (HPGe)	0,02–0,1 мБк/м ³ (воздух); 0,1–0,5 Бк/кг (почва)	Распад ^{222}Rn в ряду ^{238}U	Долгоживущий индикатор; дозообразующий; трансграничный перенос; накопление в почве и донных отложениях [5, 6, 9, 27]

^{212}Pb	10,6 часов	$\beta^- (570); ^{212}\text{Bi} \rightarrow ^{212}\text{Po}$	238,6 (43,6%); 300,1 (3,2%)	Гамма-спектрометрия (НРGe)	0,1–0,5 мБк/м ³ (воздух)	Распад ^{220}Rn в ряду ^{232}Th	Индикатор локальных торий-содержащих источников (уголь, отвалы) – измерения отсутствуют [3, 4, 10]
^{214}Pb	26,8 минут	$\beta^- (670); ^{214}\text{Bi} \rightarrow ^{214}\text{Po}$	295,2 (18,5%); 351,9 (35,8%)	Гамма-спектрометрия (НРGe)	0,2–1,0 мБк/м ³ (воздух)	Распад ^{222}Rn (через ^{218}Po)	Индикатор свежего поступления радона; оценка времени транспорта – измерения отсутствуют [3, 5, 27]

Примечание: значения приведены для типовых условий: для воздуха – при объёме пробы 500–1000 м³ и времени счёта 24–72 часа; для почвы – масса пробы 0.5–1 кг, время счёта 12–24 часа. Данные основаны на [9, 12, 13, 17, 27].

1.4. Изотопные соотношения как диагностические инструменты

Помимо абсолютных концентраций, важную информацию несут соотношения активностей:

- $^{214}\text{Pb}/^{210}\text{Pb}$ – если это отношение превышает равновесное значение ($\approx 2,5 \times 10^{-5}$ в незагрязнённой атмосфере), это указывает на наличие локального, быстрого источника ^{222}Rn (например, трещина в земле, дымовая труба угольной котельной) [3, 5].

- $^{212}\text{Pb}/^{210}\text{Pb}$ – позволяет оценить вклад ториевого ряда по сравнению с урановым. В углях Карагандинского бассейна отношение $^{232}\text{Th}/^{238}\text{U}$ может достигать 1,5–2,0 [10, 11], следовательно, в зоне влияния ТЭЦ это отношение должно быть выше, чем на фоновых участках.

- $^{210}\text{Pb}/^{206}\text{Pb}$ – комбинация радиоактивного и стабильного изотопов (последний измеряется масс-спектрометрией) может служить уникальным индикатором возраста аэрозолей и эффективности вымывания. Такие измерения в Казахстане отсутствуют.

2. Основные естественные источники: роль географических и климатических факторов

Прежде чем анализировать техногенно-обусловленные концентрации радиоактивного свинца, необходимо установить фоновые уровни ^{210}Pb , определяемые естественным выходом ^{222}Rn из почвы и последующим образованием ^{210}Pb в атмосфере. В Казахстане эти фоновые уровни существенно меняются в зависимости от геологических условий (радоновые зоны) и климатических факторов (температурные инверсии, ветровой режим, осадки).

2.1. Радоновое поле Казахстана и его связь с образованием ^{210}Pb

Концентрация ^{222}Rn в почвенном воздухе и скорость его перехода в атмосферу определяются содержанием ^{226}Ra в почвообразующих породах, их пористостью, влажностью и температурой. На территории Казахстана выделяются несколько радоноопасных зон [1, 19]:

- Северный Казахстан (Акмолинская, Северо-Казахстанская области) – зона развития гранитоидных массивов и урановых рудопоявлений. Здесь почвенный радон может достигать 300 000 Бк/м³, а в помещениях – 6000–12 000 Бк/м³ [1, 16].

- Восточный Казахстан (Рудный Алтай, Семипалатинский регион) – зона тектонических нарушений и полиметаллического оруденения. Локальные радоновые аномалии связаны с зонами разломов и отвалами горных пород.

- Южный Казахстан (Шу-Илийские горы, Каратау) – выходы гранитов и зоны тектонических разломов.

Эти геологические особенности напрямую влияют на фоновую концентрацию ^{210}Pb в приземном воздухе. Однако прямая корреляция между картами радоноопасности и измеренными концентрациями ^{210}Pb в атмосфере Казахстана до настоящего времени не устанавливалась.

2.2. Сезонная динамика концентраций ^{210}Pb : роль температурных инверсий

Наиболее полные данные о сезонных вариациях ^{210}Pb в Казахстане получены для города Астана и Степногорска [9, 13, 27, 28]. Обе станции расположены в зоне резко-континентального климата с холодной зимой (средняя температура января -17°C) и жарким летом (средняя температура июля $+20^\circ\text{C}$).

Результаты исследований показывают, что концентрации ^{210}Pb демонстрируют чёткую отрицательную корреляцию с температурой воздуха. В работе [27], основанной на двухлетних измерениях (2010–2011) в Астане, было показано, что наибольшие концентрации ^{210}Pb (до $2,2 \text{ мБк/м}^3$) наблюдаются в апреле и октябре, тогда как летние месяцы (июнь–август) характеризуются минимальными значениями ($0,3\text{--}0,6 \text{ мБк/м}^3$). Аналогичная закономерность выявлена для Степногорска: при снижении среднесуточной температуры ниже -10°C концентрации ^{210}Pb возрастают до $2,6 \text{ мБк/м}^3$ [9, 11].

Механизмы, объясняющие зимний максимум:

- *Формирование приземных температурных инверсий.* В холодный период над равнинной территорией Северного и Центрального Казахстана формируется мощный антициклон (Сибирский максимум). В этих условиях ночные и утренние инверсии (повышение температуры с высотой) могут сохраняться в течение нескольких дней. Инверсионный слой действует как «крышка», запирая ^{222}Rn и его производные продукты (включая ^{210}Pb) в приземном слое $100\text{--}300 \text{ м}$. В результате происходит накопление радиоактивных аэрозолей [27, 29].

- *Снижение вертикального перемешивания.* Летом конвективные токи и турбулентность эффективно рассеивают примеси на большую высоту, снижая их концентрацию у земли. Зимой, напротив, вертикальное перемешивание минимально.

- *Замерзание почвы и изменение выхода ^{222}Rn .* В мёрзлой почве трещины и поры могут служить дополнительными каналами для выхода радона. Кроме того, снежный покров действует как изолирующий слой, способствуя накоплению ^{222}Rn в верхних слоях почвы и увеличению его выхода при неполном промерзании [1, 5].

- *Влияние осадков.* Влажное осаждение (дождь, снег) является основным механизмом удаления ^{210}Pb из атмосферы. Однако в зимний период твёрдые осадки (снег) менее эффективно вымывают аэрозоли, чем летние дожди, что также способствует зимнему накоплению [6, 27]

2.3. Сравнение городского и фонового уровня загрязнения

Сравнение данных, полученных в Астане и на фоновых станциях (например, в окрестностях Степногорска), показывает, что урбанизированные территории могут создавать локальные максимумы ^{210}Pb , превышающие фоновые значения в 2–3 раза [9, 13]. Это связано не только с дополнительной эманацией радона из строительных материалов и коммуникаций, но и с наличием аэрозольных частиц-носителей – продукты сжигания топлива, промышленные выбросы и дорожная пыль.

2.4. Сравнение с мировыми данными

В Таблице 2 приведены средние концентрации ^{210}Pb в приземном воздухе для различных регионов мира в сравнении с данными по Казахстану.

Таблица 2. Среднегодовые концентрации ^{210}Pb в приземном воздухе (мБк/м^3) по регионам.

Регион	Средняя концентрация (мБк/м^3)	Диапазон (мБк/м^3)	Период измерений	Ссылка
Астана (Казахстан)	0,86	0,18–2,2	2010–2011	[27]
Степногорск (Казахстан)	0,86	0,46–2,60	2020–2022	[9]
Москва (Россия)	0,65	0,2–1,5	2010–2015	[25]
Пекин (Китай)	1,2	0,5–3,5	2005–2010	[5]
Центральная Европа (Германия)	0,45	0,2–0,9	многолетние	[6]
Арктика (Шпицберген)	0,12	0,05–0,30	2010–2018	[4]

Данные Казахстана лежат в среднем диапазоне, характерном для континентальных регионов умеренных широт, и сопоставимы с измерениями в крупных городах России и Китая. Однако важно отметить, что сезонный контраст (зимний максимум) в Казахстане выражен значительно сильнее, чем в Европе, что объясняется более суровыми климатическими условиями и мощными приземными инверсиями [27, 29].

2.5. Неизученные аспекты естественных источников

Несмотря на установленную корреляцию с температурой, ряд фундаментальных вопросов остаётся открытым:

- *Вклад снежного покрова.* Образование ^{210}Pb в толще снега (за счёт выхода радона из почвы, а затем диффузии через снег и захвата аэрозолей) не изучалось. Исследования в Степногорске [9] показали повышенные концентрации ^{210}Pb в нижних слоях снежного покрова вблизи хвостохранилищ (до 290 Бк/м³), что указывает на возможность «захвата» радона из-под снега.

- *Отсутствие данных по ^{214}Pb и ^{212}Pb .* Эти короткоживущие изотопы могли бы дать информацию о мгновенных выбросах радона и трона из естественных источников (трещины, талики), но, как отмечалось ранее, их измерения в Казахстане полностью отсутствуют.

3. Промышленные источники: выбросы и выщелачивание

Естественное образование ^{210}Pb в атмосфере может быть существенно усилено техногенной деятельностью, которая: 1) увеличивает выход ^{222}Rn за счёт переработки и складирования уран- и торий-содержащих материалов; 2) поставляет в атмосферу дополнительное количество аэрозольных частиц (в первую очередь $\text{PM}_{2.5}$), на которых конденсируется ^{210}Pb ; 3) непосредственно выбрасывает ^{210}Pb , уже накопленный в топливе (уголь, нефть) или рудах. В Казахстане к таким техногенным источникам относятся: угольная энергетика (ТЭЦ), уранодобывающая и перерабатывающая промышленность, бывший полигон ядерных испытаний, а также металлургические предприятия и нефтегазовый сектор.

3.1. Угольная энергетика: крупнейший неучтённый источник ^{210}Pb

Казахстан занимает одно из ведущих мест в мире по производству потреблению угля на душу населения. На угольных ТЭЦ ежегодно сжигаются десятки миллионов тонн угля, главным образом Экибастузского и Карагандинского месторождений. Эти угли характеризуются высокой зольностью (до 43%) и содержат природные радионуклиды [10, 11].

Содержание ^{238}U и ^{232}Th в углях. По данным [10], средняя удельная активность ^{238}U в экибастузских углях составляет 17,5–26,3 Бк/кг, ^{232}Th – 15,2–21,8 Бк/кг. В углях Карагандинского бассейна содержание ^{232}Th может быть выше (до 42 Бк/кг) [11]. В рядах урана и тория к моменту сжигания устанавливается равновесие. Следовательно, в угле присутствует ^{210}Pb в равновесных количествах – примерно 17–26 Бк/кг.

Поведение ^{210}Pb при горении. В высокотемпературной камере сгорания (температура 1200–1600°C) происходит испарение части радионуклидов. Летучие соединения (включая некоторые оксиды и хлориды свинца) конденсируются на поверхности мелких частиц золы-уноса по мере охлаждения дымовых газов. Процессы перераспределения следующие:

- Летучие радионуклиды (в т.ч. ^{210}Pb , ^{210}Po) концентрируются в субмикронной фракции (<0,69 мкм) [11, 32].
- Менее летучие (^{232}Th , ^{40}K , лантаниды) остаются в крупной золе и шлаке.
- Инертный ^{222}Rn , образовавшийся в угле, также выделяется в дымовые газы и служит дополнительным источником ^{210}Pb уже в атмосфере (через цепочку распада вне трубы).

Оценка выбросов ^{210}Pb . В работе [9] для Степногорской ТЭЦ (потребление 685 тыс. тонн угля в 2021 г., ^{238}U ≈ 12 Бк/кг) был выполнен оценочный расчёт: при коэффициенте улавливания 90% для крупных частиц, но лишь 30–50% для субмикронной фракции, выброс ^{210}Pb в атмосферу составил ориентировочно 0,3–0,4 мБк/м³ в расчёте на приземную концентрацию в зоне влияния станции. Это означает, что угольные ТЭЦ могут вносить вклад, сопоставимый с естественным фоном (0,86 мБк/м³), а в непосредственной близости от источников – превышать его. Однако прямых измерений ^{210}Pb в дымовых трубах или в факеле ТЭЦ в Казахстане не проводилось.

Золошлаковые отвалы как вторичный источник. В отвалах происходит медленное окисление и выщелачивание радионуклидов. Кроме того, выход ^{222}Rn из золошлаковых материалов может продолжаться десятилетиями. Исследования [10] показали, что в золе и шлаке казахстанских ТЭЦ удельная активность ^{210}Pb в 4–6 раз выше, чем в исходном угле (коэффициент концентрирования 4,2–8,6). Таким образом, отвалы представляют собой долгоживущий вторичный источник ^{210}Pb как за счёт прямого пыления, так и за счёт выхода ^{222}Rn .

3.2. Урановая промышленность: хвостохранилища и заброшенные шахты

Северный Казахстан (Акмолинская область) является регионом длительной (с 1950-х годов) добычи и переработки урановых руд. Основные объекты – Степногорский гидрометаллургический комбинат (СГМК) и его хвостохранилище, а также законсервированные рудники (Грачевское, Викторовское и др.).

СГМК и хвостохранилище. Хвостохранилище СГМК (общая площадь 757 га) содержит 44,17 млн тонн радиоактивных отходов с суммарной активностью 5,42 ГБк [15, 16]. Основные радионуклиды – ^{238}U , ^{234}U , ^{226}Ra , а также ^{210}Pb . Исследования в санитарно-защитной зоне (посёлки Аксу, Заводской, Кварцитка) зафиксировали повышенные уровни гамма-фона (до 2,87 мкЗв/ч), концентрации ^{226}Ra в почве до 4060 Бк/кг и ^{210}Pb до 2100 Бк/кг [16, 18].

Выход ^{222}Rn из поверхности хвостохранилища приводит к образованию ^{210}Pb в атмосфере. Согласно данным [9, 11], в Степногорске (20 км от хвостохранилища) концентрации ^{210}Pb в воздухе достигают 2,6 мБк/м³, причём повышенные значения наблюдаются при ветрах с юга (со стороны промзоны). Отсутствие учёта метеорологических условий при мониторинге ^{222}Rn не позволяет количественно разделить вклад хвостохранилища и других источников.

Законсервированные шахты (Грачевское месторождение). Объект расположен в 3 км от села Саумалколь. После консервации в 2000-х годах контроль за состоянием шахт практически прекращён [17]. В подземных выработках накапливается вода, которая выщелачивает радионуклиды (содержание урана в воде достигает 240 мкг/л, что в 8 раз выше ПДК), а вентиляционный воздух выносит ^{222}Rn . Исследования [17] показали, что в точках вблизи устьев шахт концентрация ^{210}Pb в почве в 20–50 раз выше фона, но данные по аэрозолям отсутствуют. При этом было установлено, что основная часть ^{210}Pb в почве находится в кислоторастворимой и подвижной формах, что указывает на потенциальную возможность его выщелачивания и переноса с грунтовыми водами.

Рудный Алтай и металлургические комбинаты. В Усть-Каменогорске и Риддере расположены свинцово-цинковые и титано-магниевого заводы, которые перерабатывают полиметаллические руды, содержащие уран и торий в качестве попутных элементов [24]. Выбросы этих предприятий содержат как стабильный свинец, так и естественные радионуклиды, включая ^{210}Pb . Однако ни одного исследования радиоактивных изотопов свинца в выбросах или в зоне влияния этих заводов не проведено. Существующие данные [23] касаются только валовых концентраций тяжёлых металлов (Pb, Zn, Cu) без разделения по изотопам.

3.3. Семипалатинский полигон

В период 1949–1989 гг. на Семипалатинском полигоне было проведено 456 ядерных взрывов, в том числе 116 в атмосфере и на поверхности [19, 20]. Радиоактивные осадки загрязнили обширные территории; основные долгоживущие радионуклиды – ^{137}Cs , ^{90}Sr , $^{239+240}\text{Pu}$. Влияние взрывов на содержание ^{210}Pb в окружающей среде может быть двояким:

1. Прямое внесение ^{210}Pb , образовавшегося в момент взрыва (активация свинца в конструкции и грунте, деление урана). Период полураспада ^{210}Pb – 22,3 года, поэтому через 35 лет после прекращения испытаний (1990 г.) этот сигнал должен был бы практически исчезнуть, если бы не было подпитки. Тем не менее современные данные [22] показывают, что в реке Шаган (на территории полигона) концентрация ^{210}Pb в воде и донных отложениях в 3–5 раз выше, чем в фоновых реках. Это указывает на продолжающееся выщелачивание ^{210}Pb из загрязнённых почв и грунтов.

2. Усиление выхода ^{222}Rn за счёт разрыхления горных пород, образования кратеров (озеро Балапан) и подземных полостей. Через зоны тектонических нарушений и дренажные каналы ^{222}Rn проникает в атмосферу, увеличивая образование ^{210}Pb .

Прямых измерений атмосферных аэрозолей ^{210}Pb на полигоне не проводилось. Однако исследования [21, 22] на прилегающих территориях (река Иртыш ниже устья реки Шаган) показали повышенное содержание ^3H (до 20 Бк/л) и ^{238}U , что свидетельствует о миграции радионуклидов с полигона. Учитывая, что ^3H является ещё более подвижным индикатором, чем ^{210}Pb , имеются основания предполагать перенос ^{210}Pb водным путём. Исследование [22] зафиксировало, что в паводковый период концентрация ^{210}Pb в воде Иртыша ниже плотины гидроузла возрастает в 1,5–2 раза по сравнению с фоновой.

3.4. Нефтегазовый сектор и металлургия

В западном Казахстане (Атырауская, Мангистауская, Западно-Казахстанская области) расположены крупные месторождения нефти и газа. Пластовые воды нефтяных месторождений часто содержат повышенные концентрации ^{226}Ra , ^{228}Ra , а также ^{210}Pb [1, 25]. В процессе эксплуатации на внутренних поверхностях трубопро-

водов и оборудования образуются радиоактивные отложения (NORM), а в отстойниках – радиоактивные шламы. Эти материалы, при их неконтролируемом хранении или захоронении, могут стать источниками выхода ²²²Rn (из ²²⁶Ra) и прямого поступления ²¹⁰Pb в окружающую среду. Тем не менее, ни одного исследования по оценке ²¹⁰Pb в нефтегазовом секторе Казахстана не опубликовано.

3.5. Сравнительная оценка вклада техногенных источников

В Таблице 3 приведены ориентировочные оценки суммарного выброса ²¹⁰Pb от основных промышленных источников Казахстана, рассчитанные на основе литературных данных и официальной статистики выбросов [26] с использованием методов, описанных в [5, 9, 32].

Таблица 3. Годовой выброс ²¹⁰Pb от основных техногенных источников в Казахстане

Источник	Базовый показатель	Оценочный выброс ²¹⁰ Pb (ГБк/год)	Примечания
Угольные ТЭЦ	70 млн т угля/год, ²³⁸ U ~20 Бк/кг, равновесие, коэф. выхода 0.1-0.3	140-420	Основной вклад дают субмикронные аэрозоли; оценка по методике [9, 32]
Урановые хвостохранилища	44 млн т отходов, ²²⁶ Ra ~2 кБк/кг, выход ²²² Rn ~1%	10-50	За счёт образования ²¹⁰ Pb из выходящего ²²² Rn
Законсервированные шахты (n=30)	Оценка на основе [17]	1-5	Сильно варьирует в зависимости от вентиляции
Семипалатинский полигон (вторичный вынос)	Оценка по [22]	0.5-2	Преимущественно водный перенос
Нефтегазовый NORM	Нет данных	Неизвестно	Не оценивался
Итого (Предварительная оценка)		150-480 ГБк/год	

Расчёт выбросов ²¹⁰Pb от угольных ТЭЦ выполнен по формуле:

$$Q = M \times A \times k \tag{1}$$

где:

Q — годовой выброс ²¹⁰Pb (Бк/год);

M — масса сжигаемого угля (кг/год);

A — удельная активность ²¹⁰Pb в угле (Бк/кг);

k — коэффициент выхода ²¹⁰Pb в атмосферу с золой-уносом.

Для оценки использованы следующие параметры: годовое потребление угля в Казахстане около 70 млн т, содержание ²¹⁰Pb принято равным содержанию ²³⁸U при условии радиоактивного равновесия (20 Бк/кг), коэффициент выхода в атмосферу принят в диапазоне 0,1-0,3 в зависимости от эффективности золоулавливающего оборудования. Полученные значения следует рассматривать как ориентировочные ввиду значительной изменчивости радионуклидного состава углей различных месторождений и различий в технологиях очистки дымовых газов.

Эта оценка показывает, что антропогенный вклад может быть сопоставим или превышать естественное поступление ²¹⁰Pb от выхода из почвы ²²²Rn (оцениваемое в 100-300 ГБк/год для территории Казахстана). Однако эти цифры являются предварительными и требуют экспериментальной верификации.

4. Результаты мониторинга ²¹⁰Pb в атмосферных аэрозолях (2018-2024 гг.)

Несмотря на значительный промышленный потенциал Казахстана и потенциальные риски техногенного усиления концентраций ²¹⁰Pb, систематический мониторинг этого радионуклида в атмосферных аэрозолях находится на начальной стадии. До 2018 года публикации по ²¹⁰Pb в воздухе Казахстана отсутствовали. Первые работы были выполнены в рамках международного сотрудничества с японскими университетами (Хиросима, Цукуба, Канадзава) и российскими институтами (УрФУ, ИПЭ УрО РАН).

4.1. Обзор пунктов мониторинга и общие концентрационные уровни

На сегодняшний день опубликованы результаты измерений ²¹⁰Pb в атмосферных аэрозолях только для трёх

локаций на территории Казахстана: город Астана (2010–2011 гг. и 2016 г.) [13, 27], город Степногорск (2020–2022 гг.) [9, 11] и, фрагментарно, город Алматы (единичные пробы) [28]. Данные по другим промышленным центрам (Усть-Каменогорск, Караганда, Шымкент, Актау) в открытой литературе отсутствуют.

Астана (2010–2011, 2016 гг.). Первое систематическое исследование было выполнено в 2010–2011 гг. с использованием высокообъемного пробоотборника и семиступенчатого каскадного импактора [27]. Отбор проб проводился каждые две недели с февраля 2010 по июль 2011 г. (исключая зимние месяцы, когда работа пробоотборника невозможна из-за низких температур). Средняя концентрация ^{210}Pb за период наблюдений составила $0,86 \text{ мБк/м}^3$ (диапазон $0,18\text{--}2,2 \text{ мБк/м}^3$). Повторные измерения в 2016 г. (только в осенний период) дали близкие значения ($0,71 \text{ мБк/м}^3$), что указывает на относительную стабильность уровней во времени [27].

Степногорск (2020–2022 гг.). Наиболее полный и современный набор данных получен в рамках проекта, поддержанного JSPS (Японское общество содействия науке) и Министерством науки Казахстана [9, 11]. Отбор проб проводился с сентября 2020 по октябрь 2022 гг. (с перерывом на зимние месяцы) на крыше здания (высота 15 м) в центре города. Использовался тот же тип каскадного импактора, что и в Астане, что позволяет корректно сравнивать результаты. Средняя концентрация ^{210}Pb за весь период составила $0,86 \text{ мБк/м}^3$ (диапазон $0,46\text{--}2,60 \text{ мБк/м}^3$) – практически идентично астанинским данным [9, 27].

Алматы. В работе [28], посвященной биоиндикации тяжёлых металлов с использованием мхов, были выполнены единичные измерения аэрозолей в южной части города. Концентрация ^{210}Pb в пробах воздуха (PM_{10} , отобранных в апреле 2022 г.) составила $0,94 \text{ мБк/м}^3$. Однако эти данные носят предварительный характер и не позволяют судить о сезонной динамике.

В Таблице 2 сведены средние концентрации ^{210}Pb в Казахстане в сравнении с другими регионами в мире.

4.2. Дисперсный состав ^{210}Pb

Ключевой характеристикой, определяющей как время жизни аэрозоля в атмосфере, так и дозу при ингаляции, является распределение ^{210}Pb по размерам аэрозольных частиц. Наиболее детальные данные получены в диссертационной работе [11] для условий Степногорска, а также в работе [27] для Астаны.

Методология. Использовался семиступенчатый каскадный импактор с эффективными диаметрами отсечки: $>10,2$; $10,2\text{--}4,2$; $4,2\text{--}2,1$; $2,1\text{--}1,3$; $1,3\text{--}0,69$; $0,69\text{--}0,39$ мкм и резервный фильтр $<0,39$ мкм. Фильтры измерялись на HPGe-спектрометре с детектированием 46,5 кэВ линии ^{210}Pb [9, 11, 12].

Основные результаты. В Таблице 4 и на Рисунке 1 представлено распределение ^{210}Pb по фракциям для Степногорска (среднее за 2020–2022 гг.). Данные показывают, что более 95% активности ^{210}Pb сосредоточено в частицах диаметром менее 2,1 мкм (т.е. в $\text{PM}_{2,5}$). При этом наибольшая доля (около 40–50%) приходится на самую мелкую фракцию – $<0,39$ мкм [9, 11].

Таблица 4. Среднее распределение ^{210}Pb по размерам аэрозольных частиц в Степногорске (2020–2022 гг.) [9, 11].

Фракция (мкм)	Диапазон размеров	Доля от общей активности, %
$>10,2$	Крупная пыль	$0,5 \pm 0,3$
$10,2\text{--}4,2$	Крупная пыль	$1,2 \pm 0,8$
$4,2\text{--}2,1$	Крупная/средняя	$3,0 \pm 1,2$
$2,1\text{--}1,3$	Средняя	$8,5 \pm 2,5$
$1,3\text{--}0,69$	Мелкая (PM_1)	$18,0 \pm 4,0$
$0,69\text{--}0,39$	Мелкая ($\text{PM}_{0,5}$)	$26,0 \pm 5,0$
$<0,39$	Субмикронная	$42,8 \pm 6,0$

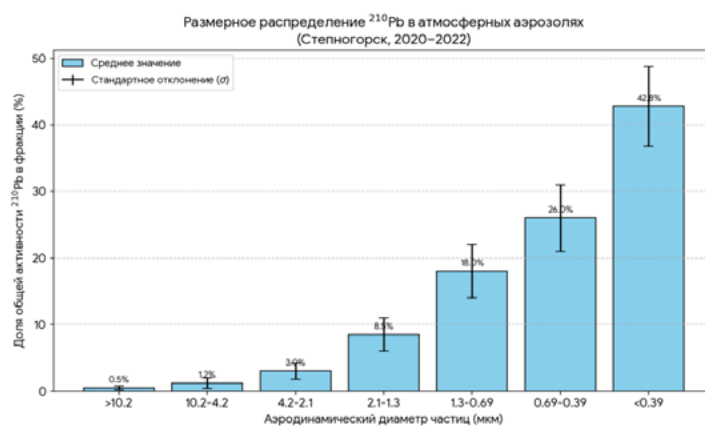


Рисунок 1. Распределение ²¹⁰Pb по фракциям для Степногорска (среднее за 2020–2022 гг.)

Сезонные изменения распределения. Зимой (при температурах ниже -10°C) доля субмикронной фракции ($<0,39$ мкм) возрастает до 55%, а вклад частиц $>2,1$ мкм снижается до 2%. Это объясняется замедлением процессов коагуляции в холодном воздухе и более эффективным осаждением крупных частиц [9, 11, 27]. Летом, напротив, доля частиц $>2,1$ мкм может достигать 8–10%.

Клиническая значимость мелкодисперсного распределения. Частицы размером <1 мкм (особенно $<0,5$ мкм) при ингаляции достигают альвеолярного отдела лёгких и задерживаются там на длительное время (недели и месяцы). Таким образом, распределение ²¹⁰Pb преимущественно в субмикронной фракции означает, что ингаляционная доза для населения может быть существенно выше, чем если бы радионуклид был ассоциирован с крупными частицами (которые задерживаются в верхних дыхательных путях и выводятся с мукоцилиарным клиренсом) [8, 19].

4.3. Временная динамика

Концентрации ²¹⁰Pb в Казахстане демонстрируют ярко выраженную сезонность с максимумом в холодный период (октябрь–апрель) и минимумом в летние месяцы [9, 27].

Корреляция с температурой. На Рисунке 2 представлена зависимость концентрации ²¹⁰Pb от среднесуточной температуры воздуха для Степногорска. Коэффициент корреляции Спирмена составляет $r = -0,60$ ($p < 0,01$), что подтверждает сильную обратную связь [9]. Для Астаны аналогичный коэффициент составил $r = -0,55$ [27].

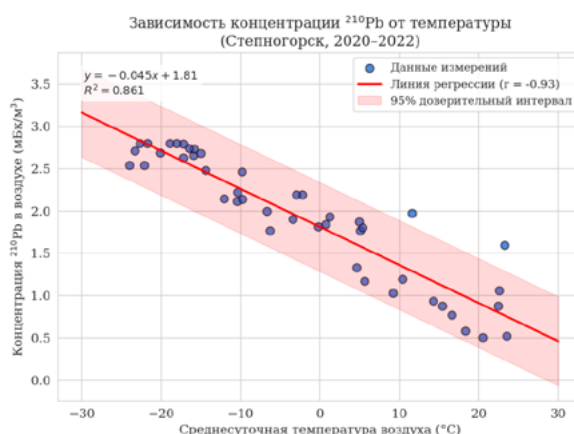


Рисунок 2. Зависимость концентрации ²¹⁰Pb от среднесуточной температуры воздуха для Степногорска

Отрицательный наклон линии подтверждает вывод: с понижением температуры концентрация ²¹⁰Pb растёт (зимние инверсии). Полученные коэффициенты (например, $-0,045$) показывают, насколько мБк/м³ увеличивается концентрация при снижении температуры на 1°C . Доверительный интервал: заштрихованная область вокруг линии регрессии показывает, где с вероятностью 95% находятся истинные значения при заданной температуре.

Влияние погодных условий. Анализ метеорологических параметров (по данным Казгидромета, представленным в [9, 28]) показывает, что наиболее высокие концентрации ^{210}Pb ($\geq 2,0$ мБк/м³) наблюдаются при следующих условиях:

- Скорость ветра < 2 м/с (слабый ветер);
- Относительная влажность 70–90% (высокая влажность способствует гигроскопическому росту частиц и их задержанию в приземном слое);
- Отсутствие осадков в течение ≥ 3 дней;
- Атмосферное давление выше среднемесячного (антициклональный режим).

В летние месяцы (июнь–август) даже при слабом ветре концентрации редко превышают 0,8 мБк/м³, что связано с вертикальным перемешиванием и частыми дождями [27].

Изменения по годам. Сравнение данных 2010–2011 гг. (Астана) и 2020–2022 гг. (Степногорск) не выявило заметных тенденций: средние значения почти идентичны (0,86 мБк/м³). Однако прямое сравнение затруднено различием локаций. Для выявления продолжительных по времени трендов (например, в связи с модернизацией ТЭЦ или изменением климата) необходима единая сеть мониторинга на протяжении минимум 10 лет.

4.4. Оценка доз внутреннего облучения от ингаляции ^{210}Pb

На основе измеренных концентраций ^{210}Pb в аэрозолях воздуха и возрастных параметров дыхания можно оценить годовые эффективные дозы. В работе [9] были выполнены такие оценки для населения Степногорска с использованием дозовых коэффициентов МКРЗ [8].

Исходные допущения:

- Средняя концентрация ^{210}Pb в воздухе – 0,86 мБк/м³ (среднегодовая).
- Коэффициент поступления – 1,0 (вдыхание только уличного воздуха, без учёта внутри помещений).
- Дозовые коэффициенты для разных возрастных групп (нЗв/Бк) взяты из [8].

Годовая эффективная доза от ингаляции ^{210}Pb рассчитывалась по формуле:

$$E = C \times BR \times DC \quad (2)$$

где:

E — годовая эффективная доза (Зв/год);

C — среднегодовая концентрация ^{210}Pb в воздухе (Бк/м³);

BR — годовой объём вдыхаемого воздуха (м³/год);

DC — дозовый коэффициент для ингаляционного поступления ^{210}Pb (Зв/Бк).

В расчётах использовалась среднегодовая концентрация ^{210}Pb , равная 0,86 мБк/м³. Дозовые коэффициенты принимались согласно рекомендациям МКРЗ. Следует учитывать, что оценки не учитывают индивидуальные особенности дыхания, сезонную изменчивость концентраций и возможное поступление радионуклидов в помещениях.

Результаты расчётов представлены в Таблице 5.

Таблица 5. Оценка годовой эффективной дозы от ингаляции ^{210}Pb для населения Степногорска (по данным [9, 11]).

Возрастная группа	Дыхательный объём (м ³ /год)	Поступление (Бк/год)	Дозовый коэффициент (нЗв/Бк)	Годовая доза (мкЗв/год)
1–2 года	1100	0,95	$1,2 \times 10^{-5}$	1,14
2–7 лет	1800	1,55	$1,0 \times 10^{-5}$	1,55
7–12 лет	2500	2,15	$1,2 \times 10^{-5}$	2,58
12–17 лет	3800	3,27	$0,8 \times 10^{-5}$	2,62
>17 лет	5000	4,30	$0,6 \times 10^{-5}$	2,58

Анализ дозовых оценок:

- Наибольшая доза (2,6–2,7 мкЗв/год) приходится на возрастные группы 7–12 лет, 12–17 лет и взрослые.
- Для детей 1–2 лет доза примерно вдвое ниже (1,1 мкЗв/год) из-за меньшего дыхательного объёма, несмотря на более высокий дозовый коэффициент.
- Эти значения составляют менее 0,1% от суммарной годовой дозы природного фона в Казахстане (которая оценивается в 3,1 мЗв/год [19]), а также значительно ниже предела для населения (1 мЗв/год от техногенных источников).

Значение полученных доз. Несмотря на кажущуюся малость, эти дозы:

- 1) являются обязательным компонентом коллективной дозы, которая не должна игнорироваться при радиоэкологической паспортизации территорий;
- 2) могут быть существенно недооценены, так как не учитывают ингаляцию воздуха внутри помещений (где концентрации ²¹⁰Pb могут быть выше из-за выделения радона из строительных материалов и грунта) и нахождение в зоне влияния локальных источников (например, вблизи ТЭЦ или хвостохранилищ);
- 3) представляют собой долгосрочный, кумулятивный эффект, поскольку ²¹⁰Pb накапливается в костной массе.

4.5. Сравнение с нормативами и рекомендациями

В законодательстве Республики Казахстан отсутствуют специальные нормативы для содержания ²¹⁰Pb в атмосферном воздухе. Применяются общие требования к обеспечению радиационной безопасности [26, 30]. Для сравнения: в России рекомендованный уровень ²¹⁰Pb в приземном воздухе составляет 100 мБк/м³ – более чем в 100 раз выше измеренных концентраций в Казахстане. Тем не менее, локальные превышения вблизи промышленных источников (угольных ТЭЦ, урановых хвостохранилищ) могут достигать 5–10 мБк/м³, что уже сопоставимо с уровнями, требующими периодического контроля.

5. Оценка радиационных доз для населения

Для комплексной оценки необходимо рассмотреть все значимые пути облучения: ингаляцию радона и его короткоживущих производных, ингаляцию ²¹⁰Pb (ранее рассмотрено), ингестию (поступление с питьевой водой и продуктами питания), а также внешнее облучение от природных радионуклидов, содержащихся в почве и строительных материалах. Ниже приведены обобщённые оценки для населения Казахстана на основе данных из литературных источников.

5.1. Ингаляционная доза от радона (²²²Rn) и его производных

Радон-222 является основным источником облучения населения от природных радионуклидов (в среднем 1,2–1,3 мЗв/год из 2,4 мЗв/год в мире) [1, 7, 19]. Для Казахстана имеются данные измерений эквивалентной равновесной объёмной активности (ЭРОА) радона в жилых и общественных зданиях, а также на открытом воздухе.

Концентрации радона. Согласно обобщённым данным [1, 19], в Северном и Восточном Казахстане (зоны урановых месторождений и радоновых аномалий) средняя ЭРОА радона в помещениях может достигать 200–800 Бк/м³, а в отдельных сёлах (Аксу, Саумалколь) – до 2000–4000 Бк/м³ [16, 18, 41]. В городах, расположенных вне радоновых провинций (Астана, Алматы), средние значения составляют 30–100 Бк/м³.

Расчёт доз. Для оценки годовой эффективной дозы от ингаляции дочерних продуктов радона используется формула [7, 8]:

$$E = \text{ЭРОА (Бк/м}^3) \times 8760 \text{ (ч/год)} \times 0,4 \text{ (коэффициент равновесия)} \times \text{дозовый коэффициент (нЗв/(Бк}\cdot\text{ч}\cdot\text{м}^3))$$

Для взрослых дозовый коэффициент составляет приблизительно 9 нЗв/(Бк·ч·м³), что при ЭРОА 100 Бк/м³ даёт годовую дозу около 3 мЗв/год [7, 8].

В Таблице 6 приведены ориентировочные дозы от радона для разных типов населённых пунктов Казахстана на основе данных [1, 16, 18, 19, 41].

Таблица 6. Оценка годовой эффективной дозы от ингаляции дочерних продуктов радона для населения Казахстана

Тип территории	ЭРОА радона (Бк/м ³)	Годовая доза (мЗв/год)	Примечания
Фоновые районы (юг, запад)	20–40	0,6–1,2	Преимущественно природный фон [1]
Города вне радоновых зон (Астана, Алматы)	40–100	1,2–3,0	[19, 27]
Северный Казахстан (урановые провинции)	100–400	3,0–12,0	Включая крупные сёла [16, 41]
Локальные аномалии (Аксу, Саумалколь)	500–2000	15–60	Требуют радиационно-гигиенических мероприятий [18, 41]

Таким образом, вклад радона в годовую дозу населения Казахстана может быть от 1 до 10 мЗв/год и более, что значительно превышает вклад ²¹⁰Pb.

5.2. Ингаляционная доза от ²¹⁰Pb

Ранее в разделе 3.4.4 были приведены оценки дозы от ²¹⁰Pb, основанные на среднегодовой концентрации 0,86 мБк/м³ (для взрослых – 2,6 мкЗв/год). Однако следует учесть, что в непосредственной близости от промышленных источников (угольные ТЭЦ, урановые хвостохранилища) концентрации ²¹⁰Pb могут быть в 3–5 раз выше (до 2,6 мБк/м³ по данным [9]). Соответственно, доза для населения, проживающего в таких зонах, может достигать 5–10 мкЗв/год [9, 11]. Дети 7–12 лет в этих условиях могут получать до 12–15 мкЗв/год.

5.3. Ингаляционная доза от ²¹²Pb и ²¹⁴Pb (оценочная)

Прямые измерения ²¹²Pb и ²¹⁴Pb в воздухе Казахстана отсутствуют. Однако, используя равновесные отношения к ²²²Rn и ²²⁰Rn, можно сделать ориентировочные оценки. В равновесной атмосфере (при условии равновесия между радонами и его короткоживущими производными) ЭРОА радона и ЭРОА торона составляют примерно 0,5–0,7 от объёмной активности ²²²Rn и ²²⁰Rn соответственно. Мощность дозы от ²¹²Pb и ²¹⁴Pb обычно составляет около 30% от мощности дозы от всех дочерних продуктов радона и торона [3, 7]. Таким образом, если принять ЭРОА радона 100 Бк/м³, то вклад ²¹⁴Pb и ²¹²Pb в суммарную дозу ингаляции будет порядка 0,1–0,3 мЗв/год. Однако эти цифры нуждаются в экспериментальной проверке. Любые количественные оценки их вклада в дозовую нагрузку населения носят исключительно предварительный характер и основаны на теоретических представлениях о равновесии в рядах распада радона и торона, а также на данных зарубежных исследований. В связи с этим приведённые оценки следует рассматривать не как фактические значения для территории Казахстана, а как ориентировочный диапазон, требующий экспериментального подтверждения в рамках специализированных программ мониторинга.

5.4. Сравнение с нормативными уровнями

В соответствии с законодательством Республики Казахстан (Санитарных правил «Санитарно-эпидемиологические требования к обеспечению радиационной безопасности») [26, 30]:

- предел годовой эффективной дозы для населения от всех техногенных источников составляет 1 мЗв/год;
- дозы от природных источников не нормируются, но для них рекомендуется применять принцип оптимизации, а при превышении 5 мЗв/год – разрабатывать защитные мероприятия.

5.5. Суммарные годовые эффективные дозы

В Таблице 7 приведены ориентировочные суммарные годовые эффективные дозы для различных групп населения Казахстана на основе данных из представленных источников.

Таблица 7. Суммарные годовые эффективные дозы для населения Казахстана (мЗв/год).

Путь/радионуклид	Фоновый регион (юг, запад)	Промышленный город (без аномалий)	Зона урановых хвостохранилищ	Зона воздействия Семипалатинского полигона
Ингаляция				
Радон (²²² Rn + ДПР)	0,6–1,2	1,2–3,0	3,0–12,0	1,5–5,0
²¹⁰ Pb (аэрозоли)	0,002–0,003	0,002–0,003	0,005–0,010	0,002–0,005
(²¹² Pb, ²¹⁴ Pb)	(оценочно) 0,01–0,05	0,02–0,10	0,05–0,20	0,02–0,10
Пероральное				
²³⁸ U, ²³⁴ U (вода)	0,01–0,05	0,01–0,05	0,3–0,5	0,05–0,10
²¹⁰ Pb (пища)	0,01–0,02	0,01–0,02	0,1–0,3	0,02–0,05
Внешнее облучение				
γ от почвы (²³⁸ U, ²³² Th, ⁴⁰ K)	0,2–0,5	0,2–0,5	0,5–2,0	0,3–1,0
Итого	0,8–1,8	1,5–3,7	4,0–15,0	1,9–6,2

Примечания к таблице: значения являются ориентировочными, получены на основе ограниченных данных и нуждаются в уточнении. Дозы в зоне урановых хвостохранилищ и Семипалатинского полигона зависят от конкретного места проживания и образа жизни.

Как видно из Таблицы 7, для большинства населения Казахстана суммарные дозы не превышают 5 мЗв/год (исключая зоны локальных аномалий). Однако в районах с высокими концентрациями радона и вблизи урановых хвостохранилищ дозы могут превышать 10 мЗв/год, что требует принятия мер по снижению облучения (реабилитация территорий, вентиляция помещений, ограничение использования подземных вод).

5.6. Корреляции с другими радионуклидами и микроэлементами

Анализ корреляций между ²¹⁰Pb и другими компонентами позволяет сделать выводы о источниках и процессах.

- ²¹⁰Pb и ²²⁶Ra в почвах. В зоне урановых хвостохранилищ коэффициент корреляции между ²¹⁰Pb и ²²⁶Ra в почвах составляет $r = 0,85-0,95$ [16, 17], что указывает на общий источник (отходы обогащения) и отсутствие значительного фракционирования. В фоновых почвах корреляция слабая ($r = 0,3-0,5$) из-за выщелачивания ²²⁶Ra.

- ²¹⁰Pb и ¹³⁷Cs. На Семипалатинском полигоне корреляция между ²¹⁰Pb и ¹³⁷Cs отсутствует ($r = 0,1-0,2$), что подтверждает различную природу этих радионуклидов (²¹⁰Pb – в основном природный/техногенно-усиленный, ¹³⁷Cs – искусственный, продукт деления) [20, 22].

- ²¹⁰Pb и стабильный Pb. В почвах вблизи угольных ТЭЦ отмечена положительная корреляция ($r = 0,6-0,7$) между ²¹⁰Pb и общим содержанием свинца (определённым методом ICP-MS), что говорит об их общем источнике – угольной золе [11]. В урановых хвостохранилищах такая корреляция отсутствует ($r = 0,1-0,2$), так как стабильный свинец поступает из других рудных минералов.

- ²¹⁰Pb и ²³²Th. В зоне влияния Карагандинской ТЭЦ (уголь с повышенным Th) корреляция между ²¹⁰Pb и ²³²Th в почвах умеренная ($r = 0,4-0,5$), что подтверждает угольную золу как основной источник [10]. В других регионах корреляция отсутствует.

5.7. Сводные данные

Таблица 8 обобщает диапазоны концентраций ²¹⁰Pb (и, где возможно, ²¹²Pb, ²¹⁴Pb) в почвах и водах Казахстана на основе существующих источников.

Таблица 8. Концентрации ²¹⁰Pb и связанных радионуклидов в почвах и водах Казахстана (диапазоны, Бк/кг – для почвы, Бк/л – для воды).

Среда/регион	^{210}Pb	^{226}Ra	^{238}U	Источники
Почвы (0–10 см)				
Фоновые (Север, Центр)	20–50	15–40	20–45	[10, 30]
Урановые хвостохранилища (Степногорск)	140–2100	200–3500	100–500	[16, 17]
Влияние угольных ТЭЦ (Темиртау)	150–270	40–80	50–90	[10, 11]
Семипалатинский полигон (локально)	50–500	20–300	30–150	[20, 22]
Вода (реки, озёра)				
Река Иртыш (фон)	0,0008–0,0012	0,01–0,03	0,003–0,01	[21]
Река Иртыш (ниже промзон)	0,0015–0,0022	0,02–0,05	0,01–0,03	[21, 22]
Река Шаган (Семипалатинский полигон)	0,005–0,008	0,05–0,20	0,08–0,12	[22]
Подземные воды (зона урановых объектов)	0,01–0,15	0,10–0,80	0,10–0,50	[17]
Донные отложения				
Река Иртыш (0–10 см)	30–80	20–50	25–60	[21, 22]

Ограниченность имеющихся данных:

1. Отсутствие данных по ^{212}Pb и ^{214}Pb в почвах и водах Казахстана, несмотря на наличие потенциальных источников (торий-содержащие угли, урановые руды с неравновесным Th/U).
2. Географическая ограниченность – практически все измерения проведены в Северном и Центральном Казахстане; отсутствуют данные по Западному (нефтегазовый шлейф), Южному (фосфориты, полиметаллы) и Восточному (Рудный Алтай) регионам.
3. Недостаток данных по формам ^{210}Pb в почвах (выщелачивание выполнено только для нескольких проб в [11, 17]).
4. Отсутствие данных по ^{210}Pb в питьевой воде населённых пунктов, расположенных в зонах влияния урановых предприятий (кроме единичных скважин).
5. Нет корреляции между содержанием ^{210}Pb в почве и в растительности (овощи, зерновые), что не позволяет оценить дозу от ингестии.

Обсуждение результатов исследования

Обзор доступных данных по радиоактивным изотопам свинца на территории Казахстана выявил противоречивую ситуацию. С одной стороны, страна обладает мощными техногенными источниками ^{210}Pb : угольная энергетика (на базе высокочольных углей) [10], урановая промышленность (хвостохранилища, законсервированные шахты) [9], металлургия (выбросы аэрозолей) и последствия ядерных испытаний [15, 19]. С другой стороны, объём прямых измерений радиоактивного свинца в атмосферных аэрозолях, почвах и водах Казахстана остаётся фрагментарным, географически ограниченным и методологически неоднородным [9, 11, 16, 21, 27]. Особенно остро стоит полное отсутствие данных по короткоживущим изотопам ^{212}Pb и ^{214}Pb , которые могли бы служить индикаторами «свежего» поступления радона/торона из техногенных источников [3, 5].

1. Научные проблемы рассматриваемого вопроса

1.1. Основные выявленные закономерности

Сезонный максимум ^{210}Pb и его климатическая обусловленность. Данные из Астаны и Степногорска [9, 27] однозначно показывают, что концентрации ^{210}Pb в приземном воздухе достигают максимума в холодный период (октябрь–апрель) при установлении устойчивых температурных инверсий. Коэффициент температурной корреляции составил $r = -0,60$ для Степногорска и $r = -0,55$ для Астаны, что соответствует закономерностям, описанным для других континентальных регионов с резко-континентальным зимним режимом (Западная Сибирь, север Китая) [5, 25]. Однако в Казахстане сезонный контраст выражен сильнее, чем в Европе [6], что объясняется большей интенсивностью инверсий и отсутствием смягчающего влияния океана.

Фракционный состав. Более 95% активности ^{210}Pb ассоциировано с частицами $\text{PM}_{2.5}$ (диаметр $<2,1$ мкм), причём около 40–50% приходится на самую мелкую фракцию $<0,39$ мкм [9, 11, 27]. Это имеет два важных следствия:

- Дальний перенос. Субмикронные аэрозоли имеют время жизни в атмосфере от нескольких дней до недель и могут переноситься на тысячи километров. Таким образом, выбросы казахстанских ТЭЦ и урановых хвостохранилищ потенциально вносят вклад в загрязнение Арктики, что уже подтверждено изотопными исследованиями стабильного свинца [4, 5].

- Повышенная ингаляционная доза. Частицы размером $<0,5$ мкм наиболее эффективно достигают альвеолярного отдела лёгких и задерживаются там. Следовательно, дозовые коэффициенты для ^{210}Pb могут быть недооценены, если не учитывать фактическое распределение по размерам. Рекомендуется проведение дозиметрических расчётов с использованием индивидуальных спектров размеров [9, 11].

Влияние урановой промышленности. В районе хвостохранилища Степногорска и законсервированных шахт Грачевского месторождения зафиксированы локальные аномалии ^{210}Pb в почвах (до 2100 Бк/кг) и атмосферных аэрозолях (до 2,6 мБк/м³) [9, 16, 17]. Однако прямое сравнение с фоновыми участками показывает, что превышения носят локальный характер (радиус 5–10 км). Вклад этого источника в фоновые концентрации на расстоянии более 20 км (г. Степногорск) уже не доминирует; среднегодовые значения здесь практически не отличаются от астанинских [9, 27]. Это говорит о том, что на региональном уровне главным антропогенным источником ^{210}Pb является рассредоточенный выброс от угольных ТЭЦ, а не точечные объекты урановой отрасли.

Относительная стабильность уровней ^{210}Pb в воздухе. Среднегодовая концентрация в Астане (2010–2011) и Степногорске (2020–2022) практически идентична (0,86 мБк/м³) [9, 27]. Что указывает на то, что за десятилетие существенных изменений в выбросах (или в фоновом режиме) не произошло. Однако для окончательного вывода необходимы продолжительные а не точечные данные.

1.2. Перспективные направления дальнейших исследований

На основе данных литературы можно сформулировать существенные пробелы в науке, которые в настоящее время препятствуют созданию полной картины распространения радиоактивного свинца в Казахстане.

Пробел 1. Полное отсутствие данных по короткоживущим изотопам ^{212}Pb и ^{214}Pb

Обоснование: ^{214}Pb ($T_{1/2} = 26,8$ мин) и ^{212}Pb ($T_{1/2} = 10,6$ ч) являются прямыми продуктами ^{222}Rn и ^{220}Rn соответственно. Их замеры позволяют:

- отличить «свежий» радон, выделившийся из техногенных источников (золоотвалы ТЭЦ, хвостохранилища, шахты), от фонового почвенного радона;
- оценить время транспорта аэрозолей от источника до точки отбора;
- количественно разделить вклад уранового и ториевого рядов (через отношение $^{212}\text{Pb}/^{210}\text{Pb}$).

Гипотеза: В пробах воздуха, отобранных в непосредственной близости от золошлаковых отвалов карагандинских ТЭЦ (где угли обогащены торием), отношение $^{212}\text{Pb}/^{210}\text{Pb}$ будет статистически значимо выше, чем на фоновых участках и вблизи урановых хвостохранилищ (где доминирует урановый ряд). Это позволит разработать простой и недорогой метод идентификации источника загрязнения.

Пути решения: Проведение экспресс-гамма-спектрометрии аэрозольных фильтров (время счёта 1–2 часа, сразу после отбора пробы) на HPGe детекторах. Необходимо организовать отбор проб в серии «градиент»: фоновый участок → вблизи ТЭЦ → вблизи хвостохранилищ. Параллельно следует измерять ^{222}Rn и ^{220}Rn в приземном воздухе с помощью коммерческих радон-мониторов (например, AlphaGUARD).

Пробел 2. Отсутствие данных по ^{210}Pb на всей территории Казахстана

Обоснование: Имеющиеся данные относятся только к трём локациям (Астана, Степногорск, разово Алматы). При этом отсутствуют измерения в крупных промышленных центрах: в Усть-Каменогорске (металлургия, уран), Караганде, Экибастузе (угольная генерация, металлургия), Шымкенте (свинцовый завод, фосфор), Актау (нефтегаз, уран), а также в зонах влияния бывшего Семипалатинского полигона.

Гипотеза: Концентрации ^{210}Pb будут максимальны в городах, где происходит интенсивное сжигание угля (частное отопление, ТЭЦ) и неблагоприятные метеоусловия. В Усть-Каменогорске, несмотря на мощные промышленные выбросы, концентрация ^{210}Pb может быть ниже из-за лучшего рассеивания (горная местность), но этот вопрос требует проверки.

Пути решения: Создание национальной сети мониторинга ^{210}Pb на базе существующих станций Казгидромета, где уже проводится отбор проб PM_{10} и $\text{PM}_{2.5}$ для определения тяжёлых металлов [28, 29]. Достаточно дополнить программу анализа этих же фильтров на ^{210}Pb методом гамма-спектрометрии (линия 46,5 кэВ). Ориентировочная стоимость: ~50–100 тыс. тенге на один фильтр (включая калибровку и время счёта). Приоритетные пункты: Усть-Каменогорск, Караганда, Экибастуз, Шымкент, Актау, а также фоновые станции (Боровое, Катон-Карагай)

Пробел 3. Неопределенный вклад угольной энергетики как источника ^{210}Pb

Обоснование: Прямых измерений содержания ^{210}Pb в дымовых газах, золе-уноса или факеле ТЭЦ Казахстана не проводилось. Это затрудняет верификацию национальных кадастров выбросов и соглашения о трансграничном переносе.

Гипотеза: Для казахстанских ТЭЦ коэффициент обогащения ^{210}Pb в золе-уноса по отношению к исходному углю будет выше, чем в среднем по миру, из-за высокой зольности углей и особенностей конструкции золоуловителей (циклоны, мокрые скрубберы, которые слабо улавливают субмикронные частицы). Следовательно, выброс аэрозолей ^{210}Pb на единицу сожжённого угля может быть недооценён в существующих моделях [5, 9, 32].

Пути решения: Отбор проб угля, золы-уноса (с разных полей электрофильтра/циклонов) и дымовых газов (по стандартизированной методике ISO 2889) на 2–3 типичных ТЭЦ (Карагандинская ГРЭС-1, Экибастузская ГРЭС, ТЭЦ 2 г. Астаны). Измерение ^{210}Pb , ^{210}Po , ^{226}Ra , ^{238}U , ^{232}Th в пробах методом гамма- и альфа-спектрометрии. Расчёт эмиссионных факторов.

Пробел 4. Неизвестные пути поступления ^{210}Pb в организм человека (пероральное)

Обоснование: Отсутствуют систематические исследования содержания ^{210}Pb , ^{210}Po и ^{212}Pb в основных продуктах (молоко, мясо, хлеб, овощи, рыба и т.п.) из регионов с потенциально повышенным фоном. Без этих данных невозможно оценить полную дозу внутреннего облучения и дать рекомендации по ограничению потребления.

Гипотеза: В зоне влияния урановых хвостохранилищ (Степногорский район) концентрации ^{210}Pb в корнеплодах (картофель, морковь) и листовых овощах будут выше, чем в продукции из «чистых» районов, из-за прямого загрязнения почвы и ирригации водой с повышенным содержанием урана и радона.

Пути решения: Отбор проб пищевых продуктов (совместно с местными сельхозпредприятиями и санэпидслужбой) в трёх зонах: 1) контрольная (фоновая) – Акмолинская область вдали от промышленности; 2) зона урановых хвостохранилищ (сёла Аксу, Кварцитка); 3) зона влияния угольных ТЭЦ (Темиртау). Анализ ^{210}Pb и ^{210}Po в продуктах после озонирования и радиохимического выделения (альфа-спектрометрия). Оценка доз от ингестии и разработка рекомендаций (например, очистка овощей от поверхностных загрязнений, отказ от использования подземной воды).

2. Предлагаемые стратегии снижения вредного воздействия радиоактивного свинца для Казахстана

На основе выявленных закономерностей и пробелов, а также с учётом международного опыта снижения выбросов естественных радионуклидов, ниже предлагаются конкретные меры по уменьшению радиационного воздействия изотопов свинца на население и окружающую среду Казахстана. Меры сгруппированы по источникам и ранжированы по ожидаемой эффективности и экономической целесообразности.

2.1. Снижение выбросов ^{210}Pb от угольной энергетики

2.1.1. Модернизация систем золоулавливания

Проблема: На многих казахстанских ТЭЦ (построенных в 1960–1980-х гг.) используются малоэффективные золоуловители – циклоны и мокрые скрубберы, которые улавливают не более 90–96% крупной золы, но задерживают лишь 30–50% субмикронных частиц (<2 мкм), на которых преимущественно концентрируется ^{210}Pb [9, 10, 11].

Рекомендация: Поэтапная замена малоэффективных золоуловителей на эмульгаторы или высокоэффективные электрофильтры (ESP) с эффективностью улавливания субмикронных частиц >99,5%. Такая модернизация позволит снизить выбросы ^{210}Pb на 90–95% и одновременно уменьшить выбросы других тяжёлых металлов (мышьяк, селен, ртуть) [10].

Экономическая оценка: Стоимость установки нового фильтра на энергоблок 100–200 МВт составляет ориентировочно 5–10 млн у.е. (долл. США). Для ТЭЦ с 4–8 блоками общие затраты могут составить 20–60 млн у.е. Срок окупаемости за счёт снижения штрафов за выбросы, уменьшения расхода воды (в случае замены скрубберов на электрофильтр) и возможности применения золы как вторичного продукта (строительная индустрия) – 3–5 лет [10, 11].

Приоритетные предприятия: Карагандинская ГРЭС-1 (влияет на г. Темиртау), Экибастузская ГРЭС 1 (крупнейшая в стране), ТЭЦ 2 г. Астаны, Степногорская ТЭЦ.

2.1.2. Рекультивация золошлаковых отвалов

Проблема: Золошлаковые отвалы являются вторичными источниками ^{210}Pb (за счёт пыления и эманации ^{222}Rn) [10, 11]. В сухую ветреную погоду происходит ветровая эрозия поверхности, а в зимнее время при инверсиях – накопление радона.

Рекомендации:

- фиксация поверхности отвалов (гидропосев трав, засыпка глинистым экраном, закрепление полимерными эмульсиями);
- утилизация золы в производство строительных материалов (кирпич, цемент, бетон) при обязательном радиационном контроле (эффективная удельная активность должна быть ниже 370 Бк/кг, согласно [26]);
- создание защитных лесополос с подветренной стороны отвалов для снижения пыления.

Экономическая оценка: Затраты на рекультивацию 1 га отвала – от 5 до 20 тыс. у.е. в зависимости от метода. Годовой предотвращённый экономический ущерб от снижения заболеваемости населения (болезни органов дыхания, онкология) может составить несколько миллионов у.е. в год для крупного региона [19].

2.2. Снижение поступления ^{210}Pb от урановой промышленности

2.2.1. Сокращение выхода радона с поверхности хвостохранилищ

Проблема: Хвостохранилище СГМК (и другие подобные объекты) является мощным источником ^{222}Rn (и, следовательно, ^{210}Pb) за счёт того, что радиоактивные отходы остаются открытыми [15, 16].

Рекомендации:

- перекрытие поверхности хвостохранилища многослойным экраном (глина – геомембрана – защитный слой грунта) для снижения эманации радона;
- установка системы сбора и очистки дренажных вод для предотвращения выноса ^{210}Pb в поверхностные водоёмы;
- организация регулярного мониторинга радона, ^{210}Pb , урана в приземном воздухе и воде в санитарно-защитной зоне.

Экономическая оценка: Полная изоляция хвостохранилища СГМК оценивается в 50–100 млн у.е. [16]. Учитывая масштаб проблемы и количество проживающего в зоне влияния населения (~100 тыс. чел.), такие затраты оправданы. Возможно привлечение международной технической помощи (МАГАТЭ, Глобальный экологический фонд).

2.2.2. Изоляция заброшенных шахт (Грачевское, др.)

Проблема: Законсервированные (фактически заброшенные) шахты продолжают выделять ^{222}Rn через вентиляционные стволы и трещины, а шахтные воды с высоким содержанием урана попадают в поверхностные водотоки [17].

Рекомендации:

- закупоривание устьев шахт и вентиляционных стволов цементными растворами;
- очистка шахтных вод (сорбционные барьеры, известкование) перед сбросом;
- организация режимных наблюдений (ежеквартально) за содержанием ^{210}Pb , ^{238}U , ^{226}Ra в воде рек, принимающих шахтные воды.

Экономическая оценка: Затраты на ликвидацию одной шахты составляют от 0,5 до 2 млн у.е. Для 30 известных шахт – 15–60 млн у.е. [17]. Альтернатива – продолжающееся загрязнение вод и почв с ежегодным ущербом для сельского хозяйства и здоровья населения, который может превысить затраты на ликвидацию за 5–10 лет.

2.3. Меры в нефтегазовом и металлургическом секторах

Хотя прямые данные по радиоактивному свинцу в этих отраслях отсутствуют (пробел 4), существование свинец-содержащих шламов предполагает необходимость профилактических мер:

- внедрение обязательного радиационного контроля оборудования и трубопроводов при демонтаже и ремонте (счётчики гамма-излучения);

- создание специализированных полигонов для захоронения шламовых отходов с гидроизоляцией и контролем эманации радона;
- разработка технических условий на переработку металлургических шлаков (Усть-Каменогорск, Риддер) с учётом содержания в них ^{210}Pb [24].

2.4. Меры по снижению доз от радона (как основного источника)

Поскольку радон даёт до 60–90% годовой дозы, его снижение является наиболее эффективным путём уменьшения суммарного облучения.

Рекомендации для жилого сектора:

- организация специальной гидрозащиты при новом строительстве (герметизация подвалов, устройство вентиляционных каналов под полом);
- проведение целевых радиометрических обследований в школах, детских садах и жилых домах сёл и городов, расположенных в радоновых зонах (Северный, Восточный Казахстан) [18, 41];
- субсидирование проветривания и герметизации для социально уязвимых групп населения (пожилые, многодетные семьи).

2.5. Совершенствование системы мониторинга и нормирования

2.5.1. Включение ^{210}Pb в перечень контролируемых показателей

- В настоящее время в Казахстане не установлены нормативы для ^{210}Pb в атмосферном воздухе, почвах и воде (за исключением общих требований к радиоактивности) [26, 30]. Рекомендуется:
- в атмосферном воздухе – использовать ориентировочный безопасный уровень воздействия (ОБУВ) для ^{210}Pb – 5–10 мБк/м³ (среднегодовой), что соответствует 2–4 стандартным отклонениям от измеренных концентраций в промышленных городах;
- в питьевой воде – принять норматив для ^{210}Pb – 0,2 Бк/л (по аналогии с нормами для ^{210}Po) [26];
- в почвах – разработать критерии отнесения земель к зоне радиоактивного загрязнения при содержании $^{210}\text{Pb} > 200$ Бк/кг (с учётом естественного фона).

2.5.2. Создание национальной базы данных

Предлагается создание единой государственной информационной системы, аккумулирующей результаты измерений ^{210}Pb , ^{212}Pb , ^{226}Ra , ^{232}Th и ^{238}U в объектах окружающей среды, а также данных о выбросах промышленных предприятий. Это позволит:

- проводить пространственный анализ и идентифицировать «горячие точки»;
- моделировать перенос ^{210}Pb на дальние расстояния (подготовка исходных данных для моделей HYSPLIT, FLEXPART) [28, 29];
- оценивать вклад различных источников в коллективную дозу населения.

2.6. Ожидаемые результаты и сроки реализации

В Таблице 9 обобщены предлагаемые стратегии, ожидаемое снижение выбросов/доз, ориентировочные сроки и затраты.

Таблица 9. Предлагаемые стратегии снижения воздействия радиоактивного свинца в Казахстане

Мера	Ожидаемое снижение (выбросов/доз)	Ориентировочный срок реализации	Ориентировочные затраты (млн у.е.)
Модернизация золоулавливания на ТЭЦ	снижение выбросов мелкодисперсных аэрозолей ^{210}Pb на 90–95%	5–10 лет (поэтапно)	20–60
Рекультивация золошлаковых отвалов	снижение пыления и выхода ^{222}Rn на 70–80%	5–15 лет (в зависимости от площади)	10–30
Изоляция хвостохранилища СГМК	снижение выброса ^{222}Rn и поступления ^{210}Pb в воду на 80–90%	3–7 лет	50–100

Ликвидация заброшенных шахт (30 шт.)	снижение поступления ²³⁸ U и ²¹⁰ Pb в поверхностные воды на 70–80%	5–10 лет	15–60
Радонозащита жилых зданий (приоритет – зоны с ЭРОА >400 Бк/м ³)	снижение дозы от радона в 3–5 раз	10–20 лет (поэтапно)	5–20 (субсидии)
Создание системы мониторинга и базы данных	Единая национальная база данных	1–2 года	0,5–1

Заключение

Данный обзор представляет собой первый систематический анализ данных о радиоактивных изотопах свинца (²¹⁰Pb, ²¹²Pb, ²¹⁴Pb) в окружающей среде Казахстана – стране, где пересекаются мощные техногенные источники (угольная энергетика, урановая промышленность, металлургия, нефтегазовая отрасль и наследие ядерных испытаний) и уникальные природно-климатические условия (континентальный климат, температурные инверсии). Несмотря на фрагментарность и географическую ограниченность имеющихся данных, можно сделать следующие обоснованные выводы.

1. Основные выводы

1.1. Уровни ²¹⁰Pb в атмосферных аэрозолях и их динамика

Среднегодовые концентрации ²¹⁰Pb в приземном воздухе для городов Астана и Степногорск составляют 0,86 мБк/м³ (диапазон 0,18–2,60 мБк/м³), что соответствует уровням, характерным для континентальных регионов умеренных широт, и остаются стабильными на протяжении десятилетия [9, 27]. Выявлена чёткая обратная корреляция с температурой воздуха ($r = -0,55 \dots -0,60$), обусловленная накоплением ²¹⁰Pb в приземном слое при устойчивых зимних инверсиях [9, 27, 29]. Более 95% активности ²¹⁰Pb ассоциировано с мелкодисперсными аэрозолями (PM_{2,5}), причём 40–50% приходится на субмикронную фракцию <0,39 мкм, что способствует дальнему (вплоть до трансграничного) переносу и увеличению ингаляционной дозы [9, 11, 27].

1.2. Техногенные источники и локальные аномалии

Крупнейшим антропогенным источником ²¹⁰Pb в Казахстане является угольная энергетика (сжигание высокозольных углей Экибастузского и Карагандинского бассейнов), что подтверждается корреляцией ²¹⁰Pb с сульфатами, нитратами и хлоридами в аэрозолях [9, 10, 11]. Золошлаковые отвалы ТЭЦ служат вторичными источниками за счёт пыления и выхода ²²²Rn (коэффициент концентрирования ²¹⁰Pb в золе – 4,2–8,6) [10, 11]. В зоне влияния урановых хвостохранилищ (Степногорск) и законсервированных шахт (Грачевское) зафиксированы локальные аномалии: концентрации ²¹⁰Pb в почве достигают 2100 Бк/кг, в атмосферных аэрозолях – 2,6 мБк/м³, в подземных водах – 0,15 Бк/л [9, 16, 17]. Однако на расстоянии >20 км от этих объектов вклад в фоновые концентрации перестает быть доминирующим, уступая рассредоточенному влиянию угольных ТЭЦ. Наследие Семипалатинского полигона продолжает влиять на содержание ²¹⁰Pb в водах реки Шаган (5–8 мБк/л) и донных отложениях (до 150 Бк/кг) за счёт продолжающейся миграции радионуклидов [20, 21, 22].

1.3. Дозовые оценки и радиологическая значимость

Годовая эффективная доза от ингаляции ²¹⁰Pb для взрослого населения составляет 2,6 мкЗв – менее 0,1% от суммарной дозы природного фона (3,1 мЗв/год) и значительно ниже предела для населения от техногенных источников (1 мЗв/год) [7, 8, 9, 19]. Однако в зонах локальных аномалий доза может возрасти до 5–10 мкЗв/год, что не должно игнорироваться при радиоэкологической паспортизации территорий. Основной вклад в годовую дозу населения Казахстана вносит радон (²²²Rn) и его короткоживущие производные продукты – от 0,6 до >10 мЗв/год в зависимости от радоновой зоны [1, 16, 18, 41]. В районах урановых хвостохранилищ дополнительный вклад даёт ингестия ²³⁸U с питьевой водой (до 0,5 мЗв/год) [17, 21].

1.4. Ключевые пробелы в исследованиях

Анализ выявил четыре критических пробела, препятствующих созданию полноценной картины:

1. Отсутствие данных по короткоживущим изотомам ²¹²Pb и ²¹⁴Pb в любых объектах окружающей среды

Казахстана. Это не позволяет идентифицировать «свежие» выбросы радона и торона из техногенных источников и оценивать время транспорта аэрозолей.

2. Отсутствие национального пространственного распределения – измерения ограничены тремя локациями (Астана, Степногорск, Алматы). Нет данных по крупным промышленным центрам (Усть-Каменогорск, Караганда, Экибастуз, Шымкент, Актау) и фоновым источникам.

3. Отсутствуют прямые измерения выбросов ^{210}Pb от казахстанских ТЭЦ (унос золы казахстанских ТЭЦ), что не позволяет верифицировать эмиссионные факторы.

4. Не определены пути поступления ^{210}Pb в организм человека – нет систематических данных по содержанию ^{210}Pb , ^{210}Po в пищевых продуктах из зон техногенных аномалий, что делает оценку дозы от ингестии приблизительной

2. Рекомендации для регулирующих документов

На основе проведённого анализа предлагаются следующие первоочередные меры:

2.1. Законодательное нормирование

- Включить ^{210}Pb в перечень контролируемых показателей при мониторинге атмосферного воздуха, почв и питьевой воды с установлением ориентировочных безопасных уровней воздействия (ОБУВ) на основе международных рекомендаций [7, 8, 26].

- Разработать и утвердить национальный стандарт (СТ РК) по отбору проб, пробоподготовке и гамма-спектрометрическому определению ^{210}Pb в различных матрицах, гармонизированный с ISO 18589 (измерение радиоактивности в окружающей среде – почва) и ISO 10703 (вода).

- Создать единую государственную информационную платформу по TENORM (техногенно-усиленным природным радионуклидам) с регулярным (ежегодным) обновлением данных от всех промышленных объектов.

2.2. Приоритетные меры по снижению выбросов

- Модернизация систем золоулавливания на угольных ТЭЦ (замена циклонов и мокрых скрубберов на эмульгаторы и электрофилтры) с целью снижения выбросов субмикронной золы и ассоциированного ^{210}Pb на 90–95%. Приоритет – ТЭЦ в городах с наибольшим населением и наихудшими метеоусловиями (Астана, Караганда, Степногорск, Экибастуз) [9, 10, 11].

- Герметизация урановых хвостохранилищ (Степногорск, Грачевское) с перекрытием поверхности многослойным экраном для снижения эманации ^{222}Rn , а также организации сбора и очистки дренажных вод [15, 16, 17].

- Радонозащита жилых зданий в зонах с ЭРОА >200 Бк/м³ (проветривание, герметизация подполий, устройство вентиляционных каналов), с государственной поддержкой для социально уязвимых групп [1, 18, 41].

2.3. Научно-исследовательские приоритеты

- Пилотное исследование по ^{212}Pb и ^{214}Pb – отбор проб вблизи Карагандинской ГРЭС (торий-содержащие угли) и урановых хвостохранилищ, гамма-спектрометрическое измерение сразу после отбора (экспресс-методика). Цель – получить первые данные и оценить эффективность метода.

- Расширение мониторинговой сети до 10–12 станций, включая Усть-Каменогорск, Караганду, Экибастуз, Шымкент, Актау, а также фоновые станции (Боровое, Катон-Карагай). Использовать существующую инфраструктуру Казгидромета.

- Прямые измерения выбросов ^{210}Pb от ТЭЦ – отбор проб угля, золы-уноса, дымовых газов на 2–3 типичных предприятиях, расчёт эмиссионных факторов для национального кадастра.

- Оценка поступления ^{210}Pb с пищевыми продуктами – отбор проб в трёх зонах (фон, урановое хвостохранилище, угольная ТЭЦ) и анализ методом альфа-спектрометрии (через ^{210}Po).

3. Перспективы для Казахстана

3.1. Научная новизна

Казахстан обладает уникальным положением для изучения процессов трансформации и переноса радиоактивных изотопов свинца в континентальных условиях. Наличие мощных точечных (хвостохранилища) и рассредоточенных (угольные ТЭЦ) источников, контрастный климат и протяжённые территории создают естественный «полигон» для верификации глобальных моделей переноса аэрозолей. Приоритетными научными направлениями являются:

- разработка и валидация моделей (HYSPLIT, FLEXPART) с использованием отечественных эмиссионных данных для оценки трансграничного переноса ^{210}Pb в Арктику, Сибирь и Китай;
- изучение химических форм ^{210}Pb в аэрозолях и почвах (последовательное выщелачивание) для оценки биодоступности и разработки методов ремедиации;
- использование соотношения $^{212}\text{Pb}/^{210}\text{Pb}$ и $^{214}\text{Pb}/^{210}\text{Pb}$ в качестве «отпечатков пальцев» для идентификации источников радона и торона.

3.2. Практическая ценность

Внедрение предложенных мер позволит:

- снизить коллективную дозу населения, проживающего в зонах влияния крупных ТЭЦ и урановых объектов, на 20–30% в течение 10 лет (оценочно);
- улучшить качество воздуха в городах за счёт сокращения выбросов не только ^{210}Pb , но и других тяжёлых металлов и $\text{PM}_{2,5}$;
- выполнить международные обязательства по Конвенции ЕЭК ООН о трансграничном загрязнении воздуха на большие расстояния (LRTAP) и улучшить имидж страны как ответственного участника экологических соглашений;
- создать рабочие места в сфере экологического мониторинга, реабилитации территорий и «зелёной» энергетики

4. Итоговый вывод

Казахстан является значимым региональным источником техногенно-усиленного ^{210}Pb , однако текущий уровень знаний о распространении, источниках и дозах этого радионуклида недостаточен для выработки эффективной политики управления рисками. Отсутствие данных по короткоживущим изотопам, географическая ограниченность мониторинга и неопределённость эмиссионных факторов – ключевые барьеры. В то же время страна обладает необходимой инфраструктурой, кадровым потенциалом и международными связями для их преодоления. Принятие предлагаемых мер позволит не только снизить радиационное воздействие на население, но и укрепить научно-технический суверенитет Казахстана в области радиоэкологии и стать примером для других стран Центральной Азии.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан, грантовое финансирование проекта AP23488651 (по договору №189/ГФ24-26 от 9 сентября 2024 г.)

Вклад авторов

Муса А.С., Жумадилов К.Ш., Баграмова А.А. — исследование, методология, написание оригинальной работы, контроль, ресурсы, рецензирование;

Касымжанов М.Т., Степаненко В.Ф., Сакагучи А., Хоши М. — концептуализация, визуализация, редактирование и финансирование.

Список литературы

1. M. Komárek, V. Ettler, V. Chrastný, and M. Mihaljevič, Environ. Int. 34, 562–577 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.envint.2007.10.005>
2. T. J. Chow and M. S. Johnstone, Science 147, 502–503 (1965). <https://doi.org/10.1126/science.147.3657.502>.
3. J. Porstendörfer, J. Aerosol Sci. 25, 219–263 (1994). [https://doi.org/10.1016/0021-8502\(94\)90077-9](https://doi.org/10.1016/0021-8502(94)90077-9)
4. C. Papastefanou, Radioactivity in the Environment 12, 1–172 (2008). [https://doi.org/10.1016/S1569-4860\(07\)12002-7](https://doi.org/10.1016/S1569-4860(07)12002-7)
5. M. Baskaran, J. Environ. Radioact. 102, 500–513 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2010.10.007>
6. R. Winkler and G. Rosner, Sci. Total Environ. 263, 57–68 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0048-9697\(00\)00666-5](https://doi.org/10.1016/S0048-9697(00)00666-5)
7. United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation (UNSCEAR), Sources and Effects of Ionizing Radiation, Vol. I (United Nations, New York, 2000)
8. International Commission on Radiological Protection (ICRP), Compendium of Dose Coefficients Based on ICRP Publication 60, ICRP Publication 119, Ann. ICRP 41, Suppl. 1 (2012)
9. A. Bagramova, A. Sakaguchi, K. Sakata, J. Takahashi, T. Kajimoto, S. Endo, M. Toekin, A. Zhumalina, D. Ibrayeva, V. Stepanenko, M. Hoshi, and K. Zhumadilov, Atmos. Environ. 372, 121836 (2026). <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2026.121836>

10. Y. Pak, D. Pak, D. Ibragimova, V. Matonin, and A. Tebayeva, *Atmosphere* 16, 125 (2025). <https://doi.org/10.3390/atmos16020125>
11. Khalaf, H.N.V. Взаимодействие продуктов распада радона с аэрозольными частицами и аналитическими фильтрами Петрянова. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. Уральский федеральный университет: Екатеринбург, Россия, 2020. 153 с.
12. A. Bagramova, K. Zhumadilov, S. Endo, T. Kajimoto, A. Sakaguchi, Zh. Zeinulla, and M. Hoshi, *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 334, 381–387 (2025). <https://doi.org/10.1007/s10967-024-09839-2>
13. Жумалина А.Г., Самбаев Е.К., Сакагучи А., Эндо С., Танака К., Каджимото Т., Кавано Н., Жумадилов К.Ш., Хоши М. Измерение концентрации ^{210}Pb в воздухе города Астаны. Вестник Карагандинского университета. Серия «Физика» 2018, 92 (4), 88–93. <https://phs.buketov.edu.kz/physics-vestnik/article/download/265/207/398>
14. Nuclear Energy Agency and International Atomic Energy Agency, *Uranium 2024: Resources, Production and Demand* (OECD Publishing, Paris, 2025)
15. Агентство по атомной энергетике Республики Казахстан. Материалы работы комиссии по изучению состояния радиационной обстановки на рудоуправлениях Целинного горно-химического комбината. Агентство по атомной энергетике: Алматы, Казахстан, 1993; Vol. 20.
16. D. Ibrayeva, M. Bakhtin, Y. Kashkinbayev, P. Kazymbet, K. Zhumadilov, N. Altaeva, M. Aumalikova, and E. Shishkina, *Radiat. Prot. Dosim.* 189, 2050–2057 (2020). <https://doi.org/10.1093/rpd/ncaa068>
17. S. Subbotin, P. Krivitskiy, N. Larionova, A. Toporova, A. Kunduzbayeva, D. Turchenko, Zh. Tleukanova, and A. Aidarkhanova, *Sci. Rep.* 15, 7845 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41598-025-01697-6>
18. Y. Kashkinbayev, P. Kazymbet, M. Bakhtin, A. Khazipova, M. Hoshi, A. Sakaguchi, and D. Ibrayeva, *Atmosphere* 14, 1133 (2023). <https://doi.org/10.3390/atmos14071133>
19. R. I. Bersimbaev and O. Bulgakova, *Genes Environ.* 37, 18 (2015). <https://doi.org/10.1186/s41021-015-0019-3>
20. R. Harbron, A. Lipikhina, G. Yessilkanov, K. Apsalikov, Y. Brait, M. Hoshi, and E. Ostroumova, *J. Radiat. Res.* 66, 24–30 (2025). <https://doi.org/10.1093/jrr/rrae101>
21. A. Aidarkhanova, N. Larionova, A. Tashekova, M. Dyussebayeva, A. Mamyrbayeva, L. Timonova, Ye. Shakenov, A. Mulikova, and A. Aidarkhanov, *RSC Adv.* 14, 26208–26218 (2024). <https://doi.org/10.1039/D4RA02557A>
22. M. Dyussebayeva et al., *PLoS ONE* 20, e0310833 (2025). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0310833>
23. V. S. Cherednichenko, A. V. Cherednichenko, Al. V. Cherednichenko, A. K. Zheksenbaeva, and A. S. Madibekov, *Heliyon* 7, e05844 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e05844>
24. Z. Bagova, A. Assilbekova, A. Kolesnikov, A. Mamitova, S. Abdazimov, M. Talipov, and R. Javier, *Open Eng.* 16, 20250156 (2026). <https://doi.org/10.1515/eng-2025-0156>
25. N. A. Onishchuk, T. V. Khodzher, E. P. Chebykin, and E. V. Chipanina, *Geogr. Nat. Resour.* 30, 345–349 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.gnr.2009.11.007>
26. Бюро национальной статистики Республики Казахстан. Об охране атмосферного воздуха в Республике Казахстан (2024 г.). Статистический сборник. Астана, 2025. URL: <https://stat.gov.kz> (дата обращения: 06.03.2026).
27. Y. K. Sambayev, A. G. Zhumalina, K. S. Zhumadilov, A. Sakaguchi, T. Kajimoto, K. Tanaka, S. Endo, N. Kawano, M. Hoshi, and M. Yamamoto, *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 323, 663–674 (2020). <https://doi.org/10.1007/s10967-019-06968-x>
28. M. Nurkassimova, N. Omarova, I. Zinicovscaia, N. Yushin, and O. Chaligava, *Environ. Monit. Assess.* 196, 442 (2024). <https://doi.org/10.1007/s10661-024-12602-5>
29. K. Tursun, A. Omarova, O. P. Ibragimova, B. Bukenov, A. Solovyova, N. Zhumadilova, N. Nurgali, and A. Muratuly, *Urban Clim.* 64, 102706 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.uclim.2025.102706>
30. N. A. Nursapina, Entering of Natural Radionuclides in Soil and Root Crops with Fertilizers and Their Distribution in the Soil–Plant System, Ph.D. thesis, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan (2025)
31. N. A. Nursapina, Entering of Natural Radionuclides in Soil and Root Crops with Fertilizers and Their Distribution in the Soil–Plant System, Ph.D. thesis, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan (2025)
32. H. N. B. Khalaf, M. Y. A. Mostafa, and M. Zhukovsky, *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 319, 1283–1289 (2019). <https://doi.org/10.1007/s10967-019-06421-z>
33. A. Bazzano, S. Bertinetti, F. Ardini, D. Cappelletti, and M. Grotti, *Atmosphere* 12, 388 (2021). <https://doi.org/10.3390/atmos12030388>
34. M. Grotti, F. Ardini, M. A. Vecchio, M. Mataloni, S. Bertinetti, F. Bruschi, B. Moroni, D. Cappelletti, K. Hobin, and F. Vanhaecke, *Atmos. Environ.* 330, 120541 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2024.120541>
35. I. V. Chernyshev, I. V. Vikentyev, A. V. Chugaev, A. L. Dergachev, and V. V. Ratkin, *Geochem. Int.* 61, 539–561 (2023).

<https://doi.org/10.1134/S0016702923060022>

36. A. Eichler, L. Tobler, S. Eyrikh, G. Gramlich, N. Malygina, T. Papina, and M. Schwikowski, Environ. Sci. Technol. 46, 4323–4330 (2012). <https://doi.org/10.1021/es2039954>
37. B. Grigholm, P. A. Mayewski, V. Aizen, K. Kreutz, C. P. Wake, E. Aizen, S. Kang, K. A. Maasch, M. J. Handley, and S. B. Sneed, Atmos. Environ. 131, 17–28 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.01.030>
38. M. R. Sierra-Hernández, F. Marcantonio, E. M. Griffith, and L. G. Thompson, Commun. Earth Environ. 5, 548 (2024). <https://doi.org/10.1038/s43247-024-01724-w>
39. K. Zheng, Y. Li, N. Wang, Y. Zhou, and Z. Li, Ecotoxicol. Environ. Saf. 263, 115296 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2023.115296>
40. Zh. Abilda, D. L. Daurov, A. Daurova, K. Zhapar, Z. Sapakhova, K. Zhambakin, and M. Shamekova, Eurasian J. Ecol. 74, 4–15 (2023). <https://doi.org/10.26577/EJE.2023.v74.i1.01>
41. Sh. Tokonami, Ch. Kranrod, P. Kazymbet, Y. Omori, M. Bakhtin, W. Poltabtim, S. Musikawan, R. Pradana, Y. Kashkinbayev, K. Zhumadilov, A. Pirmanova, M. Aumalikova, Zh. Isa, A. Sakaguchi, H. Sato, and M. Hoshi, J. Radiol. Prot. 43, 021501 (2023). <https://doi.org/10.1088/1361-6498/acda41>

**А.С. Муса¹, К.Ш. Жумадилов*¹, М.Т. Касымжанов¹,
А.А. Баграмова¹, Ф.В. Степаненко², А. Сакагучи³, М. Хоши⁴**

¹Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

²Ресей Федерациясының Денсаулық сақтау Министрлігінің «ФМЗО» Федералдық Мемлекеттік бюджеттік мекемесінің филиалы А.Ф. Цыба атындағы МРФО, Обнинск қаласы

³Университет Хиросима, Хиросима, Япония

⁴Университет Цукуба, Цукуба, Япония

(E-mail: musa.aigerim01@mail.ru, zhumadilovk@gmail.com, kasymzhanov@pnt.kz, assel.yaf.enu@gmail.com, valerifs@yahoo.com, ayaskgc@ied.tsukuba.ac.jp, mhoshi@hiroshima-u.ac.jp)

Қазақстанның қоршаған ортасындағы қорғасынның радиоактивті изотоптарын анықтау

Аңдатпа. Қазақстан өнеркәсібі, соның ішінде жоғары күлді көмірді жағу, уранды өндіру және өңдеу, түсті металлургия, мұнай өндіру және ядролық сынақтардың салдары радиоактивті қорғасын изотоптарының таралуына бірегей орта қалыптастырады. Ластану көздерін анықтау үшін қолданылатын тұрақты қорғасын изотоптарынан айырмашылығы, ^{210}Pb ($T_{1/2} = 22,3$ жыл), ^{212}Pb ($T_{1/2} = 10,6$ сағат) және ^{214}Pb ($T_{1/2} = 26,8$ минут) радиоактивті изотоптары радонның (^{222}Rn) және торонның (^{220}Rn) бөлінуімен, сондай-ақ аэрозольдер динамикасымен тікелей байланысты, бұл оларды табиғи да, технологиялық күшейтілген радиациялық сәулеленудің де тамаша индикаторларына айналдырады. Осы жұмыста алғаш рет Қазақстанның атмосфералық аэрозольдерінде, топырақтарында және суларында радиоактивті қорғасын изотоптарының болуына және олардың жаһандық қоршаған ортаға қосатын үлесіне кешенді баға беру әрекеті жасалды.

Зерттеу қорытындысы бойынша шешуді қажет ететін негізгі олқылықтар анықталды: 1) ауа мен топырақтағы ^{210}Pb бойынша жалпыұлттық кеңістіктік кадастрдың болмауы; 2) көмір электр станциялары мен уран қалдықтары маңында ^{212}Pb және ^{214}Pb бойынша қандай да бір өлшеулердің болмауы; 3) шығарындылар шлейфтеріндегі ^{210}Pb химиялық формасының (биожетімділігінің) белгісіздігі. Әрбір олқылықты жою үшін нақты шешу жолдары ұсынылған.

Түйінді сөздер: қорғасынның радиоактивті изотоптары; ^{210}Pb ; атмосфералық аэрозоль; радон ыдырау өнімдері; радиологиялық дозаны бағалау.

**A.S. Musa¹, K.Sh. Zhumadilov*¹, M.T. Kassymzhanov¹, A.A. Bagramova¹,
V.F. Stepanenko², A. Sakaguchi³, M. Hoshi⁴**

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Republic of Kazakhstan

²A.F. Tsyb Medical Radiological Research Center - branch of the National Medical Research Radiological Center of the Ministry of Health of the Russian Federation, Koroleva, Obninsk, Russian Federation

³University of Tsukuba, Tsukuba, Japan⁴Hiroshima University, Hiroshima, Japan(E-mail: musa.aigerim01@mail.ru, zhumadilovk@gmail.com, kasymzhanov@pnt.kz, assel.yaf.enu@gmail.com, valerifs@yahoo.com, ayaskgc@ied.tsukuba.ac.jp, mhoshi@hiroshima-u.ac.jp)**Assessment of Radioactive Lead Isotopes in the Environment of Kazakhstan**

Abstract. The industry of Kazakhstan, including the combustion of high-ash coal, uranium mining and processing, non-ferrous metallurgy, oil production, and the consequences of nuclear weapons testing, creates a unique environment for the occurrence of radioactive lead isotopes. Unlike stable lead isotopes commonly used for source apportionment of pollution, the radioactive isotopes ^{210}Pb ($T_{1/2} = 22.3$ years), ^{212}Pb ($T_{1/2} = 10.6$ hours), and ^{214}Pb ($T_{1/2} = 26.8$ minutes) are directly associated with the release of radon (^{222}Rn) and thoron (^{220}Rn), as well as aerosol dynamics, making them excellent indicators of both natural and technologically enhanced radiation exposure. This study represents the first attempt to assess the comprehensive distribution of radioactive lead isotopes in atmospheric aerosols, soils, and waters of Kazakhstan and their contribution to the global environment.

The study identified several major gaps requiring further investigation: (1) the absence of a nationwide spatial inventory of ^{210}Pb in air and soil; (2) the lack of any measurements of ^{212}Pb and ^{214}Pb near coal-fired power plants and uranium tailings; and (3) the unknown chemical forms (bioavailability) of ^{210}Pb in emission plumes. Specific recommendations are proposed to address each of these gaps.

Keywords: radioactive lead isotopes; ^{210}Pb ; atmospheric aerosol; radon decay products; radiological dose assessment.

References

1. M. Komárek, V. Ettler, V. Chrástný, and M. Mihaljevič, *Environ. Int.* 34, 562–577 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.envint.2007.10.005>
2. T. J. Chow and M. S. Johnstone, *Science* 147, 502–503 (1965). <https://doi.org/10.1126/science.147.3657.502>.
3. J. Porstendörfer, *J. Aerosol Sci.* 25, 219–263 (1994). [https://doi.org/10.1016/0021-8502\(94\)90077-9](https://doi.org/10.1016/0021-8502(94)90077-9)
4. C. Papastefanou, *Radioactivity in the Environment* 12, 1–172 (2008). [https://doi.org/10.1016/S1569-4860\(07\)12002-7](https://doi.org/10.1016/S1569-4860(07)12002-7)
5. M. Baskaran, *J. Environ. Radioact.* 102, 500–513 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2010.10.007>
6. R. Winkler and G. Rosner, *Sci. Total Environ.* 263, 57–68 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0048-9697\(00\)00666-5](https://doi.org/10.1016/S0048-9697(00)00666-5)
7. United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation (UNSCEAR), *Sources and Effects of Ionizing Radiation, Vol. I* (United Nations, New York, 2000)
8. International Commission on Radiological Protection (ICRP), *Compendium of Dose Coefficients Based on ICRP Publication 60*, ICRP Publication 119, *Ann. ICRP* 41, Suppl. 1 (2012)
9. A. Bagramova, A. Sakaguchi, K. Sakata, J. Takahashi, T. Kajimoto, S. Endo, M. Toekin, A. Zhumalina, D. Ibrayeva, V. Stepanenko, M. Hoshi, and K. Zhumadilov, *Atmos. Environ.* 372, 121836 (2026). <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2026.121836>
10. Y. Pak, D. Pak, D. Ibragimova, V. Matonin, and A. Tebayeva, *Atmosphere* 16, 125 (2025). <https://doi.org/10.3390/atmos16020125>
11. Khalaf, H.N.B. Взаимодействие продуктов распада радона с аэрозольными частицами и аналитическими фильтрами Петрянова. Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. Уральский федеральный университет: Екатеринбург, Россия, 2020. 153 с.
12. A. Bagramova, K. Zhumadilov, S. Endo, T. Kajimoto, A. Sakaguchi, Zh. Zeinulla, and M. Hoshi, *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 334, 381–387 (2025). <https://doi.org/10.1007/s10967-024-09839-2>
13. Жумалина А.Г., Самбаев Е.К., Сакагучи А., Эндо С., Танака К., Каджимото Т., Кавано Н., Жумадилов К.Ш., Хоши М. Измерение концентрации ^{210}Pb в воздухе города Астаны. Вестник Карагандинского университета. Серия «Физика» 2018, 92 (4), 88–93. <https://phs.buketov.edu.kz/physics-vestnik/article/download/265/207/398>
14. Nuclear Energy Agency and International Atomic Energy Agency, *Uranium 2024: Resources, Production and Demand* (OECD Publishing, Paris, 2025)
15. Агентство по атомной энергетике Республики Казахстан. Материалы работы комиссии по изучению состояния радиационной обстановки на рудоуправлениях Целинного горно-химического комбината. Агентство по атомной энергетике: Алматы, Казахстан, 1993; Vol. 20.
16. D. Ibrayeva, M. Bakhtin, Y. Kashkinbayev, P. Kazymbet, K. Zhumadilov, N. Altaeva, M. Aumalikova, and E. Shishkina,

- Radiat. Prot. Dosim. 189, 2050–2057 (2020). <https://doi.org/10.1093/rpd/ncaa068>
17. S. Subbotin, P. Krivitskiy, N. Larionova, A. Toporova, A. Kunduzbayeva, D. Turchenko, Zh. Tleukanova, and A. Aidarkhanova, *Sci. Rep.* 15, 7845 (2025). <https://doi.org/10.1038/s41598-025-01697-6>
 18. Y. Kashkinbayev, P. Kazymbet, M. Bakhtin, A. Khazipova, M. Hoshi, A. Sakaguchi, and D. Ibrayeva, *Atmosphere* 14, 1133 (2023). <https://doi.org/10.3390/atmos14071133>
 19. R. I. Bersimbaev and O. Bulgakova, *Genes Environ.* 37, 18 (2015). <https://doi.org/10.1186/s41021-015-0019-3>
 20. R. Harbron, A. Lipikhina, G. Yessilkanov, K. Apsalikov, Y. Brait, M. Hoshi, and E. Ostroumova, *J. Radiat. Res.* 66, 24–30 (2025). <https://doi.org/10.1093/jrr/rrae101>
 21. A. Aidarkhanova, N. Larionova, A. Tashekova, M. Dyussebayeva, A. Mamyrbayeva, L. Timonova, Ye. Shakenov, A. Mulikova, and A. Aidarkhanov, *RSC Adv.* 14, 26208–26218 (2024). <https://doi.org/10.1039/D4RA02557A>
 22. M. Dyussebayeva et al., *PLoS ONE* 20, e0310833 (2025). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0310833>
 23. V. S. Cherednichenko, A. V. Cherednichenko, Al. V. Cherednichenko, A. K. Zheksenbaeva, and A. S. Madibekov, *Heliyon* 7, e05844 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e05844>
 24. Z. Bagova, A. Assilbekova, A. Kolesnikov, A. Mamitova, S. Abdazimov, M. Talipov, and R. Javier, *Open Eng.* 16, 20250156 (2026). <https://doi.org/10.1515/eng-2025-0156>
 25. N. A. Onishchuk, T. V. Khodzher, E. P. Chebykin, and E. V. Chipanina, *Geogr. Nat. Resour.* 30, 345–349 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.gnr.2009.11.007>
 26. Бюро национальной статистики Республики Казахстан. Об охране атмосферного воздуха в Республике Казахстан (2024 г.). Статистический сборник. Астана, 2025. URL: <https://stat.gov.kz> (дата обращения: 06.03.2026).
 27. Y. K. Sambayev, A. G. Zhumalina, K. S. Zhumadilov, A. Sakaguchi, T. Kajimoto, K. Tanaka, S. Endo, N. Kawano, M. Hoshi, and M. Yamamoto, *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 323, 663–674 (2020). <https://doi.org/10.1007/s10967-019-06968-x>
 28. M. Nurkassimova, N. Omarova, I. Zinicovscaia, N. Yushin, and O. Chaligava, *Environ. Monit. Assess.* 196, 442 (2024). <https://doi.org/10.1007/s10661-024-12602-5>
 29. K. Tursun, A. Omarova, O. P. Ibragimova, B. Bukenov, A. Solovyova, N. Zhumadilova, N. Nurgali, and A. Muratuly, *Urban Clim.* 64, 102706 (2025). <https://doi.org/10.1016/j.uclim.2025.102706>
 30. N. A. Nursapina, Entering of Natural Radionuclides in Soil and Root Crops with Fertilizers and Their Distribution in the Soil–Plant System, Ph.D. thesis, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan (2025)
 31. N. A. Nursapina, Entering of Natural Radionuclides in Soil and Root Crops with Fertilizers and Their Distribution in the Soil–Plant System, Ph.D. thesis, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan (2025)
 32. H. N. B. Khalaf, M. Y. A. Mostafa, and M. Zhukovsky, *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 319, 1283–1289 (2019). <https://doi.org/10.1007/s10967-019-06421-z>
 33. A. Bazzano, S. Bertinetti, F. Ardini, D. Cappelletti, and M. Grotti, *Atmosphere* 12, 388 (2021). <https://doi.org/10.3390/atmos12030388>
 34. M. Grotti, F. Ardini, M. A. Vecchio, M. Mataloni, S. Bertinetti, F. Bruschi, B. Moroni, D. Cappelletti, K. Hobin, and F. Vanhaecke, *Atmos. Environ.* 330, 120541 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2024.120541>
 35. I. V. Chernyshev, I. V. Vikentyev, A. V. Chugaev, A. L. Dergachev, and V. V. Ratkin, *Geochem. Int.* 61, 539–561 (2023). <https://doi.org/10.1134/S0016702923060022>
 36. A. Eichler, L. Tobler, S. Eyrikh, G. Gramlich, N. Malygina, T. Papina, and M. Schwikowski, *Environ. Sci. Technol.* 46, 4323–4330 (2012). <https://doi.org/10.1021/es2039954>
 37. B. Grigholm, P. A. Mayewski, V. Aizen, K. Kreutz, C. P. Wake, E. Aizen, S. Kang, K. A. Maasch, M. J. Handley, and S. B. Sneed, *Atmos. Environ.* 131, 17–28 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2016.01.030>
 38. M. R. Sierra-Hernández, F. Marcantonio, E. M. Griffith, and L. G. Thompson, *Commun. Earth Environ.* 5, 548 (2024). <https://doi.org/10.1038/s43247-024-01724-w>
 39. K. Zheng, Y. Li, N. Wang, Y. Zhou, and Z. Li, *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 263, 115296 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2023.115296>
 40. Zh. Abilda, D. L. Daurov, A. Daurova, K. Zhapar, Z. Sapakhova, K. Zhambakin, and M. Shamekova, *Eurasian J. Ecol.* 74, 4–15 (2023). <https://doi.org/10.26577/EJE.2023.v74.i1.01>
 41. Sh. Tokonami, Ch. Kranrod, P. Kazymbet, Y. Omori, M. Bakhtin, W. Poltabtim, S. Musikawan, R. Pradana, Y. Kashkinbayev, K. Zhumadilov, A. Pirmanova, M. Aumalikova, Zh. Isa, A. Sakaguchi, H. Sato, and M. Hoshi, *J. Radiol. Prot.* 43, 021501 (2023). <https://doi.org/10.1088/1361-6498/acda41>

Сведения об авторах:

А.С. Муса – PhD докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

К.Ш. Жумадилов – автор для корреспонденции, PhD, профессор, заведующий кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

М.Т. Касымжанов – PhD докторант, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

А.А. Баграмова – PhD, преподаватель кафедры «Ядерной физики, новых материалов и технологий», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан.

В.Ф. Степаненко – доктор биологических наук, профессор, заведующий лаборатории медико-экологической дозиметрии и радиационной безопасности МРНЦ имени А.Ф. Цыба – филиала ФГБУ «НМИЦ радиологии» Министерства здравоохранения Российской Федерации, Обнинск, Российская Федерация.

А.Сакагучи – доцент в центре исследований изотопов и динамики окружающей среды, Университет Цукуба, Цукуба, префектура Ибараки, Япония.

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

А.С. Муса – PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

К.Ш. Жумадилов – хат-хабар авторы, PhD, профессор, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының меңгерушісі, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан

М.Т. Касымжанов – PhD докторант, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

А.А. Баграмова – PhD, «Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар» кафедрасының оқытушысы, Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Астана, Қазақстан.

В.Ф. Степаненко – биология ғылымдарының докторы, профессор, Ресей Денсаулық сақтау министрлігінің «НМИЦ радиология» ФМБУ филиалы А.Ф. Цыба атындағы мрнц медициналық-экологиялық дозиметрия және радиациялық қауіпсіздік зертханасының меңгерушісі, обнинск қаласы, Ресей Федерациясы.

А. Сакагучи – доцент, изотоптар мен қоршаған орта динамикасын зерттеу орталығы, Цукуба университеті, Цукуба, Ибараки префектурасы, Жапония.

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

A.S. Mussa – PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

K.Sh. Zhumadilov – the corresponding author, PhD, professor, Head of the Department of «Nuclear Physics, New Materials and Technologies», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

M. T. Kasymzhanov – PhD student, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

A. A. Bagramova – PhD, teacher in the Department of «Nuclear Physics, New Materials and Technologies», L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan.

V.F. Stepanenko – doctor of Biological Sciences, professor, Head of the Laboratory of Medical-Ecological Dosimetry and Radiation Safety of the MRRC named after A.F. Tsyba - a branch of the Federal State Budgetary Institution «National Medical Research Center of Radiology» of the Russian Ministry of Health, Obninsk, Russia.

A. Sakaguchi – Associate Professor, Center for Research in Isotopes and Environmental Dynamics,, University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki Prefecture, Japan.

M. Hoshi –emeritus professor at Hiroshima University, Hiroshima Prefecture, Japan.



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: Д. Дунайская

Авторларға арналған нұсқаулықтар,
жарияланым этикасы журнал сайтында берілген: <http://bulphysast.enu.kz>
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.

Физика. Астрономия сериясы.
№2(154)/2026 – Астана: ЕҰУ. – 257 б.
Шартты б.т. – 11,18. Таралымы – сұраныс бойынша
Басуға қол қойылды: 30.06.2026 ж.
Ашық қолданыстағы электронды нұсқа: <https://bulphysast.enu.kz>

Мазмұнына типография жауап бермейді

Редакция мекен-жайы:
010008, Қазақстан, Астана қ., Қажымұқан Мұңайтпасов көш., 13, Л.Н. Гумилев атындағы
Еуразия ұлттық университеті, Оқу корпусы - ЦИСИ ғимараты, 300 және 301 кеңсе.
Тел: +77172709500 (ішкі 33-303 (бас редактор), 33-318 (жауапты және техникалық хатшы)).
E-mail: vest_phys@enu.kz. Веб-сайт: www.bulphysast.enu.kz/
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің баспасында басылды.